



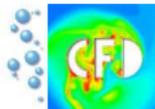
Effiziente Diskretisierungs- und Lösungstechniken für die Lattice-Boltzmann Equation auf unstrukturierten Gittern

Thomas Hübner, Stefan Turek

(thomas.huebner@math.uni-dortmund.de, ture@featflow.de)

LS III: Angewandte Mathematik und Numerik
TU Dortmund

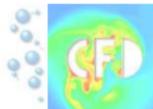
Vortrag, München – 24.01.2008





Inhalt

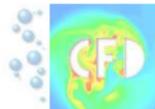
1. Lattice-Boltzmann Gleichung als PDE
2. Implizite Zeitdiskretisierung
3. Ortsdiskretisierung auf unstrukturierten Gittern
4. Konvergenz
5. Effiziente Löser
6. Neue Gleichgewichtsformulierung der LB Gleichung





Kapitel 1

- Lattice-Boltzmann Gleichung als PDE





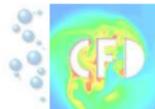
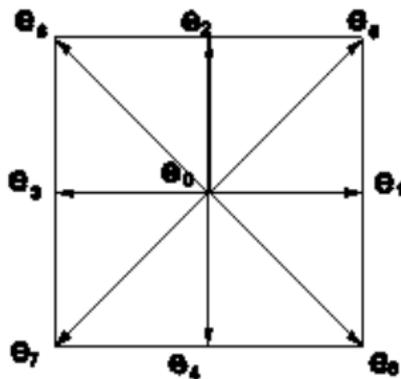
1. Lattice-Boltzmann Gleichung

- Lattice-Boltzmann Equation (LBE) für laminare, in- bzw. schwach kompressible Strömungen

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + e_i \cdot \nabla f_i = \frac{1}{\tau} (f_i^{eq} - f_i)$$

- bzw. stationäre Formulierung

$$e_i \cdot \nabla f_i = \frac{1}{\tau} (f_i^{eq} - f_i)$$





1. Lattice-Boltzmann Gleichung

$$e_i \cdot \nabla f_i = \frac{1}{\tau} (f_i^{eq} - f_i)$$

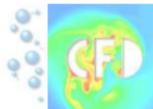
- Approximiere Dichte und Geschwindigkeit durch Momente

$$\rho = \sum_i f_i \quad , \quad u = \sum_i e_i \cdot f_i$$

- Quadratischer Gleichgewichtsterm des inkompressiblen Modells

$$f_i^{eq} = w_i \left(\rho + \frac{3}{2c^2} (e_i \cdot u) + \frac{9}{2c^4} (e_i \cdot u)^2 - \frac{3}{2c^2} |u|^2 \right)$$

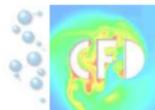
- Viskosität bestimmt Relaxationszeit durch $\tau = \frac{3\nu}{c^2}$
- Schallgeschwindigkeit c linear in e_i , quadratisch in rechter Seite





Kapitel 2

- Implizite Zeitdiskretisierung





2. Zeitdiskretisierung

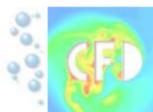
- Zeitdiskretisierung

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} + e_i \cdot \nabla f_i^{n+1} + \frac{1}{\tau} (f_i^{n+1} - f_i^{eq, n+1}) = 0$$

- Mit $h_i^n := e_i \cdot \nabla f_i^n + \frac{1}{\tau} (f_i^n - f_i^{eq, n})$ erhalte Time-Stepping-Schema

$$f_i^{n+1} + \theta \Delta t h_i^{n+1} = (\theta - 1) \Delta t h_i^n + f_i^n$$

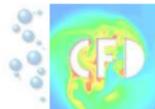
- $\theta \in \{0, \frac{1}{2}, 1\}$: Expliziter Euler, Crank-Nicholson, **Impliziter Euler**





Kapitel 3

- Ortsdiskretisierung auf unstrukturierten Gittern





3. Ortsdiskretisierung

- Ortsdiskretisierung gibt (lineare and nichtlineare) Operatoren

$$\mathbf{T}_i F_i \sim e_i \cdot \nabla f_i \quad , \quad \mathbf{M}_i F_i \sim \frac{1}{\tau} f_i \quad , \quad \sum_{j=0}^8 \mathbf{N}_{ij} F_j \sim \frac{1}{\tau} f_i^{eq}$$

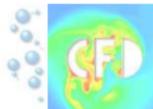
- Dann kann die LBE geschrieben werden als

$$F_i^{n+1} + \Delta t (\mathbf{T}_i F_i^{n+1} + \mathbf{M}_i F_i^{n+1} - \sum_{j=0}^8 \mathbf{N}_{ij} F_j^{n+1}) = F_i^n \quad , \quad i = 0, \dots, 8$$

- Resultiert in diskretem, gekoppelten, nichtlinearen Gleichungssystem

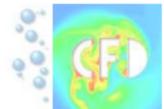
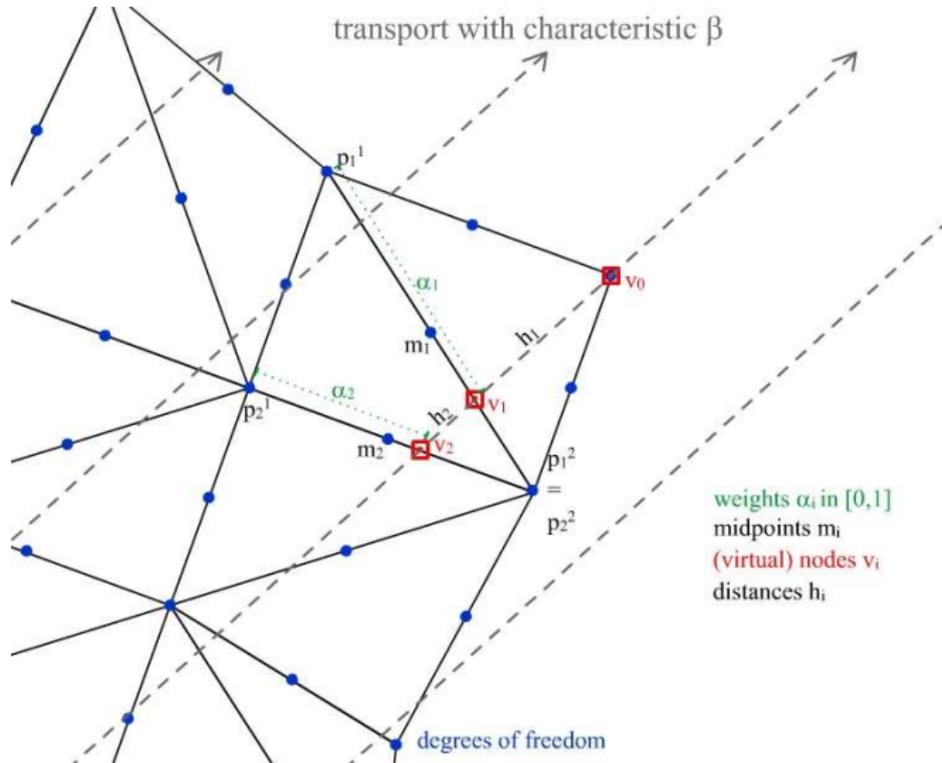
$$\mathcal{T} := \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{T}_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{T}_8 \end{bmatrix}, \quad \mathcal{M} := \begin{bmatrix} \mathbf{M}_0 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{M}_8 \end{bmatrix}, \quad \overline{\mathcal{N}} := \begin{bmatrix} \mathbf{N}_{00} & \dots & \mathbf{N}_{08} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{N}_{80} & \dots & \mathbf{N}_{88} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A} = \Delta t (\mathcal{T} + \mathcal{M} - \overline{\mathcal{N}}) \quad , \quad B = (1 - \theta) \mathbf{A} F^n + F^n \\ (\mathbf{Id} + \theta \mathbf{A}) F^{n+1} = B$$





3. Transport





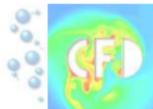
3. 1D Ansatz für das Transportproblem



- Diskretisierung 2er Ordnung ergibt (mit $h_1 + h_2 = r \cdot h_1$)

$$\beta \cdot \nabla u(v_0) = u'(v_0) = \frac{-(1-r^2)u(v_0) - r^2u(v_1) + u(v_2)}{h_1(r^2-r)} + O(h_1, h_2)^2$$

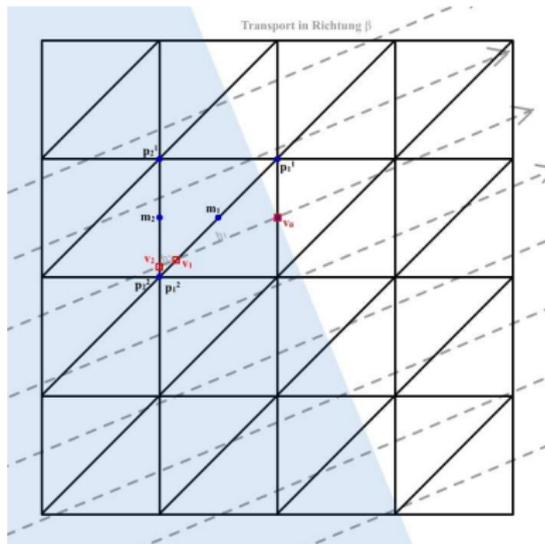
- Hohe Genauigkeit
- Untere Dreiecksmatrizen \Rightarrow löse Transportschritte direkt
- Nur möglich durch spezielles Sortierverfahren
- Matrixfreie Implementierung





3. Knotennummerierung

- ausgehend vom Rand alle Knoten abarbeiten
- naiver Algorithmus sogar auf kartesischem Gitter inkonsistent

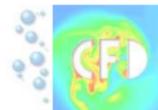
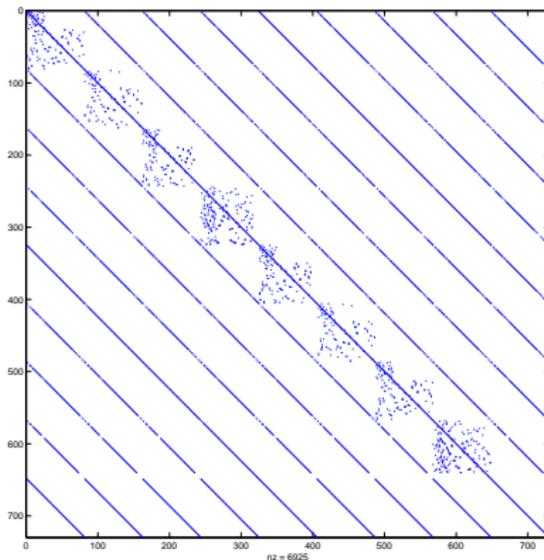


- Struktur der Differenzgleichung entspricht gerichtetem Graphen
- Hilfe aus der Graphentheorie (Topologische Nummerierung)



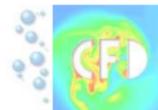
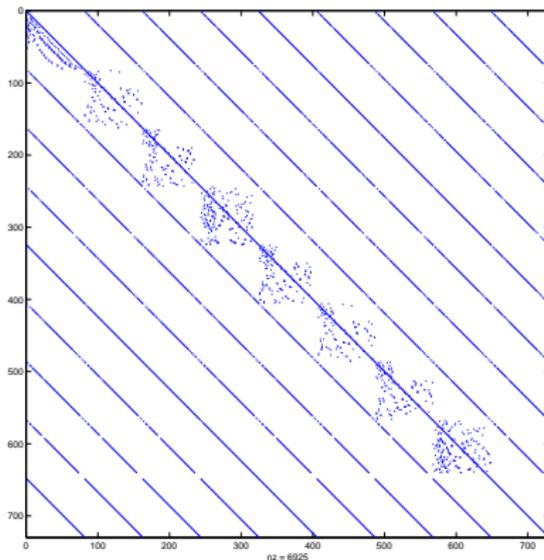


3. Transportoperatoren in der Praxis



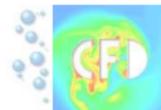
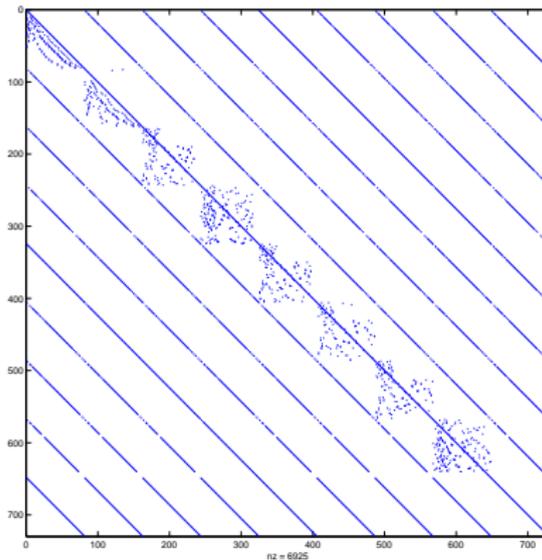


3. Transportoperatoren in der Praxis



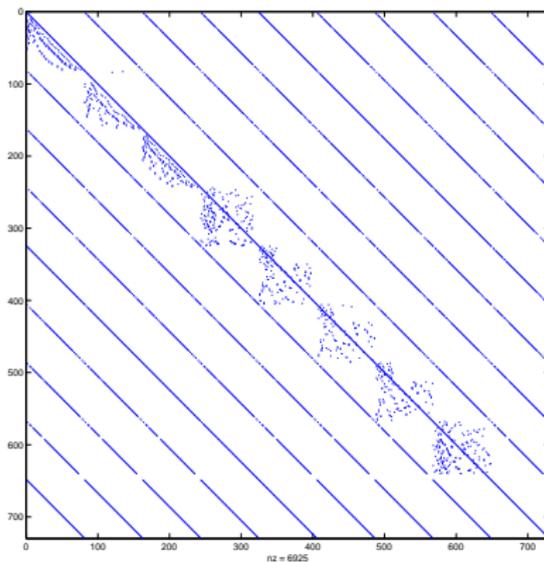


3. Transportoperatoren in der Praxis



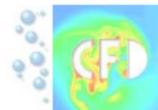
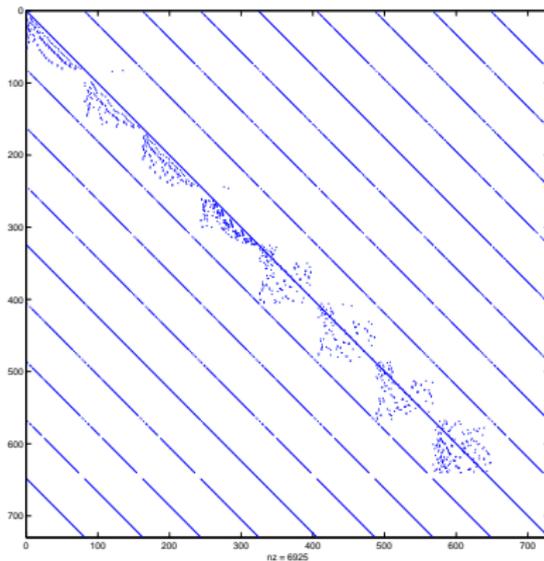


3. Transportoperatoren in der Praxis



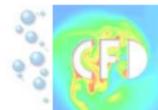
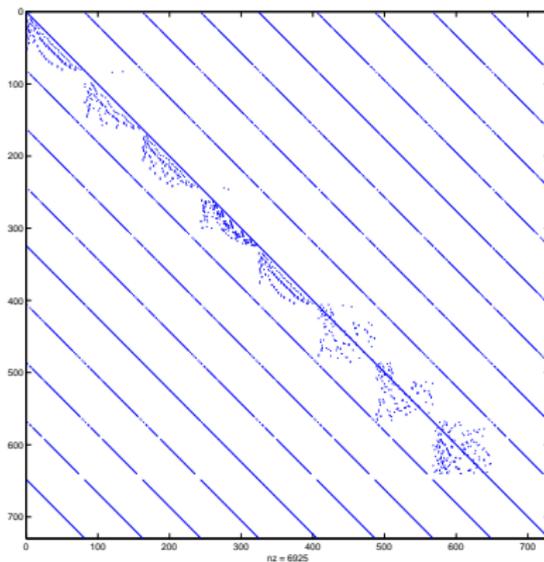


3. Transportoperatoren in der Praxis



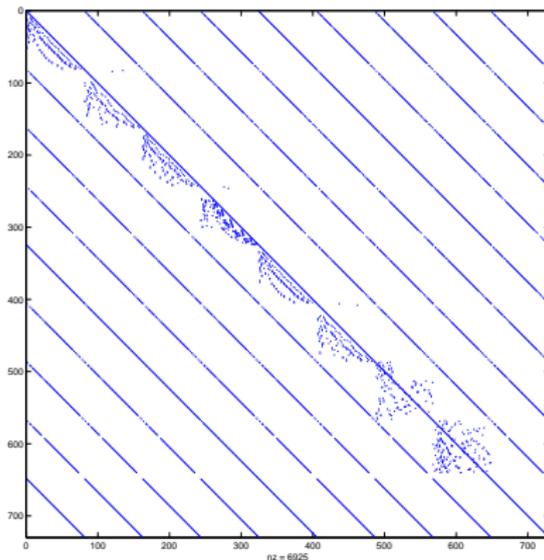


3. Transportoperatoren in der Praxis



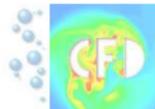
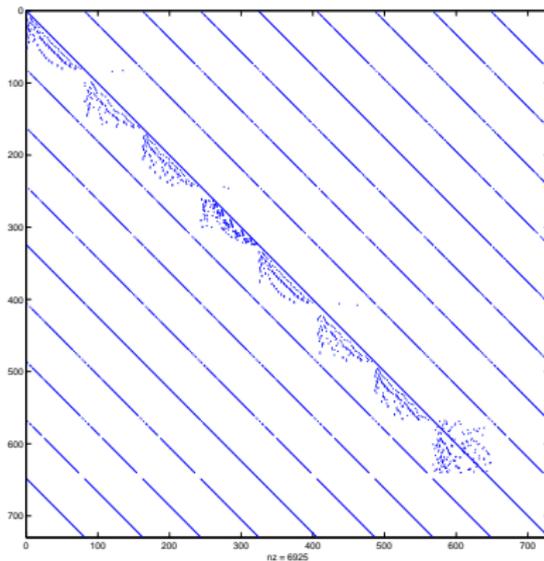


3. Transportoperatoren in der Praxis



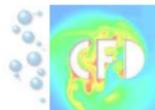
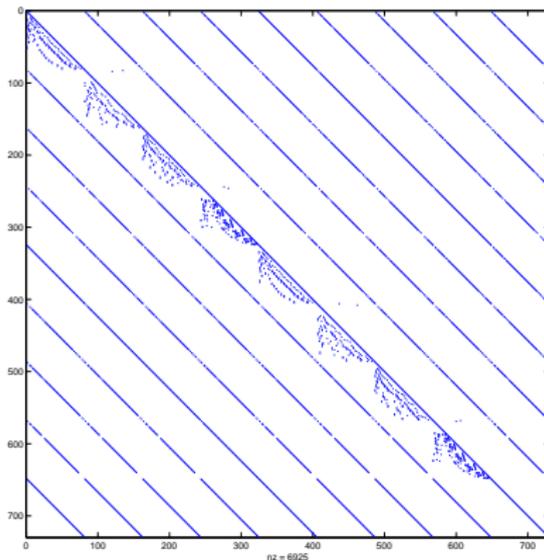


3. Transportoperatoren in der Praxis





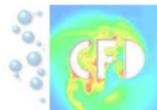
3. Transportoperatoren in der Praxis





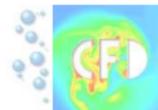
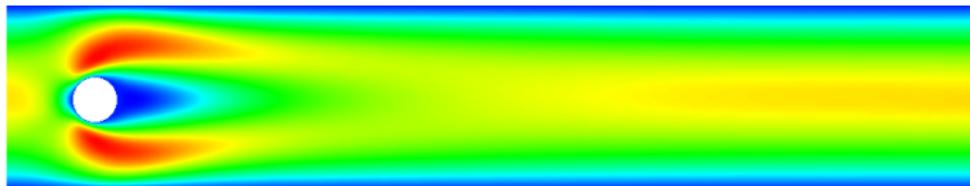
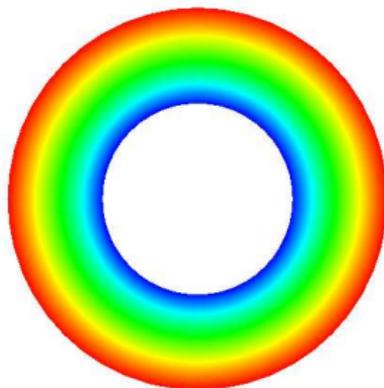
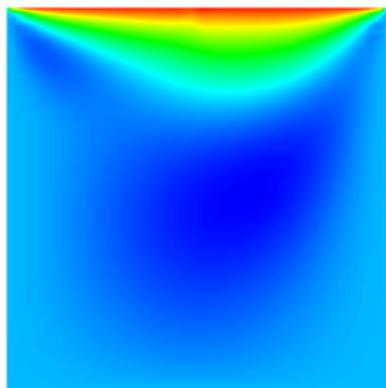
Kapitel 4

- Konvergenz



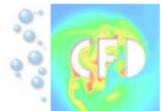
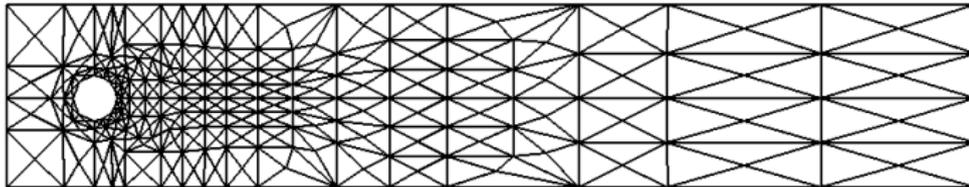
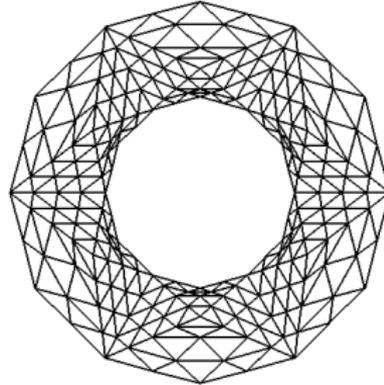
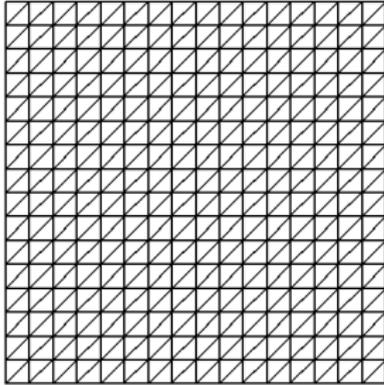


4. Testprobleme





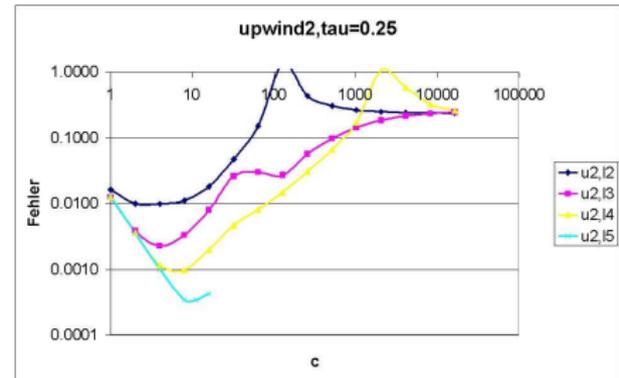
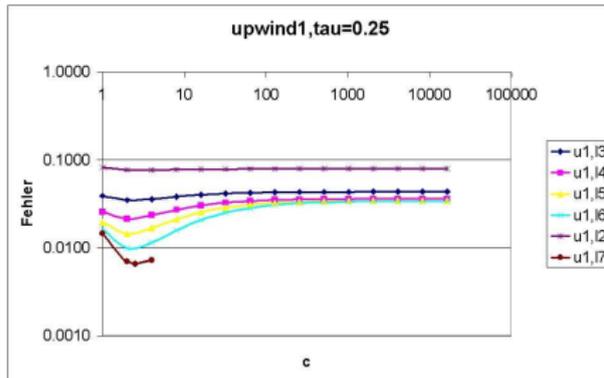
4. Testprobleme





4. Rotating Couette Flow

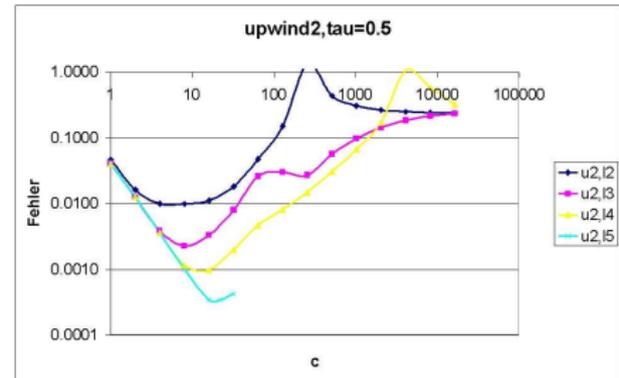
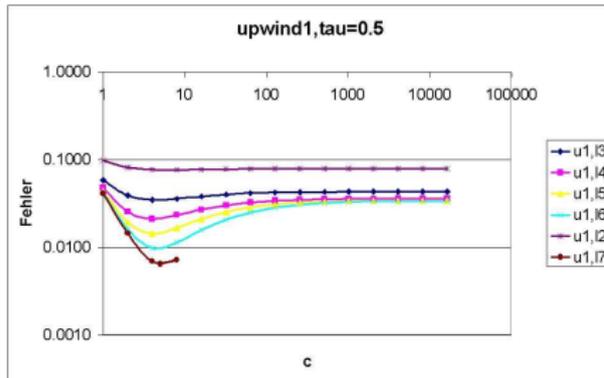
- Analytische Lösung, unabhängig von Viskosität
- Fehlerraten gleichbleibend bei konstantem Verhältnis $\frac{\nu}{c}$





4. Rotating Couette Flow

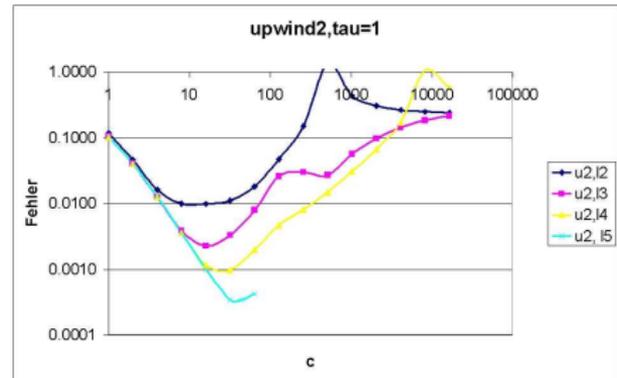
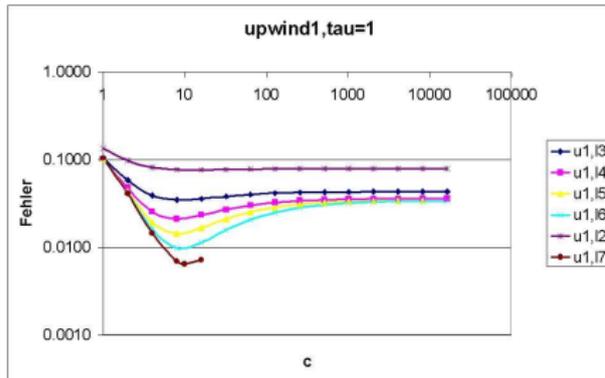
- Analytische Lösung, unabhängig von Viskosität
- Fehlerraten gleichbleibend bei konstantem Verhältnis $\frac{\nu}{c}$





4. Rotating Couette Flow

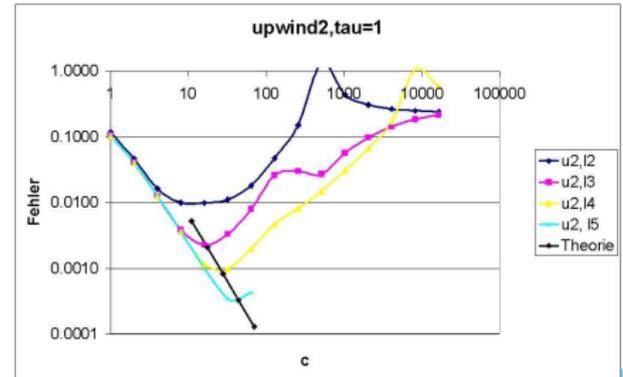
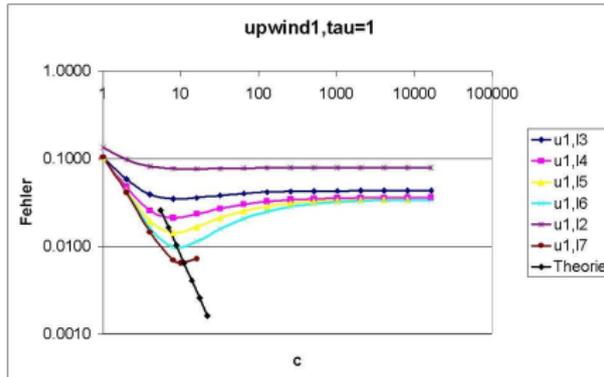
- Analytische Lösung, unabhängig von Viskosität
- Fehlerraten gleichbleibend bei konstantem Verhältnis $\frac{\nu}{c}$





4. Rotating Couette Flow

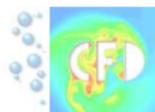
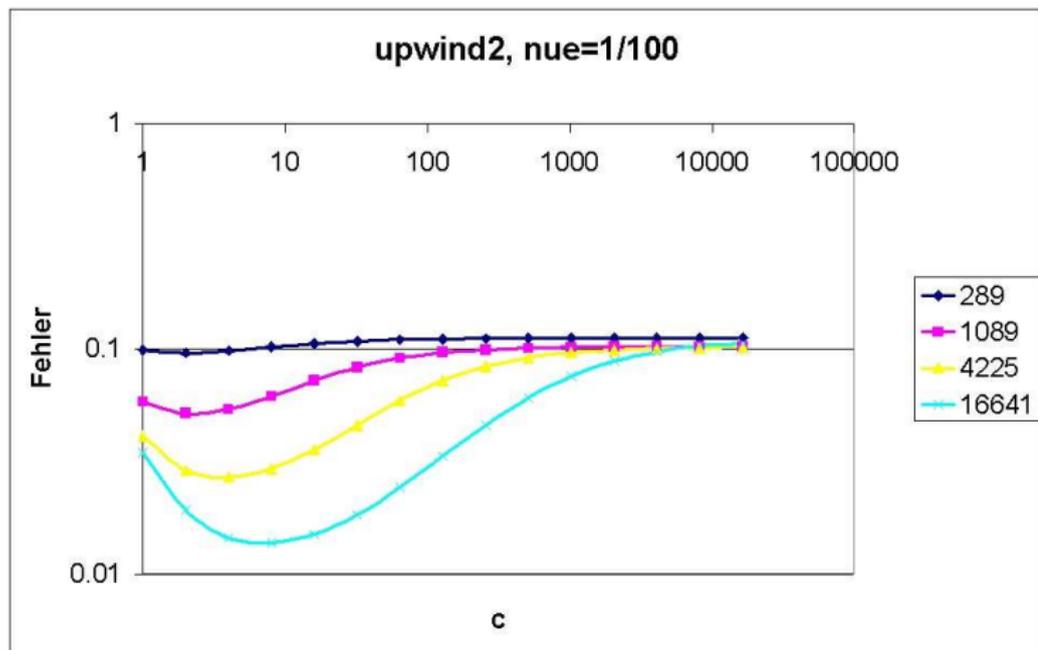
- Analytische Lösung, unabhängig von Viskosität
- Fehlerraten gleichbleibend bei konstantem Verhältnis $\frac{\nu}{c}$





4. Driven Cavity

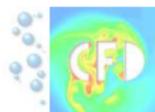
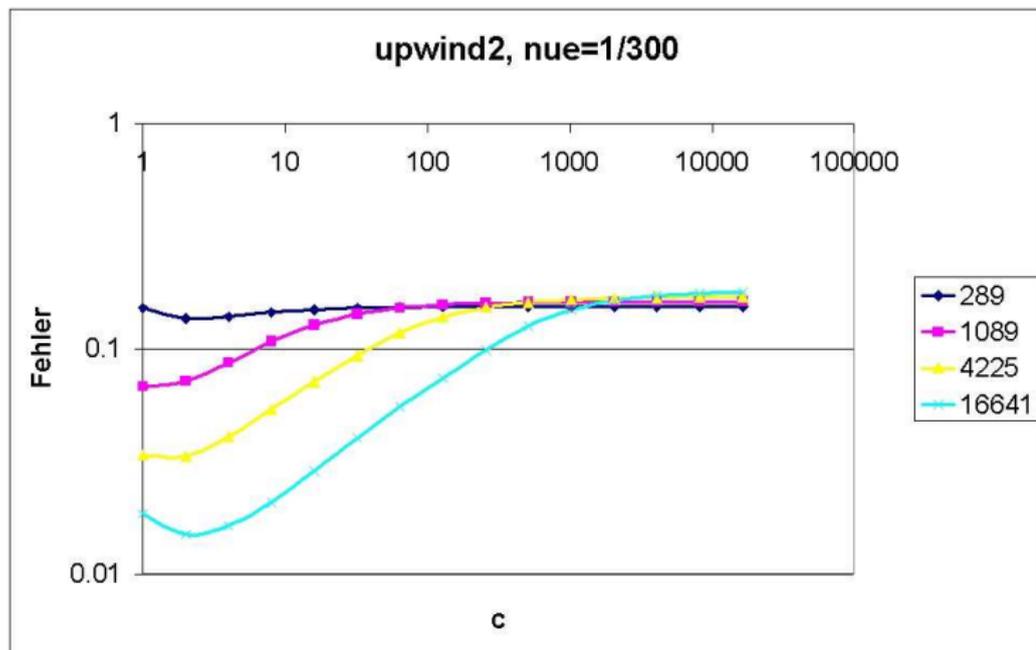
- Driven Cavity, CFD-Referenzlösung mit $n=263169$ Gitterpunkten





4. Driven Cavity

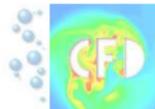
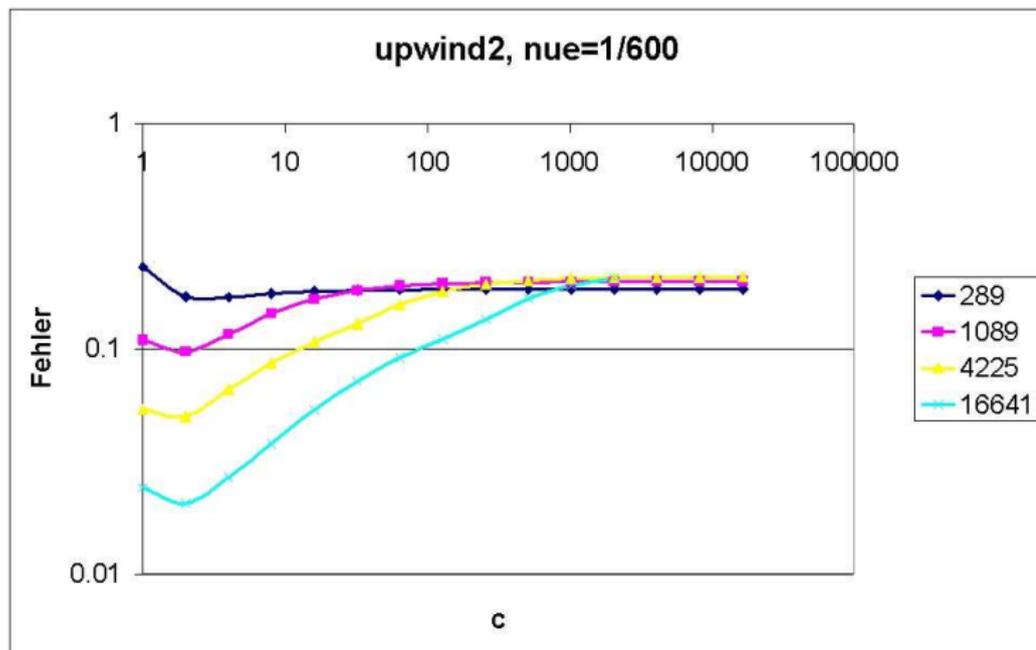
- Driven Cavity, CFD-Referenzlösung mit $n=263169$ Gitterpunkten





4. Driven Cavity

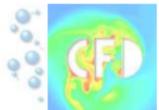
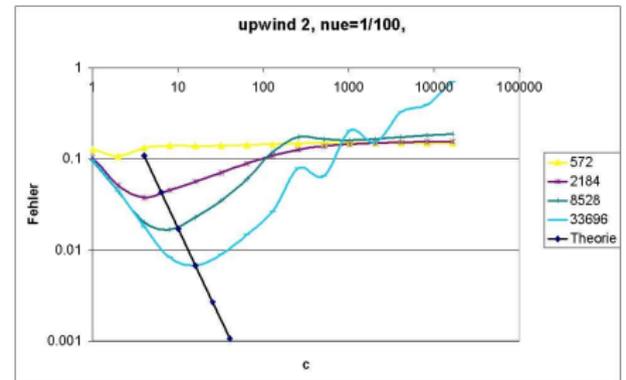
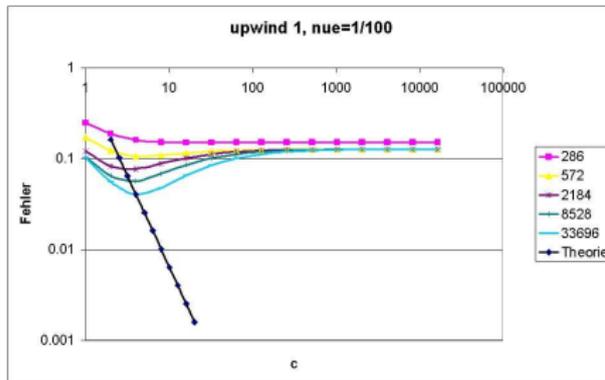
- Driven Cavity, CFD-Referenzlösung mit $n=263169$ Gitterpunkten





4. Benchmark, $Re=2$

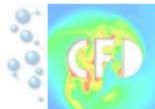
- Zylinder im Kanal, CFD-Referenzlösung mit $n=66976$ Gitterpunkten





Kapitel 5

- Effiziente Löser





5. Lösung der nichtlinearen Probleme

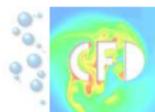
- Nichtlinearen Defekt lösen (auf 10^{-6}) für stationären Benchmark
 $Re = 2$

	c=1			c=10			c=100		
	572	2184	8528	572	2184	8528	572	2184	8528
Fixpunkt	13	15	16	11	14	16	6	11	15
Newton	4	4	4	4	4	4	3	4	4

- $Re = 20$

	c=1			c=10			c=100		
	572	2184	8528	572	2184	8528	572	2184	8528
Fixpunkt	180	> 300	>300	30	211	>300	8	23	>300
Newton	5	5	5	4	5	5	3	4	6

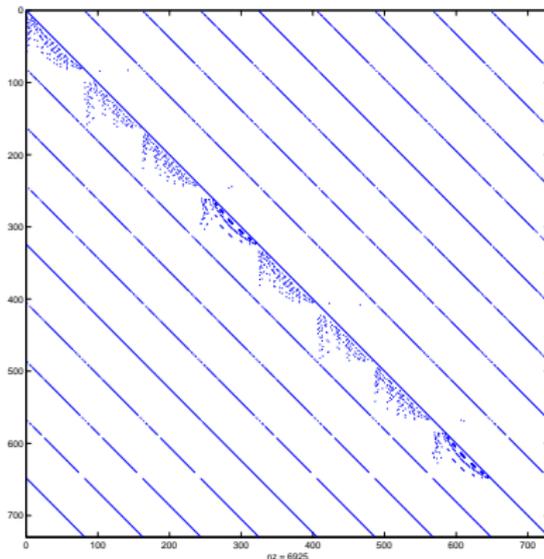
⇒ Newton Schema klappt gut für verschiedene h und Re





5. Preconditioner 1

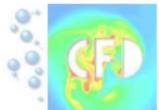
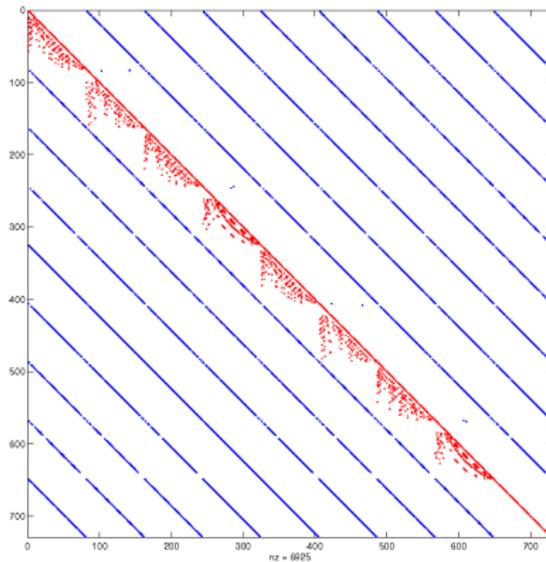
- Nummerierung entsprechend dem Transport
- Direkte Anwendung wegen der unteren Dreiecksstruktur





5. Preconditioner 1

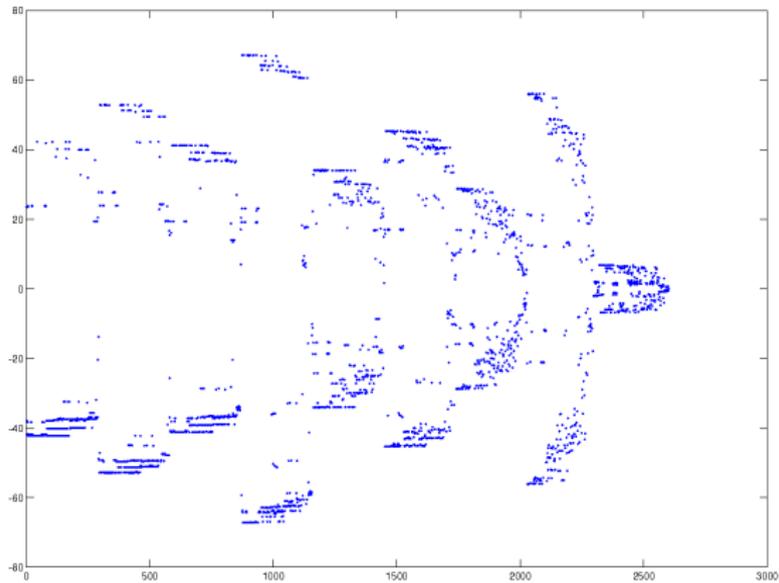
- Nummerierung entsprechend dem Transport
- Direkte Anwendung wegen der unteren Dreiecksstruktur





5. Eigenwertverteilung

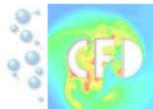
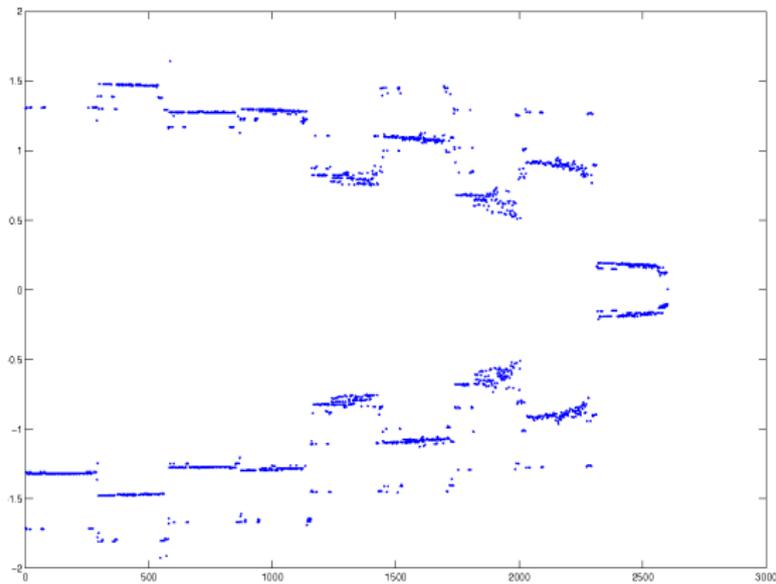
- QR-Zerlegung für Driven Cavity ($Re=100$), $c=1$
- Systemmatrix A der stationären Gleichung





5. Eigenwertverteilung

- QR-Zerlegung für Driven Cavity ($Re=100$), $c=1$
- Modifizierte Eigenwerte durch Transport-Vorkonditionierer $T^{-1}A$



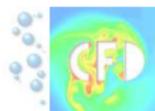


5. Kondition

- Eigenwerte der vollimpliziten Systemmatrix A
- bzw. der modifizierten Matrix $T^{-1}A$
- Kondition für $c \rightarrow \infty$ sehr schlecht

A		$\max \lambda $	$\min \lambda $	$\frac{\max \lambda }{\min \lambda }$
c1	n=81	5.56E+01	7.90E-02	7.04E+02
	n=289	8.59E+01	4.96E-02	1.73E+03
	n=1089	1.53E+02	2.94E-02	5.20E+03
c100	n=81	3.89E+05	9.72E-02	4.00E+06
	n=289	3.90E+05	6.25E-02	6.24E+06
	n=1089	3.91E+05	4.77E-02	8.20E+06

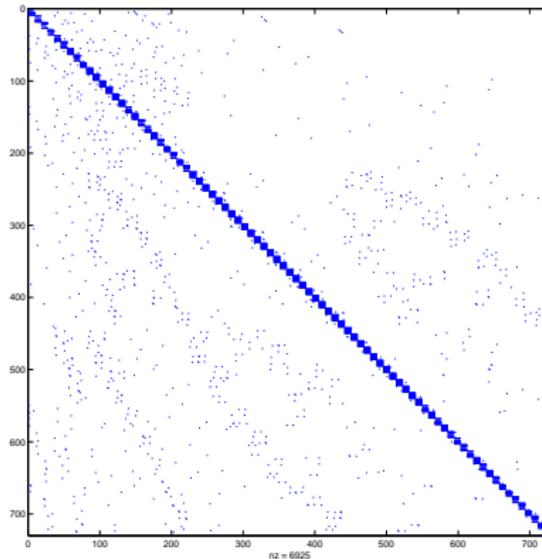
$T^{-1}A$		$\max \lambda $	$\min \lambda $	$\frac{\max \lambda }{\min \lambda }$
c1	n=81	1.95E+00	9.50E-03	2.05E+02
	n=289	1.95E+00	7.70E-03	2.53E+02
	n=1089	2.00E+00	6.20E-03	3.23E+02
c100	n=81	2.02E+00	1.42E-04	1.42E+04
	n=289	2.02E+00	1.12E-04	1.80E+04
	n=1089	2.01E+00	1.14E-04	1.76E+04





5. Preconditioner 2

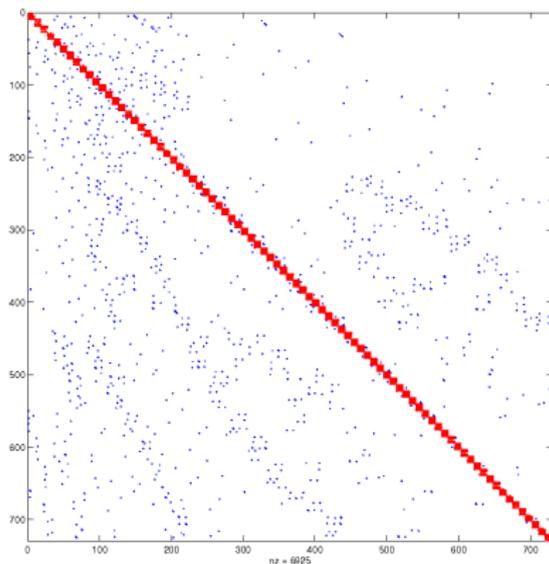
- Alternative Nummerierung entsprechend den Kollisionen
- Block-Jacobi-Vorkonditionierer





5. Preconditioner 2

- Alternative Nummerierung entsprechend den Kollisionen
- Block-Jacobi-Vorkonditionierer



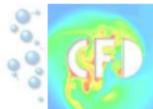


5. Lösung der linearen Systeme

- Lineares System lösen (um 6 Stellen relativ) für Driven Cavity mit $\Delta t = 1$, $Re = 100$
- Kleines c : Transport-Preconditioner **levelunabhängig**
- Dominante Kollisionen: Block-Jacobi Variante **c -unabhängig**

		plain	bl-jac	tr-pre
c=1	n=81	62	25	45
	n=289	101	51	52
	n=1089	190	110	62
	n=4225	363	196	58
c=10	n=81	91	26	91
	n=289	181	65	157
	n=1089	487	181	304
	n=4225	875	412	440
c=100	n=81	147	35	174
	n=289	299	75	339
	n=1089	675	195	720
	n=4225	1859	511	1834
c=1000	n=81	152	35	203
	n=289	324	81	423
	n=1089	734	203	946
	n=4225	2110	507	2555

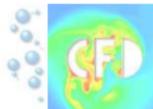
⇒ Nicht optimal!





Kapitel 6

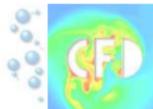
- Gleichgewichtsformulierung der LB Gleichung





6. Umformulierung des Systems

- Versuche das System umzuformulieren, um den Transportlöser besser, direkter auszunutzen
- Analog zum Verfahren der *generalized mean intensity* (GMI) aus dem Gebiet des Strahlungstransports
- Neue *generalized equilibrium formulation* (GEF) der LB Gleichung
- Die invertierten Transportschritte sind dann Teil der (impliziten) Systemmatrix





6. Gleichgewichtsformulierung

Ausgehend von der diskretisierten LBE, mit $\mathbf{T}_i f_i \sim \mathbf{e}_i \cdot \nabla f_i + \frac{1}{\tau} f_i$ wird die Gleichung

$$\mathbf{T}_i f_i = \frac{1}{\tau} f_i^{eq}$$

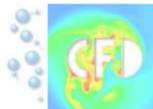
zu

$$f_i = \mathbf{T}_i^{-1} \frac{1}{\tau} f_i^{eq} \quad (1)$$

und mit den entsprechenden Gewichten multipliziert und aufsummiert:

$$f_i^{eq} = \sum_k \tilde{w}_{ik} f_k = \sum_k \tilde{w}_{ik} \mathbf{T}_k^{-1} \frac{1}{\tau} f_k^{eq}$$

Erhalte Distributionen f_i im postprocess direkt mit Gleichung (1)





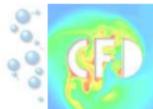
6. Gleichgewichtsformulierung: System

$$f_i^{eq} - \sum_k \tilde{w}_{ik} \mathbf{T}_k^{-1} \frac{1}{\tau} f_k^{eq} = 0$$

ergibt ein LGS $Ax = b$ mit *impliziter* Systemmatrix

$$\left(Id - \begin{bmatrix} \frac{\tilde{w}_{11}}{\tau} \mathbf{T}_1^{-1} & \frac{\tilde{w}_{12}}{\tau} \mathbf{T}_2^{-1} & \cdots & \frac{\tilde{w}_{10}}{\tau} \mathbf{T}_0^{-1} \\ \frac{\tilde{w}_{21}}{\tau} \mathbf{T}_1^{-1} & \frac{\tilde{w}_{22}}{\tau} \mathbf{T}_2^{-1} & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \frac{\tilde{w}_{01}}{\tau} \mathbf{T}_1^{-1} & \cdots & \cdots & \frac{\tilde{w}_{00}}{\tau} \mathbf{T}_0^{-1} \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} f_1^{eq} \\ f_2^{eq} \\ \vdots \\ f_0^{eq} \end{bmatrix} = 0$$

Vorkonditionierung ist möglich, da Diagonalen der inversen Transportoperatoren bekannt sind \Rightarrow invertiere 9x9 Systeme





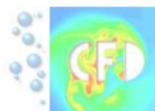
6. Performanz der Formulierung

- Vergleich mit Transport/Block-Jacobi Vorkonditionierer
- Direkte Formulierung über f_i **vs.** Gleichgewichtsformulierung per f_i^{eq}

		plain	bl-jac	tr-pre
c=1	n=81	62	25	45
	n=289	101	51	52
	n=1089	190	110	62
	n=4225	363	196	58
c=10	n=81	91	26	91
	n=289	181	65	157
	n=1089	487	181	304
	n=4225	875	412	440
c=100	n=81	147	35	174
	n=289	299	75	339
	n=1089	675	195	720
	n=4225	1859	511	1834
c=1000	n=81	152	35	203
	n=289	324	81	423
	n=1089	734	203	946
	n=4225	2110	507	2555

		GEF	GEF(diag)
c=1	n=81	32	19
	n=289	42	29
	n=1089	55	42
	n=4225	70	56
c=10	n=81	65	25
	n=289	120	60
	n=1089	246	156
	n=4225	387	297
c=100	n=81	110	35
	n=289	233	84
	n=1089	497	203
	n=4225	1219	522
c=1000	n=81	111	34
	n=289	243	83
	n=1089	536	215
	n=4225	1629	515

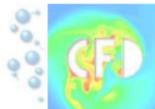
⇒ Nicht unabhängig von Gitterweite h !





Kapitel 7

- Multigrid



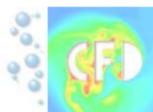


7. Erste Schritte mit Mehrgitter

- Gute Mehrgitterraten mit beiden Glättervarianten
- Mehr Glättungsschritte besser, Levelabhängigkeit nur im positiven Sinne

		c10				c100			
		tr-pre	bl-jac	GEF	GEF(diag)	tr-pre	bl-jac	GEF	GEF(diag)
n=4	1089	0.53	0.40	0.43	0.36	0.73	0.46	0.75	0.44
	4225	0.42	0.42	0.36	0.33	0.68	0.51	0.65	0.44
	16641	0.32	0.42	0.30	0.30	0.65	0.51	0.52	0.44
	66049	0.27	0.44	0.23	0.24	0.57	0.48	0.47	0.42
n=16	1089	0.27	0.28	0.27	0.24	0.39	0.36	0.35	0.35
	4225	0.29	0.33	0.27	0.27	0.44	0.43	0.38	0.39
	16641	0.26	0.32	0.24	0.24	0.42	0.46	0.38	0.36
	66049	0.21	0.25	0.19	0.20	0.42	0.45	0.40	0.39

- Aber: Gittertransfer noch nicht optimal





Zusammenfassung

- Moderne Numerik für PDE angewandt auf die LBE
- Finite-Differenzen Upwind Diskretisierung mit konst. Char.
- Auf unstrukturierten Gittern von 1er und 2er Ordnung
- Spezielle Nummerierung liefert untere Dreiecksmatrix für Transportoperator
- Implizite Zeitdiskretisierung sowie stationäre Formulierung
- Spezielle Vorkonditionierer für transport- und kollisionsdominante Systeme
- Gleichgewichtsformulierung liefert einen neuen Zugang zur LBE

