

Teilprojekt

D5

Implementierung und Validierung der
Kumulantenmethode zur Simulation von gaskinetischen
Prozessen auf massiv parallelen Rechnern

2.1 Teilprojekt D5

Implementierung und Validierung der Kumulantenmethode zur Simulation von gaskinetischen Prozessen auf massiv parallelen Rechnern

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Karl Heinz Hoffmann
29.7.1953
Professur für Theoretische Physik,
insbesondere Computerphysik
Fakultät für Naturwissenschaften
Technische Universität Chemnitz
09107 Chemnitz
Tel.: (0371) 531-3212
Fax: (0371) 531-3233
hoffmann@physik.tu-chemnitz.de

Prof. Dr. Arnd Meyer
08.03.1952
Professur Numerische Analysis
Fakultät für Mathematik
Technische Universität Chemnitz
09107 Chemnitz
Tel.: (0371) 531-2659
Fax: (0371) 531-2657
a.meyer@mathematik.tu-chemnitz.de

2.1.2 Projektbearbeiter

Dr. S. Seeger
Prof. Dr. K. H. Hoffmann
Prof. Dr. A. Meyer
Dr. P. Blaudeck

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

In bisherigen Arbeiten des SFB 393 wurde die Simulation von Strömungsprozessen anhand des Navier-Stokes-Systems durchgeführt. Für die numerische Behandlung dieses Systems sind theoretisch fundierte, effiziente (d. h. adaptive, sich auf die Lösung anpassende) Lösungsstrategien bekannt. Diese Gleichungen werden mittlerweile routinemäßig gelöst und benötigen einen handhabbaren numerischen Aufwand.

Auf der anderen Seite bietet die kinetische Theorie mit der Boltzmann-Gleichung eine gute Beschreibung für Strömungszustände von Fluiden, bei denen die Abweichung von lokalen Gleichgewichtszuständen nicht mehr vernachlässigt werden kann, z. B. wenn die mittlere freie Weglänge in der Größenordnung charakteristischer Strömungslängen liegt. Im Vergleich zur Lösung der Euler- und Navier-Stokes-Gleichung ist der Berechnungsaufwand zur Lösung der Boltzmann-Gleichung immens, hauptsächlich durch die Beschreibung durch Phasenraumdichten und numerische Steifheit.

Dies lässt eine erhebliche Lücke in der Möglichkeit, numerische Ergebnisse für Strömungen in dem zwischen den beiden oben genannten Beschreibungen liegenden Übergangsbereich zu erhalten. Dies sind Probleme, bei denen (in bestimmten Bereichen) eine Modellierung durch die Navier-Stokes-Gleichungen nicht mehr ausreicht, eine Beschreibung

mittels Boltzmann-Gleichung jedoch zu aufwendig ist. Oft beschränkt sich die Notwendigkeit einer Fluidbeschreibung durch die kinetische Theorie auf einen vergleichsweise kleinen Teil des Gesamtgebietes, z. B. dort, wo starke Gradienten in makroskopischen Feldern auftreten. In vielen praktisch relevanten Anwendungen ist man jedoch nicht an solch detaillierter Beschreibung durch Phasenraumdichten f_s interessiert. Hier reichen oft einige “wenige” Feldvariablen zur Charakterisierung der Strömungsverhältnisse aus.

Es ist daher von großem Interesse, Methoden zu entwickeln, die eine systematische Anpassung der Komplexität in der Modellierung zwischen Boltzmann-Gleichung auf der einen und Euler-Gleichungen auf der anderen Seite ermöglichen. Diese Verfahren müssen es erlauben, nicht nur die Gebietsdiskretisierung adaptiv an die Geometrie und Strömungsverhältnisse anzupassen, sondern auch – im Sinne einer adaptiven Approximation der Boltzmann-Gleichung – das zu lösende System partieller Differentialgleichungen. Wann diese Verfeinerung notwendig wird, und wie die Kopplung aneinandergrenzender Modellierungsbereiche zu behandeln ist, stellen dabei interessante und neue Fragestellungen dar. Hier haben Simulationsmethoden basierend auf gaskinetischen Modellierungen in den vergangenen Jahren mögliche Ansatzpunkte aufgezeigt.

Das Teilprojekt D5 befasst sich mit eben dieser systematischen Ableitung von Fluidmodellen aus der Boltzmann-Gleichung und deren numerischer Simulation. Die dabei verwendete Kumulantenmethode erlaubt es ausgehend von der Boltzmann-Gleichung, auf einfache Weise deterministische Modelle verschiedener Ordnung für die Bewegung von Fluiden zu erhalten.

Ziel dieser Antragsphase war die Anwendung dieser Methode zur Modellierung von Fluiden auf laminare 2D-Probleme und der Vergleich mit den Ergebnissen bekannter Methoden. Da die zu lösenden Gleichungen in beliebiger Ordnung abgeleitet werden können, lassen sich diese zusammen mit dem verwendeten Ansatz als schrittweise Näherung der Boltzmann-Gleichung durch immer “detailliertere” Fluidmodelle auffassen. Die Betrachtung dieser Gleichungshierarchien soll langfristig die Entwicklung effizienter numerischer Verfahren zur Lösung von Strömungsproblemen im Übergangsregime ermöglichen.

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

Grundlage einer gaskinetischen Modellierung einer chemisch nicht reagierenden Mischung von N_s verschiedenen Spezies ist die Boltzmann-Gleichung [CIP94] für die einzelnen Phasenraumdichten $f_s(t, \underline{x}, \underline{c})$:

$$\partial_t f_s + \underline{c} \cdot \partial_{\underline{x}} f_s + \underline{a} \cdot \partial_{\underline{c}} f_s = \sum_r^{N_s} S_{rs}[f_r, f_s]. \quad (2.1)$$

Das Hauptproblem einer Lösung dieser Integro-Differentialgleichung liegt darin, dass zum einen N_s Funktionen von 7 Veränderlichen zu bestimmen sind und zum anderen komplizierte Integrale über diese Funktionen bei der Auswertung der Kollisionsterme S_{rs} zu berechnen sind. Eine Übersicht über Lösungsmethoden zur direkten numerischen Integration dieser Gleichungen ist im Antrag zu finden. Im Vergleich zu Strömungssimulationen nach dem Navier-Stokes-Modell sind diese Verfahren jedoch extrem aufwendig,

so dass ihre Anwendung nur im Regime stark verdünnter Gase lohnt, in denen die Kontinuumsnäherungen nicht anwendbar sind.

Ein weiterer Ansatz, der im letzten Jahrzehnt daher besonders stark verfolgt wird, ist die Reduktion der Boltzmann-Gleichung auf für die makroskopische Dynamik relevante Größen [KNS00]. Hier haben Lattice-Boltzmann-Methoden (LBM) [Luo00], [Suc01] vielversprechende Alternativen [KNS00], [TKSR00], [JK00] zu bisherigen Methoden aufgezeigt. Die Grundidee der LBM besteht in einer radikalen Vereinfachung der Phasenraumdichte f_s so, dass gerade die klassischen Feldvariablen Dichte ρ , Strömungsgeschwindigkeit \underline{v} und Spannungen $\underline{\tau}$ richtig reproduziert werden können. Bei geschickter Wahl der Ortsdiskretisierung ergibt sich durch das Modell diskreter Geschwindigkeiten ein sehr schnelles numerisches Verfahren zur Simulation isothermer Strömungen. Allerdings lassen sich LBM nur schwer unter Beibehaltung ihrer guten Anwendungseigenschaften auf Modelle höherer Ordnung verallgemeinern, z. B. für nicht-isotherme Strömungen.

Kennt man die Phasenraumdichte $f_s(t, \underline{x}, \underline{c})$, lassen sich makroskopisch relevante Größen $\overline{\Psi}(t, \underline{x})$ als Mittelwerte zugeordneter mikroskopischer Funktionen $\Psi(t, \underline{x}, \underline{c})$ bestimmen, für die aus (2.1) Bilanzgleichungen hergeleitet werden können:

$$\partial_t \overline{\Psi} + \partial_{\underline{x}} \cdot \overline{\underline{c}\Psi} = \sum_r^{N_s} \varpi[f_1, \dots, f_{N_s}] + \overline{\partial_t \Psi} + \overline{\partial_{\underline{x}} \cdot \underline{c}\Psi} - \overline{a_s \partial_{\underline{c}} \Psi} \quad (2.2)$$

Eine besondere Rolle spielen dabei Momente $\overline{\Psi} = \overline{c^\alpha}$, da aus diesen für $\alpha = 0, 1, 2$ gerade die ‘klassischen’ Feldvariablen ρ_s , \underline{v}_s und T_s berechnet werden können. Erweitert man die Feldvariablen um höhere Momente, erhält man eine Hierarchie von Bilanzgleichungen, in welcher der Flux der n -ten Bilanzgleichung jeweils die Dichte in der $(n+1)$ -ten Gleichung darstellt. Der Abbruch dieser Hierarchie nach N Momenten führt zum Abschlussproblem, d. h. es müssen die $(N+1)$ -ten Momente und die Produktionsterme als Funktionen der Momente bis zur Ordnung N ausgedrückt werden.

Die verschiedenen in der Literatur bekannten Ansätze erlauben einen Abschluss der Momentengleichungen durch Annahmen über die spezielle Form von f_s . Bei der Momentenmethode [Gra58] entwickelt man die Phasenraumdichte nach Momenten und bestimmt die Entwicklungskoeffizienten aus der Forderung, dass die Ansatzfunktion und f_s in den ersten N Momenten übereinstimmen sollen. Nach der Erweiterten Thermodynamik (ET) [MR98] betrachtet man die Momentengleichungen als Nebenbedingungen zur Forderung nach Existenz und Stabilität des thermodynamischen Gleichgewichts. Man erhält so aus dem Formalismus der ET f_s als Funktion von Lagrange-Multiplikatoren, die wieder aus der Forderung nach Übereinstimmung der ersten N Momente bestimmt werden. Eine ähnliche Herangehensweise bietet die erweiterte Momentenmethode [Eu92]. Bei allen Methoden muss jedoch letztlich die Annahme gemacht werden, dass das System sich *nahe am thermodynamischen Gleichgewicht* befindet, da die Entwicklungskoeffizienten bzw. Lagrange-Multiplikatoren nur in linearer Näherung bestimmt werden können. Auch gestaltet sich die Bestimmung der Momente des Kollisionsoperators als Funktion der N Momente schwierig, da dieser von zweiter Ordnung in den Phasenraumdichten ist. Wird auch im Stoßoperator die Annahme gemacht, dass sich das Fluid nahe dem Gleichgewicht befindet, lassen sich auch die Produktionsterme näherungsweise bestimmen (linearisierte Boltzmann-Gleichung) [Wal58]. Sowohl beim Abschluss der Momentengleichungen als auch bei der Berechnung der Produktionsterme bestehen die Probleme hauptsächlich

darin, dass höhere Momente von Funktionen des Typs $e^{p(\underline{c})}$ mit einem Tensorpolynom $p(\underline{c})$ – sogenannten Normallösungen – bestimmt werden müssen. Die Tatsache, dass die vernachlässigten Terme gerade bei Gaszuständen ausserhalb des thermodynamischen Gleichgewichts eine Rolle spielen (z.B. starke Temperatur-Gradienten), erfordert entsprechende Sorgfalt bei der Interpretation der Ergebnisse aus Anwendungen auf Probleme, in denen viele Momente berücksichtigt werden.

Literaturverzeichnis zu 2.3 (eigene Vorarbeiten und Fremdliteratur)

- [Ari01] V. V. Aristov.
Direct methods for solving the Boltzmann equation and study of nonequilibrium flows. Kluwer Acad. Publ., Dordrecht, 2001.
- [Bob75] A. V. Bobylev.
Exact solutions of the Boltzmann equation.
Dokl. Akad. Nauk SSSR, 225(6):1296–1299, 1975. in Russian.
- [BPS95] A. V. Bobylev, A. Palczewski, and J. Schneider.
On approximation of the Boltzmann equation by discrete velocity models.
CR Acad. Sci. I - Math., 320(5):639–644, March 1995.
- [BR99] A. V. Bobylev and S. Rjasanow.
Fast deterministic method of solving the Boltzmann equation for hard spheres.
Eur. J. Mech. B Fluids, 18(5):869–997, 1999.
- [BR00] A. Bobylev and S. Rjasanow.
Numerical solution of the Boltzmann equation using a fully conservative difference scheme based on the FFT. *Transp. Theor. Stat. Phys.*, 29(3–5):289–310, 2000.
- [CC70] S. Chapman and T. G. Cowling.
The mathematical theory of Nonuniform Gases.
Cambridge University Press, Cambridge, 1970.
- [Cer00] C. Cercignani.
Rarefied Gas Dynamics: from basic concepts to actual calculations.
Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press, 2000.
- [CIP94] C. Cercignani, R. Illner, and M. Pulvirenti.
The Mathematical Theory of Dilute Gases,
volume 106 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, 1994.
- [CR96] P. Cordero and D. Risso.
Microscopic computer simulation of fluids.
In *4th Granada Lectures in Comp. Physics (Proceedings)*: pp. 83–134, 1996.
- [Eu92] B. C. Eu.
Kinetic Theory and Irreversible Thermodynamics, Chapter 10.7: Modified Moment Method, pp 365–386. John Wiley & Sons, New York, 1992.
- [Gra58] H. Grad.
Principles of the Kinetic Theory of Gases,
in *Handbuch der Physik* (Band XII), 205–293. Springer-Verlag, Berlin, 1958.

- [HMM99] S. Hess and M. M. Mansour.
Temperature profile of a dilute gas undergoing a plane Poiseuille flow.
Physica A, 272:481–496, 1999.
- [JK00] M. Junk and A. Klar.
Discretizations for the incompressible Navier-Stokes equations based on the lattice Boltzmann method. *SIAM J. Sci. Comput.*, 22(1):1–19, 2000.
- [KNS00] A. Klar, H. Neunzert, and J. Struckmeier. Transition from kinetic theory to macroscopic fluid equations: A problem for domain decomposition and a source for new algorithms. *Transp. Theor. Stat. Phys.*, 29(1-2):93–106, 2000.
- [KW77] M. Krook and T. Wu.
Exact solutions of the Boltzmann equation.
Phys. Fluids, 20(10):1589–1595, 1977.
- [Luo00] L.-S. Luo.
Some recent results on discrete velocity models and ramifications for lattice Boltzmann equation. *Comp. Phys. Comm.*, 129(1–3):63–74, 2000.
- [MBG97] M. M. Mansour, F. Baras, and A. L. Garcia.
On the validity of hydrodynamics in plane Poiseuille flows.
Physica A, 240:255–267, 1997.
- [MR98] I. Müller and T. Ruggeri.
Rational Extended Thermodynamics, volume 37 of *Springer Tracts in Natural Philosophy*. Springer-Verlag, New York, 2nd edition, 1998.
- [NGS91] H. Neunzert, F. Gropengiesser, and J. Struckmeier.
Computational methods for the Boltzmann equation,
Applied and Industrial Mathematics, 111–140. Kluwer Acad. Publ., Dordrecht, 1991.
- [RC97] D. Risso and P. Cordero.
Dilute gas Couette flow: Theory and molecular dynamics simulation.
Phys. Rev. E, 56(1):489–497, 1997.
- [Suc01] S. Succi.
The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond.
Numerical Mathematics and Scientific Computation. Oxford Univ. Press, 2001.
- [TKSR00] J. Tölke, M. Krafczyk, M. Schulz, and E. Rank.
Discretization of the Boltzmann equation in velocity space using a Galerkin approach. *Comp. Phys. Comm.*, 129(1–3):91–99, 2000.
- [TS94] M. Tij and A. Santos.
Perturbation analysis of a stationary nonequilibrium flow generated by an external force. *J. Stat. Phys.*, 76(5/6):1399, 1994.
- [TS95] M. Tij and A. Santos.
Combined heat and momentum transport in a dilute gas.
Phys. Fluids, 7(11):2858–2866, 1995.
- [Wal58] L. Waldmann.
Transporterscheinungen in Gasen von mittlerem Druck,
in *Handbuch der Physik* (Band XII), 295–514. Springer-Verlag, Berlin, 1958.

- [Wil62] D. R. Willis.
Comparison of kinetic theory analysis of linearized Couette flow.
Phys. Fluids, 5(2):127, 1962.
- [ZGA03] Y. Zheng, A. Garcia, and B. Alder.
Comparison of kinetic theory and hydrodynamics for poiseulle flow.
in volume 663 of *AIP Conference Proceedings*, pp. 149–156, Canada, 2003. Whistler.

2.4 Ergebnisse

Der folgende Bericht umfasst einen Überblick über die insgesamt erreichten Ergebnisse und die im letzten Jahr erzielten Fortschritte. Die Kumulantenmethode [SH00], [SH02] umgeht die Schwierigkeiten bei der Herleitung der Gleichungssysteme mit den o.g. Momentenmethoden durch einen Kumulanten-Ansatz

$$\varphi_s^{\text{CM}} = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \exp \left(\sum_{\alpha=0}^{N_\alpha} \frac{\mathbf{i}^\alpha}{\alpha!} \underline{\chi}^\alpha \cdot C_s^\alpha \right) \quad (2.3)$$

für die charakteristische Funktion

$$\varphi_s = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int d\underline{c} f_s(t, \underline{x}, \underline{c}) e^{+\mathbf{i}\underline{\chi} \cdot \underline{c}}. \quad (2.4)$$

Dadurch lassen sich die Bewegungsgleichungen für die Kumulanten durch einfache Differentiation analytisch berechnen. Die erhaltenen Gleichungen wurden mit den aus Momentenmethoden erhaltenen verglichen und zeigen für niedrige Approximationsordnungen die gleiche Form. Für höhere Ordnungen treten für die Kumulantengleichungen jedoch zusätzliche, nicht-lineare Beiträge auf, wodurch die Advektionsform

$$\partial_t \underline{C}_s + \underline{\underline{A}}_s(\underline{C}_s) \cdot \partial_{\underline{x}} \underline{C}_s = \underline{E}_s + \sum_r^{N_s} \underline{B}_{rs}(\underline{C}_r, \underline{C}_s) \quad (2.5)$$

mit dem Advektionstensor $\underline{\underline{A}}_s(\underline{C}_s)$, den externen Kräften \underline{E}_s und Produktionstermen \underline{B}_{rs} eine besonders einfache, quasi-lineare Struktur hat, denn der Advektionstensor ist linear in den Kumulanten und besitzt eine einfache Blockstruktur:

$$\left[\underline{\underline{A}}_s \right]_x = \left(\begin{array}{c|ccc|ccc|ccc|c} C^x & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ \hline C^{xx} & C^x & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ \hline C^{xy} & 0 & C^x & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ \hline C^{xxx} & 2C^{xx} & 0 & C^x & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \\ \hline C^{xxy} & C^{xy} & C^{xx} & 0 & C^x & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \\ \hline C^{xyy} & 0 & 2C^{xy} & 0 & 0 & C^x & 0 & 0 & 1 & 0 & \\ \hline C^{xxxx} & 3C^{xxx} & 0 & 3C^{xx} & 0 & 0 & C^x & 0 & 0 & 0 & \ddots \\ \hline C^{xxxy} & 2C^{xxy} & C^{xxx} & C^{xy} & 2C^{xx} & 0 & 0 & C^x & 0 & 0 & \\ \hline C^{xxyy} & C^{xyy} & 2C^{xxy} & 0 & 2C^{xy} & C^{xx} & 0 & 0 & C^x & 0 & \\ \hline C^{xyyy} & 0 & 3C^{xyy} & 0 & 0 & 3C^{xy} & 0 & 0 & 0 & C^x & \\ \hline \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \end{array} \right) \quad (2.6)$$

Die Berechnung der Gleichungen zu gegebener Ordnung erfolgt durch automatisierte Formelmanipulation mittels MATHEMATICA [See03a], [SH05c]. Durch Differentiation von (2.3) werden zunächst die Beziehungen zwischen Momenten und Kumulanten bis zur gewünschten Ordnung bestimmt. Anschließend werden die Produktionsterme für die

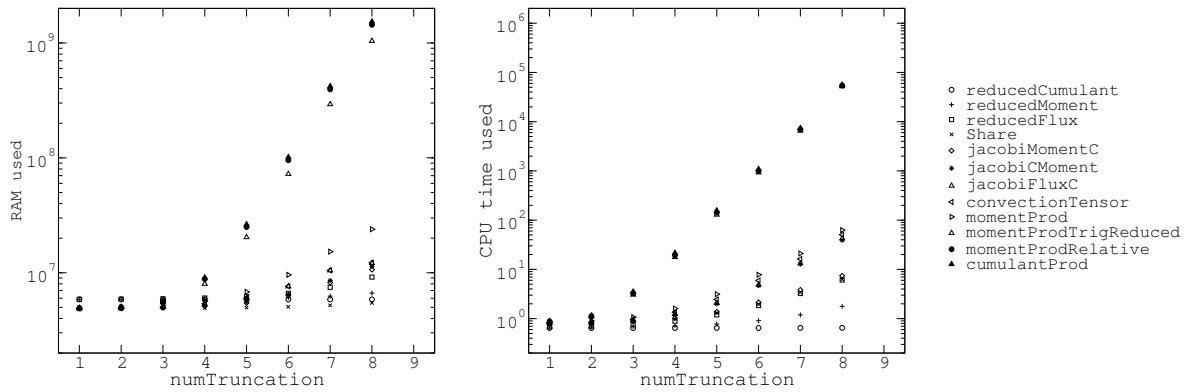


Abbildung 2.1: Benötigter Speicher- und CPU-Zeitbedarf zur Berechnung der Kumulantengleichungen zum Abschluss des entsprechenden Teilschrittes für eine inerte Mischung (Dual-Itanium2, 12GB RAM).

Momentengleichungen und daraus die Produktionsterme für (2.5) abgeleitet. Dazu wird zuerst die Fourier-Transformierte des Stoßoperators als Funktional der charakteristischen Funktionen berechnet. In Verbindung mit dem Kumulantenansatz erhält man wieder durch schrittweise Differentiation die Produktionsterme für die Momentengleichungen als Funktion der Kumulanten. Da die Abbildung der Kumulanten auf die Momente eindeutig und analytisch invertierbar ist, können im Anschluss die Formulierungen der Bewegungsgleichungen für die Momente sowohl in Erhaltungs- bzw. Divergenzform als auch für die Kumulantengleichungen in quasi-linearer bzw. Advektionsform bestimmt werden. Abbildung 2.1 zeigt den Ressourcenbedarf für die einzelnen Schritte. Hauptaufwand ist dabei die symbolische Integration der Produktionsterme, welche im wesentlichen aus der Reduktion trigonometrischer Ausdrücke besteht. Für einkomponentige Gase vereinfachen sich die Terme, so dass sehr viel höhere N_α möglich sind.

Für das Modell des Maxwell-Gases gibt die Betrachtung von in den Kumulanten linearisierten Produktionstermen Aufschluss über den Bezug der Kumulanten zur klassischen, kontinuumsmechanischen Fluid-Beschreibung. Für dieses Modell ist die Jacobi-Matrix der Produktionsterme bezüglich der Kumulanten im Gleichgewicht blockdiagonal. Dadurch können entsprechende Eigenwerte und -variablen unabhängig von der Ordnung der Kumulantengleichungen N_α bestimmt werden [See03b]. Die Motivation für die Kumulantenmethode zeigt sich bestätigt, denn die Eigenwerte (und damit die Relaxationsraten Eigenvariablen) wachsen mit zunehmender Kumulantenordnung. Allerdings ist ein erheblicher Überlapp der Eigenwertspektren verschiedener Ordnungen zu beobachten. Die

Eigenvariablen $e_{\alpha i}$ ergeben sich als Linearkombination der Kumulanten:

$$\begin{aligned}
 \begin{pmatrix} e_{00} \\ e_{11} \\ e_{12} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} C^0 \\ C^x \\ C^y \end{pmatrix} \\
 \begin{pmatrix} e_{20} \\ e_{211} \\ e_{212} \end{pmatrix} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C^{xx} + C^{yy} \\ C^{xx} - C^{yy} \\ 2C^{xy} \end{pmatrix} \\
 \begin{pmatrix} e_{311} \\ e_{312} \\ e_{321} \\ e_{322} \end{pmatrix} &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C^{xxx} + C^{xyy} \\ C^{yyy} + C^{xxy} \\ C^{xxx} - 3C^{xyy} \\ C^{yyy} - 3C^{xxy} \end{pmatrix} \\
 \begin{pmatrix} e_{40} \\ e_{411} \\ e_{412} \\ e_{421} \\ e_{422} \end{pmatrix} &= \frac{1}{8} \begin{pmatrix} C^{xxxx} + 2C^{xxyy} + C^{yyyy} \\ 4C^{xxxx} - 4C^{yyyy} \\ 4C^{xxyy} + 4C^{xyyy} \\ C^{xxxx} - 6C^{xxyy} + C^{yyyy} \\ 4C^{xxyy} - 4C^{xyyy} \end{pmatrix} \\
 &\vdots
 \end{aligned} \tag{2.7}$$

Genauere Betrachtungen [See03b] zeigen drei verschiedene Arten von Eigenvariablen, die man entsprechend der Zuordnung zu klassischen Variablen unterscheiden kann: (I) einzelne, *energieartige* Eigenvariablen $e_{\alpha 0}$, welche immer zum niedrigsten Eigenwert für geradzahlige Ordnungen α auftreten. Diese Eigenvariablen sind symmetrisch bezüglich einer Vertauschung der Koordinatenachsen; (II) paarweise *flussartige* Eigenwerte $e_{\alpha n 1}$ und $e_{\alpha n 2}$, welche stets paarweise zu ungeradzahligem Ordnungen α auftreten und für die die Eigenvariablen ebenfalls symmetrisch bezüglich einer Vertauschung der Koordinatenachsen sind; (III) paarweise *spannungsartige* Eigenwerte $e_{\alpha n 1}$ und $e_{\alpha n 2}$, die zu geradzahligem α auftreten und für deren Eigenvariablen sowohl symmetrisches als auch antisymmetrisches Verhalten auftritt. Schreibt man die Kumulantengleichungen in diesen Eigenvariablen der Produktionsterme, so kann man die Eigenvariablen niedrigster Ordnung als die Feldvariablen der klassischen Hydrodynamik identifizieren [SH02]. Dazu ist keine Kenntnis „klassischer“ Modellierungen notwendig, denn es werden lediglich Systeme nahe dem Gleichgewicht betrachtet, für die sich über den ersten Schritt einer Maxwell-Iteration aus dem erhaltenen Differentialgleichungssystem *direkt* die Navier-Stokes- bzw. Eulergleichungen ableiten lassen. Der Zusammenhang der Relaxationszeiten mit den Transportkoeffizienten ergibt dabei die Motivation für ein hyperbolisches Equivalent zum Navier-Stokes-Modell.

2.4.1 Thermische Randbedingungen

Diese Herleitung des Bezugs zum Navier-Stokes-System über die Technik der Maxwell-Iteration kann benutzt werden, um Randbedingungen für die Kumulanten zu konstruieren: Fasst man sich im Fluid aufbauende Wärmeströme und Scherspannungen als Reaktion auf Gradienten in den Eigenvariablen niedrigerer Ordnung auf, so kann man entsprechend der erhaltenen Beziehungen aus den Gradienten niedriger Ordnung die Randwerte für Eigenvariablen höherer Ordnung rekonstruieren (siehe Abschnitt 2.4.1).

Bei den thermischen noslip-Randbedingungen werden Randpunkte im wesentlichen wie innere Gitterpunkte behandelt: die Gradienten senkrecht zur Wand werden durch einseitige Differenzen approximiert und die Werte für die Eigenvariablen e_{1i} und e_{20} durch die Komponenten der Wandgeschwindigkeit \underline{u} bzw. aus der Wandtemperatur T berechnete Werte ersetzt. Anschließend erfolgt ein Update wie für einen normalen Fluidknoten.

Bei den Navier-Stokes Randbedingungen werden zunächst für den Randknoten und den benachbarten Fluidknoten die Eigenvariablen bezüglich der Produktionsterme bestimmt.

Für die der Strömungsgeschwindigkeit und spezifischen Energie entsprechenden Eigenvariablen e_{1i} und e_{20} des Randknotens werden die Wandgeschwindigkeit \underline{w} und die aus der Wandtemperatur T berechnete spezifischen Energie angenommen. Über einseitige Differenzenquotienten zum Fluidknoten werden die Gradienten in den Eigenvariablen berechnet und nach den aus der Maxwell-Iteration erhaltenen Beziehungen die den Spannungen $\underline{\sigma}$ und dem Wärmestrom \underline{j} entsprechenden Eigenvariablen e_{21i} und e_{31i} bestimmt. Durch Rücktransformation erhält man die neuen Werte für die Kumulanten am Randknoten.

Anhand von Couette- und Poiseuille-Strömungen wurden diese thermischen Randbedingungen für verschiedene Gasmodelle untersucht [See03b] und es zeigt sich, dass für beide die wesentlichen Eigenschaften (lineares bzw. parabolisches Profil der Strömungsgeschwindigkeit, dissipative Effekte im Innern und Wärmetransport zu den Wänden) qualitativ richtig wiedergegeben werden. Allerdings konnten bestimmte, für Strömungen verdünnter Gase typische qualitative Eigenschaften nur mit der einen oder anderen Art Randbedingungen beobachtet werden. Trotzdem wird mit diesen Randbedingungen ein direkter Vergleich der Implementation der Kumulantenmethode mit den in den A-Teilprojekten verwendeten Verfahren möglich.

2.4.2 Testprobleme

Analytische Bobylev/Krook-Wu-Lösung

Für den Fall einer räumlich homogenen Mischung kann die einzige bekannte, nichttriviale, analytische Lösung der Boltzmann-Gleichung angegeben werden, die so genannte Bobylev/Krook-Wu-Lösung [Bob75], [KW77]. Mit dieser lassen sich für bestimmte Anfangsbedingungen explizite Lösungen der raumhomogenen Boltzmann-Gleichung durch elementare Funktionen angeben. In [SH05a] wurde diese Lösung auf den Kumulanten-Ansatz übertragen und so die entsprechenden analytischen Lösungen für die Kumulanten bestimmt. Mittels einer Runge-Kutta-Integration 4. Ordnung wurde die numerische Lösung für die nichtlinearen und die in den Kumulanten linearisierten Produktionsterme bestimmt und mit der analytischen Lösung verglichen. Durch die hohe Symmetrie der Lösung haben zwar mehrere Kumulanten höherer Ordnung eine nichttriviale Zeitentwicklung, betrachtet man jedoch die Zeitentwicklung der Eigenvariablen bezüglich der linearisierten Produktionsterme, so sind nur die energieartigen Eigenwerte von Null verschieden. Es zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung mit der analytischen Lösung bei Verwendung der exakten, nicht-linearen Produktionsterme sowohl für das einkomponentige Gas als auch für eine binäre Mischung über einen weiten Bereich unterschiedlichen Massenverhältnisses der Spezies. Bei Verwendung der nach den Kumulanten linearisierten Produktionsterme sind jedoch für Kumulanten höherer Ordnung Abweichungen zu beobachten.

Couette-Strömung (adiabatische Ränder)

Zunächst wurden die aus der kinetischen Theorie bekannten adiabatischen slip- und noslip-Randbedingungen für den Kumulantenansatz hergeleitet: Bei adiabatischen noslip-Randbedingungen wird ein auf die Wand prallendes Teilchen elastisch retro-reflektiert,

d. h. beide Geschwindigkeitskomponenten normal und tangential zur Wand werden negiert. Dadurch können Normal- und Scherspannungen zwischen Fluid und Wand entstehen und das Fluid hat am Rand die Wandgeschwindigkeit.

Aus diesen Annahmen folgen Symmetrieeigenschaften der Phasenraumdichte und damit auch der charakteristischen Funktion, aus welchen Randbedingungen an die Werte und Gradienten für die Kumulanten folgen [SH00], [See03b].

Mit diesen adiabatischen noslip-Randbedingungen wurde das Problem der Couette-Strömung simuliert [See03b] und mit Ergebnissen für den 3D-Fall nach [Cer00] verglichen. Obwohl ein quantitativer Vergleich aufgrund unterschiedlicher Dimensionalität und Strömungsverhältnisse nicht sinnvoll möglich ist, zeigen die Ergebnisse eine gute qualitative Übereinstimmung der Kumulantenmethode mit der Kinetischen Theorie und der direkten Simulation durch Molekulardynamik.

Poiseulle-Strömung

Für die durch eine konstante externe Kraft angetriebene Kanalströmung sagen Modelle basierend auf der kinetischen Theorie ein lokales Minimum im Temperaturprofil quer zur Strömungsrichtung voraus. Dieser qualitative Unterschied zum Navier-Stokes-Modell tritt bereits für laminare Strömungen mit niedrigen Reynolds- und Machzahlen sowohl bei einer direkten Molekulardynamik-Simulation [MBG97] als auch bei einer störungstheoretischen Betrachtung der Boltzmann-Gleichung mit BGK-Wechselwirkungsterm [TS94] und Momentenmethoden [HMM99] auf. Diese qualitative Eigenschaft ist auch bei Antrieb der Kanalströmung durch einen Druckgradienten vorhanden, obwohl hierbei eine bessere Übereinstimmung mit Navier-Stokes zu beobachten ist [ZGA03]. Auch bei Modellierung durch die Kumulantenmethode wird dieses lokale Temperaturminimum reproduziert [See03b], allerdings nur bei Verwendung der Navier-Stokes-Randbedingungen. Für die thermischen noslip-Randbedingungen wird ähnlich zu Navier-Stokes ein Maximum im Temperaturprofil beobachtet.

Couette-Strömung

Auch für die laminare Scherströmung eines verdünnten Gases zwischen zwei unendlich ausgedehnten Platten, welche sich entgegengesetzt mit der Geschwindigkeit w bewegen, werden verschiedene Eigenschaften der Strömung verdünnter Gase durch das Navier-Stokes-Modell falsch wiedergegeben. Zum einen ist das Profil der x -Komponente der Geschwindigkeit sogar für die linearisierte Boltzmann-Gleichung keine exakt lineare Funktion mehr [Wil62], zum anderen tritt ein nicht verschwindender Wärmestrom in Strömungsrichtung auf, obwohl kein Temperaturgradient in dieser Richtung vorhanden ist. Auch diese durch Navier-Stokes nicht beschriebene qualitative Eigenschaft wird durch direkte numerische Simulation [RC97], Momentenmethoden [TS95] und die kinetische Theorie [CC70] vorhergesagt und ist auch für die Kumulantenmethode zu beobachten [See03b].

2.4.3 Stabilität/Hyperbolizitätsbereich

Für starke externe Kräfte (Poiseulle) bzw. hohe Wandgeschwindigkeiten (Couette) treten numerische Instabilitäten der verwendeten Verfahren auf. Ausgehend von der Beobachtung, dass diese sich von den Rändern aus in das Strömungsgebiet hinein ausbreiten, wurden Untersuchungen zum Hyperbolizitätsbereich der Kumulanten-Gleichungen bis zu hohen Ordnungen angestellt [See03b]. Dazu wurde das Eigenwertspektrum der Komponenten des Advektionstensors bei Variation der Eigenvariablen bezüglich der in den Kumulanten linearisierten Produktionsterme betrachtet.

Die Form der Spektren im Vergleich mit dem entsprechenden Profil aus der Strömungssimulation lässt darauf schließen, dass diese Instabilitäten durch zu hohe Wärmeflüsse hervorgerufen werden. Dies kann zum einen dadurch bedingt sein, dass die Randbedingungen für solch starke Nichtgleichgewichtszustände nicht geeignet sind (die Navier-Stokes-Beziehungen wurden unter der Annahme von Zuständen nahe dem Gleichgewicht erhalten) oder die Ordnung der Kumulantengleichungen zu niedrig ist. Dies muss in weitergehenden Arbeiten geklärt werden.

2.4.4 Effiziente Diskretisierung

In Arbeiten zur Anwendbarkeit effizienter, d.h. adaptiver Diskretisierungsstrategien für die Kumulantengleichungen zeigte sich [See03b], dass sich eine wesentliche Voraussetzung für die Anwendbarkeit moderner Verfahren mit dem bisherigen, nichtlinearen Ansatz für die charakteristische Funktion nur schwierig erreichen lässt. Hauptproblem ist dabei die analytische Formulierung einer Entropiedichte, mittels derer eine symmetrische Form der Gleichungen konstruiert werden kann, für die sich die aus dem H-Theorem ableitbaren fundamentalen Stabilitätseigenschaften auf die diskrete Lösung übertragen. Im Rahmen dieser Arbeiten konnte gezeigt werden [See03b],[Ba04] dass Momenten- und Kumulantenmethoden als eine spezielle Form der Methode der gewichteten Residuen (WRM) zur Diskretisierung der Boltzmann-Gleichung aufgefasst werden können. Allerdings gehen viele Eigenschaften der WRM dadurch verloren, dass für die Momenten-/Kumulantenmethoden nichtlineare Ansatzfunktionen für die Lösung verwendet werden müssen. Bei geeigneter Wahl der Ansatzfunktionen für die charakteristische Funktion könnten eine analytische Form für die Entropiedichte und damit nach der Kumulantenmethode symmetrische Gleichungen angegeben werden, die unter Beibehaltung der Stabilitätseigenschaften diskretisierbar sind.

Literaturverzeichnis

- [SHMss] S. Seeger, K. H. Hoffmann, and A. Meyer. The cumulant method for gas dynamics. In K. H. Hoffmann and A. Meyer, editors, *Parallel algorithms and cluster computing*, page 337. Springer Verlag, Berlin, in press.
- [SH05c] S. Seeger and K.H. Hoffmann.
On symbolic derivation of the cumulant equations.
Computer Physics Communications, 168(3):165–176, 2005.

- [SH05b] S. Seeger and K.H. Hoffmann.
On the Domain of Hyperbolicity of the Cumulant Equations.
J. Stat. Phys., 121(1–2):75–90.
- [SH05a] S. Seeger and K.H. Hoffmann.
The cumulant method for the space-homogeneous Boltzmann equation.
Continuum Mech. Thermodyn., 17(1):51–60, 2005.
- [Ba04] J. Balg.
Anwendung der Methode der gewichteten Residuen auf die eindimensionale Boltzmann-Gleichung.
Bachelorarbeit TU-Chemnitz, 2004
- [SH04] S. Seeger and K.H. Hoffmann.
Erratum: The cumulant method applied to a mixture of Maxwell gases.
Continuum Mech. Thermodyn., 16(5):515, 2004.
- [See03b] S. Seeger. *The Cumulant Method*.
Phd thesis, Chemnitz University of Technology, Chemnitz, September 2003.
<http://archiv.tu-chemnitz.de/pub/2003/0120>.
- [See03a] S. Seeger. Cumulant method implementation for MATHEMATICA.
<http://www.tu-chemnitz.de/pub/2003/0120>, March 2003.
- [SH02] S. Seeger and K. H. Hoffmann.
The cumulant method applied to a mixture of Maxwell gases.
Continuum Mech. Thermodyn., 14(2):321–335, 2002.
- [SH00] S. Seeger and K. H. Hoffmann.
The cumulant method for computational kinetic theory.
Continuum Mech. Thermodyn., 12:403–421, 2000.

2.5 Offene Fragen / Ausblick

Die Validierung der Methode anhand komplizierterer Testprobleme zeigt die grundsätzliche Anwendbarkeit der Kumulanten-Methode, wirft aber auch neue Fragestellungen auf, die wir weiter untersuchen wollen.

Dazu gilt es eine Theorie zu entwickeln, wie aus der kinetischen Theorie bekannte Formulierungen für Randbedingungen an die Phasenraumdichte auf die für die Ableitung der Kumulantengleichungen benötigte charakteristische Funktion übertragen lassen. So können Randbedingungen aus der mikroskopischen Beschreibung heraus systematisch und theoretisch fundiert abgeleitet werden. Auf der anderen Seite lassen sich auch aus dem thermodynamischen Verständnis geschlossener bzw. offener thermodynamischer Systeme Randbedingungen in Form von Extremalprinzipien ableiten. Diese stellen eine alternative “makroskopische” Formulierung dar, welche jedoch eng an eine praktisch benutzbare Formulierung der entsprechenden Größen (z. B. Entropiedichte) geknüpft ist. Die Untersuchungen zu dieser Herangehensweise und ihrer Anwendbarkeit auf die Kumulantengleichungen sind eng mit den Arbeiten zur Formulierung möglicher Entropiefunktionale verknüpft.

Weiterhin ist die Anwendung moderner numerischer Methoden auf die Lösung der raum-inhomogenen Kumulanten-Gleichungen weiter voranzutreiben. Es ist bekannt, dass bei Angabe einer Entropiedichte als Funktion der Ansatzparameter die Gleichungen symmetrisiert und damit unter Übertragung der grundlegenden Stabilitätseigenschaften auf die numerische Lösung diskretisiert werden können. Für Formulierungen basierend auf einem Ansatz für die charakteristische Funktion sind Entropie-Funktionale bisher in der Literatur jedoch nicht bekannt. Zwar kennt man notwendige Kriterien für solche Funktionale, Untersuchungen zu konkreten, praktisch anwendbaren Formulierungen sind in der Literatur jedoch nicht zu finden. Ausgehend von bekannten Entropiefunktionalen für die Phasenraum-dichte kann durch einen geeigneten linearen Ansatz für die Phasenraum-dichte versucht werden, mögliche Entropiefunktionale für die charakteristische Funktion zu finden. So ließe sich zum einen eine symmetrische Form der Bewegungsgleichungen für die Ansatzparameter konstruieren, zum anderen könnten aber auch die Vorteile bei der Berechnung der Stoßintegrale bei einer Formulierung bezüglich der charakteristischen Funktion genutzt werden. Die zu gewinnenden Erkenntnisse sind über die hier untersuchten Methoden zur Modellierung von Fluiden hinaus für eine Vielzahl anderer Probleme der statistischen Physik von Bedeutung.

Zusammen mit den Ergebnissen aus den Untersuchungen zu möglichen Randbedingungen können so kompliziertere Anwendungs-Probleme gelöst werden, anhand derer die Anwendbarkeit dieser Herangehensweise weiter überprüft werden kann.