



## Numerische Simulationsverfahren im Ingenieurwesen

### Fragenkatalog

WS 18/19

#### Zelluläre Automaten

- 1 • Erklärung des Verfahrens. Wann verwendet man zelluläre Automaten? Nennen Sie Beispiele für zelluläre Automaten.
- 2 • Was versteht man unter Zellen, Zuständen, Nachbarschaften und Update-Regeln?
- 3 • Wie viele Regeln sind bei einem Automaten möglich?
- 4 • Was versteht man unter einen Wolfram-Automaten? Welches Verhalten kann man bei diesen beobachten (Klasseneinteilung)? Nennen Sie eine Anwendung. Welche Regelarten existieren und wie funktionieren diese?
- 5 • Wie kann man eine Verkehrssimulation aufbauen, was ist zu beachten? Erklären Sie die Modelle von Weimar sowie Nagel und Schreckenberg. Welche wichtigen Ergebnisse liefern die Simulationen dieser Modelle?
- 6 • Welche regelmäßigen Gitter verwendet man in 1D, 2D und 3D? Was ist bei der Implementierung von 2D Gitter zu beachten, worin unterscheiden sich diese Gitter?
- 7 • Welche Randbedingungen sind denkbar und wie werden diese implementiert?
- 8 • Was simuliert Conways Game of Life?
- 9 • Was beschreiben erregbare Medien und wie kann man sie als Automat modellieren? Wie funktioniert das Aktivator-Inhibitor-Modell?
- 10 • Was sind partitionierte und Block-Automaten? Warum verwendet man diese?
- 11 • a) Wie wird mittels zellulärem Automaten Diffusion beschrieben? b) Wie zeigt man, dass tatsächlich Diffusion beschrieben wird? c) Erklären Sie das Sprungmodell. d) Wie lautet die Mastergleichung? e) Kann man von der Diffusionsgleichung auch zu einem Automaten gelangen?
- 12 • Was ist der zeitliche Mittelwert und was das Scharmittel?

#### Elastische Gittermodelle

- 13 • Was sind Gittervektoren und Gittertensoren? Wie berechnet man diese, und wofür braucht man sie? Wann ist ein Gittertensor isotrop? Wie kann man aus einem anisotropen Gittertensor einen isotropen machen?
- 14 • Wie sind elastische Gittermodelle aufgebaut und wozu können sie verwendet werden? Welche Eigenschaften muss das Gitter erfüllen?
- 15 • Wie lautet die Lamé-Naviersche Verschiebungsdifferenzialgleichung?
- 16 • Welche Probleme treten hinsichtlich der Abbildung elastischer Parameter auf?

## Gittergase

- 17 • Was haben die Gittergase mit den zellulären Automaten gemein? Welches makroskopische Verhalten möchte man mit Hilfe der Gittergase simulieren?
- 18 • Wie lautet die Navier-Stokes-Gleichung einer inkompressiblen Strömung? Benennen Sie die einzelnen darin vorkommenden Größen.
- 19 • Wie funktioniert das HPP-Gittergas-Modell? Was sind Besetzungszahlen, was mittlere Besetzungszahlen? Was versteht man unter Coarse Graining? Wie lautet die mikrodynamische Gleichung und wie der Stoßoperator des HPP-Modells? Warum liefert das HPP-Modell nur eine schlechte Beschreibung des Verhaltens realer Gase?
- 20 • Wie funktioniert das FHP-Gittergas-Modell? Welche elementaren Stoßregeln hat dieses System und auf welchen Prinzipien beruhen diese? Welche Randbedingungen kann man modellieren und wie wird das gemacht?
- 21 • Wie erhält man aus den mittleren Besetzungszahlen makroskopische Größen wie Dichte und Impulsdichte? Wie legt man die Anfangsbedingungen fest? Wie kann man das Rauschen bei einer Gittergas-Simulation verringern?
- 22 • Auf welche Einschränkungen hinsichtlich der Abbildung der Navier-Stokes-Gleichung führt das FHP-Modell? Was ist die Hauptursache für diese Einschränkungen? Wie kann man die Verletzung der Galilei-Invarianz reparieren?

## Gitter-Boltzmann-Verfahren

- 23 • Wie funktioniert die Gitter-Boltzmann-Methode? Wie unterscheidet sich die Methode im Vergleich zu den Gittergasmodellen?
- 24 • Wie funktionieren Kollision und Propagation innerhalb der Gitter-Boltzmann-Methode? Was muss man bei Verwendung eines D2Q8 bzw. D2Q9 Gitters beachten?
- 25 • Wie wird der Stoßoperator abgebildet? Wozu verwendet man den BGK-Ansatz und auf welche makrodynamische Gleichung für die Verteilungsdichten führt er?
- 26 • Wie berechnet man Dichte und Impulsdichte aus den Verteilungsdichten?
- 27 • Erklären Sie den groben Simulationsablauf für das Gitter-Boltzmann-Verfahren. Wie stellt man die Viskosität ein? Wie werden reale Strömungsrandbedingungen innerhalb des Verfahrens abgebildet?

## Randelementemethode

- 28 • Wozu kann man die Methode der Randelemente nutzen? Was sind Vor- und Nachteile dieser Methode z.B. gegenüber FEM?
- 29 • Erklären Sie die Methode der gewichteten Residuen.
- 30 • Welche wesentlichen Schritte sind zur Transformation einer gewöhnlichen Differenzialgleichung auf den Rand durchzuführen?
- 31 • Was ist der Unterschied zwischen der Poisson- und Laplacegleichung? Welche physikalischen Prozesse werden durch die Poisson- bzw. Laplacegleichung beschrieben? Wie lautet die 2. Greensche Identität?

- 32 • Zwischen welchen Randbedingungen unterscheidet man? Wie hängt der Flussdichtevektor mit dem Potenzial zusammen?
- 33 • Welche Schritte sind prinzipiell nötig, um aus einem Randwertproblem (DGL) eine REM Formulierung zu machen? Was ist die schwache Form einer DGL? Was sagt der Satz von Gauß aus?
- 34 • Überführen Sie die 2D-Laplace-Gleichung in eine Randintegralgleichung.
- 35 • Was ist die Delta-Distribution? Wie kann man diese als Folge von Funktionen darstellen? Was passiert, wenn man sie integriert? Was ist zu beachten, wenn sie auf dem Rand liegt?
- 36 • Was ist die Fundamentallösung? Welche Gleichung löst diese?
- 37 • Was sind Randelemente, Gitterpunkte, Knoten, Interpolationsfunktionen? Was ist der Unterschied zwischen kontinuierlichen und diskontinuierlichen Elementen? Wo verwendet man welche?
- 38 • Was ist die Kollokationsmethode? Was sind Einflussmatrizen?
- 39 • Wie behandelt man den Quellterm der Poisson-Gleichung?

## Implementierung

- 40 • Welche Techniken kann man zum Aufsummieren benachbarter Elemente in Arrays verwenden?
- 41 • Wie dreht man gleichzeitig mehrere Blöcke innerhalb einer Matrix?
- 42 • Bei welchen der behandelten numerischen Methoden treten Matrizen auf, die schwach besetzt sind?
- 43 • Was versteht man unter dem Begriff „Vektorisierung“?

# Numerische Simulationsverf. in Ingenieurwesen - Fragenkatalog

## Zelluläre Automaten

- ① Prinzip:
- 1) gleichmäßiges Gitter
  - 2) endliche Anzahl diskreter Zustände
  - 3) diskrete Zeitschritte
  - 4) definierte Nachbarschaft
  - 5) Update-Regelung

Nann 2:  
▷ einfache Rechenvorschriften  
▷ diskrete Vorgänge

Beispiele:  
▷ Evakuierung, Verkehrssimulation, Waldbrände, Neuronale Netze, ...

- ② Zellen:  
▷ kleinste Einheit  $\rightarrow$  Anordnung im Gitter  $\rightarrow$  Zustandsmenge  
Zustände:  
▷ Jede Zelle kann eine endl. Anzahl diskreter Zustände annehmen  $\rightarrow$  Nachbarschaft: Zustandskombinationen

Nachbarschaft:  
▷ definierte NB  $\rightarrow$  Zelle gehört mit zur NB  
 $\hookrightarrow$  Nachbarschaftsradius  $r$

Update-Regel:  
▷ Zustand der Zelle zum Zeitpunkt  $t+1$  hängt von den Zuständen der Nachbarschaftszellen zum Zeitpunkt  $t$  ab

- ③ Anzahl mögl. Regeln:  $x = \frac{1}{2} \binom{2r+1}{2}$   
 $\hookrightarrow$  Beschränkungen möglich: Symmetrische Regel, Regeln ohne Gedächtnis, lokale Regeln, Additive Regeln, (Anzahl) Totalistische Regel, Irreversible Reg., Garten-Eden Konfiguration

- ④ Wolfram-Automat: binärer, 1-0 Automat

- Klasseneinteilung:
- Klasse 1: homogener Endzustand nach kurzer Zeit
  - Klasse 2: einfache zeitunabhängige oder period. Muster
  - Klasse 3: chaotisches unvorherschaubares Verhalten (lokal regelmäßige Strukturen) möglich
  - Klasse 4: wie Klasse 2, jedoch auch Strukturen möglich, die sich im Laufe der Zeit durch den Raum bewegen, auch langlebige Elemente

Anwendung: Urknall mit Nachwirkung / Universelle Berechnungen (Regel 110)

Regelarten: siehe ③



- ⑤ Aufbau:
- ▷ Zelle durch ein Auto besetzt oder nicht
  - ▷ Zuordnung von (diskreten) Geschwindigkeiten (auch Null)
  - ▷ Update-Regel muss enthalten: Beschleunigen, Bremsen (auch zufällig), Fahren / Vorsetzen

- Weimar:
- ▷ Zustandsmenge  $a_i \in \{F, 0, 1\}$  → nur eine Geschwindigkeit 1
  - ▷ Update-Regel: Wenn ein Auto ein anderes Auto direkt vor sich hat, bleibt es stehen, ansonsten fährt es (Regel Nr. 184)
  - ▷ Zufälliges Bremsen: Ein fahrendes Auto stoppt mit der Wahrscheinlichkeit "p" und fährt weiter mit "1-p"
  - ▷ Autos können sich nicht gegenseitig überholen
  - ▷ Problem bei doppelter Anwendung der B|B-Regel und zum Teil Wahrscheinlichkeitsregel → Lösung: Erst Fahrschritt, dann B|B (Ausschluss von Anfangskonfigurationen bei denen zwei Autos voreinander sind)

- Nagel & Schreckenberg:
- ▷ Erweiterung zu Weimar: mehrere diskrete Geschwindigkeitsstufen:  $0 \leq v \leq v_{\max}$ , wobei v der Anzahl der Zellen entspricht, die ein Fahrzeug innerhalb eines Zeitschnittes zurück legen kann
  - ▷ Update-Regel: Beschleunigungsschritt, natürliches Bremsen, zufälliges Bremsen, Sit - / Fahrschritt

- Ergebnisse:
- ▷ Weimar
    - ↳ Weg-Zeit-Charakteristik: Verkehrsstaus bewegen sich dem Verkehrsfluss entgegen
    - ↳ max mittlerer Fahrzeugdurchsatz bei Verkehrsdichte von 0,5
  - ▷ NaSch
    - ↳ Raum-Zeit-Charakt. der Simulation in Einklang mit Luftbildaufnahmen (Stop-and-go-Bewegung)
    - ↳ max Fahrzeugdurchsatz zu kleineren Dichten hin verschoben (In Übereinstimmung mit den Messergebnissen)

- ⑥ regelmäßige Gitter:
- ▷ 1D: Quadratisches Gitter
  - ▷ 2D: Dreiecksgitter, Quadratisches Gitter, Hexagonales Gitter
  - ▷ 3D: Würfel wahrscheinlich einfachste Form, denkbar wären auch Kristallsysteme wie (Kubisch, Tetragonal, Hexagonal)

Implementierung: ▷ zur Berechnung ist eine Abbildung auf ein quadratisches Gitter notwendig → Array, Matrix (z.B. bei hexagonales Gitter Scher- oder Schiebendarstellung)

Unterscheidung: Isotropieeigenschaften, Nachbarschaftdefinitionen

⑦ Randbedingungen: Periodische RB, Gespiegelte RB (symmetrisch), Konstante RB, Offene RB

Implementierung:

⑧ Game of Life: Evolution ausgehend von Anfangskonfiguration  
▷ Update-Regel:  
↳ lebende Zelle überlebt, wenn 2 oder 3 leb. Zellen in der "echten" Nachbarschaft  
↳ tote Zelle wird neu geboren, wenn Nachbarschaft mit genau 3  
▷ quadratisches Gitter mit Moore Nachbarschaft und  $r=1$

⑨ Erregbare Medien: mind. 3 Zustände ( $0 \hat{=}$  Ruhezustand,  $1 \hat{=}$  angeregter ZS,  $2 \hat{=}$  Erholungszustand)  
▷ Bsp: Waldbrandsimulation, Reizweiterleitung im Herzmuskel, Chem. Reaktion mit bistabilen Medien

Modellierung: zB. Greenberg-Hastings Automaten mit  $k=3$  und  $a_{ij} \in \{0,1,2\}$   
Aktivator  $0 \rightarrow 1 \rightarrow 2$  } 1, wenn  $a_{ij}(t)=0$  und  $\exists a_{em} \in N_{ij} : a_{em}=1$   
↑  $\leftarrow$  <sub>mehrere</sub>

Aktivator-Inhibitor-Modell:  
▷ erweitertes Modell mit angeregten Zuständen und refraktären Zuständen ( $\tau_e + \tau_r$ )  
▷ jeder Zelle werden 2 Variablen zugeordnet:  $a_{ij}$  beschreibt Anregungszustand und ist nicht von der Nachbarschaft abhängig,  $b_{ij}$  entspricht Inhibitorzustand, der allein für die Anregung der Zelle zuständig ist (mit Schwellwertsteuerung, zB. über Summe aktiver Nachbarschaftszellen)

⑩ Partitionierte Automaten:  
▷ Einteilung einer Zelle in Partitionen mit Anwendung von mehreren reversiblen Regeln  $\rightarrow$  Rücktransform. auf Zellen  
▷ übergeordnete Regel ist somit wieder reversibel

Blockautomaten: Ähnlich partitionierter Automaten, wobei jedoch eine Blockeinteilung erfolgt und dann eine Block-zu-Block Abbildung (untergeordnete Regel) angewendet wird  
▷ Anschließend Verschiebung der Blockgrenzen und so weiter...

Verwendung:  
▷ komplexe reversible übergeordnete Regeln können mit Hilfe von einfachen reversiblen untergeordneten Regeln erstellt werden  
↳ zur Abbildung vieler physikalischer Prozesse  
▷ Blockautomat erhält die Teilchenanzahl

(11)

a)  $\triangleright$  Methode der Gittergase (LGA)  $\Rightarrow$  Man "generiert" ein diskretes System mit zugehörigen Spielregeln, sodass sich makroskopisch das gewünschte Verhalten einstellt. Die Mikrodynamik muss nicht zwingendermaßen das reale System abbilden

$\triangleright$  2 Newtonsches Gesetz mit Annahme (Dämpfungskraft  $\Rightarrow$  Trägheitskraft)

$$\hookrightarrow v(t) = \frac{F(t)}{\delta}$$

$\triangleright$  Annahmen:

$\hookrightarrow$  mittlere Geschw. des Teilchens ist null:  $\langle v(t) \rangle = 0$

$\hookrightarrow$  der Schwerpunkt des Systems von Teilchen ist null:  $\langle x(t) \rangle = 0$

$\hookrightarrow$  mittlere quadratische Abstand nimmt mit der Zeit zu:  $\langle (x(t))^2 \rangle = \frac{k}{\delta} \cdot t$

stimmt mit der 1D-Diffusionsgl. überein

$\triangleright$  wesentliche Eigenschaften des Modells sind:

$$\langle v(t) \rangle = 0$$

$$\langle v(t_i) \cdot v(t_j) \rangle = 2D \delta(t_i - t_j)$$

(Autokorrelation)

$\triangleright$  Sprungmodell kann alle statistischen Mittelwerte abbilden

$\triangleright$  Abbildung der Diffusionsgl. über Interpretation der Teilchenkonzentration ( $c$ ) als Wahrscheinlichkeitsdichte ( $w$ )

b)  $\triangleright$  Erfüllung der statistischen Mittelwerte (Sprungmodell)

$\triangleright$  Taylorentwicklung (2. Ord.) der Mastergleichung führt auf Form der 1D-Diff.-DGL

c) Sprungmodell (1D):  $\triangleright$  Zelle kann genau mit einem Teilchen besetzt werden  
 $\triangleright$  Teilchen springen mit gleicher Wahrscheinlichkeit nach rechts oder links

$$\hookrightarrow v_e(t) = \pm \frac{\Delta x}{\Delta t}$$

$$\hookrightarrow \langle v(t) \rangle = 0, \quad \langle v(t_i) v(t_j) \rangle = \left(\frac{\Delta x}{\Delta t}\right)^2 \delta_{ij}$$

$\triangleright$  Annäheren der  $\delta$ -Dist. über Folge:  $\delta(t_i - t_j) \approx \frac{1}{\Delta t} \delta_{ij}$

$$\hookrightarrow \frac{2D}{\Delta t} = \left(\frac{\Delta x}{\Delta t}\right)^2 \Rightarrow D = \frac{\Delta x^2}{2\Delta t}$$

Blockautomat (2D): da Teilchensprungoord. des Sprungmodells zu kompliziert

d) Mastergleichung:  $w(x_i, t + \Delta t) - w(x_i, t) = p [w(x_i - \Delta x_i, t) + w(x_i + \Delta x_i, t) - 2w(x_i, t)]$

$$\text{für } p = \frac{1}{2}: w(x_i, t + \Delta t) = \frac{1}{2} [w(x_i - \Delta x_i, t) + w(x_i + \Delta x_i, t)]$$

e) Ja, man müsste die dem Prozess beschreibende DGL diskretisieren

$$\text{z.B. 1D-Diff-Gleichg: } \left[ \frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} \right]$$

$$\hookrightarrow \frac{c(x, t + \Delta t) - c(x, t)}{\Delta t} = D \cdot \frac{c(x + \Delta x, t) - 2c(x, t) + c(x - \Delta x, t)}{\Delta x^2}$$

$$\hookrightarrow c(x, t + \Delta t) = c(x, t) + \frac{D \cdot \Delta t}{\Delta x^2} (c(x + \Delta x, t) - 2c(x, t) + c(x - \Delta x, t))$$

(12) zeitl. Mittelwert:  $\langle F(t) \rangle_T := \frac{1}{T} \int_t^{t+T} F(\tau) d\tau$  // "100 mal mit einem Würfel"

Scharmittel:  $\langle F(t) \rangle := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N F_i(t)$  // "1 mal mit 100 Würfeln"

# Elastische Gittermodelle

(13) Gittervektoren:  $\triangleright$  bilden vom Mittelpunkt der Zelle auf den Mittelpunkt des nächsten Nachbarn ab

Gittertensoren:  $\triangleright$  nach zweidimensionaler Taylorentw. der Hookegleichung entstehen Terme folgender Form:

$$L_i = \sum_{\alpha=1}^N e_i^\alpha \quad \Rightarrow \text{i-ter Eintrag des } \alpha\text{-Gittereinheitsvektors}$$

$$L_{ij} = \sum_{\alpha=1}^N e_i^\alpha \cdot e_j^\alpha$$

$$L_{ijk} = \sum_{\alpha=1}^N e_i^\alpha e_j^\alpha e_k^\alpha$$

$$L_{ijkl} = \sum_{\alpha=1}^N e_i^\alpha e_j^\alpha e_k^\alpha e_l^\alpha$$

$\triangleright$  Tensoren, deren Koordinaten sich unter beliebigen orthogonalen Basisstransform. nicht ändern, nennt man isotrop!

Verwendung:  $\triangleright$  Zur Beschreibung / Umrechnung der Hookegleichung  
 $\triangleright$  unterschiedl. Gittervektoren je nach Gitter und Nachbarschaft

Isotropie:  $\triangleright$  Isotropie kann nur erreicht werden wenn alle Gittertensoren der gewählten Ordnung ( $\Rightarrow$  Fehlerterm) auch isotrop sind

$\triangleright$  isotrope Tensoren:

- $\hookrightarrow$  0. Stufe: alle Skalare sind isotrop
- 1. Stufe: nur Nullvektor ist isotrop:  $L_i = 0$
- 2. Stufe:  $L_{ij} = \delta_{ij}$  (Kronecker-Delta)
- 3. Stufe:  $L_{ijk} = \varepsilon_{ijk}$  (Kewi-Girita-Symbol)
- 4. Stufe:  $L_{ijkl} = A \delta_{ij} \delta_{kl} + B \delta_{ik} \delta_{jl} + C \delta_{il} \delta_{jk}$

Anisotrope Gittertensoren:  $\triangleright$  durch Wahl geeigneter Gitter und Nachbarschaften  
isotrop machen  $\triangleright$  mit Hilfe gewichteter Gittertensoren (Gewichte werden so gewählt, dass die Gittertensoren isotrop sind: z.B. elastisches Gitter mit 6-er NB  $\Rightarrow k_0 = \frac{k}{2}$ )

(14) Aufbau:  $\triangleright$  Masspunkte, die über lin. Federelemente miteinander wechselwirken  
 $\triangleright$  Anordnung auf einem gleichmäßigen Gitter in der undeformierten Referenzkonfiguration.

Verwendung:  $\triangleright$  Abbildung des dynamischen Verhaltens isotroper linearelastischer Kontinua (für kleine Verzerrungen)

Eigenschaften des Gitters:  $\triangleright$  Isotropie

(15) Lamé - Naviersche - Verschiebungsdifferentialgleichung

$$(\lambda + \mu) \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + \mu \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i \partial x_i} = f \cdot \ddot{u}_j$$

$$\text{bzw. } \Rightarrow (\lambda + \mu) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + \mu \Delta \mathbf{u} = \mathbf{f} \cdot \ddot{\mathbf{u}}$$

16) Probleme:  $\lambda$  und  $\mu$  können nicht unabhängig voneinander gewählt werden  $\rightarrow$  somit sind nicht alle Materialien abbildbar

Gittergase

17) Gemeinsamkeit mit zellulären Automaten:  $\triangleright$  es handelt sich um einen partitionierten zellulären Automaten

makroskopisches Verhalten:  $\triangleright$  Simulation von reibungsbehafteten Strömungen (z.B. Rohr- oder Hindernisströmung)  $\rightarrow$  Navier-Stokes-Gleichungen // allgemeiner: zur num. Beschreibung des makroskopischen Verhaltens kontinuierl. Medien

18) Navier-Stokes-Gl (incompressible Strömung)

$$\dot{v}_i = \underbrace{-\frac{1}{\rho} \frac{dp}{dx_i}}_{\text{Druckkräfte}} + \underbrace{\frac{\mu}{\rho} \frac{\partial^2 v_i}{\partial x_j^2}}_{\substack{=: \tau \\ \text{Reibungskräfte}}}$$

Substanzielle Beschleunigung / Trägheitskräfte

$\nu \hat{=} \text{kin. Viskosität}$

$$\dot{v} = \underbrace{\frac{dv}{dt}}_{\text{lokale Besch.}} + \underbrace{(v \cdot \nabla) v}_{\text{konvektive Beschleunigung}}$$

19) HPP-Modell:  $\triangleright$  Jeder Knoten (Zellblock) enthält vier Zellen mit den Werten 0 oder 1  
 $\triangleright$  4 Gittervektoren  $e^\alpha$  (quadratisches Gitter)  
 $\triangleright$  Teilchen bewegt sich mit der Geschwindigkeit  $v_0 = \frac{e}{\Delta t}$  in  $x$ -Richtung  
 $\triangleright$  Zustandswert einer Zelle  $\alpha$  eines Knotens wird durch die Besetzungszahl  $n^\alpha(r, t)$  angegeben  
 $\triangleright$  Update-Regel: 1. Ausbreitungsschritt  $\rightarrow$  2. Kollisionsschritt (nur zwei Stoßkonfigurationen  $\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \rightleftharpoons \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ )

Besetzungszahl:  $\triangleright$  Zustandswert einer Zelle  $\alpha$  eines Knotens:  $n^\alpha(r, t) \in \{0, 1\}$

mittl. Besetzungszahl:  $\rightarrow$  Coarse Graining  $\rightarrow N^\alpha := \langle n^\alpha \rangle$

Coarse Graining (Vergrößerung):  $\triangleright$  mitteln über viele (ca. 1000) HPP-Blöcke  $\rightarrow$  mittlere Besetzungszahlen  
 $\triangleright$  Somit lassen sich aus der mikrodynamischen Größe ( $n^\alpha$ ) makrodyn. Größen wie Dichte und Impulsdichte bestimmen

$$\frac{\rho(r, t)}{\rho_0} = \sum_{\alpha=1}^4 N^\alpha(r, t) \quad \parallel \quad \frac{\rho(r, t) v(r, t)}{\rho_0 v_0} = \sum_{\alpha=1}^4 N^\alpha(r, t) \cdot e^\alpha$$

(mit  $v_0 \hat{=} \text{Bezugsgeschw.}$  und  $\rho_0 \hat{=} \text{Bezugsdichte}$ )

mikrodynamische Gleichung

$$\underbrace{n^\alpha(r + e^\alpha, t + \Delta t) - n^\alpha(r, t)}_{\text{Ausbreitung}} = \underbrace{\mathcal{S}^\alpha(n(r, t))}_{\substack{\text{Änderung durch den Stoß} \\ \text{(vorgeschaltet)}}$$

Stoßoperator:


$$\mathcal{S}^\alpha(n(r, t)) = \underbrace{-n_{\text{vor}}^{\alpha+1} \cdot n_{\text{vor}}^{\alpha+2} \cdot n_{\text{vor}}^{\alpha+3}}_{\mathcal{S}_1} + \underbrace{n_{\text{vor}}^\alpha \cdot n_{\text{vor}}^{\alpha+1} \cdot n_{\text{vor}}^{\alpha+2} \cdot n_{\text{vor}}^{\alpha+3}}_{\mathcal{S}_2}$$

(für Exponenten  $\beta > 4$  muss der Modulo Operator verwendet werden  $B \rightarrow B \text{ mod } 4$ )

Problem:  $\triangleright$  Es kann nicht die Navier-Stokes-Gleichung abbilden  $\rightarrow$  Hauptursache ist der nichtisotrope Gittertensor 4. Stufe des einfachen quadr. Gitters

⑳ FHP-Modell:  $\triangleright$  grundsätzlich wie HPP mit hexagonalem Gitter, dessen Isotropieeigenschaften ausreichend sind um die Navier-Stokes-Gleichung (mit Einschränkungen) abzubilden

$\hookrightarrow$  D2Q6 bzw. D2Q7 (mit Ruheteilchen)

elem. Stoßregeln:  $\triangleright$  FHP-Klassisch: nur 2-Teilchen-Stöße ( $m=3$ )  $\rightarrow$   (kommen gleichwahrscheinl. vor)

$\triangleright$  grundsätzliches Prinzip: Impulserhaltung

Randbedingungen: 1) Bounce-Back-Regel:

- $\triangleright$  Teilchen werden am Randnoten entgegengesetzt zur Richtung reflektiert, aus welchem sie gekommen sind
- $\triangleright$  beschreibt Wandhaftung

2) Bounce-Away-Regel:

- $\triangleright$  Reflexion als Spiegelung zur Normalkomponente "der Wand"
- $\triangleright$  beschreibt makroskopisches Gleiten

3) Periodische RB | Ein- und Ausströmung

㉑ Wie?: siehe ⑬

Anfangsbed.:  $\triangleright$  Anfangsdichte  $\rho(x, t) = \rho_A$  und Anfangsgeschw.  $v(x, t) = v^A$  gegeben

- $\triangleright$  die mittleren Besetzungszahlen  $N^k$  zu Beginn können über den lim. Ansatz gebildet werden:

$$N^k(x, t_0) = a \rho_A + b \cdot \rho_A v_k^A \cdot e_k^A$$

- $\triangleright$  danach Berechnung der Besetzungszahlen  $n^k$ , sodass  $N^k(x, t_0) = \langle n^k \rangle$  erfüllt ist

$\Rightarrow$  einsetzen in die Definitionsgleichungen (siehe ⑬) unter Berücksichtigung der Gittertensoren liefert  $a$  und  $b$

Rauschen:  $\triangleright$  Blockgröße (für coarse grainig) erhöhen?

㉒ Einschränkungen:

- $\triangleright$  Galilei-Invarianz verletzt

$\hookrightarrow$  Ursache: Fermi-Dirac-Verteilung aufgrund der Bosonischen Natur der Besetzungszahlen

- $\triangleright$  Der statische Druck ist von der Geschw. abhängig  $\rightarrow$  unphysikalisch, zudem ist  $p > 0$  nur für kleine Geschw. möglich

- $\triangleright$  eingeschränkte Abbildung von Reynoldszahlen (FHP III bietet den größten Bereich)

Galilei-Invarianz reparieren: Umeichen der Zeit:  $\tau = g(\rho) \cdot t$

# Gitter-Boltzmann-Verfahren (LB - Lattice Boltzmann)

(23) Funktionsweise:  $\triangleright$  Mittelung der mikrodynamischen Gleichung (siehe 19):

$$N^{\alpha}(x+\xi, t+\Delta t) - N^{\alpha}(x, t) = \hat{S}_{LB}(N^{\alpha}(x, t))$$

- $\triangleright$  an jeden "makroskopischen" Knoten wird ein Satz von Verteilungsdichten  $N^{\alpha}(x, t)$  angenommen (beliebige pos. reelle Werte)
- $\triangleright$  Isotropes Gitter
- $\triangleright$  Dichte und Impulsdichte werden wie bekannt (siehe 19) berechnet

Unterschied: keine  $n^{\alpha} \rightarrow$  keine Fermi-Dirac-Verteilung

(24) Kollisionsschritt:  $N_{\text{neu}}^{\alpha}(x, t) = N^{\alpha}(x, t) - \frac{1}{g} [N^{\alpha}(x, t) - N_{\text{eq}}^{\alpha}(p, v)]$

Grenzwerte:  
 $g=0 \rightarrow$  nach dem Stoß nimmt  $N^{\alpha}$  Gleichgewichtsverteilung an  
 $g=1 \rightarrow$  keine Änderung durch den Stoß

Propagation:  $\xi \rightarrow$  Ausbreitungsschritt:  $N^{\alpha}(x+\xi, t+\Delta t) = N_{\text{neu}}^{\alpha}(x, t)$

D2Q81Q9: Gitter muss mit Hilfe der Methode der gerichteten Gitterketten hinreichend isotrop gemacht werden

(25) Stoßoperator:  $\triangleright$  Existenz eines Gleichgewichtszustandes  $N_{\text{eq}}$  wird vorausgesetzt, der sich für eine elementare Strömung einstellen würde:

$$\hat{S}_{LB}^{\alpha}(N^{\alpha}(x, t)) = \hat{S}_{LB}^{\alpha}(N_{\text{eq}}^{\alpha}(x, t) + \Delta N^{\alpha}(x, t))$$

"linear entwickeln"  $\rightarrow \sum_{\beta} M^{\alpha\beta} (N^{\beta}(x, t) - N_{\text{eq}}^{\beta}(x, t))$

BGR-Ansatz:  $M^{\alpha\beta} = -\frac{1}{g} \delta^{\alpha\beta}$

$$\hookrightarrow \hat{S}_{LB}^{\alpha}(N^{\alpha}(x, t)) = -\frac{1}{g} (N^{\alpha}(x, t) - N_{\text{eq}}^{\alpha}(x, t))$$

$\left. \begin{array}{l} \text{wird benutzt um den} \\ \text{linear entw. Stoßoperator} \\ \text{abzubilden} \\ \text{Verteilungsdichten (siehe 24)} \end{array} \right\}$

(26)  $\triangleright$  wie bei den Gittergasen (siehe 19)  $\Rightarrow$  bei D2Q8 Korrektur der Ausbreitungsgeschw. ( $v_x$  und  $v_z$ )

(27) Ablauf: 1) Berechnung Gleichgewichtsverteilungen  $N_{\text{eq}}^{\alpha}$  (mit Anfangswerte  $p, v$ ; zur Initialisierung kann  $N^{\alpha} = N_{\text{eq}}^{\alpha}$  gesetzt werden)  
 2) Kollisionsschritt  
 3) Ausbreitungsschritt  $\left. \begin{array}{l} \text{siehe (24)} \\ \text{Randbedingungen} \end{array} \right\}$   
 4) Berechnung der Dichte und Impulsdichte (siehe 19)  $\rightarrow$  wieder von 1) beginnen

Viskosität:  $\triangleright$  über den Relaxationsparameter ( $g$ ) kann die Viskosität eingestellt werden ( $\nu > 0 \Rightarrow g > \frac{1}{2}$ )

Randbeding.:  $\triangleright$  Bounce-Back, Bounce-Away

$\triangleright$  Zou & He (z.B.  $f_1 - f_1^{\text{eq}} = f_3 - f_3^{\text{eq}}$ )



Randelementemethode (BEM  $\hat{=}$  Boundary Element Method)

- 28) Wozy?  $\rightarrow$  zur Lösung von bestimmten partiellen DGLn
- $\triangleright$  Bsp:  $\Delta$  Laplace-glg, Poisson-glg.  $\rightarrow$  Diffusion, Wärmeleitung
  - $\triangleright$  Helmholtz-glg.  $\rightarrow$  Akustik
  - $\triangleright$  inkompr. Navier-Stokes-glg.  $\rightarrow$  Strömung
  - $\triangleright$  Lamé-Navier'sche Verschiebungsgln.  $\rightarrow$  Elastodynamik

BEM vs. FEM: Vorteile:

- $\triangleright$  nur Rand muss diskretisiert werden  $\rightarrow$  enorme Reduktion von FFG
- $\triangleright$  gezielte Innenpunktauswertung
- $\triangleright$  höhere Genauigkeit
- $\triangleright$  Probleme zur Rissausbreitung (Spannungsintensitätsfaktor) können genauer gelöst werden

Nachteile:

- $\triangleright$  enorme mathematischer Vorlaufwand um das Problem um eine Dimension zu minimieren  $\rightarrow$  Integralansätze!
- $\triangleright$  Koeffizientenmatrix des zu lösenden linearen algebraischen Gleichungssystems ist voll besetzt und unsymmetrisch
- $\triangleright$  Kenntnis der Fundamentallösung notwendig

29) Methode der gew. Residuen:  $\triangleright$  (Näherungs-) Lösungen von Feldproblemen, bei denen die Feldgleichung gerichtet im integralen Mittel über das gesamte Gebiet erfüllt sind

$$\hookrightarrow \text{z.B. } \int_0^1 \varepsilon(x) w_1(x) dx = 0 \quad \wedge \quad \int_0^1 \varepsilon(x) w_2(x) dx = 0$$

30) wesentliche Schritte:

1) Bildung der schwachen Form der DGL:  $\int_0^1 u(x) w(x) dx = 0$

2) Partielle Integration bzw. Anwendung der 2. Green'schen Identität

$$\int_0^1 u(x) (w'' + w) dx = (\dots)$$

3) Wahl der Fundamentallösung als Wichtungsfkt

$\hookrightarrow$  Lösung der homogenen DGL ergänzt um die Delta-distr.:  $w'' + w = \delta(x - \xi)$

$$\hookrightarrow \int_0^1 u(x) \underbrace{(w'' + w)}_{=\delta(x-\xi)} dx = u(\xi) = (\dots)$$

4) Bestimmung der Fundamentallösung:  $u^*(x, \xi) = (\dots)$

5) Einsetzen der Fundamentallösung:  $u(\xi) = (\dots)$

6) Berechnung der unbekanntem Randwerte:  $\rightarrow$  Nutzung der Randbedingungen

$$\hookrightarrow u(\xi) = (\dots) \quad (\text{ohne Unbekannte})$$

$\hookrightarrow$  war wirklich das an dieser Stelle gefragt?

31) Poisson-glg:  $\Delta u(x, y) = b(x, y)$   $\left\{ \begin{array}{l} \triangleright \text{stationäre Wärmeleitung: } \Delta T(r) = -\frac{1}{\kappa} \sigma(r) \\ \triangleright \text{stationäre Diffusion: } \Delta c(r) = -\frac{1}{D} \sigma(r) \end{array} \right.$

Sonderfall  $\Downarrow$   $b(x, y) = 0$

Laplace-glg:  $\Delta u(x, y) = 0$   $\left\{ \begin{array}{l} \triangleright \text{Potentialströmung: } \Delta \phi = 0 \\ (u \hat{=} \text{Potential, } b \hat{=} \text{Quellterm}) \end{array} \right.$



## 2. Greensche Identität

$$\int_{\Omega} (v \Delta u - u \Delta v) d\Omega = \int_{\Gamma} (v \nabla u - u \nabla v) \cdot \mathbf{n} ds$$

32) Randbed.:

1) Dirichlet-RB

▷ überall auf dem Rand ist das Potential  $u$  gegeben

2) Neumann-RB

▷ überall auf dem Rand ist der normierte Fluss  $q_n$  gegeben

3) Gemischte-RB

▷  $u$  und  $q_n$  sind auf unterschiedl. Randgebieten gegeben

4) Robin-RB

▷ Zusammenhang zwischen  $u$  und  $q_n$  gegeben

Flussdichtektor:  
vs. Potential

normierte Fluss:  $\nabla u \cdot \mathbf{n} =: \frac{\partial u}{\partial n} = q_n$

zusätzlich →  $\Delta$  Randintegral wird dann mit einem  $G$ -Kern diskretisiert (Ansatzfunktionen)  
▷ lineares algebraisches Gleichungssystem entsteht, welches gelöst werden muss  
(Integralausdrücke werden numerisch berechnet)

33) ▷ siehe 30

Satz von Gauß:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{v} d\Omega = \int_{\Gamma} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) ds$$

} Integral der Quelldichte ist  
gleich dem Fluss durch den  
Rand

34)

$$\Delta u(x, y) = 0 \quad (2D\text{-Laplace-Gl.})$$

▷ schwache Form:  $\int_{\Omega} \Delta u \cdot w d\Omega = 0$

▷ 2. Greensche Identität:  $\int_{\Omega} (u \Delta w - w \Delta u) d\Omega = \int_{\Gamma} (u \nabla w - w \nabla u) \cdot \mathbf{n} ds$

$$\hookrightarrow \int_{\Omega} u \Delta w d\Omega = \int_{\Gamma} (u \nabla w - w \nabla u) \cdot \mathbf{n} ds$$

▷ als Wichtungsfkt. Fundamentallösung wählen:  $w(x, y) = u^*$  mit  $\Delta u^* = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{q})$

$$\hookrightarrow \text{für 2D-Problem: } u^*(\mathbf{r}, \mathbf{q}) = -\frac{1}{2\pi} \ln |\mathbf{r} - \mathbf{q}|$$

▷ Einsetzen liefert:

$$C(\mathbf{q}) u(\mathbf{q}) = \int_{\Gamma} [u^* \tilde{q}_n - u \tilde{q}_n^*] ds \quad \text{mit } \tilde{q}_n^* := \nabla u^* \cdot \mathbf{n}$$

↳ zusätzliche Filterfunktion:  $C(\mathbf{q}) = \begin{cases} 1 & \text{innerer Punkt} \\ 0 & \text{äußerer Punkt} \\ \neq 0 & \text{für Randelemente (siehe 35)} \end{cases}$

35)  $\delta$ -Distribution:  $\delta(x-x_0) = \begin{cases} \infty & \text{für } x = x_0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \Rightarrow \int_{x_1}^{x_2} \delta(x-x_0) dx = \begin{cases} 1, & \text{für } x_1 \leq x_0 \leq x_2 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$

Folgendarstellung:  $\delta_\varepsilon(x-x_0) = \begin{cases} \frac{1}{2\varepsilon} & \text{für } |x-x_0| \leq \varepsilon \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \Rightarrow \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \text{ bilden}$

Integration:  $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_1}^{x_2} \delta_\varepsilon(x-x_0) dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\varepsilon} \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\varepsilon} \frac{[x]_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon}}{2\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{2\varepsilon}{2\varepsilon} = 1$

Rand:  $\triangleright$  1D  $\rightarrow$  Integrationsgrenzen verschieben sich  $(x_0, x_0+\varepsilon) \rightarrow \frac{1}{2} f(x_0)$

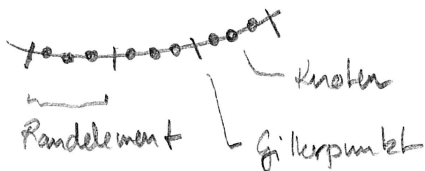
- $\triangleright$  2D:  $\triangleright$  Punkt im Inneren:  $C(\varphi) = 1$
- $\triangleright$  Punkt außerhalb:  $C(\varphi) = 0$
- $\triangleright$  Punkt auf "glatten" (diffbaren) Rand:  $C(\varphi) = \frac{1}{2}$
- $\triangleright$  Eckpunkt auf dem Rand:  $C(\varphi) = \frac{\kappa}{2\pi}$

36) Fundamentallösung:  $\triangleright$  wird als Nüchternheit gewählt ergänzt um die Deltadistribution  
 $\triangleright$  Ausnutzen der Filtereigenschaft im Integral

$$\int_{\Omega} u \delta(x-\varphi) = u(\varphi) \quad (\dots)$$

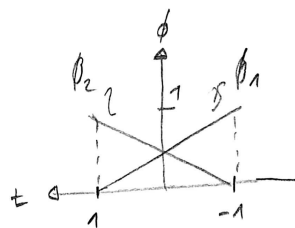
Gleichung:  $\triangleright$  Löst die homogene DGL im Integral ergänzt um die Deltadistribution

37)



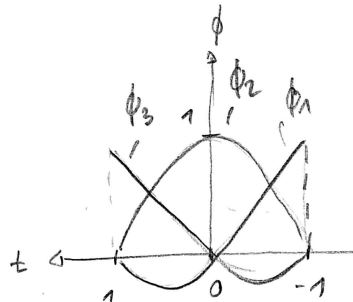
Interpolationsfkt:  $\triangleright$  In dem  $M$  Knoten eines Randelements wird gefordert, dass die Randwerte exakt eingehalten werden  
 $\triangleright$  Zwischen den Knoten werden die Feldgrößen interpoliert

$\triangleright$  z.B.



$$\phi_1 = -\frac{1}{2}t + \frac{1}{2}$$

$$\phi_2 = \frac{1}{2}t + \frac{1}{2}$$



$$\phi_1 = \frac{1}{2}t(t-1)$$

$$\phi_2 = 1-t^2$$

$$\phi_3 = \frac{1}{2}t(t+1)$$

kontin. Elemente:  $\triangleright$  Knoten sitzen auch auf den Gitterpunkten

diskont. Elemente:  $\triangleright$  Knoten sitzen nicht auf den Gitterpunkten

$\hookrightarrow$  somit können auch "Sprünge" in den RB abgebildet werden (z.B. Wärmestrom)

38 39  $\Rightarrow$  waren nicht mehr Teil der VL

### Implementierung

40 Erstellen mehrerer verschobener Matrizen mit anschließender Aufsummierung (z.B. Circshift)

41 Bsp. Blöcke  $2 \times 2$ , Ausgangsmatrix  $A$ , Drehung nach links

$$B = \text{reshape}(A, 2, 2, 2, 2) \quad // \text{Erlebung Zweier-Blöcke}$$

$$C = B(2:-1:A, :, :, :)$$

// Tauschen der Zeilen innerhalb der Blöcke

$$D = \text{permute}(C, [3 2 1 4])$$

$$E = \text{reshape}(D, [4 4])$$

42  $\triangleright$  Bei diskontinuellen Filtermodellen  
 $\triangleright$  auch bei anderen Verfahren mit einfacher Nachbarschaft  $Z$   
 $\triangleright$  Randelementemethode ist vollbesetzt

43 Vektorisierung:  $\triangleright$  Matlab  
 $\triangleright$  Jede Optimierung weg von Schleifen zu Vektor- und Matrixoperationen

Hooke'sches Gesetz:  $\sigma_{ij} = \lambda e_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \epsilon_{ij}$

Verschiebungs-Verzerrungsgl.:  $\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$

Projektionsmethode: (d. Gittermodelle)  $\rightarrow$  linearisierte Verschiebungskinetik

$$\Delta \underline{e}^x = [u_i(x, t) - u_i(x, t)] e_i^x$$

nicht isotr.

Gittertensoren:  $\triangleright$  Quadratisches Gitter (von-Neumann-NB):  $L_i = 0, L_{ij} = 2\delta_{ij}, L_{ijk} = 0, L_{ijkl} = 2\delta_{ijkl}$