



UNIVERSITY OF AMSTERDAM

## UvA-DARE (Digital Academic Repository)

### Large Scale Lattice-Boltzmann Simulations: Computational Methods and Applications

Kandhai, B.D.

**Publication date**  
1999

[Link to publication](#)

#### **Citation for published version (APA):**

Kandhai, B. D. (1999). *Large Scale Lattice-Boltzmann Simulations: Computational Methods and Applications*. Universiteit van Amsterdam.

#### **General rights**

It is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), other than for strictly personal, individual use, unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

#### **Disclaimer/Complaints regulations**

If you believe that digital publication of certain material infringes any of your rights or (privacy) interests, please let the Library know, stating your reasons. In case of a legitimate complaint, the Library will make the material inaccessible and/or remove it from the website. Please Ask the Library: <https://uba.uva.nl/en/contact>, or a letter to: Library of the University of Amsterdam, Secretariat, Singel 425, 1012 WP Amsterdam, The Netherlands. You will be contacted as soon as possible.

*UvA-DARE is a service provided by the library of the University of Amsterdam (<https://dare.uva.nl>)*

Download date: 27 Sep 2021

# Samenvatting

Een grote verscheidenheid aan natuurwetenschappelijke en technische problemen hebben te maken met vloeistofstromingen. Enkele typische voorbeelden zijn luchtcirculatie in de atmosfeer, stroming rondom vliegtuigvleugels, bloedstroming door complexe vatenstelsels, grondwatervervuiling en vele andere problemen die zeer relevant zijn voor de wetenschap en industrie. Een goed begrip van vloeistofdynamica kan daarom uitermate belangrijk zijn voor de optimalisatie van diverse industriële processen en kan een belangrijke bijdrage leveren aan onze kennis van vele fundamentele wetenschappelijke vragen. Ondanks het feit dat de vergelijkingen voor het beschrijven van vloeistofstromingen al vrij lang bekend zijn, bestaat er nog geen algemene oplossing voor dit probleem.

Een veel gebruikte aanpak om enigszins inzicht te verkrijgen is via numerieke simulaties. De rooster-Boltzmann methode is een vrij nieuwe benadering voor de numerieke simulatie van vloeistofstromingen. In deze methode wordt een vloeistof gemodelleerd d.m.v. deeltjes die zich in een beperkt aantal richtingen bewegen op een regelmatig rooster. In elke tijdstap bewegen de deeltjes zich eerst naar een naburige roosterpunt waarna vervolgens botsingen plaatsvinden, waarin de deeltjes hun snelheden op een bepaalde manier herverdelen. De inherente lokaliteit in tijd en ruimte van deze regels heeft als gevolg dat deze methode uitermate geschikt is voor de berekening op geavanceerde parallelle computerarchitecturen. In dit proefschrift wordt de rooster-Boltzmann methode gebruikt om diverse realistische toepassingen te simuleren op parallelle computers. De nadruk ligt op computationele aspecten en op het verkrijgen van nieuwe fysische inzichten voor de transporteigenschappen van poreuze media opgebouwd uit vezels.

In hoofdstuk 3 wordt de nauwkeurigheid van de *bounce-back* methode in onregelmatige geometrieën bestudeerd. Dit wordt gedaan d.m.v. stroming in een geroeteerde pijp als testprobleem. De *bounce-back* methode is een simpele en generieke methode voor het specificeren van de condities op de wand van een obstakel. Het blijkt dat de methode eerste-orde nauwkeurig is, indien in de analyse de locatie van de *non-slip* wand (de positie waarop de snelheid precies nul is) verondersteld wordt op het roosterpunt waar de *bounce-back* wordt uitgevoerd. Het is namelijk zo dat de effectieve locatie van de *non-slip* wand enigszins verschoven is. Voor het specifieke geval waarbij de rotatiehoek gelijk is aan 45 graden, blijkt de methode tweede-orde nauwkeurig te zijn, indien in de analyse rekening wordt gehouden met de verschuiving van de effectieve locatie

van de *non-slip* wand. Deze bevindingen zijn consistent met die van een vlakke pijp. Naast de *bounce-back* methode zijn randcondities bekeken waarmee men een stroming kan aandrijven. Hierbij is een vergelijking gemaakt tussen de veel gebruikte *body-force* methode en drukranden. Voor stromingen in het lage Reynoldsgetal-regime is er een goede overeenstemming tussen beide methoden. Verder zijn de meest gangbare driedimensionale rooster-Boltzmann modellen, de  $D_3Q_{15}$  en de  $D_3Q_{19}$  modellen, bestudeerd. Er wordt geïllustreerd dat in het  $D_3Q_{15}$  model een artefact aanwezig is, waardoor het gesimuleerde vloeistof in feite opgesplitst is in twee afzonderlijke gedeelten volgens het zwart-wit schaakbordpatroon. Voor een aantal testgevallen kan dit leiden tot onfysische resultaten welke in het algemeen verwaarloosbaar zijn.

Hierna is de implementatie van de rooster-Boltzmann methode op parallelle systemen bekeken. Ten eerste is gekeken naar het gedrag van de rekentijd als functie van het aantal processoren en voor variërende probleemgrootte. Parallellisatie van de meeste rooster-Boltzmann simulaties is vaak gebaseerd op het opsplitsen van het rooster in volumes met een ongeveer gelijk aantal roosterpunten. Hierbij wordt geen rekening gehouden met het feit dat er gebieden kunnen zijn waar helemaal niet hoeft te worden gerekend. In onze aanpak gebruiken wij de Orthogonale Recursieve Bisectie methode om het domein op te splitsen in stukken met min of meer gebalanceerd rekenwerk. Het gevolg is dat de communicatiestructuur tussen de verschillende processoren onregelmatig kan zijn. Voor stroming in een centrifugale elutriatorgeometrie is deze strategie twaalf tot zestig procent efficiënter ten opzichte van de bovengenoemde naïeve parallellisatiestrategieën.

Vervolgens is een gedetailleerd validatie-experiment uitgevoerd, waarbij de resultaten van de rooster-Boltzmann methode werden vergeleken met die van de wereldwijd geaccepteerde eindige-elementen methode en experimentele data. Als testprobleem is vloeistofstroming in de complexe SMRX statische mixer reactor genomen. De overeenstemming tussen de beide simulatiemethoden en de experimentele data was verrassend goed. Voor het verkrijgen van een redelijke nauwkeurigheid bleek de rooster-Boltzmann methode minder geheugen en een vergelijkbare computertijd dan de eindige-elementen methode, nodig te hebben. Verder bleek de rooster-Boltzmann methode voor zowel de snelheids- als de drukprofielen een vergelijkbare nauwkeurigheid te hebben. De eindige-elementen methode kan echter resulteren in een vrij goede voorspelling van de snelheidsprofielen terwijl de drukval vrij incorrect kan zijn wanneer lineaire elementen gebruikt worden. De rooster-Boltzmann methode daarentegen blijkt vrij inefficiënt te zijn voor heel fijne gridresoluties.

Om deze tekortkoming enigszins tegemoet te komen, zijn twee verfijningen aangebracht op de methode, namelijk de Iteratieve Momentum Relaxatie (IMR) methode om het aantal tijdstappen te reduceren die nodig zijn voor de convergentie naar een stationair toestand, en de uitbreiding van de rooster-Boltzmann methode naar geneste grids. De IMR methode is gebaseerd op een iteratief proces waarin de *body-force* wordt aangepast, zodat eerder een stationair toestand wordt bereikt. Voor stroming rondom een bol bleek het ongeveer 35 keer minder iteraties nodig te hebben, terwijl voor de complexe toepassingen als stroming

in een SMRX reactor en andere poreuze media het gemiddeld gezien ongeveer 3 maal efficiënter is, hetgeen voor realistische simulaties significant is. In de tweede verfijning, worden rooster-Boltzmann simulaties bekeken die gebaseerd zijn op geneste computationele grids. Deze geneste grids zijn hiërarchisch opgebouwd uit verschillende subgrids die een ander resolutie kunnen hebben. De Boltzmann vergelijking voor een discrete verzameling van snelheden (continue tijd en ruimte) wordt numeriek opgelost en de verschillende subgrids worden consistent aan elkaar gekoppeld. Deze methode is gevalideerd op het Taylor-Vortex probleem en de eerste resultaten zijn positief. In de nabije toekomst willen wij deze techniek toepassen op een aantal veel complexere problemen.

In het laatste hoofdstuk zijn de transporteigenschappen van poreuze fibermedia bestudeerd. De doorlaatbaarheid van verschillende modellen van fibermedia is berekend als functie van de volumefractie en de resultaten zijn vergeleken met bestaande theoretische, numerieke en experimentele data. Voor de geordende media, namelijk SC en BCC configuraties is er een goede overeenstemming tussen de rooster-Boltzmann berekeningen en de beschikbare theoretische en numerieke data. De resultaten voor de doorlaatbaarheid van ongeordende fibermedia zijn ook eveneens in overeenstemming met de analytische oplossing van Jackson en James en de empirische Kozeny-Carman vergelijking. Over een vrij groot bereik van volumefracties blijkt de doorlaatbaarheid van 3D fibermedia exponentieel afhankelijk te zijn van de volumefractie.

Via dimensie-analyse is beredeneerd dat de gemiddelde afstand tussen de vezels de bepalende factor is voor de doorlaatbaarheid. Dit verband is bestudeerd voor de diverse fibermedia en verschaft inzicht in het exponentieel verband van de doorlaatbaarheid als functie van de volumefractie.

Tenslotte is de doorlaatbaarheid van fibermedia bestudeerd die geplaatst worden tussen twee vlakke platen (de zogenaamde *bounded* media). Ondanks het feit dat veel realistische fibermedia *bounded* zijn, zijn weinig theoretische oplossingen van dergelijke systemen in de literatuur te vinden. Voor zowel geordende als ongeordende fibermedia hebben wij de doorlaatbaarheid bepaald als functie van de afstand tussen de platen. In de limiet van kleine volumefracties zijn de resultaten goed in overeenstemming met de theorie van Tsay en Weinbaum. Door in de theoretische oplossing van Tsay en Weinbaum expliciet een afhankelijkheid op te nemen van de gemiddelde afstand (dominante factor van de doorlaatbaarheid) is een fenomenologische uitdrukking afgeleid die in een groter bereik van fibervolume fracties geldig is.

