No. 556 January 2017

Alles im Fluss
Simulationstechniken der Strömungsmechanik in der Materials Chain

J. Schröder, S. Turek, A. Schwarz

ISSN: 2190-1767

Universität Duisburg-Essen

Beitrag zu

ESSENER UNIKATE

Alles im Fluss

Simulationstechniken der Strömungsmechanik in der Materials Chain

zum Mercurprojekt Effiziente Simulationstechniken für robuste Least-Squares FEM in der Fluiddynamik

von J. Schröder, S. Turek und A. Schwarz

Institut für Mechanik • Fakultät für Ingenieurwissenschaften

Creation date: 29. September 2016

1. Einleitung und Motivation

Bereits Anfang des 19.ten Jahrhunderts leiteten Claude Louis Marie Henri Navier und Sir George Gabriel Stokes unabhängig von einander den Impulssatz für reibungsbehaftete Newtonsche Fluide in differentieller Form her. Das physikalische Verhalten von Wasser, Ölen und Luft konnte nun mathematisch beschrieben werden. Auch Adhémar Jean Claude Barré de Saint-Venant und Siméon Denis Poisson formulierten die Navier-Stokes Gleichungen im frühen 19.ten Jahrhundert, dennoch setzten sich die Namensgeber Navier und Stokes durch. Heute, zwei Jahrhunderte später, ermöglichen die enormen Entwicklungen im Bereich der Hochleistungsrechner, sowie im Bereich der numerischen Simulationstechniken die Beschreibung komplexer Strömungen auf der Grundlage der Navier-Stokes Gleichungen. Das Zusammenspiel aus effizienten Lösungsstrategien und numerisch robusten Modellen zur Beschreibung des physikalischen Problems ist dabei ein zentrales Element heutiger Forschung.

Die heutigen Problemstellungen sind vielseitiger Natur: Die Forschung hat sich zum Ziel gesetzt die Gesetzmäßigkeiten der Natur abzubilden und physikalische Phänomene zu simulieren. Dazu gehören längst nicht nur die Beschreibung des Fliessverhaltens Newtonscher Fluide wie Wasser oder Luft, sondern auch die Simulation von sogenannten Nicht-Newtonschen Fluiden. Diese Fluide sind im Gegensatz zu Newtonschen Fluiden in ihrem Antwortverhalten nicht mehr durch ein einfaches Materialgesetz zu erfassen. Durch die Nicht-Newtonsche Beschreibung einer viskosen Flüssigkeit lässt sich zum Beispiel erklären, warum Ketchup die Flasche erst gar nicht und dann plötzlich in Gänze verlässt. Ein weiterer Aspekt auf dem Weg zur naturgetreuen Nachbildung physikalischer Phänomene oder zur Analyse strömungsmechanischer Experimente ist die auftretende Komplexität der Geometrien, wie etwa die Umströmung einer Flugzeugtragfläche oder die Durchströmung verschiedenster Mikrostrukturen, siehe Abbildung 1.

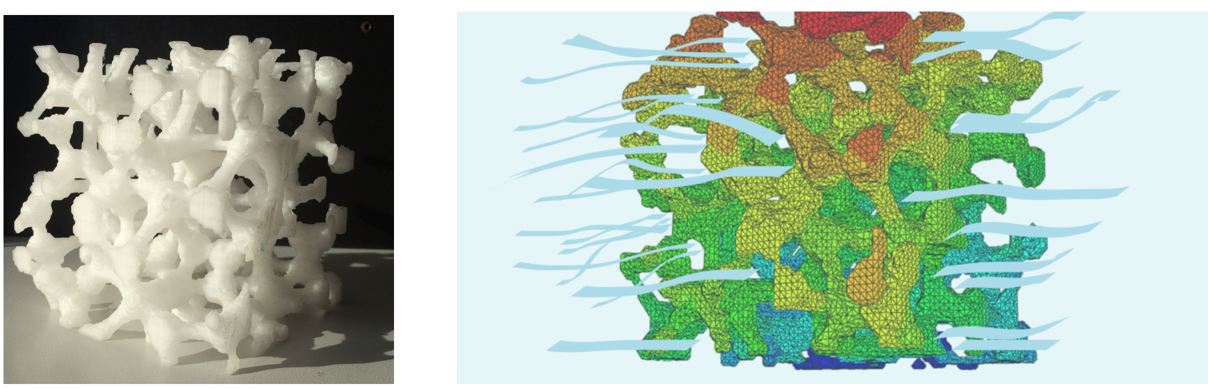

Abbildung 1: 3D-gedruckte komplexe Struktur und prinzipielle Darstellung der Durchströmung derselben Struktur

Alle diese verschiedenen Phänomene kommen insbesondere bei komplexen industriellen Anwendungen zusammen, beispielsweise bei Extrusionsprozessen in der Produktionstechnologie, die daneben auch dynamisch veränderliche Geometrien beinhalten. Ein häufig in der Lebensmittel- und Kunststoffindustrie verwendeter Extruder ist ein in Abbildung 2 dargestellter (Doppel-)Schneckenextruder. Das Wissen um jeden Produktionsschritt ist in der Auslegung der Maschinen, aber auch in der Kontrolle der Fertigungsprozesse unumgänglich. Jeder Produktionsschritt in heutigen modernen Anlagen wird in digitaler Form observiert, analysiert und dokumentiert. Dies begründet den Bedarf an robusten und effizienten Simulationstechniken in der Fertigungsindustrie.

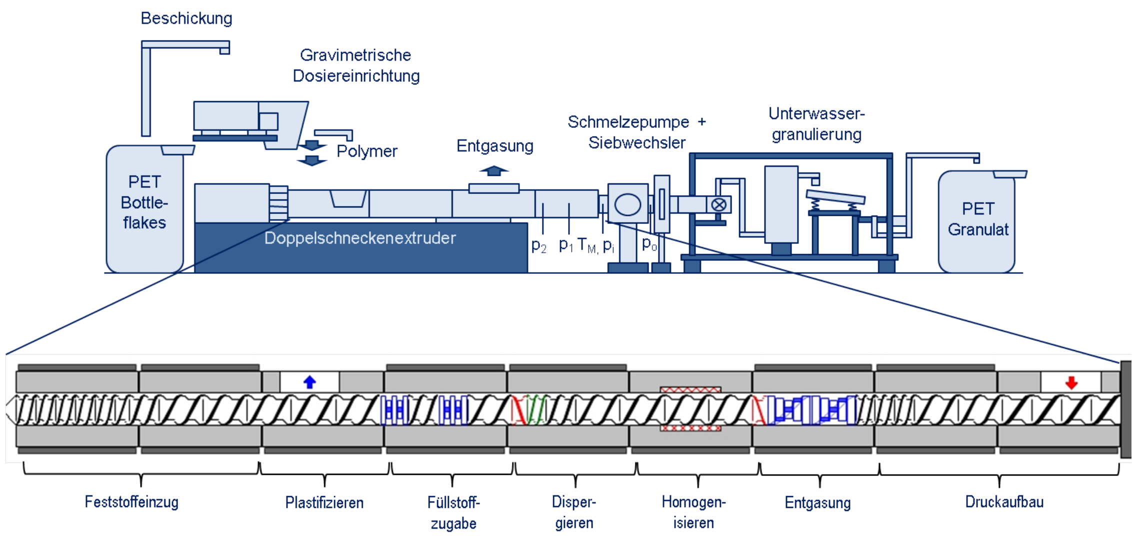

Abbildung 2: Schematische Darstellung eines Extrusionsprozesses

Ein relativ neuer und vielversprechender Ansatz zur Simulation in der Strömungsmechanik beruht auf einer Lösungsstrategie mittels der gemischten Least-Squares Finite-Elemente-Methode (LSFEM) in Kombination mit effizienten iterativen Lösern für massiv parallele Rechnerarchitekturen. Die Least-Squares Finite-Elemente-Methode, was frei mit Finite-Element-Methode der kleinsten Fehlerquadrate zu übersetzen ist, gründet auf der Idee der Minimierung des quadratischen Fehlers eines mathematischen Problems, eben jener Idee der Regression in der Statistik. Sie ist ein alternativer variationeller Ansatz zur bekannten Galerkin Finite-Elemente-Methode. Im Gegensatz zu *klassischen* gemischten Galerkin Verfahren liegt der wesentliche Vorteil der LSFEM, insbesondere für die Navier-Stokes Gleichungen, in der inhärent symmetrischen Struktur der zu lösenden Gleichungssysteme. Des Weiteren bietet die gemischte Least-Squares Finite-Elemente-Methode eine große Flexibilität in der Konstruktion und Fehlerkontrolle der Formulierung.

2. Robuste Elementformulierungen

Optimierte Least-Squares Elementformulierungen in der Fluiddynamik

Das physikalische Verhalten von Flüssigkeiten und Gasen wird durch die Navier-Stokes Gleichungen beschrieben. Für inkompressible Fluide wie zum Beispiel Wasser wird angenommen, dass sich die Dichte der Flüssigkeit nicht ändert. Als Formel lässt sich dieser Zusammenhang mit der Kontinuitätsbedingung, der Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes $\boldsymbol{v}$, beschreiben

$$\operatorname{div} \boldsymbol{v} = 0.$$

Zusammen mit der Navier-Stokes Gleichung, die das Gleichgewicht beziehungsweise die Erhaltung des Impulses im Sinne der Newtonschen Axiome beschreibt

$$-\rho \nabla \boldsymbol{v} \boldsymbol{v} + 2\rho\nu \ \mathrm{div}(\nabla^s \boldsymbol{v}) - \rho \dot{\boldsymbol{v}} - \nabla p = \boldsymbol{0}$$

erhält man einen Gleichungssatz für inkompressible Fluide. In den gegebenen Gleichungen wird das Fluid durch seine Dichte ρ, den Druck p und seine kinematische Viskosität ν beschrieben. $\dot{\boldsymbol{v}}$ bezeichnet die Beschleunigung, also die partielle Zeitableitung der Geschwindigkeit und $\nabla \boldsymbol{v}$ den räumlichen Gradienten des Geschwindigekeitsfeldes bzw. $\nabla^s \boldsymbol{v}$ den symmetrischen Gradienten. Die mathematische Beschreibung des physikalischen Problems wird nun mittels eines variationellen Ansatzes in eine numerisch lösbare Form überführt. Dazu wurde im Rahmen der Forschungsarbeiten des Mercur-Projekts von Schröder, Turek und Schwarz die Least-Squares Finite-Elemente-Methode verwendet.

Die Methode der kleinsten Fehlerquadrate

Die Least-Squares Methode ist ein bekanntes Verfahren der Statistik um Datenmengen zu analysieren und diesen eine Beschreibung durch mathematische Funktionen zuzuordnen. Ein Bespiel für eine solche Regressionsanalyse für eine bestimmte Datenmenge (rote Kreuze) ist in Abbildung 3 dargestellt.

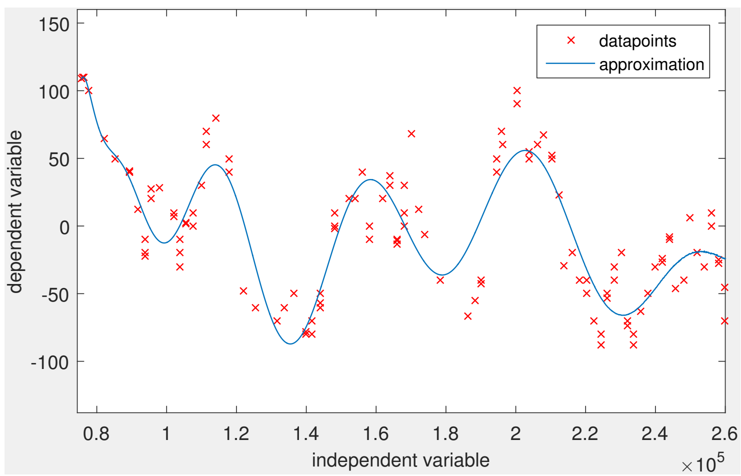

Abbildung 3: 1D Regressionsanalyse

Die Approximation (blaue Kurve) beschreibt die Datenmenge im „least-squares“ Sinne, das heißt die Summe des Quadrats der Abweichungen jedes Datenpunkts zur Approximationskurve ist minimal. Ein kurzes Beispiel zu diesem Minimierungsproblem wird im Folgenden dargestellt: Gegeben sind die Datenpunkte (0,2), (2,3) und (4,1) und gesucht ist eine Funktion $f(x) = a_1 + a_2 x$, die diesen Punkten am besten genügt, siehe Abbildung 4. Hierzu stellen wir das zugehörige Funktional in Abhängigkeit von a_1 und a_2 auf, es lautet

$$\mathcal{F}(a_1, a_2) = \frac{1}{2}\left((a_1 - 2)^2 + (a_1 + 2a_2 - 3)^2 + (a_1 + 4a_2 - 1)^2\right).$$

Die Minimierung des Funktionals liefert die Lösung für a_1 und a_2 mit $a_1 = 2,5$ und $a_2 = -0,25$.

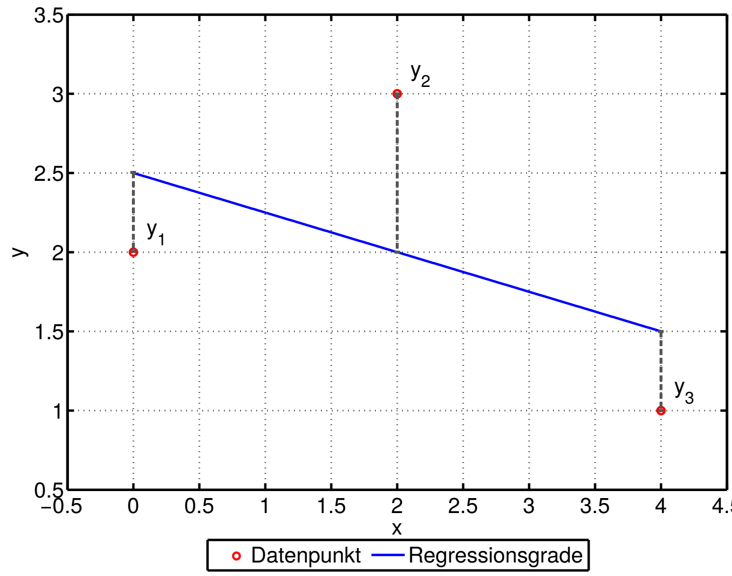

Abbildung 4: Minimierung der Summe der Fehlerquadrate für $F(a_1, a_2)$

Die Least-Squares Finite-Elemente-Methode für inkompressible Fluide

Die beschriebene Methode der kleinsten Fehlerquadrate lässt sich in analoger Form in eine Variationsmethode für Finite-Element Formulierungen überführen. Damit ist auch die Übertragung der *kontinuierlichen* Eigenschaften der Least-Squares Formulierung auf die *diskrete* FEM Welt möglich: Dazu gehört die Symmetrie der resultierenden Gleichungssysteme, auch bei den Navier-Stokes Gleichungen mit dominanter Konvektion bei höheren Reynolds Zahlen, sowie die Stabilität bei der Auswahl der Finite Element Ansatzfunktionen für die individuellen Felder, so dass neue Finite Elemente Kombinationen für die Simulation von inkompressiblen Fluiden möglich werden. Hinzu kommen auch mathematisch fundierte Konzepte zur Fehlerkontrolle und Gitteradaptivität, die im Folgenden noch genauer erläutert werden. Neben den genannten Diskretisierungsaspekten spielen aber auch *Schnelle Löser* zur Behandlung der hochdimensionalen Gleichungssysteme eine entscheidende Rolle. Auch hier ist es möglich, hierarchische Mehrgitterlöser, die augenblicklich zu den effizientesten Verfahren gehören, auf Least-Squares Formulierungen erfolgreich zu übertragen.

Eine Möglichkeit zur Simulation des Strömungsverhaltens eines inkompressiblen Fluids ist ein System erster Ordnung mit den unabhängigen Größen, im Folgenden auch Freiheitsgrade genannt, Spannung $\boldsymbol{\sigma}$, Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}$ und Druck p in einem Gleichungssatz. Das resultierende Funktional dieser Formulierung lautet

$$\mathcal{F}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{v}, p) = \frac{1}{2}\left(\int_{\mathcal{B}} ||\mathrm{div}\,\boldsymbol{\sigma} - \rho\dot{\boldsymbol{v}} - \rho\nabla\boldsymbol{v}\,\boldsymbol{v}||^2 \mathrm{d}v + \int_{\mathcal{B}} ||\boldsymbol{\sigma} - 2\rho\nu\nabla^s\boldsymbol{v} + p\mathbf{1}||^2 \mathrm{d}v + \int_{\mathcal{B}} ||\mathrm{div}\boldsymbol{v}||^2 \mathrm{d}v\right),$$

hierin ist $|| \bullet ||^2$ die quadrierte L^2-Norm. Eine weitere Formulierung zur Strömungssimulation ist eine sogenannte reduzierte Form in den Größen Spannung und Geschwindigkeit mit

$$\widetilde{\mathcal{F}}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{v}) \;=\; \frac{1}{2}\left(\int\limits_{\mathcal{B}} ||\operatorname{div}\boldsymbol{\sigma} - \rho\dot{\boldsymbol{v}} - \rho\nabla\boldsymbol{v}\,\boldsymbol{v}||^2 \mathrm{d}v + \int\limits_{\mathcal{B}} ||\operatorname{dev}\boldsymbol{\sigma} - 2\rho\nu\nabla^s\boldsymbol{v}||^2 \mathrm{d}v\right),$$

wobei $\operatorname{dev}\boldsymbol{\sigma}$ den Deviator der Spannungen bezeichnet. Bei Letzterer wird der Druck-Freiheitsgrad aus dem System eliminiert, was zu einer Reduktion an Freiheitsgraden führt. Die für die Formulierungen verwendeten Interpolationsfunktionen sind zur Approximation der Spannungen vektorwertige Raviart-Thomas (RT) Interpolatoren. Das Geschwindigkeitsfeld und der Druckfreiheitsgrad werden mit skalarwertigen Lagrange (P) Interpolationsfunktionen approximiert. Beispielhaft sind zwei Lagrange Ansatzfunktion in Abbildung 5 für ein Dreieckselement mit kubischem Interpolationsansatz dargestellt.

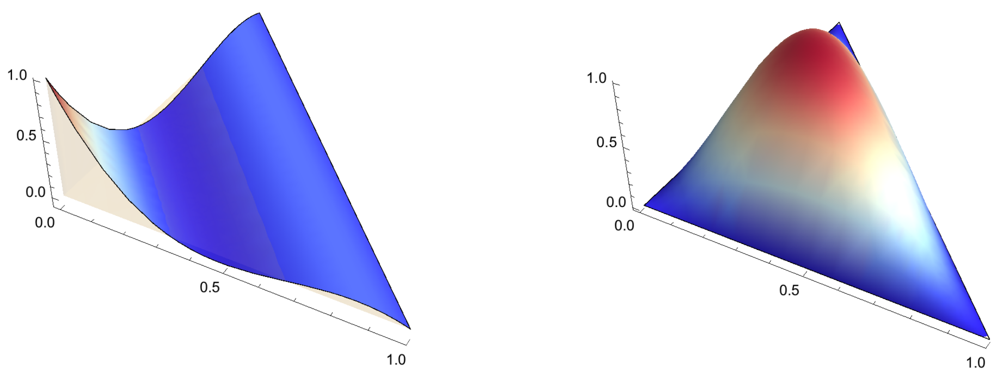

Abbildung 5: Auswahl kubischer Lagrange-Ansatzfunktionen

Die resultierende gemischte Finite-Element-Formulierung wird mit $RT_m P_k P_l$ beziehungsweise $RT_m P_k$ abgekürzt, wobei m, k und l die polynominale Ordnung der Interpolationsfunktionen beschreiben. Im Rahmen des Mercur-Projekts wurden unter anderem optimierte und robuste Least-Squares Finite-Element-Formulierungen beschrieben und untersucht. Um die Effizienz und die Approximationsqualität dieser Formulierungen zu beurteilen, können verschiedene Optimierungsansätze untersucht werden. Eine mögliche Strategie ist die Kombination unterschiedlicher polynominaler Interpolationsordnungen für die Spannungen, Geschwindigkeiten und den Druck. Anhand verschiedener Benchmark-Randwertprobleme werden diese Optimierungsansätze analysiert. Hierbei hat sich bereits gezeigt, dass höhere polynomiale Ansätze grundsätzlich eine bessere Approximationsgüte aufweisen. Eine ausführliche Darstellung der Ergebnisse wird in Schwarz et al. [2016] gezeigt. Ein weiterer Optimierungsansatz ist die unterschiedliche Gewichtung der einzelnen Residuen in den Funktionalen beider Formulierungen, siehe auch Nickaeen et al. [2014].

Umströmung eines Zylinders

Die Optimierungsstrategien für beide Formulierungen wurden unter anderem für das Randwertproblem „Flow around a cylinder“, siehe Turek and Schäfer [1996], dargestellt und in Schwarz et al. [2016] für den stationären Fall untersucht. Abbildung 7 zeigt eine beispielhafte Triangulierung des Randwertproblems.

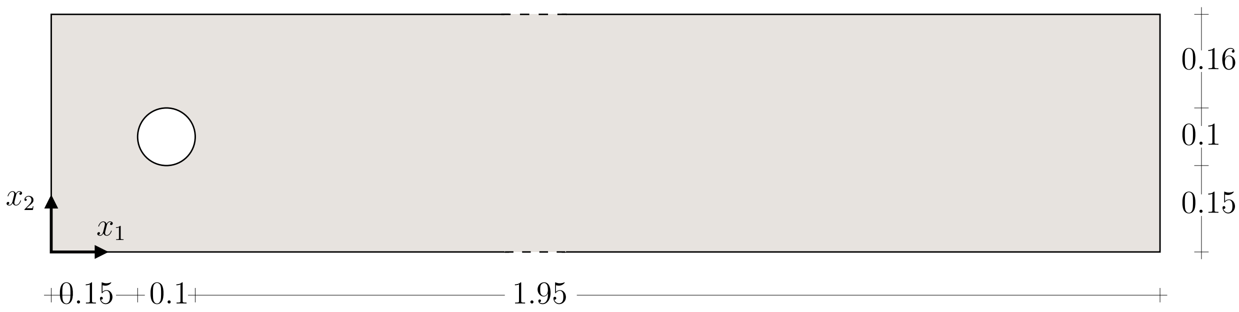

Abbildung 6: Randwertproblem - „Flow around a cylinder“

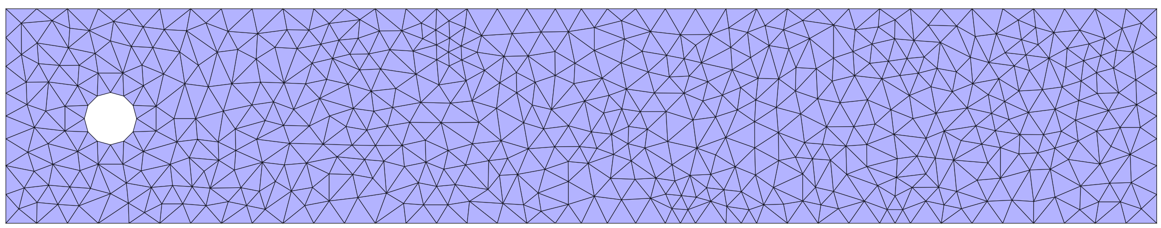

Abbildung 7: Beispielvernetzung für „Flow around a cylinder“

In dem gezeigten Randwertproblem wird für die Flüssigkeit eine Dichte von $\rho = 1.0$ und eine Viskosität von $\nu = 0.001$ angenommen. Am oberen und unteren Rand wie auch am Zylinder werden die Geschwindigkeiten zu Null gesetzt. Der linke Rand wird durch die Einflussbedingung $\boldsymbol{v} = (6\,x_2(0.41 - x_2)/0.41^2, 0)^T$ beschrieben. Am rechten Rand wird der Druck genullt.

Das wohl bekannteste Ergebnis dieses Randwertproblems ist das Geschwindigkeitsprofil für die Geschwindigkeiten in x_1-Richtung, die sogenannte Kármánsche Wirbelstraße, wie in Abbildung 8 dargestellt. In dem instationären Problem stellt sich eine Verwirbelung der Geschwindigkeiten hinter dem mit einer Ausmitte angeordneten Zylinder ein.

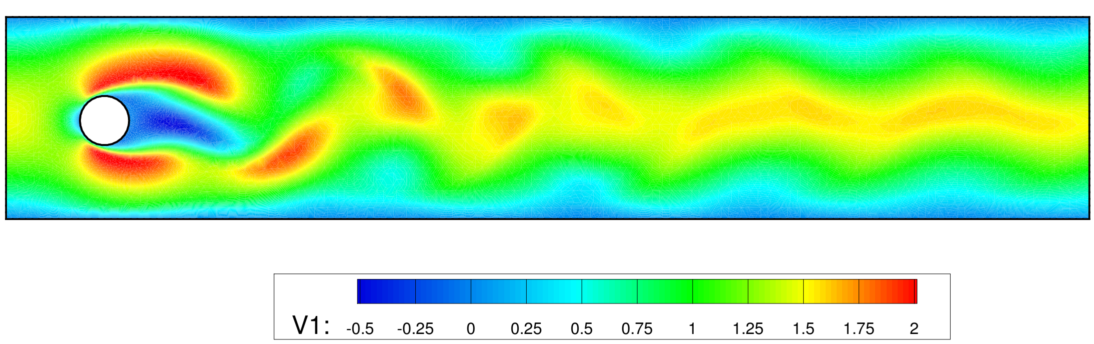

Abbildung 8: Kármánsche Wirbelstraße

Regularisierte Nischenströmung

Ein zweites numerisches Beispiel beschreibt den „Regularized lid-driven cavity flow“, eine regularisierte Nischenströmung. Die Geometrie und eine sogenannte *Union-Jack* Vernetzung sind in Abbildung 9 dargestellt. Auf einem quadratischen Gebiet $\mathcal{B}$ mit den Abmessungen 1×1 wird am oberen Rand ein quartisches Geschwindigkeitsprofil aufgebracht: Die Geschwindigkeit in x_1-Richtung wird mit $v_1(x) = 16x^2(1-x)^2$ vorgegeben. An allen anderen Rändern werden die Geschwindigkeiten des Fluids zu Null angenommen. Des Weiteren wird der Druck im Fluid in der Mitte des unteren Randes zu Null gesetzt. In Folge der aufgebrachten Randbedingungen stellt sich ein Geschwindigkeitsprofil der absoluten Geschwindigkeiten wie in Abbildung 10 (links) dargestellt, ein. Das Randwertproblem wird für eine Reynolds Zahl Re=400 berechnet. Dies entspricht einer Dichte $\rho = 1.0$ und einer kinematischen Viskosität $\nu = 0.0025$ für das Medium.

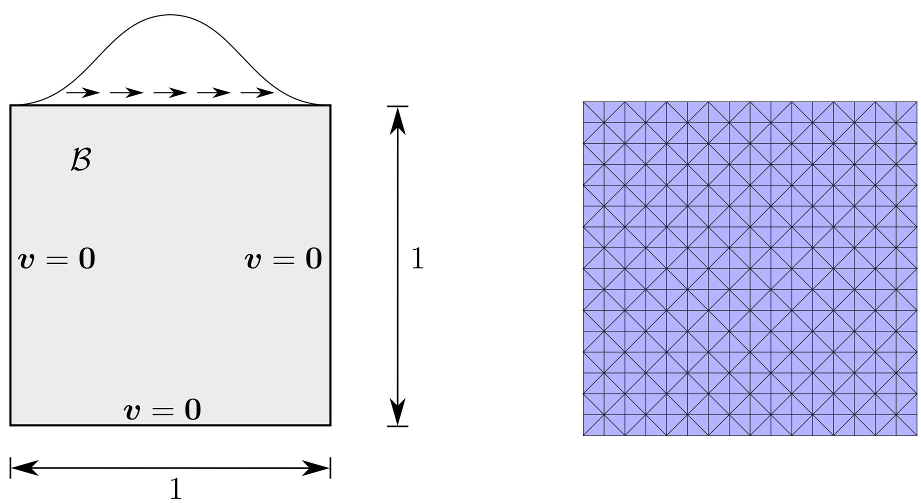

Abbildung 9: Geometrie (links) und *Union-Jack* Vernetzung in Level 1 (rechts) für die regularisierte Nischenströmung

Wie bereits beschrieben ist die Kombination der Ansatzfunktionsordnung zur Interpolation der Freiheitsgrade in der Least-Squares Finite-Element-Methode frei wählbar, allerdings ist sie nicht beliebig. Jedoch, wie ist sie zu wählen? Um diese Frage beantworten zu können werden für das dargestellte Randwertproblem zwei Größen ausgewertet. Zum einen berechnen wir die kinetische Energie der Flüssigkeitsströmung, diese ist mit $E = \dfrac{1}{2}\displaystyle\int_{\mathcal{B}} \rho|\boldsymbol{v}|^2 \mathrm{d}V$ definiert. Die zweite untersuchte Größe ist der Wert des Least-Squares Funktionals und damit der Fehler der Lösung. Das Konvergenzverhalten der kinetischen Energie für eine reguläre Netzverfeinerung ist in Tabelle 2 dargestellt. In Tabelle 1 sind die zugeörigen Systemgrößen für die unterschiedlichen Interpolationskombinationen aufgeführt.

Die Untersuchungen zu der Wahl der Ansatzordnungen für die regularisierte Nischenströmung zeigen, dass die Referenzlösung in der untersuchten physikalischen Größe für

Level	NEL	Anzahl der Freiheitsgrade			
		$RT_0P_2P_1$	$RT_1P_2P_1$	$RT_3P_4P_1$	$RT_3P_4P_3$
1	25,350	15,811	29,762	107,586	115,906
2	99,846	62,339	118,914	430,210	463,234
3	396,294	247,555	475,394		
4	1,579,014	986,627	1,901,058		

Tabelle 1: Netzinformation zum Randwertproblem der regularisierten Nischenströmung. Anzahl der Elemente (NEL) und Anzahl der Freiheitsgrade.

Spannung-Geschwindigkeit-Druck Formulierung $\mathcal{F}$				
Level	$RT_0P_2P_1$	$RT_1P_2P_1$	$RT_3P_4P_1$	$RT_3P_4P_3$
1	1.024579E-02	2.146524E-02	2.128403E-02	2.131555E-02
2	1.400149E-02	2.132649E-02	2.131336E-02	2.131536E-02
3	1.776242E-02	2.131607E-02		
4	2.007041E-02	2.131541E-02		
Referenzlösung E =2.131529E-02 in Nickaeen et al. [2014]				

Tabelle 2: Konvergenz der kinetischen Energie E zum Randwertproblem der regularisierten Nischenströmung für Re=400 für ein regulär verfeinertes Netz

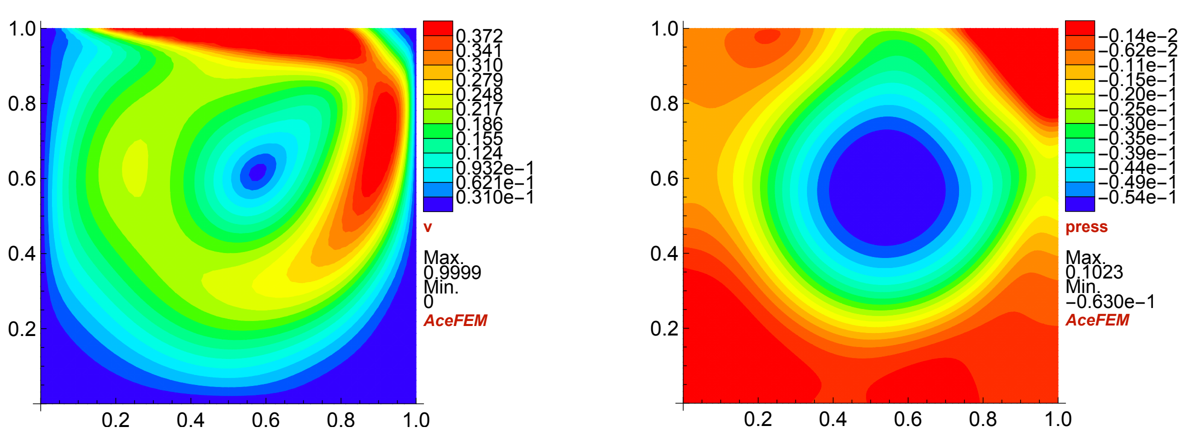

Abbildung 10: Geschwindigkeits- (links) und Druckplot (rechts) zum Randwertproblem der regularisierten Nischenströmung

fast alle Kombinationen erreicht werden kann. Lediglich die Approximation der Spannungen in RT_0 ist unzureichend, so erreicht das $RT_0P_2P_1$ finite Element auch im feinsten

Netzlevel nicht die korrekte Lösung. Diese wird hingegen bereits mit der Elementkombination $RT_1P_2P_1$ in Netzlevel 3 erreicht. Die höherwertigen Ansatzkombinationen $RT_3P_4P_1$ und $RT_3P_4P_3$ erreichen die Referrenzlösung bereits für Level 2, beziehungsweise Level 1.

Dennoch verbleibt die Frage, welche Ansatz-Kombination nun die *Beste* ist. Die Auswertung des Funktionalwerts, wie in Abbildung 11 für die verschiedenen Appoximationskombinationen dargestellt, zeigt, dass die beste Konvergenz mit dem $RT_3P_4P_3$ erreicht wird. Eine Interpolation der Spannungen mit Hilfe der RT_3 Ansatzfunktionen ist in der Kombination mit einer linearen Druck-Approximation jedoch schlechter. Es wird deutlich, dass ein Polynomgrad $m \geq 1$ einhergehend mit einer passenden Interpolationsordnung $k = m + 1$ der Geschwindigkeiten und $l = m$ des Drucks die Referrenzlösung für ein adäquat feines Netz liefert. Durch die angegebenen Werte für die Wahl der Interpolationsordnung kann die entsprechend optimale Konvergenzrate des Least-Squares-Fehlers erreicht werden, siehe auch Schwarz et al. [2016]. In Verbindung mit entsprechend konzipierten Mehrgitterverfahren, die bezüglich der Wahl des Gittertransfers an die jeweils gewählten Ansatzfunktionen angepasst werden, lassen sich hiermit hohe Genauigkeit mit hoher numerischer Effizienz verbinden. Nutzt man gleichzeitig im Kontext von *hardware-orientierten* Techniken aus, dass zwar aufgrund der höheren Belegungsdichten in den Systemmatrizen die rechenintensiven Operationen anwachsen, diese aber wiederum mittels Beschleuniger-Hardware, wie z.B. Graphikprozessoren (GPUs), sehr effizient behandelt werden können, so wird offensichtlich, dass die vorgestellten Techniken ein sehr hohes Potential für zukünftige Simulationen auf Hochleistungsrechnern besitzen.

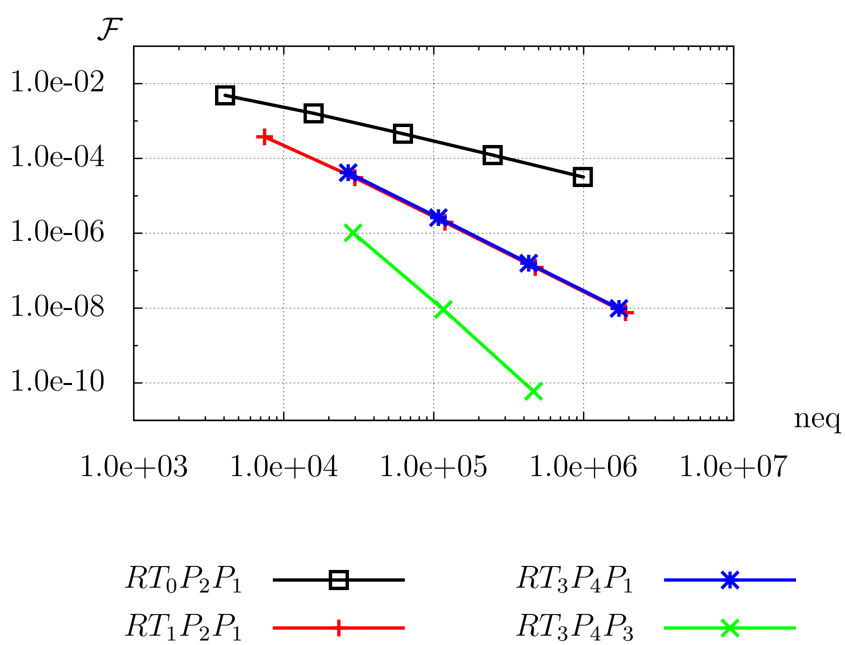

Abbildung 11: Konvergenz des Funktionalwerts verschiedener Interpolationsordnungen für die regularisierte Nischenströmung für Re = 400. Hierbei bezeichnet „neq“ die Anzahl der Gleichungen des zu lösenden Systems

Beschreibung Nicht-Newtonscher Fluide

„Der Widerstand, der durch den Mangel an Gleitfähigkeit innerhalb einer Flüssigkeit entsteht, ist - vorausgesetzt, dass alle anderen Bedingungen gleich bleiben - proportional zu der Geschwindigkeit, mit der die Flüssigkeitsteilchen voneinander getrennt werden.“ , so beschrieb Isaac Newton in *Philosophiae Naturalis Principia Mathematica*, siehe Doraiswamy [2002], ein Newtonsches Fluid. Die Proportionalität der Scherspannung τ und der Scherrate $\dot{\gamma}$ die Newton postuliert ist heute als dynamische Viskosität μ bekannt, wobei $\mu = \nu\rho$ den Zusammenhang zwischen der dynamischen und der kinematischen Viskosität beschreibt. Die Relation aus Scherspannung und Scherrate, gegeben mit $\tau = \mu\dot{\gamma}$, gilt allerdings nur für Newtonsche Fluide. Nicht-Newtonsche Fluide zeigen hingegen ein schergeschwindigkeitabhängiges Antwortverhalten und werden durch komplexe rheologische Modelle beschrieben. Eine Kategorisierung eines Nicht-Newtonschen Fluids ist also abzuleiten aus der Abhängigkeit zwischen der dynamischen Viskosität und der Schergeschwindigkeit. Im Allgemeinen lässt sich das Fließverhalten solcher Nicht-Newtonschen Fluide mit $\tau = K\dot{\gamma}^n$ mit dem Konsistenz-Faktor K und dem Fließindex n beschreiben. Diese Fluide werden auf der einen Seite mit der Eigenschaft Dilatanz ($n > 1$), also einer scherratenabhängigen Zunahme der Viskosität definiert. Den gegensätzlichen Fall, also eine scherratenabhängige Abnahme der Viskosität bezeichnet man als Strukturviskosität und es gilt $n < 1$. Zur Simulation dieses komplexen rheologischen Verhaltens des Fluids wurde im Rahmen des Mercur-Projekts von Schröder, Turek und Schwarz eine Least-Squares Formulierung basierend auf einem Power-Law-Ansatz der Form

$$\nu(\nabla^s \boldsymbol{v}) = K\, I_2^{(n-1)/2}$$

konstruiert und untersucht. Auch hierin können der Konsistenz-Faktor K und der Fließindex n identifiziert werden. Des Weiteren bezeichnet I_2 die zweite Invariante des symmetrischen Geschwindigkeitsgradienten. Beispielhafte Auswertungen für die Funktion der kinematischen Viskosität ν abhängig vom Fließindex n über die Invariante I_2 sind in Abbildung 12 dargestellt. Hierbei wird die monotone Steigung beziehungsweise monotone Abnahme der Viskosität bei zunehmender Scherung deutlich.

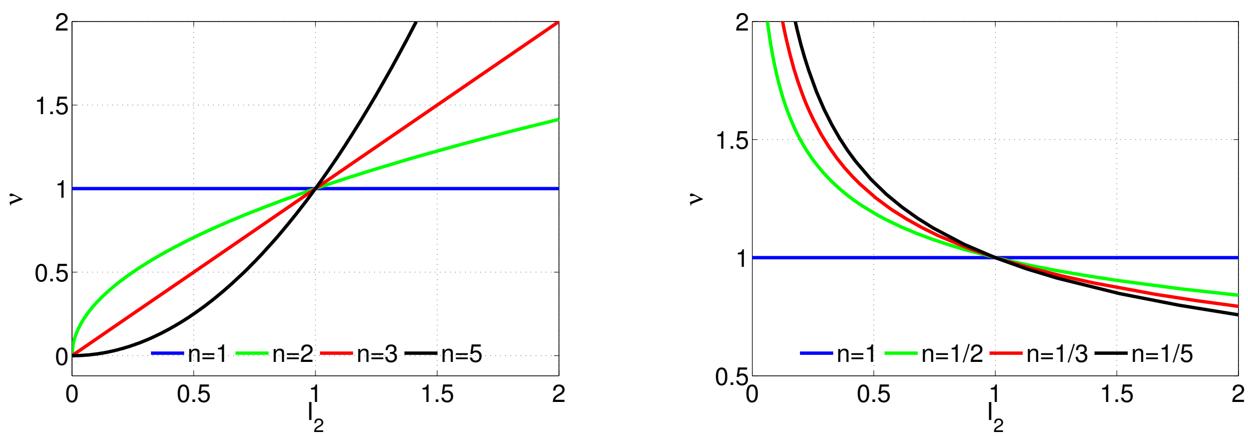

Abbildung 12: Darstellung der Viskositätsfunktion für verschiedene Fließindizes n. Dilatanz (links) und Strukturviskosität (rechts)

Die Formulierung für das Nicht-Newtonsche Fluid wurde für eine stationäre Strömung zwischen parallelen Platten unter Ausnutzung der Symmetrie des Systems untersucht, siehe unter anderem Bell and Surana [1994] und Abbildung 13.

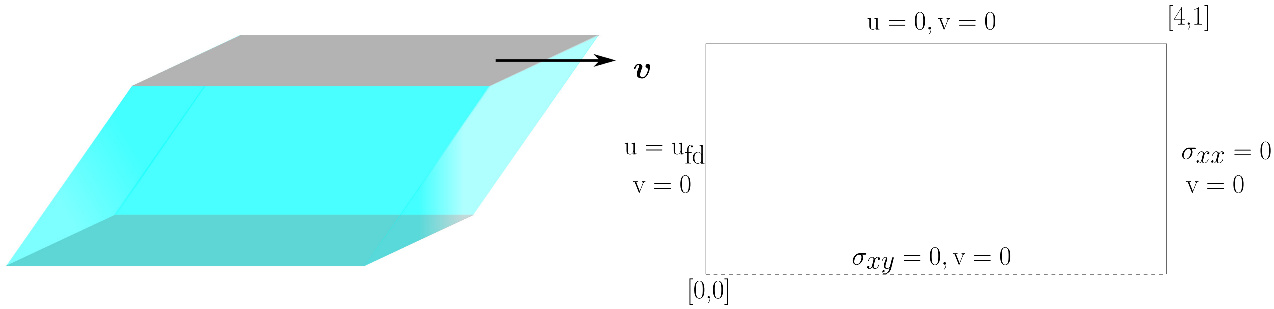

Abbildung 13: Darstellung des numerischen Beispiels für eine Nicht-Newtonsche Fluid Strömung zwischen zwei Platten

Es zeigt sich, dass mit dem Standardvorgehen der LSFEM unter Verwendung eines nichtlinearen Funktionals das Anwendungsspektrum für den Fließindex n mit $0,8 < n < 1,2$ relativ beschränkt ist. Es liegt die Vermutung nahe, dass sich numerische Probleme aus den zweiten Ableitungen für die Systemmatrizen des zu lösenden Gleichungssystems für einen Fließindex außerhalb des genannten Bereichs ergeben. Aus diesem Grund wird auch die Methodik basierend auf einem linearisierten Funktional angewandt, siehe Payette and Reddy [2011]. In Kombination mit Newton-ähnlichen Lösungs-Verfahren, die neben dem nichtlinearen Konvektionsterm auch die Nichtlinearität aufgrund der scherratenabhängigen Viskosität berücksichtigen, und den beschriebenen Mehrgittermethoden (zur effizienten Lösung der resultierenden linearen Teilprobleme in jedem Newton-Schritt) werden somit auch für den Fall Nicht-Newtonscher Fluide sehr robuste und effiziente Simulationstechniken möglich. Das Anwendungsspektrum für den Fließindex ist mit $0,45 < n < 3$ in diesem Fall deutlich größer. Die Ergebnisse zu diesen Untersuchungen mit einem linearisierten Funktional sind in Abbildung 14 und 15 dargestellt.

Fehlerabhängige Netzanpassung

Einer der wichtigsten Vorteile der Least-Squares Finite-Element-Methode liegt in der unmittelbaren Verfügbarkeit eines *a posteriori* Fehlerschätzers. Die Auswertung des Least-Squares Funktionals für jedes finite Element einer Simulation ist gleich dem Fehler des jeweiligen Elements. Damit kann eine adaptive Netzanpassung relativ einfach in die Simulation der Strömungsprobleme eingebracht werden. Die Realisierung erfolgt in Form einer Verfeinerungsroutine, die der allgemeinen Netzgenerierung vorgeschaltet ist. Die elementweise Auswertung des Funktionals dient der Markierung der zu verfeinernden Elemente, wobei unterschiedliche Markierungsstrategien verwendet werden können. Die Verfeinerungsroutine garantiert dabei die Evolution des Ursprungsnetz, d.h. jedes adaptiv erstellte Netz ist eine direkte Nachfolge des vorherigen Netzlevels. Beispielhaft ist in Abbildung 16 (rechts) die Konvergenz des Funktionals für eine Verfeinerung der jeweils schlechtesten 10% bis 50% der absoluten Anzahl der Elemente und für eine reguläre Verfeinerung dargestellt. Abbildung 16 (links) zeigt ein Triangulierungslevel für eine 50%-ige Verfei-

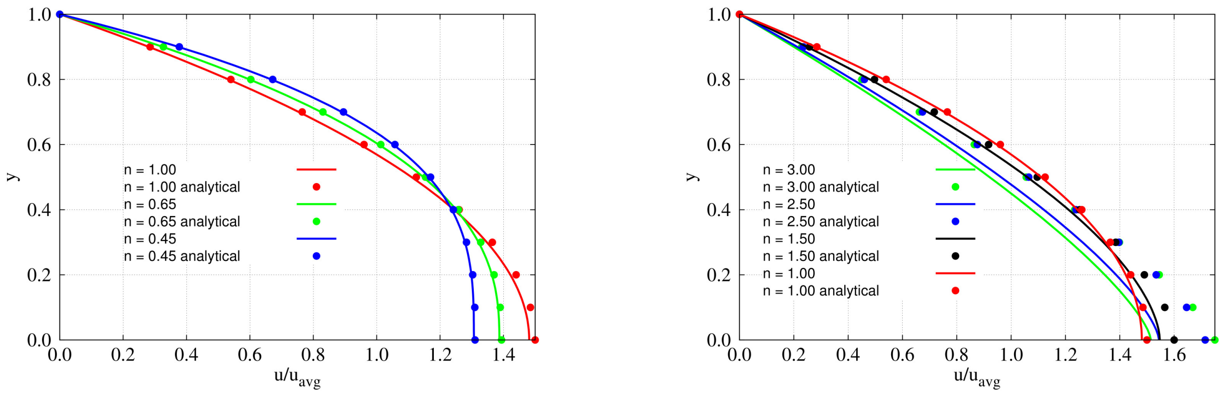

Abbildung 14: Stationäre Strömung zwischen parallelen Platten: Scherverdünnend (links) und scherverdickend (rechts) für $RT_0P_2P_1$ Elemente

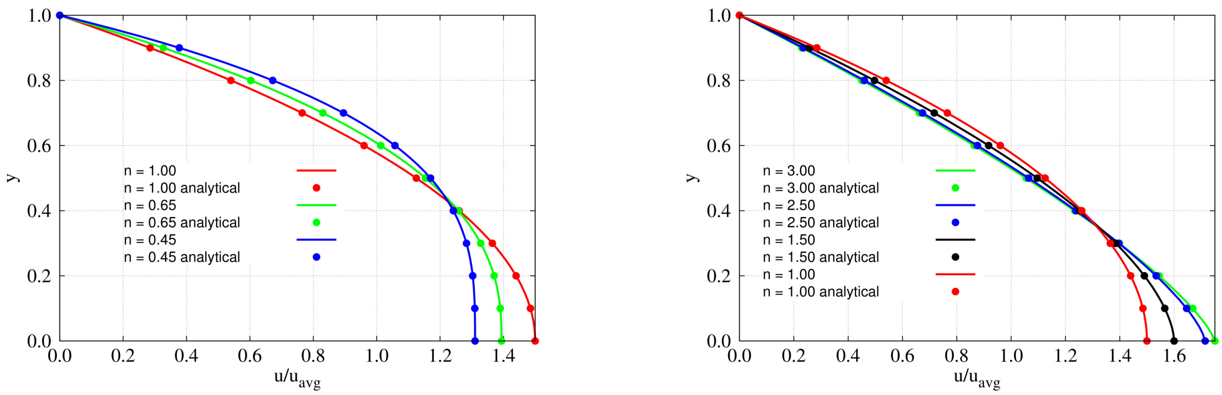

Abbildung 15: Stationäre Strömung zwischen parallelen Platten: Scherverdünnend (links) und scherverdickend (rechts) für $RT_1P_3P_1$ Elemente

nerung des berechneten Randwertproblems „Regularized lid-driven cavity". Hier sollte zum Abschluss bemerkt werden, dass sich die resultierenden lokalen Gitterverfeinerungen hervorragend mit entsprechenden Gittertransferoperatoren im Kontext hierarchischer Mehrgitterverfahren kombinieren lassen.

3. Ausblick

Eine der großen Herausforderungen in der numerischen Strömungssimulation, für die die beschriebenen Least-Squares Techniken besonders geeignet erscheinen, sind komplexe geometrische Strukturen und ihre Interaktionen mit dem umströmenden Fluid, d.h. für Fluid-Struktur-Interaktionen (FSI). Dazu gehört einerseits das Durch- und Umströmen komplexer *fester* Strukturen, wie bereits in Abbildung 1 beispielhaft dargestellt, als auch die Interaktion mit elastischen Strukturen, wobei sich in diesem Fall Fluid und Struktur auf äußerst komplizierte Art und Weise beeinflussen und miteinander nichtlinear gekoppelt sind und interagieren. Gerade bei pulsierenden Blutströmungen durch elastische Blut-

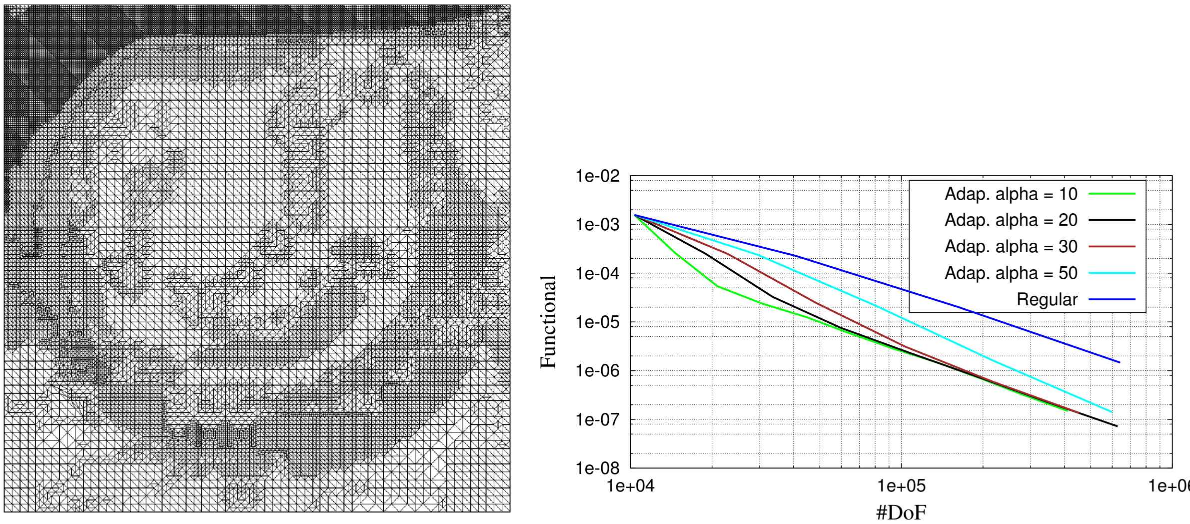

Abbildung 16: Netz für ein RT_1P_3P1 bei Re=1000 und 50% Verfeinerung (links) und Diagramm des Funktionalwerts gegenüber der Anzahl der Freiheitsgrade (#DoF) für verschiedene Verfeinerungsstufen α = x% der schlechtesten Elemente (rechts)

gefäße, die bei der Vorhersage bzw. Vermeidung von Stenosen und Aneurysmen und ihrer Behandlung mit Stents (siehe Abbildung 17) von zentraler Bedeutung sind, ist der Einsatz der beschriebenen Least-Squares Finite-Element Techniken für Fluid und Struktur ein sehr erfolgsversprechender Ansatz, insbesondere wenn die komplexen rheologischen Eigenschaften von Blut, das in der Regel mittels scherratenabhängiger Viskosität beschrieben wird, berücksichtigt werden müssen.

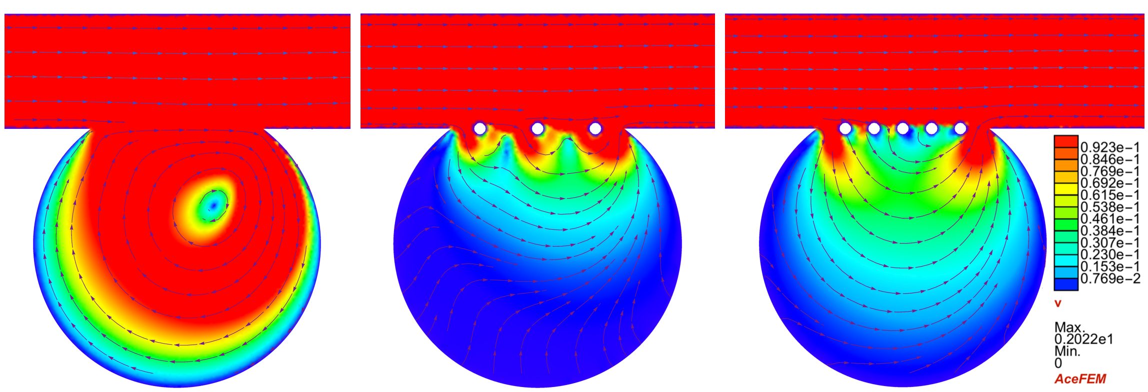

Abbildung 17: Systematische Darstellung eines durchflossenen Aneurysma ohne (links) und mit (Mitte und rechts) Stenteinfluss

Ebenso sind Nicht-Newtonsche Fluide immer wieder Bestandteil komplexer Produktionsschritte in der Herstellungstechnik, insbesondere bei den in der Einleitung genannten Extrusionsprozessen mit Ein- und Doppelschrauberextrudern. Im Rahmen von effizienten Produktionsketten ist das Wissen um das Fluidverhalten in der Auslegung solcher Produktionsschritte unerlässlich. Gleichermaßen ist die verbesserte Kontrolle von Fertigungsprozessen möglich, wenn das physikalische Verhalten des Fluids und seine Interaktion mit umgebenden Festkörpern charakterisiert werden kann. Die Anwendungen in den beschriebenen Produktionsketten stellen hohe Ansprüche an die Leistungsfähigkeit des mechanischen Modells und der numerischen Lösung der Problemstellung. Ein Beispiel für Doppelschraubenextruder, deren Optimierung bezüglich Geometrie und Energieeintrag gerade für Produkte mit gezieltem spezifischen Materialverhalten von großer Bedeutung ist, ist in den nachfolgenden Abbildungen 18-20 dargestellt.

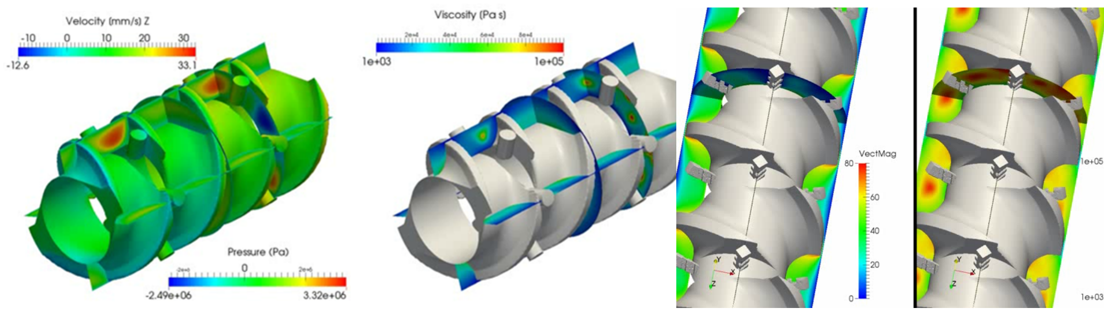

Abbildung 18: Beispiele für Simulationen für Einschraubenextruder

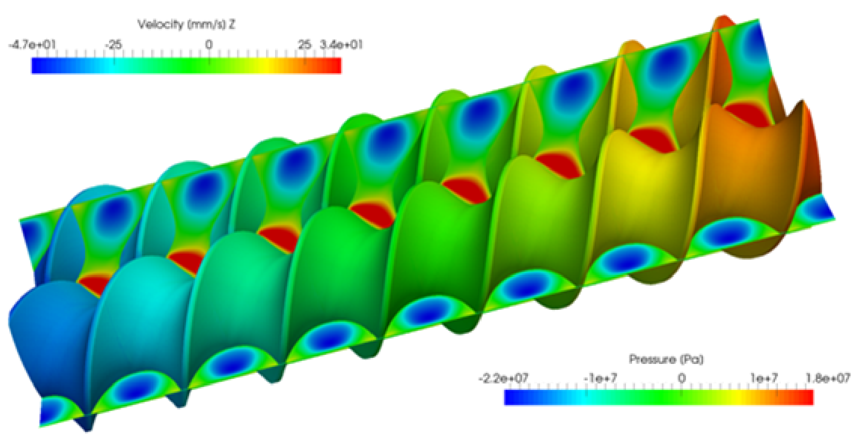

Abbildung 19: Beispiel für die Simulation eines Doppelschraubenextruders

Neben komplexen Nicht-Newtonschen Fluiden und FSI-Simulationen sind außerdem Probleme mit sehr geringer Viskosität und folglich großen Reynolds-Zahlen zu lösen. Dies erfordert die Beschreibung von Instationarität beziehungsweise Turbulenz. Mögliche Anwendungsfelder sind die Konstruktion und Auslegung von Turbinenanlagen oder die aerodynamische Optimierung in der Automobilindustrie und der Luft- und Raumfahrttechnik. Im Rahmen der Least-Squares Methode und effizienter, kompatibler Löser sind dies zu beschreitende Wege der zukünftigen Forschung.

Ein besonderer Dank gilt der MERCUR Stiftung für die finanziellen Förderung im Rahmen des MERCUR-Projekts Pr-2011-0017, sowie der Unterstützung durch Serdar Serdas und Carina Nisters in diesem Beitrag.

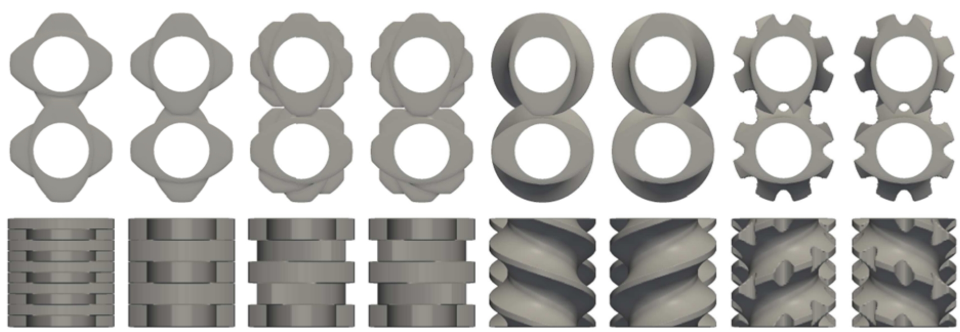

Abbildung 20: Einzelne Geometriekomponenten für unterschiedliche Extrudertypen

Literatur

B.C. Bell and K.S. Surana. p-Version Least Squares Finite Element Formulation for two-dimensional, incompressible, non-newtonian isothermal and non-isothermal fluid flow. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 18:127–162, 1994.

D. Doraiswamy. The Origins of Rheology: A Short Historical Excursion. *The Society of Rheology (Hrsg.): Rheology Bulletin*, Band 71, Nr. 2:2, 2002.

M. Nickaeen, A. Ouazzi, and S. Turek. Newton multigrid least–squares FEM for the V–V–P formulation of the Navier–Stokes equations. *J. Comput. Phys.*, 256:416–427, 2014.

G.S. Payette and J.N. Reddy. On the roles of minimization and linearization in least-squares finite element models of nonlinear boundary-value problem. *Journal of Computational Physics*, 230:3265–3613, 2011.

A. Schwarz, M. Nickaeen, S. Serdas, C. Nisters, A. Ouazzi, J. Schröder, and S. Turek. A Comparative Study of Mixed Least Squares FEMs for the Incompressible Navier-Stokes Equations. *International journal of computational science and engineering*, 2016.

S. Turek and M. Schäfer. Benchmark computations of laminar flow around cylinder. In E.H. Hirschel, editor, *Flow Simulation with High-Performance Computers II*, volume 52 of *Notes on Numerical Fluid Mechanics*, pages 547–566. Vieweg, 1996.