

STRÖMUNGSMECHANIK

Entwicklung der Strömungsmechanik

MIT DEN NEUEN LEISTUNGSFÄHIGEN HÖCHSTLEISTUNGSRECHNERN KÖNNEN KOMPLEXE STRÖMUNGSPROBLEME MITHILFE VON SIMULATIONEN ERFORSCHT WERDEN.

VON FRANZ DURST UND SIEGFRIED WAGNER

Abb. 1: Stromlinien und Druckverteilung in einem Schnitt durch den Zug; oben: ohne Windschutzzaun, unten: mit Windschutzzaun.

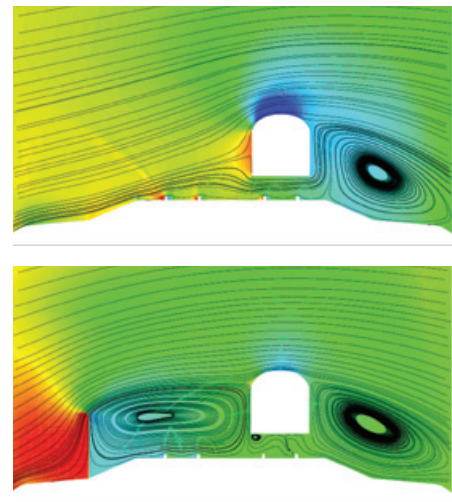
Entwicklungen numerischer Methoden, verbunden mit beachtlichen Steigerungen der Rechnerleistungen, führten in der zweiten Hälfte des 20. Jahrhunderts zu den heute vorliegenden Möglichkeiten, Strömungsprobleme auf Computern zu lösen. Dazu werden die zeitgemittelten Navier-Stokes-Gleichungen, die sogenannten Reynoldsschen Gleichungen, gelöst, in Verbindung mit Turbulenzmodellen, z.B. dem k-ε-Modell. Dieser Satz von Gleichungen ist untenstehend zusammenfassend dargestellt. Mit diesem Satz von Differentialgleichungen lassen sich Strömungsprobleme in vielen Bereichen des Ingenieurwesens, der Naturwissenschaften und der Medizin bzw. Medizintechnik

numerisch lösen. Einige Beispiele solcher Lösungen werden in diesem Beitrag erörtert.

Aerodynamik schienengebundener Fahrzeuge

Die Tendenz, die Reisegeschwindigkeit moderner Züge ständig zu erhöhen, erklärt die heutige Bedeutung der Aerodynamik in diesem Bereich der Technik. Bei Untersuchungen spielt nicht nur der Strömungswiderstand eine zentrale Rolle. Vor allem bedrohen auftretende Seitenwinde und Böen die Sicherheit des Zugverkehrs, da sie zu sehr hohen Seitenkräften und Rollmomenten führen können, so dass der Zug den Kontakt zur Schiene verlieren kann. Windkanal- und Felduntersuchungen sind die traditionellen Zugänge, um die aerodynamischen Eigenschaften von Zügen zu bewerten. Diese sind teuer und zeitaufwändig. Numerische Strömungssimulationen haben sich zu einer kostengünstigen Alternative entwickelt. Detaillierte Untersuchungen unterschiedlicher Einflussfaktoren und Parametervariationen können damit schnell und einfach durchgeführt werden.

Im Rahmen des europäischen Projekts TRANSAERO wurden Berechnungen der turbulenten Umströmung von Hochgeschwindigkeitszügen durchgeführt. Im Mittelpunkt der Arbeiten standen Untersuchungen zur Seitenwindempfindlichkeit der Fahrzeuge, die für die Sicherheit des Zugverkehrs



von großer Bedeutung ist. Ziel der Berechnungen war die Bestimmung der bei Seitenwindbedingungen am Zug angreifenden Kräfte und Momente, um daraus Aussagen über sichere Betriebsbedingungen ableiten zu können. Ferner wurde die Wirkungsweise und Effektivität von Windschutzzäunen zur aktiven Beeinflussung der Seitenwindempfindlichkeit untersucht.

Die Arbeiten basierten auf einer sehr detaillierten Zugeometrie inklusive Drehgestell und Schienen. Der Zug fuhr dabei auf einem Bahndamm in der atmosphärischen Grenzschicht. Ferner wurde in einer der Simulationen ein Windschutzzaun berücksichtigt und die Auswirkungen auf das Strömungsfeld und die auf den Zug wirkenden Kräfte und Momente bestimmt. Diese wurden mit den Messdaten aus dem Windkanal (University of Notting-

Reynoldssche Gleichungen:

$$\text{Kontinuitätsgleichung } (\rho = \text{const}): \quad \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_i} = 0$$

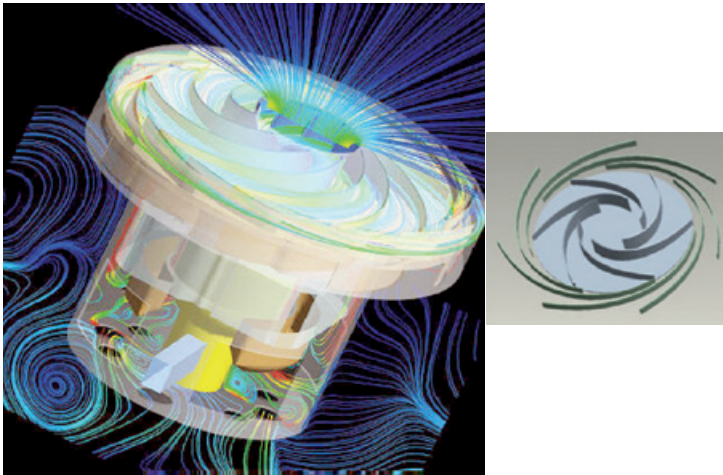
$$\text{Impulsgleichungen: } \rho \left[\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} \right] = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} \right) - \rho \bar{u}'_j \bar{u}'_i + \rho g_i$$

k-ε-Turbulenzmodell:

$$\text{Turb. Impulstransport } \rho \bar{u}'_j \bar{u}'_i = -\mu_t \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \delta_{ij} k; \quad \mu_t = c_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$$

$$\text{k-Gleichung: } \rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho U_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \tau_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \rho c \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \mu_t / \sigma_k) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right]$$

$$\text{ε-Gleichung } \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho U_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \tau_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \mu_t / \sigma_\varepsilon) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right]$$



ham) bzw. den Messungen auf der Teststrecke (DB AG) verglichen. Vor allem mit den Windkanal-Daten ergab sich bei den wichtigen Seitenkräften bzw. Rollmomenten eine zufrieden stellende bereinstimmung. Abb. 1 deutet die gewählte Zuggeometrie und deren Erfassung mit einem numerischen Gitter und die erhaltenen Berechnungsergebnisse an (oben). In der unteren Abbildung wird die Wirkungsweise von Windzäunen auf die Seitenkräfte des Zuges deutlich.

Strömungen in Gebläsen

Mit Hilfe numerischer Berechnungsverfahren lässt sich eine Strategie entwickeln, die eine gezielte Optimierung von Strömungsmaschinen ermöglicht, wie z.B. von Radialrädern, Ventilatoren und Gebläsen. Mittels dieser Strategie ist es möglich, hydraulische Kennwerte von Strömungsmaschinen zu optimieren: Volumenstrom, Druck bzw. Wirkungsgrad. Aeroakustische Aspekte, wie z.B. der Gesamtschalldruckpegel, das Frequenzspektrum und der Einfluss der tonalen Komponenten auf den psychoakustischen Eindruck des Geräusches, können in der Auslegungsphase mit berücksichtigt werden.

Strömungsmaschinen werden heute nach Strategien ausgelegt, die sich an eindimensionalen Strömungsgleichungen orientieren und einfache Energiebetrachtungen umfassen. Die einzelnen Teile einer Strömungsmaschine, z.B. Lauf-

rad, Diffuser, Rückführschaufeln, etc., werden sequentiell ausgelegt. Die heute möglichen Strategien zur Auslegung von Strömungsmaschinen umfassen kombinierte Auslegungen für Laufrad, Diffuser und Rückführschaufeln in einem Stück. Für die Schaufelausbildung kommt ein voll digitales Mean-Line-Design zur Anwendung. Die Schaufelformen werden nach Vorgabe des gewünschten Druckverlaufs im Schaufelkanal mittels eines inversen Verfahrens berechnet. Dieses Verfahren ermöglicht Schaufelformen, die zu einem optimierten Druckaufbau im Schaufelkanal und somit zu höchsten Wirkungsgraden führen. Nach dem Design, werden die selektierten Auslegungen mit einem kommerziellen CFD-Programm (*Computational Fluid Dynamics*, d.h. numerische Strömungsmechanik) nachgerechnet. In diesem Schritt werden die ausgelegten Geometrien validiert und Feinheiten aufgelöst. Nach der Validierung der Auslegung mittels CFD kann der Prototypenbau praktisch risikolos erfolgen. Am

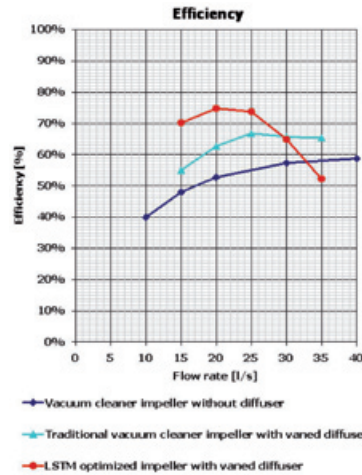
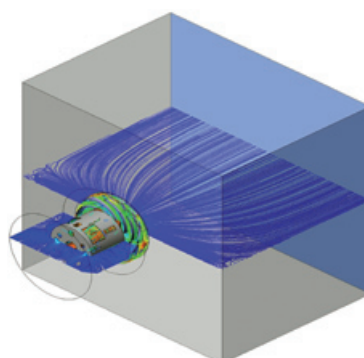


Abb. 2: Wirkungsgrad: dunkelblau: ohne Diffusor; hellblau: herkömmlicher Diffusor; rot: neue optimierte Laufrad-Diffusor-Kombination.

Lehrstuhl für Strömungsmechanik in Erlangen (LSTM) gibt es drei Prüfstände unterschiedlicher Größe, um die Kennlinien von Gebläsen, Laufrädern und anderen Strömungsmaschinen zu ermitteln. Die experimentelle Validierung der entwickelten Prototypen erfolgt auf einer dieser Einrichtungen.

Berechnungen mittels der LES-Methode

Simulationen turbulenter Strömungen auf der Basis der RANS-Gleichungen, kombiniert mit statistischen Turbulenzmodellen, liefert für viele einfache Strömungsprobleme sinnvolle und für den Ingenieur ausreichend genaue Ergebnisse. In nahezu allen kommerziellen Programmpaketen sind heutzutage derartige statistische Turbulenzmodelle implementiert. Dies darf allerdings nicht darüber hinwegtäuschen, dass selbst die aufwändigsten Turbulenzmodelle bei

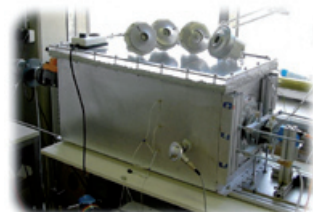
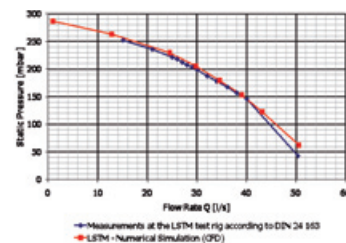


Abb. 3: Vergleich zwischen Strömungssimulation und Messungen.

vielen Strömungsproblemen versagen und keine im ingenieurmäßigen Sinn zufrieden stellende Vorhersage der Strömung liefern. Dies ist insbesondere der Fall, wenn in der Strömung komplexe Strömungsphänomene wie Ablösung, Transition oder großskalige Wirbelstrukturen vorhanden sind. Derartige Strömungen lassen sich bei niedrigen Reynolds-Zahlen bekannterweise hervorragend mittels direkter numerischer Simulation (DNS) berechnen. Für höhere Reynolds-Zahlen hat sich in den vergangenen Jahren verstärkt die Large-Eddy Simulationstechnik (LES) durchgesetzt. Bei der LES werden die großen, energietragenden Wirbel (Grobstruktur) durch das numerische Verfahren direkt aufgelöst, während die kleinen, energiearmen Wirbel (turbulente Feinstruktur) sich nicht auflösen lassen und folglich ihr Einfluss auf die Grobstruktur mo-

Spektrum der Energiekaskade abdecken müssen. Diese theoretischen Überlegungen spiegeln sich auch in der Praxis wider.

Beispiel für die LES-Methode

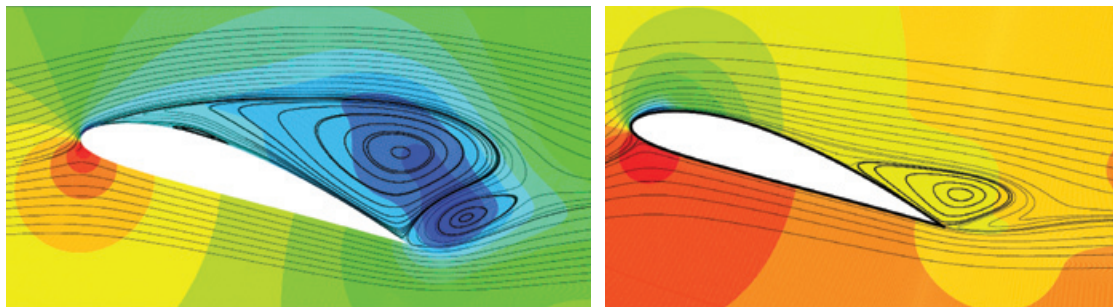
Durch die Entwicklung moderner numerischer Verfahren, die Formulierung geeigneter Feinstrukturmodelle sowie nicht zuletzt durch die effiziente Implementierung der Algorithmen auf Höchstleistungsrechnern ist man heute in der Lage, mit Hilfe der LES komplexe turbulente Strömungen detailliert zu berechnen. Derartige Simulationen stellen auch einen hervorragenden Ausgangspunkt dar, um strömungsphysikalische Vorgänge zu untersuchen und auf diese Weise zu einem besseren Verständnis turbulenter Strömungsphänomene beizutragen. Gegenstand der hier vorgestellten Berechnungen ist die Umströmung

auf der Flügeloberseite. Wie Abb. 4 auch zeigt, bildet sich bei der Reynoldszahl 100.000 infolge des laminar-turbulenten Umschlags, nahe der Oberfläche, eine laminare Ablöseblase am Profil aus. Die Strömung bleibt dadurch länger am Flügel anliegen und es kommt zu einer Hinterkantenablösung mit entsprechend kleinerem Ablösegebiet. Diese Beobachtungen sind in guter Übereinstimmung mit den entsprechenden Experimenten. Die Simulationen liefern jedoch das vollständige, vierdimensionale Strömungsfeld, was sehr umfangreiche Studien der strömungsmechanischen Vorgänge zulässt.

Simulation der Strömung gesamter Hubschrauber

Die Fähigkeit des Hubschraubers zum Schwebeflug, zum Senkrechstart und zur senkrechten Landung

Abb. 4:
Stromlinien des zeitlich gemittelten Strömungsfeldes um einen Tragflügel mit Anstellwinkel 18 Grad; $Re = 20.000$ (links), $Re = 100.000$ (rechten).



delliert werden muss. Der Vorteil der LES gegenüber statistischen Modellen liegt somit auf der Hand; lediglich die kleinen Wirbelstrukturen, die numerisch nicht mehr aufgelöst werden können, müssen modelliert werden. Die großen Wirbelstrukturen dagegen, die i. A. sehr stark von der Geometrie und den Randbedingungen des jeweiligen Strömungsproblems abhängen, werden durch Lösen der vollständigen Erhaltungsgleichungen direkt berechnet. Folglich können die Modelle zur Beschreibung der turbulenten Feinstruktur wesentlich einfacher sein als statistische Turbulenzmodelle, die das gesamte

eines auf einem NACA-4415 Profil basierenden ungepfeilten Tragflügels, der in einem Wind- bzw. Wasserkanal montiert ist.

Abb. 4 zeigt Stromlinien des zeitlich gemittelten Strömungsfeldes für die Reynoldszahlen 20.000 und 100.000 bei einem Anstellwinkel von 18°. Daraus wird die unterschiedliche Strömungsstruktur der beiden Fälle ersichtlich. Bei der niedrigen Reynolds-Zahl löst die von der Viskosität beeinflusste Schicht an der Profilnase ab und es ergibt sich eine so genannte Vorderkantenablösung mit ausgeprägtem Rezirkulationsgebiet

verschafft ihm einen einzigartigen Platz im Transportsystem, z.B. durch seine herausragende Rolle bei Rettungseinsätzen, Polizeieinsätzen, Überwachungsaufgaben und beim Transport von Gütern in schwer zugängliche Gebiete. Allerdings ist der Hubschrauber nach wie vor ein kostspieliges Gerät mit hohen Wartungskosten, niedriger Kraftstoffeffizienz, mäßigem Flugkomfort, bemerkenswerter Lärmerzeugung und Luftverschmutzung. Diese Nachteile rühren von der Komplexität der Strömung um den Hubschrauber her, die in Abb. 5 dargestellt ist, und nachdrücklich verbessert werden muss.

Unter Ausnutzung der hochentwickelten computergestützten Strömungsmechanik (CFD) spielen Simulationen der Aerodynamik, Aeroakustik und der Koppelfekte zwischen Aerodynamik und Dynamik des Rotorblattes bereits heute eine zentrale Rolle in der europäischen Hubschrauberindustrie, müssen jedoch im Entwurfsprozess aus Wettbewerbsgründen noch gesteigert werden.

Große Fortschritte wurden bislang schon durch Simulationen höchster Güte von gekoppelten Wechselwirkungen an Hubschrauberkomponenten, wie isolierten Haupt- und Heckrotoren, mittels derzeitiger Höchstleistungsrechner erzielt. Abb. 6 zeigt beispielhaft die Gegenüberstellung von zwei Rotornachläufen, wie sie zum einen bisher aus Gründen der Rechnerkapazität durchgeführt werden mussten, nämlich mit einer vergleichsweise noch starren Nachlaufgeometrie (linke Bildseite), und zum anderen einer realistischen Nachlaufgeometrie (rechte Bildseite), wie sie mit heutigen Rechnern simulierbar ist. Die genaue Beschreibung der Nachlaufgeometrie ist deshalb so wichtig, weil der genaue Abstand zwischen Blattspitzenwirbel und Rotorblatt entscheidend für die Wechselwirkung zwischen Wirbel und Rotorblatt (BVI, Blade-Vortex-Interaction) und somit für die Lärmentwicklung und das Vibrationsniveau des Hubschraubers ist. Um numerisch bedingte Dissipation des Blattspitzenwirbels zu vermeiden und seine volle Wirkung auf die Umströmung des Rotorblattes erfassen zu können, muss der Wirbel über mehrere Umdrehungen des Rotors verfolgt und fein aufgelöst erhalten werden. Abb. 7 zeigt, wie diese Forderungen durch ein wirbelangepasstes Gitter innerhalb eines verwölbten Nachlaufs durch Anwendung der so genannten Chimera-Technik verwirklicht werden können.

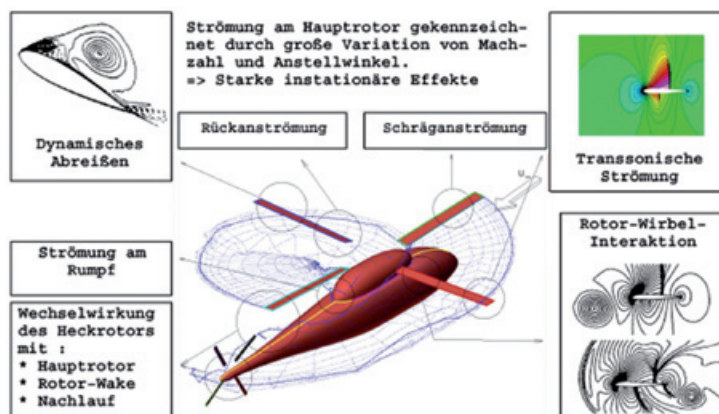


Abb. 5: Strömungsprobleme am Hubschrauber.

Das Ziel ist jedoch die Simulation der Vorgänge am gesamten Hubschrauber. Hierzu sind Höchstleistungsrechner mit noch größerer Leistung und Speicherkapazität erforderlich. Das Hauptproblem im Entwurfsprozess ist die nicht einfach zu vollziehende Skalierung vom Rotor- oder Hubschraubermodell zur Großausführung. Eine genaue Simulation eines isolierten Rotors auf einem Supercomputer

periodischer Zustand erreicht ist. Zur Trimmung des Rotors sind weitere 5 Umdrehungen zu simulieren. Diese Simulation kostet bereits rund 30.000 CPU-Stunden.

Die zusätzliche Berücksichtigung des Rumpfes und des Heckrotors sowie aller gegenseitigen Wechselwirkungen lassen den Rechenzeitbedarf leicht auf 150.000 CPU-Stunden steigen. Die Einbeziehung

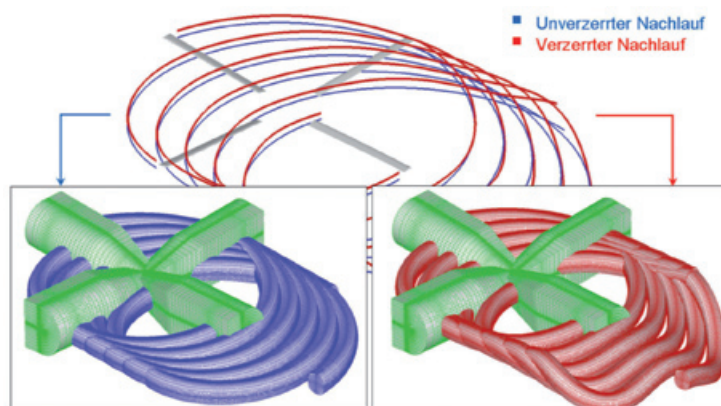


Abb. 6: Unverzerrte und verzerrte Nachlaufgeometrie.

heutiger Leistungsklasse, erfordert ungefähr 20 Millionen Gitterpunkte pro Rotor, 7.200 Zeitschritte für jede Umdrehung des Rotors und rund 5 Rotorumdrehungen, bis ein

von Regelungselementen und Steuereingaben des Piloten wird die Anforderung an die computergestützte Simulation um einen weiteren Betrag steigern. Die

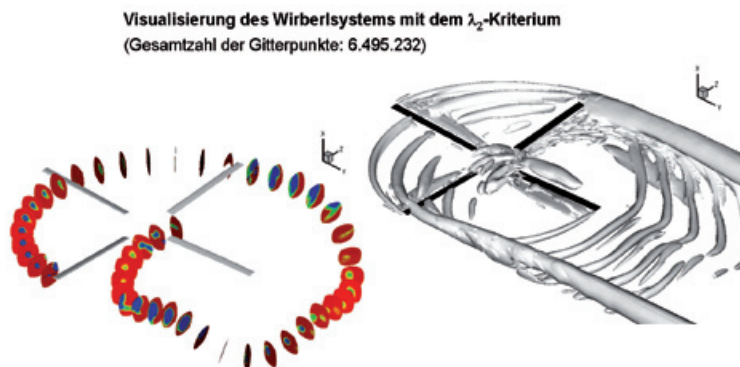


Abb. 7: Genaue Erfassung des Blattspitzenwirbels auf Basis verzerrter Gitter.

Abb. 8: Herstellung von Silizium-Einkristallen nach dem Czochralski-Verfahren. Links: fertiger Einkristall, Durchmesser 200 mm (Wacker Siltronic AG). Rechts: schematische Darstellung des Züchtungsprozesses.

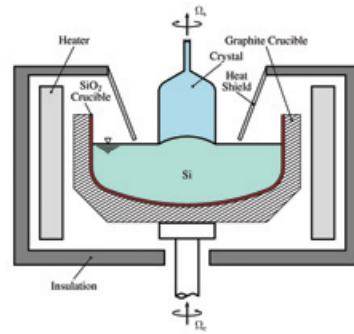


Simulation von Flugmanövern wird schließlich zu einem inhärent multidisziplinären Problem mit Beiträgen aus verschiedenen Fachgebieten führen und so ein herausforderndes Projekt darstellen, wo verschiedene Lösungsalgorithmen und Modellierungstechniken in einer einzigen parallelen Umgebung zusammenwirken müssen. Dies erfordert eine Leistung des Computers in der Größenordnung von Petaflops/s.

Silizium-Kristallzüchtung

Für die Herstellung integrierter Schaltkreise und optoelektronischer Bauelemente werden in der Elektronikindustrie große Mengen monokristallinen Siliziums hoher Qualität benötigt. Ein wichtiges Verfahren zur Produktion von Silizium-Einkristallen im industriellen Maßstab ist das Czochralski-Verfahren, nach dem mehr als 90 % der Siliziumkristalle für elektronische Bauelemente hergestellt werden. Bei diesem Verfahren wird ein Monokristall mit Hilfe eines Impfkristalls durch Ziehen aus einer Siliziumschmelze gewonnen. Eine schematische Darstellung dieses Kristallzüchtungsprozesses zeigt Abb. 8.

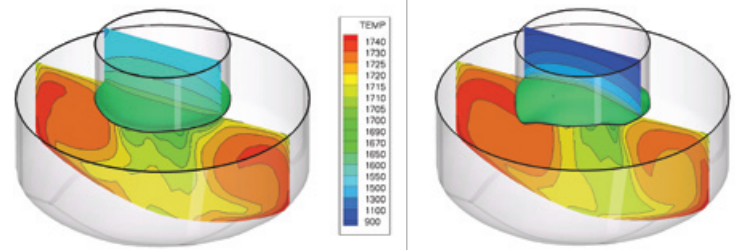
Abb. 9: Berechnetes Temperaturfeld ohne (links) und mit Kühlung des Kristalls (rechts).



ist jedoch, dass es mit wachsender Kristallgröße zunehmend schwieriger geworden ist, die hohen Qualitätsanforderungen zu erfüllen, die für die Herstellung elektronischer Bauelemente gestellt werden. Die Qualität der produzierten Einkristalle wird wesentlich vom Wärme- und Stofftransport in der Schmelze beeinflusst. Hohe Reinheit und Homogenität der Kristalle sind dabei für die Elektronikindustrie von besonderer Bedeutung. Verunreinigungen mit Sauerstoff sind in der Regel nicht zu vermeiden, da der Schmelztiegel meist aus Quarzglas besteht, das bei hohen Temperaturen Sauerstoff an die Schmelze abgibt. Aus diesen Grün-

in der Schmelze ist entscheidend für die Sicherung und Verbesserung der Kristallqualität. Da Messungen des Strömungsfeldes in der Schmelze extrem schwierig und kostspielig sind, spielen Simulationsmethoden dabei heute eine unverzichtbare Rolle. Aufwändige Berechnungen mittels quasi-direkter numerischer Simulationen (QDNS) oder LES, die aufgrund ihrer hohen Anforderungen an die rechnerischen Ressourcen auf Hochleistungsrechnern durchgeführt werden müssen, liefern detaillierte Informationen über das instationäre Strömungsfeld in der Schmelze.

Abb. 9 zeigt beispielhaft das Temperaturfeld in zwei unterschiedlichen Schmelztiegelkonfigurationen. Bei der rechten Konfiguration wurde der Kristall zusätzlich gekühlt, so dass die Phasengrenze nach oben

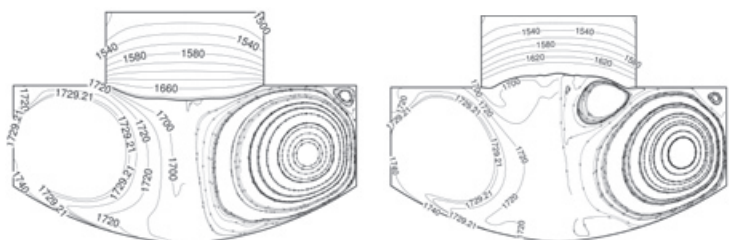


den ist es notwendig, möglichst homogene Strömungsverhältnisse in der Schmelze herzustellen. Dazu werden Kristall und Schmelztiegel in der Regel in Rotation versetzt, da dies ausgleichend auf Schwankungen im Strömungsfeld wirkt. Zusätzlich wird die Schmelze oft auch magnetischen Feldern ausgesetzt, die eine Dämpfung der Temperaturfluktuationen bewirken. Ein tieferes Verständnis der komplexen strömungsmechanischen Vorgänge

gewölbt ist. In Abb. 10 ist das Strömungsfeld für zwei weitere Konfigurationen dargestellt. Im rechten Bild ist die Rotationsrate des Einkristalls erhöht, was ebenfalls zu einer Wölbung der Phasengrenze nach oben führt. Solche Parameterstudien können dazu dienen, Hinweise für eine Optimierung von Form und Lage der Phasengrenze zu geben und damit die Kristallqualität positiv zu beeinflussen.

Abb. 10: Auswirkungen einer erhöhten Kristallrotation (rechts) auf das Strömungsfeld (Stromlinien und Temperaturisolinien).

Aufgrund der Nachfrage der Elektronikindustrie nach immer größeren Silizium-Wafern hat auch die Größe der produzierten Einkristalle in den letzten Jahrzehnten stetig zugenommen. Kristalldurchmesser von bis zu 400 mm sind heute technisch realisierbar. Ein wesentlicher Nachteil dieser Entwicklung



Beispiele von Strömungsberechnungen mittels LBM

Seit wenigen Jahren nehmen Anzahl und Umfang der Anwendungen von Lattice-Boltzmann-Verfahren (LBM) zur detaillierten numerischen Simulation von komplexen Strömungen schnell zu. Das LBM ist zum Mittel der Wahl in vielen Bereichen geworden ist. Einerseits ermöglichen Sie eine beeindruckende Beschleunigung und gleichzeitige Vereinfachung der zur Simulation herangezogenen Computerprogramme. Andererseits stellen sie, sowohl aus theoretischer als auch aus praktischer Sicht eine natürliche und gleichzeitig effiziente Art dar, komplexe physikalische Phänomene, insbesondere auch bei Auftreten von physikalischen Problemen mit breitem Skalenspektrum, wie sie die Strömungsmechanik darstellt, zu modellieren und numerisch zu simulieren.

Das Lattice-Boltzmann-Verfahren

Historisch sind die LBM als Erweiterung und Verbesserung der sogenannten Lattice-Gas-Automata entstanden. Theoretisch sind sie vor allem als Diskretisierungen von kinetischen Gleichungen zu betrachten. Solche Gleichungen liegen allen kinetischen Theorien zugrunde, die den Übergang zwischen der mikroskopischen Dynamik auf Partikelebene und der makroskopischen Dynamik von flüssigen, elastischen, partikelbeladenen und anderen Arten von Medien ermöglichen, die sich als Kontinuum behandeln lassen. Kinetische Theorien unterscheiden sich im Wesentlichen durch ihre Vorschriften für den Stoßterm, der die Wechselwirkung im Medium beschreibt. Bei den meisten LBM liegt der so genannte BGK-Ansatz zugrunde, eine maximal vereinfachte Stoßterm-Formulierung.

$$\frac{f_a(t + \Delta t, x + \xi_a \Delta t) - f_a(t, x)}{\Delta t} = -\frac{(f_a - f_a^{eq})(t, x)}{\tau(t, x)}$$

Die Relaxationszeit τ bestimmt hier in strömungsmechanischen Berechnungen die effektive Viskosität μ der mit zweiter Ordnung in Zeit und Raum approximierten Navier-Stokesschen dynamischen Gleichungen:

$$\mu = \rho c_s^2 (\tau - \Delta t / 2)$$

Für Berechnungen muss noch die Gleichgewichtsverteilung vorgeschrieben werden. Üblicherweise ist dies eine optimale Taylor-Reihen-Approximation des klassischen Maxwellischen Ansatzes, z. B. bei isothermalen LBK

$$f_a^{eq} = w_a \left(1 + \frac{p}{c_s^2} + \frac{v \cdot \xi_a}{c_s} + \frac{1}{2} \frac{v \cdot \xi_a}{c_s} \left(\frac{\xi_a \otimes \xi_a}{c_s^2} - I \right) \cdot \frac{v}{c_s} \right)$$

Da die interne Energie nicht herangezogen wird, ist das Gleichgewicht für die Strömungsbedingungen nur vom Druck

$$p = c_s^2 \sum_a f_a = c_s^2 \sum_a f_a^{eq}$$

und von der Geschwindigkeit

$$v = \sum_a \xi_a f_a = \sum_a \xi_a f_a^{eq}$$

abhängig. Die Entwicklung der Lattice-Boltzmann-Verfahren hat nun zu einer Reihe von Lösern geführt, die als Lattice-Boltzmann-Schemata in der Literatur beschrieben sind. Bei den am LSTM-Erlangen untersuchten Anwendungen hat sich das 3-D Schema mit 19 Freiheitsgraden pro Punkt ($-9 \leq i \leq 9$) als optimal erwiesen. In den parallelierten Codes am LSTM-Erlangen sind aber alle bekannte Schemata implementiert und teilweise benutzt worden.

Durchströmung einer Kugelschüttung

Die erste Standardanwendung von LBM ist die Berechnung detaillierter Strömungsverhältnisse in porösen Medien. Dabei stammt die Komplexität der Strömung direkt aus der geometrischen Komplexität des Strömungsgebietes, während die Geschwindigkeiten sehr niedrig bleiben. Monodisperse Kugelschüt-

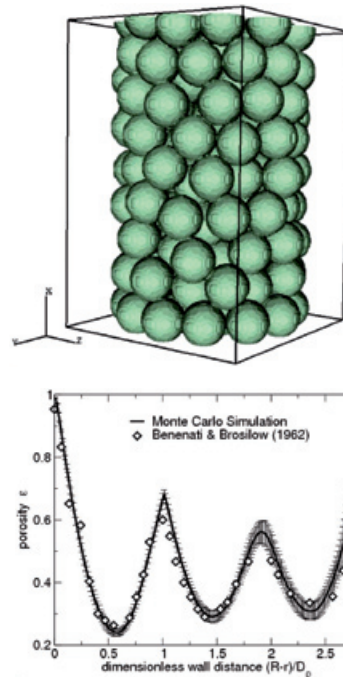


Abb. 11: Numerisch erzeugte Kugelschüttung als Basis für detaillierte Strömungsberechnungen mit LBM-Verfahren.

tungen sind ein einfaches Beispiel. Der wichtigste kontrollierbare Parameter ist der Kugeldurchmesser bzw. sein Verhältnis zum Reaktordurchmesser. Die Porosität kann gut mit Rechenalgorithmen nachgebildet werden. Das Ergebnis und ein Vergleich mit experimentellen Daten bei selbem Verhältnis der Durchmesser ist in Abb. 11 zu sehen.

Entsprechende Ergebnisse der LBM-Simulation sind in Abb. 12 dargestellt. Von Hauptinteresse bei Reaktoren ist der Verlauf der Konzentrationen von bestimmten, in chemische Reaktionen einbezogenen Komponenten. Die über den Querschnitt des zylindrischen Reaktors gemittelten Verläufe für die einfachste Reaktion, $A+B \rightarrow C$, sind vom untersten Bild abzulesen. Das zweite Bild zeigt die detail-

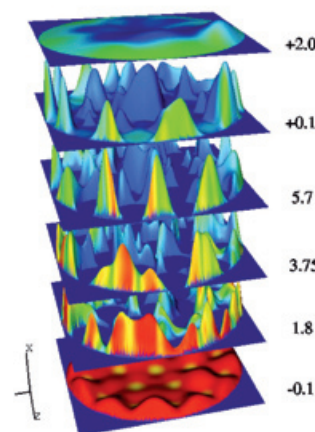


Abb. 12: Räumlicher Verlauf einer „A+B ->C“ Reaktion in Kugelschüttungs-Mini-reaktor mit Kugel : Rohr Durchmesser-verhältniss von 3: querschnittgemittelte Konzentration (links), räumliche Konzentrationsverteilung (rechts, rot: hohe Konzentration von „A“).

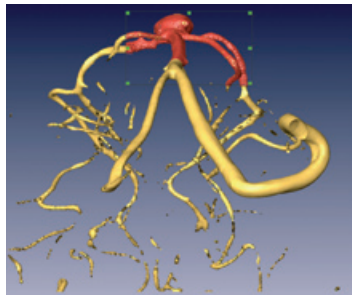
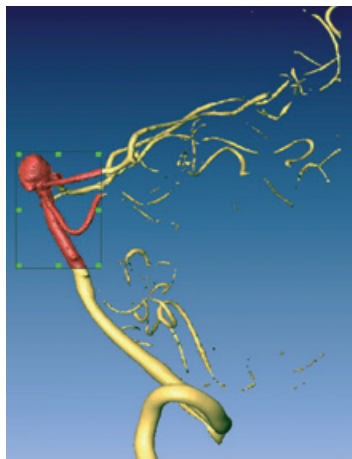


Abb. 13: Segmentierung einer CT-Angiographie von Gehirnarterien im Circle of Willis bei einem Patienten mit terminalem Aneurysma; das Rechengebiet für die Simulation ist in rot.



lierte räumliche Verteilung der Konzentration des Edukts. Der an der Berandung des Porenreaktors ersichtliche Randeffect ist deutlich zu sehen. Entsprechende Ergebnisse der LBM-Simulation sind in Abb. 12 dargestellt. Von Hauptinteresse bei Reaktoren ist der Verlauf der Konzentrationen von Reagenten.

Abb. 14: Die über den Querschnitt des zylindrischen Reaktors gemittelten Verläufe für die einfachste Reaktion, $A+B \rightarrow C$, sind vom untersten Bild abzulesen. Das zweite Bild zeigt die detaillierte räumliche Verteilung der Konzentration des Edukts. Der wichtige ungünstige Randeffect ist deutlich zu sehen.

Strömungen in Blutgefäßen mit Aneurysmen

Ein weiteres Anwendungsgebiet von LBM-Strömungsberechnungen mit großer Bedeutung ist die

simulationsgestützte Analyse der Hämodynamik in gefährdeten Blutgefäßen. Als Beispiel zeigt Abb. 13 eine Gehirnarterien-Verzweigung (in rot) eines Patienten mit Aneurysma (ballonförmiger Erweiterung, auch in rot).

Aneurysmen im Gehirn, an der Aorta und an anderen großen Blutgefäßen sind Abweichungen vom Normalzustand. Sie treten auf, weil das Wandmaterial der Blutgefäße geschwächt und mechanisch belastet wird. Deswegen werden mit hoher Wahrscheinlichkeit Aneurysmen platzen und können dann unheilbare Gesundheitsschäden und den Tod verursachen. Genauere Untersuchung der Ursachen der Gefahr, die von einem Aneurysma ausgeht und Voraussage der Wahrscheinlichkeit bedrohlicher Weiterentwicklungen sind von großer Bedeutung und müssen individuell, möglichst genau und quantitativ, dennoch aber bei einer großen Anzahl von Fällen durchgeführt werden.

Es wird seit zehn Jahren in vielen Gruppen durch Zusammenarbeit von Ärzten und Ingenieuren weltweit versucht, wenigstens die technischen Voraussetzungen für derartige Studien zu schaffen. Ein immer größerer Teil der Gruppen benutzt kommerzielle Software, auch für die Strömungssimulation. So hat sich der Gesamtzeitaufwand pro Simulation von zwei Arbeitswochen bis auf wenige Arbeitstage verringert. Erst mit der Anwendung von LBM auf Hochleistungsrechnern konnten die Zeiten bis auf 1–2 Stunden verringert werden.

Ein kritischer Schritt im Workflow ist die sogenannte Segmentierung der Tomographiedaten, d. h. die Festlegung des genauen Verlaufs der Gefäßlumina. Stets werden die Erfahrung der Radiologen und die Modalitäten fortgeschrittener Software gefragt, um Uneindeutigkeiten und unzureichende Auflösung zu kompensieren. Ein am LSTM-Erlangen entwickeltes Programm übernimmt einen Teil der Segmentierungsaufgaben und die Anpassung der Rechengitter an die individuelle Gefäßgeometrie. Darauf wird die Blutstrom-Simulation automatisch durchgeführt, woraus eine Reihe von Momentaufnahmen (wie z. B. in Abb. 14 dargestellt) und gemittelten Charakteristiken entstehen. Davon ist die Wandbelastung der betroffenen Gefäßabschnitte am wichtigsten. Darüber hinaus können aus der Druckverteilung und den Scherspannungen (Abb. 14) wichtige Schlüsse bezüglich der von einem Aneurysma ausgehenden Gefahr gezogen werden. LBM haben den Vorteil, diese Größen auf jedem Rechengitterpunkt unabhängig berechnen zu können, was die Effizienz und Stabilität steigert.

Literatur

[1] Bell ET (1936) Men of Mathematics. Simon & Schuster, New York
 [2] Rouse H, Ince S (1980) History of Hydraulics. The University of Iowa, Inst. of Hydraulic Research, Ames
 [3] Sžabo I (1987) Geschichte der mechanischen Prinzipien und ihrer wichtigsten Anwendungen. Birkhäuser, Basel

Franz Durst ist Inhaber des Lehrstuhls für Strömungsmechanik an der Universität Erlangen-Nürnberg und o. Mitglied der Bayerischen Akademie der Wissenschaften, Siegfried Wagner ist Prof. i.R. für Aerodynamik und Gasdynamik an der Universität Stuttgart.

