

# Mitteilung

**Projektgruppe/Fachkreis:** Hyperschall / Numerische Verfahren

**Ansprechpartner:** Frank Stollmeier, Martin Grabe

**Institution:** DLR, Institut für Aerodynamik und Strömungstechnik

**Adresse:** Bunsenstr. 10; 37073 Göttingen

**Telefon:** 0551 709 2476

**e-mail:** frank.stollmeier@dlr.de

**Thema:** Rechengitter zur Teilchenverfolgung in DSMC-Strömungssimulationen

## Ausgangssituation:

Am DLR wird derzeit an der Entwicklung eines Direct-Simulation-Monte-Carlo (DSMC) - Programms für die Simulation verdünnter Gasströmungen in dreidimensionalen Geometrien gearbeitet. In der DSMC-Methode wird das Gas als eine große Anzahl von repräsentativen Teilchen aufgefasst, die sich durch das Rechengebiet bewegen, mit Rändern kollidieren können und untereinander stoßen.

Die Teilchenverfolgung durch das Strömungsgebiet hat aufgrund der großen Anzahl der zu simulierenden Partikel einen wesentlichen Anteil an der Gesamtrechnzeit der Simulation. Es erscheint daher lohnenswert, die Vielzahl der in der Literatur beschriebenen Verfahren zur Raumdiskretisierung auf ihre Eignung für die spezifischen Anforderungen von DSMC-Simulationen hin zu untersuchen.

## Ziel:

Neben der korrekten Verfolgung von Partikeln durch das Simulationsgebiet unter Beachtung geometrischer Ränder soll ein ideales Gitter auch gewährleisten, daß nur räumlich benachbarte Teilchen mögliche Kandidaten für eine intermolekulare Kollision sind.

Die in Entwicklung befindliche DSMC-Implementierung soll auch die Umströmung komplizierter Geometrien berechnen können, ein geeignetes Gitterkonzept darf daher keinen Einschränkungen in Bezug auf mögliche Wandformen unterliegen.

## Lösungsweg:

Aus der Analyse des Einflusses eines Rechengitters auf jedes der drei entkoppelten Kernelemente der DSMC-Methode (Teilchenbewegung inkl. Wandwechselwirkung, intermolekulare Kollisionen, Mittelwertbildung zur Bestimmung makroskopischer Strömungsgrößen) wird ein Satz Anforderungen erarbeitet, um verschiedene Gittertypen bewertet zu können.

Eine Klassifizierung derzeit gebräuchlicher und in der Literatur beschriebener Gittertypen soll eine methodische Bewertung unter Beachtung der zuvor erstellten Anforderungen ermöglichen.

Die größte Herausforderung für alle Varianten von Rechengittern ist die richtige (und schnelle) Detektion von Partikelkollisionen mit den Rändern des Strömungsfeldes im allgemeinen Fall. Da die Effizienz der Randerkennung maßgeblich die Rechenzeit des ganzen Verfahrens beeinflusst, werden für die geeignetsten Gittertypen Teilchenverfolgungsalgorithmen implementiert und auf Richtigkeit und Ausführungsgeschwindigkeit hin genauer untersucht.

## Ergebnis:

Aus der Analyse der DSMC-Methode ergibt sich eine Liste idealer Eigenschaften für Rechengitter: Die Zellen sollten konvex mit möglichst isotroper Ausdehnung sein; des

weiteren sollte es möglich sein, die Netzdichte des Rechengitters sowohl lokal als auch zeitlich möglichst kontinuierlich an veränderliche Strömungen anzupassen, um Gradienten im Strömungsfeld auflösen zu können. Es ist wünschenswert, daß jede Zelle mit ihren Nachbarn nur über ihre Seitenflächen, nicht über Ecken verbunden ist (keine indirekten Nachbarn).

Alle diese Eigenschaften werden sehr gut von einer räumlichen Zerlegung erfüllt, die seit langem unter dem Namen Voronoi-Diagramm bekannt ist [1]. Eine Voronoi-Zelle stellt in diesem Fall das größtmögliche Einflussgebiet eines Punktes (Zellkern) dar. Die Nutzung der zum Voronoi-Diagramm dualen Delaunay-Kanten ermöglicht eine schnelle Berechnung der Partikelbewegung von Zelle zu Zelle. Ein inkrementeller Konstruktionsalgorithmus [2] ermöglicht eine leichte Anpassung der lokalen Netzdichte. Werden darüber hinaus neue Zellkerne immer nur auf den gemeinsamen Punkt dreier benachbarter Zellen gelegt, entsteht ein wohlgestaltetes Gitter mit bestmöglich isotropen Zellen (Abb. 1). Mit besonderer Behandlung konvexer Randkurven bei der Erstellung eines Voronoi-Rechengitters zerstören auch kompliziertere Konturen die guten Eigenschaften der Voronoi-Zellen nicht (Abb. 2).

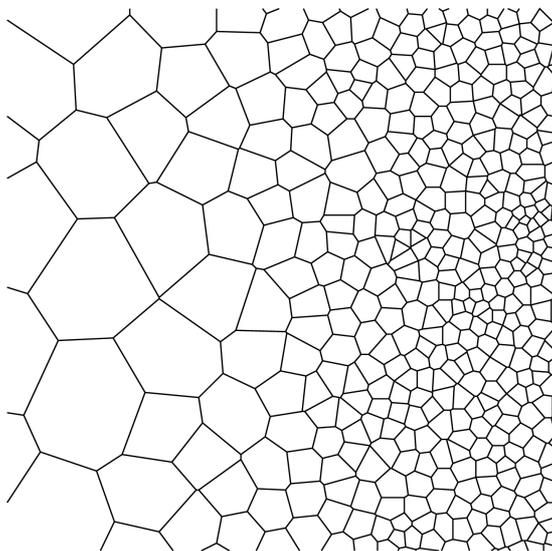


Abbildung 1: Beispiel für kontinuierlich verfeinertes Voronoi-Diagramm mit bestmöglich isotropen Zellen

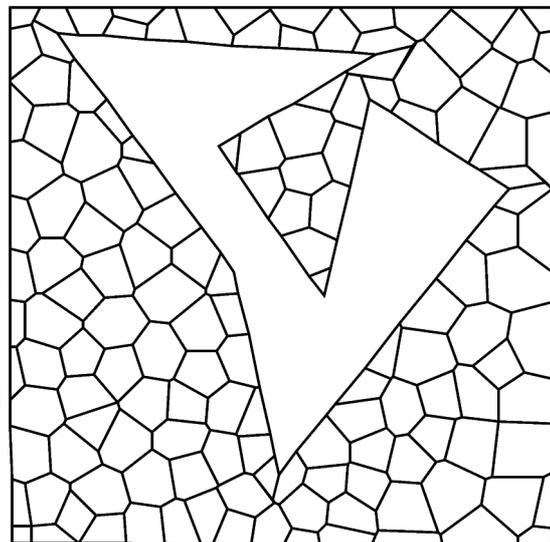


Abbildung 2: Voronoi-Gitter entstehen aus der Schnittmenge von Voronoi-Diagrammen und stückweise planaren Randkonturen

## Literatur:

[1] Okabe, A. ; Boot, B. ; Sugihara, K.: *Spatial Tessallations: Concepts and Applications of Voronoi Diagrams*. John Wiley and Sons Ltd., 1992

[2] Joe, B.: *Construction of three-dimensional Delaunay triangulations using local transformations*. In: Computer Aided Geometric Design 8 (1991)

[3] Cavalcanti, P.R. ; Mello, U.T.: *Three-dimensional constrained Delaunay-Triangulation: a minimalist approach*. In: Proceedings of the 8th International Meshing Roundtable, 1999, S. 119–129

## weiteres Vorgehen:

Die bisherigen Arbeiten wurden der Anschaulichkeit halber bisher in zwei Dimensionen durchgeführt. Die Algorithmen werden derzeit auf drei Dimensionen erweitert [3]. Voronoi-Diagramme eignen sich auf natürlich Weise für hierarchische Gitterstrukturen. Deren Einsatzmöglichkeit für DSMC wird weiter untersucht.