ENTROPIE-STABILES, ADAPTIVES DISCONTINUOUS-GALERKIN VERFAHREN HOHER ORDNUNG ZUR MODELLIERUNG VON SCHWAPPVORGÄNGEN

J. Markert*

* Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR), SC-HPC, Linder Höhe, 51147 Köln, Deutschland

Zusammenfassung

Eines der relevanten physikalischen Phänomene bei der Planung von bewegten Flüssigkeitstanks ist das Tankschwappen - ein komplexes dreidimensionales und instationäres Phänomen, welches nicht durch vereinfachte Methoden abgebildet werden kann. Daher werden Mehrphasenströmungssimulationen zur Modellierung herangezogen. Im Rahmen des am DLR durchgeführten Impulsprojekts HYTAZER kommen hochskalierbare Discontinuous-Galerkin-Methoden als neuartige aber erfolgversprechende Alternative zu etablierten numerischen Lösungsstrategien zum Einsatz. Der Forschungsauftrag ist die Konstruktion, Analyse und hochskalierbare Implementierung entropie-stabiler adaptiver Discontinuous-Galerkin Verfahren hoher Ordnung [1] für schwachkompressible Zweiphasenströmungen an diffusen Grenzflächen [2] im Open-Source Code Trixi.jl [3]. Hierbei operiert der neuartige numerische Löser auf dynamisch-adaptiven baumbasierten Gittern die von der Open-Source Softwarebiblitothek t8code [4] bereitgestellt werden. Neben der mathematisch beweisbaren Entropiestabilität sind weitere Stabilisierungsmethoden [5] zur präzisen Darstellung der Grenzsschicht zwischen Flüssigkeits- und Gasphase notwendig. Das Projekt hat zum Ziel ein vollwertiges Open-Source Simulationsframework zur dreidimensionalen Modellierung von Schwapphänomenen auf modernsten CPU- und GPU-basierten, verteilten Hardwareplattformen der bevorstehenden Exascale-Ära bereitzustellen.
In diesem erweiterten Abstract werden die theoretischen Vorarbeiten in aller Kürze dargestellt. Im Vortrag werden die entwickelten Komponenten detailierter vorgestellt und aktuelle Ergebnisse präsentiert.

Keywords

Tankschwappen, Flüssigwasserstoff, Mehrphasenströmungen, Discontinuous-Galerkin-Methoden, adaptive Gitter

1. ZWEIPHASENMODELL

1.1. Balancegleichungen

Zum Einsatz kommt das nicht-konservative Dreigleichungsmodell [2] erweitert mit einem Gravitationsterm, das eine Vereinfachung der aus sieben Gleichungen bestehenden Baer-Nunziato-Gleichungen [6] darstellt. Das System lautet

$$\begin{aligned} \partial_t(\alpha\rho) + \nabla\cdot(\alpha\,\rho\,\vec{v}) &= 0 \\ \partial_t(\alpha\rho\,\vec{v}) + \nabla\cdot\alpha\,(\rho\,\vec{v}\otimes\vec{v} + p\,\mathbb{1}) &= -\alpha\rho\,\nabla\Phi \\ \partial_t\alpha + \vec{v}\,\nabla\alpha &= 0 \\ \partial_t\Phi &= 0 \end{aligned} \tag{1}$$

mit den konservativen Variablen

$$\mathbf{u} = (\alpha\,\rho,\ \alpha\,\rho\,\vec{v},\ \alpha,\ \Phi)^T. \tag{2}$$

Hierbei sind $\rho > 0$ die Dichte, $\vec{v}$ die Geschwindigkeit, $\alpha \in (0,1]$ der Volumenanteil der Flüssigphase sowie Φ das Gravitationspotential. Die triviale Evolutionsgleichung für das Gravitationspotential dient lediglich der Vereinheitlichung der mathematische Notation.

Das System wird mit einer barotropischen Zustandsgleichung [7] vervollständigt:

$$p(\rho) = k_0\left(\left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\gamma} - 1\right). \tag{3}$$

Die Zustandsgleichung (3) kann als ideales Gas, das unter hohem Druck steht, interpretiert werden. Durch diese Versteifung des Systems erhält man ein schwachkompressibles Näherungsmodell einer eigentlich inkompressiblen Flüssigkeit. Das Kompressionmodul k_0 und γ sowie die Referenzdichte ρ_0 sind heuristische Werte aus experimentellen Daten. Für Wasser bei 20°C, beispielsweise, lauten die Parameter

$$\begin{aligned} \rho_0 &= 1\,000\,\mathrm{kg/m^3}, \\ k_0 &= 3,2\times 10^8\,\mathrm{Pa}, \\ \gamma &= 7. \end{aligned}$$

Obige Werte ergeben eine Schallgeschwindigkeit von $c = \frac{\partial p}{\partial \rho} = 1\,500$ m/s.
Durch Annahme eines barotropischen Modells (3), wobei der Druck ausschließlich von der Dichte abhängt, besteht folgender Zusammenhang zwischen Dichte ρ,

Druck p und spezifischer innerer Energie e:

$$\rho \, \frac{de}{d\rho} = \frac{p}{\rho}. \tag{4}$$

Durch Integration obiger Gleichung erhält man für e:

$$e(\rho) = \frac{k_0}{\rho} \left(\frac{1}{\gamma - 1} \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{\gamma} + 1 \right), \quad \gamma > 1, \tag{5}$$

bzw.

$$e(\rho) = \frac{k_0}{\rho} \left(\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right) \ln(\rho) + 1 \right), \quad \gamma = 1. \tag{6}$$

1.2. Entropie

Ein Hauptziel dieser Forschungsarbeit ist die Herleitung eines entropie-stabilen numerischen Verfahrens. Eine adäquate Entropie S für das System (1) ist die spezifische Gesamtenergie, die sich aus interner Energie, kinetischer Energie und potentieller Energie zusammensetzt:

$$S = \alpha\rho \, e + \frac{\alpha\rho}{2} \, v^2 + \alpha\rho \, \Phi. \tag{7}$$

Für isentrope bzw. reversible Prozesse wandelt sich eine Energieform in einer der anderen Energieformen um. Die Gesamtenergiebilanz bleibt konstant. Irreversible Prozesse, z.Bsp. Stöße oder Dissipation, führen zu einer Abhnahme der Gesamtenergie bzw. Entropie. In diesem Text wird die mathematische Entropie verwendet, die per Definition eine abnehmende Größe ist. Entropie-stabile numerische Verfahren sind so konstruiert, dass sie die Entropieerhaltung bzw. -abnahme bis auf Rundungsfehler abbilden können.

1.3. Hydrostatisches Gleichgewicht

Befindet sich das System in Ruhe, d.h. $\vec{v} = \vec{0}$, so hat sich ein hydrostatisches Gleichgewicht zwischen Druck und Gravitation herausgebildet:

$$\nabla p = -\alpha\rho \, \nabla\Phi. \tag{8}$$

Die hydrostatische Lösung der Dichteverteilung für ein gegebenes Gravitationspotential $\Phi(x)$ erhält man mit (3) und durch Integration von (8):

$$\bar{\rho}(x) = \left(\frac{(\gamma - 1)\, \rho_0^{\gamma}}{\gamma \, k_0} \left(\Phi(x_0) - \Phi(x) \right) \right)^{\frac{1}{\gamma - 1}}, \ \gamma > 1, \tag{9}$$

bzw.

$$\bar{\rho}(x) = \rho_0 \, \exp\left(\frac{\rho_0}{k_0} \left(\Phi(x_0) - \Phi(x) \right) \right), \ \gamma = 1. \tag{10}$$

Auch hier besteht die Anforderung an das numerische Verfahren das hydrostatische Gleichgewicht möglichst präzise abbilden zu können. Diese geforderte Eigenschaft unterdrückt die Aufprägung numerischer Artefakte auf die Lösung im Falle stationärer oder sehr langsam fließender Strömungen.

2. NUMERISCHES VERFAHREN

2.1. DGSEM in Fluktuationsform

Als numerisches Verfahren wird eine Discontinous-Galerkin-Spectral-Element-Methode (DGSEM) mit integriertem Shock-Capturing [8] verwendet. Das Shock-Capturing regularisiert die Lösung an den mitunter unteraufgelösten diffusen Grenzschichten und unterdrückt ungewollte Oszillationen. Eine spezielle Umformulierung der DGSEM in die sogenannte Fluktuationsform [9] erlaubt den Einsatz entropieerhaltender numerischer Flüsse für nicht-konservative Systeme wie (1) ohne dabei die Konvergenzordnung oder die Datenlokalität des Verfahrens zu beeinträchtigen. Eine umfassende und zugängliche Einführung in entropie-stabile DGSEM ist beispielsweise in [1] zu finden.

2.2. Entropie-erhaltende Flüsse

In Anlehnung an die Notation in [10] lauten die entropie-konservativen numerischen Flüsse für das System (1) wie folgt:

$$\mathbf{h}(\mathbf{u}^-, \mathbf{u}^+) = \begin{pmatrix} \{\{\alpha\}\} \, \{\{\rho\}\}_\gamma \, \{\{\vec{v}\}\} \cdot \vec{n} \\ \{\{\alpha\}\} \left(\{\{\rho\}\}_\gamma \, \{\{\vec{v}\}\} \, (\{\{\vec{v}\}\} \cdot \vec{n}) + \{\{p\}\} \, \vec{n} \right) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{11}$$

und

$$\mathbf{d}^{\pm}(\mathbf{u}^-, \mathbf{u}^+) = \frac{[[\alpha]]}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vec{v}^{\pm} \cdot \vec{n} \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{[[\Phi]]}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ \{\{\alpha\}\} \, \{\{\rho\}\}_\gamma \, \vec{n} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{12}$$

Hierbei ist $\vec{n}$ der Normalenvektor an der Schnittstelle zwischen den Zuständen $\mathbf{u}^-$ und $\mathbf{u}^+$. Die speziellen Durchschnitts- und Sprungoperatoren sind wie folgt definiert:

$$\{\{\cdot\}\} = \frac{(\cdot)^- + (\cdot)^+}{2}, \quad [[\cdot]] = (\cdot)^+ - (\cdot)^-, \tag{13}$$

und

$$\{\{\rho\}\}_\gamma = \frac{[[p]]}{\left[\left[e + \frac{p}{\rho} \right]\right]}. \tag{14}$$

Durch die Flüsse (11) und (12) erhält man ein entropie-erhaltendes Verfahren. In der Regel sind solche Verfahren für Langzeitsimulationen allerdings nicht stabil. Zur Stabilisierung des Verfahrens werden adäquate Dissipationsterme den numerischen Oberflächenflüssen (Flüsse zwischen Gitterelementrändern) beigefügt, die eine stetige Abnahme der Entropie zur Folge haben. Die Formulierung ausgeklügelter Dissipationsterme und damit die präzise Kontrolle

über das Entropieabnahmeverhalten ist Gegenstand aktueller Forschung.
Eine weitere wichtige Eigenschaft, die die Flüsse (11) und (12) eleganterweise gleich mitbringen, ist die Wahrung des hydrostatischen Gleichgewichts (8).
Zur Zeitintegration werden explizite Runge-Kutta-Verfahren verwendet. Die Parameter in (3) werden so gewählt, dass eine Balance zwischen Modelltreue und vertretbare Zeitschrittgröße besteht.

2.3. Implementierung

Die Implementierung des Verfahrens erfolgt im Strömungssimulationsframework Trixi.jl [3], das die wesentlichen Bestandteile des numerischen Verfahrens in modularisierter Form bereithält. DGSEMs mit den gewünschen Eigenschaften können ähnlich einem Baukastensystem zusammengefügt und direkt genutzt werden. Dem Anwender obliegt es nur noch die Flüsse (11) und (12) zu implementieren um Trixi.jl das System (1) bekannt zu machen.

3. AUSBLICK

Dieser erweiterte Abstract fasst die theoretischen Vorarbeiten stark gekürzt zusammen. Im Vortrag werden die technischen Details des physikalischen Modells sowie des numerischen Verfahrens detaillierter dargestellt. Des Weiteren wird auf die Implementierung in Trixi.jl eingegangen und numerische Ergebnisse präsentiert.

Kontaktadresse:

johannes.markert@dlr.de

Literatur

[1] Gregor J Gassner and Andrew R Winters. A novel robust strategy for discontinuous galerkin methods in computational fluid mechanics: Why? when? what? where? Frontiers in Physics, 8:500690, 2021.

[2] Michael Dumbser. A simple two-phase method for the simulation of complex free surface flows. Computer methods in applied mechanics and engineering, 200(9-12):1204–1219, 2011.

[3] Michael Schlottke-Lakemper, Gregor J Gassner, Hendrik Ranocha, and Andrew R Winters. Trixi.jl: Adaptive high-order numerical simulations of hyperbolic PDEs in Julia. https://github.com/trixi-framework/Trixi.jl, 08 2020. DOI: 10.5281/zenodo.3996439.

[4] Johannes Holke, Carsten Burstedde, David Knapp, Lukas Dreyer, Sandro Elsweijer, Veli Uenlue, Johannes Markert, Ioannis Lilikakis, and Niklas Boeing. t8code, 9 2022. DOI: 10.5281/zenodo.7034838, https://github.com/dlr-amr/t8code.

[5] Johannes Markert, Gregor Gassner, and Stefanie Walch. A sub-element adaptive shock capturing approach for discontinuous galerkin methods. Communications on Applied Mathematics and Computation, pages 1–43, 2021.

[6] Melvin R Baer and Jace W Nunziato. A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (ddt) in reactive granular materials. International journal of multiphase flow, 12(6):861–889, 1986.

[7] Francis Dominic Murnaghan. The compressibility of media under extreme pressures. Proceedings of the National Academy of Sciences, 30(9):244–247, 1944.

[8] Sebastian Hennemann, Andrés M Rueda-Ramírez, Florian J Hindenlang, and Gregor J Gassner. A provably entropy stable subcell shock capturing approach for high order split form dg for the compressible euler equations. Journal of Computational Physics, 426:109935, 2021.

[9] Manuel J Castro, Ulrik S Fjordholm, Siddhartha Mishra, and Carlos Parés. Entropy conservative and entropy stable schemes for nonconservative hyperbolic systems. SIAM Journal on Numerical Analysis, 51(3):1371–1391, 2013.

[10] Florent Renac. Entropy stable dgsem for nonlinear hyperbolic systems in nonconservative form with application to two-phase flows. Journal of Computational Physics, 382:1–26, 2019.