

Eike Alexander Hylla

**Eine Immersed Boundary Methode zur Simulation von  
Strömungen in komplexen und bewegten Geometrien**



Eike Alexander Hylla

**Eine Immersed Boundary Methode zur Simulation von  
Strömungen in komplexen und bewegten Geometrien**

Universitätsverlag der TU Berlin

### **Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek**

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.dnb.de/> abrufbar.

### **Universitätsverlag der TU Berlin 2013**

<http://www.univerlag.tu-berlin.de>

Fasanenstr. 88 (im VOLKSWAGEN-Haus), 10623 Berlin

Tel.: +49 (0)30 314 76131 / Fax: -76133

E-Mail: [publikationen@ub.tu-berlin.de](mailto:publikationen@ub.tu-berlin.de)

Zugl.: Berlin, Technische Universität, Diss., 2013

1. Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Frank Thiele

2. Gutachter: Univ. Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Schröder

Die Arbeit wurde am 10.12.2012 unter Vorsitz

von Prof. Dr.-Ing. Marc Kraft erfolgreich verteidigt.

Das Manuskript ist urheberrechtlich geschützt.

Druck: Docupoint GmbH, Magdeburg

Satz/Layout: Eike Alexander Hylla

Zugleich online veröffentlicht auf dem Digitalen Repositorium  
der Technischen Universität Berlin:

URL <http://opus.kobv.de/tuberlin/volltexte/2013/3932/>

URN [urn:nbn:de:kobv:83-opus-39323](http://nbn-resolving.org/urn:nbn:de:kobv:83-opus-39323)

[<http://nbn-resolving.org/urn:nbn:de:kobv:83-opus-39323>]

**ISBN 978-3-7983-2530-2 (print)**

**ISBN 978-3-7983-2531-9 (online)**

*Für  
meine Familie*



## Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Fachgebiet Numerische Methoden der Thermofluidodynamik der Technischen Universität Berlin.

Mein aufrichtiger Dank gilt Herrn Prof. Frank Thiele dem Leiter des Fachgebiets für das entgegengebrachte Vertrauen und die intensive Zeit, die ich in einer hervorragenden Arbeitsgruppe verbringen durfte. In diesem Umfeld konnte ich mich nicht nur fachlich und persönlich weiterentwickeln, ich hatte zudem die Freiheit, eigene Ideen voranzutreiben und umzusetzen. Insbesondere den Besuch internationaler Fachkonferenzen und die damit verbundene Gelegenheit zum Reisen habe ich sehr genossen.

Das Teilprojekt „Simulation instationärer konvektiver Strömungsverhältnisse in sich dynamisch verändernden zentralen Geometrien des Tracheobronchialbaumes unter Spontanatmung“ im DFG Forschungsschwerpunkt „Protektive Beatmungskonzepte“ bildete die Voraussetzung für diese Arbeit. Für die erfolgreiche Beantragung dieses Projekts sowie für die gute wissenschaftliche Anleitung im Anfangsstadium danke ich Herrn Dr. Octavian Frederich sehr herzlich.

Ich danke Herrn Prof. Wolfgang Schröder, Leiter des Aerodynamischen Instituts der RWTH Aachen, dass er die Aufgabe des Zweitberichters übernommen hat.

Herrn Prof. Marc Kraft der TU Berlin danke ich, dass er als Vorsitzender für das Promotionsverfahren zur Verfügung stand.

Für die gute Zusammenarbeit im Teilprojekt „Quatitative Analyse der Totraumventilation in Tiermodellen des akuten Lungenschadens“ danke ich den Kooperationspartnern; insbesondere: Hannah Nickles, Dr. Michael Puderbach, Micle Sumkauskaitė, Xin Wang und Dr. Ingmar Wegner.

Den Administratoren des Fachbereichs Lars Oergel, Martin Franke danke ich für die stets reibungslos funktionierende IT-Infrastruktur und ihr unerschöpfliches Computerverwissen.

Allen meinen Kollegen und ehemaligen Kollegen des Fachbereichs gilt größter Dank für die zahlreichen fachlichen wie privaten Diskussionen sowie die phantastische gemeinsame Zeit.

Frau Anke Heymann danke ich herzlich für die sorgfältige Rechtschreibkorrektur meiner Dissertation.

Ohne meine Familie, deren Unterstützung und Liebe wäre diese Arbeit nicht zustande gekommen. Ich danke von ganzem Herzen: meinen Eltern Susann und Manfred Hylla sowie meiner Frau Nadine und unserer gemeinsamen Tochter Theda.

Berlin, im April 2013

Eike Alexander Hylla





## Zusammenfassung

Zur Beantwortung strömungsmechanischer Fragestellungen, bei denen komplexe und bewegte Geometrien eine wesentliche Rolle spielen, bietet sich ein numerisches Verfahren an, welches als Immersed Boundary Methode (IBM) bezeichnet wird. Dabei werden die Navier-Stokes Gleichungen auf einem Hintergrundgitter diskretisiert, in welches die zu berücksichtigende Oberflächengeometrie eingetaucht wird (engl. *to immerse*) und an dessen Position die Randbedingungen erfüllt werden.

Die vorliegende Arbeit beschreibt die Umsetzung, Validierung und Anwendung einer IBM auf Basis eines bestehenden Finite-Volumen Strömungslösers. Die Bereitstellung der Randbedingungen, zu der ein s. g. Ghost-Cell Ansatz verwendet wird, stellt die zentrale Aufgabe dar. Hinzu kommen erforderliche Mechanismen zum schnellen Auffinden geschnittener Zellen, Techniken zur dynamischen Adaption des kartesischen Rechengitters sowie die Umsetzung numerischer Algorithmen zur Speicherung und Lösung der auftretenden Gleichungssysteme.

Um diese Methode auch für Problemstellungen der Fluid-Struktur-Interaktion (FSI) nutzbar zu machen, wurde ein auf Schalenelementen beruhendes FEM Verfahren zur Struktursimulation implementiert und validiert. Dieses ist über eine lose Kopplung mit dem CFD-Verfahren verbunden, wobei die vom Fluid hervorgerufenen Kräfte und die Geometrie des zeitlich veränderlichen Körpers zwischen beiden Verfahren ausgetauscht werden.

Das entwickelte Verfahren findet erfolgreich Anwendung in zwei Bereichen, bei denen sich der Einsatz einer IBM als besonders vorteilhaft erwiesen hat. Die erste Anwendung ist die Strömungsvorhersage in den zentralen Atemwegen verschiedener Lungengeometrien. Bei einem einfachen generischen Modell der oberen Atemwege nach Weibel entstehen an den Verzweigungen deutlich sekundäre Strömungsstrukturen in Form s. g. Deanwirbel, die jedoch bedingt durch die Geometrie symmetrisch und sehr regelmäßig ausfallen. Im komplexesten Fall, dem dynamischen Tracheobronchialbaum eines Schweins, zeigt sich zudem der Einfluss der Oberflächenbewegung. Während der Ein- und Ausatemungsphasen zeigen sich asymmetrische Paare gegensinnig rotierender Wirbel, deren Drehsinn über den Atemzyklus erhalten bleibt. Den zweiten Anwendungsfall aus dem Bereich der Fluid-Struktur-Interaktion stellt die quasi-stationäre Strömung um eine elastische Zylinderhülle dar. Schon nach wenigen Kopplungsiterationen stellt sich ein Gleichgewicht zwischen der deformierten Geometrie und der umgebenden Strömung, die im Wesentlichen Druckkräfte verursacht, ein. Die Abflachung und Verbreiterung des Körpers führt zu einer Vergrößerung der Reynoldszahl. Die im Nachlauf des Zylinders auftretende stationäre Rückströmung vergrößert sich dadurch. Die Länge der Ablösung stimmt etwa mit der zu erwartenden Ablöselänge eines Kreiszylinders bei der entsprechend vergrößerten Reynoldszahl überein.

## Abstract

The Immersed Boundary Method (IBM) is a numerical approach in the field of computational fluid dynamics well suited if complex and dynamic geometries are considered. The geometry is immersed into an underlying computational grid. The Navier-Stokes equations are solved fulfilling the boundary conditions at the intersections between the surface discretization and the grid cells. Based on an existing finite-volume flow solver, the present work describes the implementation, validation, and application of such an IBM approach. A central role plays the providing of the boundary conditions employing a so-called Ghost-Cell approach. In addition, mechanisms for fast detection of cell intersections, techniques for grid adaptation, and numerical algorithms for storing and solving the arising equation systems are provided. The developed methodology is further enhanced in order to solve problems of Fluid-Structure-Interaction (FSI). Therefore, a Finite-Element based structural solver is implemented and validated. The CFD and FEM solvers are loosely coupled by exchanging the fluid forces and the actual geometry of the elastic body. The developed methods are successfully applied to two different fields favorable for the use of an IBM solver. First, the physics of the flow through different geometries of the central airways are investigated. Smooth and symmetrical secondary flow structures and Dean vortices are observed downstream the bifurcations of a simple generic lung model by Weibel. For the most complex case, the dynamic tracheobronchial tree of a pork, the influence of the surface motion is important. During in- and expiration, asymmetrical pairs of counter rotating vortices occur, maintaining their rotating sense during the respiratory cycle. Secondly, a Fluid-Structure-Interaction is considered by means of a quasi steady flow past an elastic cylinder shell. After a small number of coupling iterations, the deformed geometry and the surrounding flow, mainly imposing pressure forces, reach a state of equilibrium. The front of the cylinder shell flattens while its width increases which leads to a higher Reynolds number. Accordingly, the steady wake downstream of the cylinder enlarges. The recirculation length now corresponds to the estimation of the one for a circular cylinder under the raised Reynolds number.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1. Motivation . . . . .	1
1.2. Zielsetzung . . . . .	2
1.3. Rahmenbedingungen und eigener Beitrag zur Arbeit . . . . .	4
1.4. Aufbau der Arbeit . . . . .	4
<b>2. Theorie</b>	<b>7</b>
2.1. Bilanzgleichungen der Strömungsmechanik . . . . .	7
2.2. Diskretisierung der Bilanzgleichungen . . . . .	8
2.2.1. Finite-Volumen-Methode . . . . .	9
2.2.2. Diskretisierung der einzelnen Terme . . . . .	10
2.2.3. Vollständig diskretisierte Transportgleichung . . . . .	15
2.3. Kopplung von Druck- und Geschwindigkeitsfeld . . . . .	15
2.3.1. SIMPLE Druckkorrekturverfahren . . . . .	17
2.4. Randbedingungen . . . . .	18
2.5. Lösen des Gleichungssystems . . . . .	21
2.5.1. Struktur der Koeffizientenmatrix . . . . .	22
2.5.2. Krylov-Unterraum-Verfahren . . . . .	23
2.5.3. Präkonditionierung . . . . .	25
2.5.4. Testfall: Konvektions-Diffusions Gleichung . . . . .	26
<b>3. Immersed Boundary Methode</b>	<b>29</b>
3.1. Grundprinzip eingetauchter Randbedingungen . . . . .	29
3.2. Ursprung und Entwicklung des Verfahrens . . . . .	31
3.3. Vor- und Nachteile der Immersed Boundary Methode . . . . .	35
3.4. Praxisrelevanz des Verfahrens . . . . .	37
<b>4. Umsetzung des Simulationsverfahrens</b>	<b>39</b>
4.1. Kartesisches Rechengitter . . . . .	39
4.1.1. Aufgabe der Flächenelemente . . . . .	40
4.1.2. Flächenbasierte Diskretisierung . . . . .	41
4.1.3. Lokale Verfeinerung durch hängende Knotenelemente . . . . .	41
4.2. Dynamische Gitteradaption . . . . .	43
4.2.1. Konzept und Herangehensweise . . . . .	43
4.2.2. Sensorbasierte Adaption und Adaptionkontrolle . . . . .	47
4.2.3. Gitterverfeinerung . . . . .	49
4.2.4. Gittervergrößerung . . . . .	51

4.2.5.	Abschließende Aufgaben	54
4.2.6.	Testfälle und Verifikation	55
4.3.	Diskretisierung der Immersed Boundary	58
4.4.	Identifizierung und Markierung	59
4.4.1.	Auffinden der Schnittpunkte	59
4.4.2.	Binärer Suchbaum	62
4.4.3.	Markierung des Strömungs- und des nicht-Strömungsgebiets	68
4.4.4.	Bestimmung der Dreiecke innerhalb des Rechengitters	69
4.5.	Randbedingungen an Immersed Boundaries	71
4.5.1.	Einströmrandsbedingung	72
4.5.2.	Ausströmrandsbedingung	73
4.5.3.	Wandrandbedingung	75
4.5.4.	Validierung der IB Randbedingungen	86
4.6.	Kopplung mit einem Verfahren zur Struktursimulation	94
4.6.1.	Strukturmechanisches Schalenelement	95
4.6.2.	Umsetzung des Verfahrens zur Struktursimulation	97
4.6.3.	Validierung des Strukturverfahrens	98
4.6.4.	Kopplungsalgorithmus	101
<b>5.</b>	<b>Anwendung des Verfahrens</b>	<b>105</b>
5.1.	Strömungen in den zentralen Atemwegen	105
5.1.1.	Hintergrund und Vorgehen	106
5.1.2.	Atemwegsgeometrien	108
5.1.3.	Strömungszustand, Randbedingungen und Setup	113
5.1.4.	Ergebnisse	118
5.1.5.	Diskussion	138
5.2.	Strömung um einen elastischen Zylinder	140
5.2.1.	Konfiguration	140
5.2.2.	Ergebnisse	141
5.2.3.	Diskussion	144
<b>6.</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>145</b>
<b>A.</b>	<b>Anhänge zur Theorie und zur Umsetzung</b>	<b>149</b>
A.1.	BiCGSTAB	149
A.2.	Datenstruktur des Rechengitters	149
A.3.	Sparse Matrix Format (CRS)	150
A.4.	Quantitativer Zusammenhang: Zell- und Flächenelemente	151
A.5.	Gitter Präprozess	152
A.6.	Zuordnungsumkehr	153
A.7.	Testfälle der Gitteradaption	154
A.8.	Datenstruktur des Oberflächengitters	154
A.9.	Algorithmus zur Suche von Objekten in einem Binärbaum	156
A.10.	Algorithmus zur Markierung des Strömungsgebiets	156

<b>B. Anhänge zur Anwendung des Verfahrens</b>	<b>157</b>
B.1. Arbeitsablauf: vom VCT Scan zur CFD Simulation . . . . .	157
B.1.1. Bestimmung der Deformationsfelder . . . . .	158
B.1.2. Beschnitt des Oberflächengitters . . . . .	159
B.1.3. Interpolation der Deformationsfelder . . . . .	161
B.2. Ersatzdurchmesser . . . . .	162
B.3. Strömung in einer Verzweigung . . . . .	162
B.4. Visualisierung in dynamischen Atemwegsgeometrien . . . . .	164
<b>Literatur</b>	<b>167</b>



# Nomenklatur

## Lateinische Bezeichnungen

$a_{(\cdot)}$	Koeffizienten der Diskretisierungsgleichung
<b>A</b>	Koeffizientenmatrix des linearen Gleichungssystems
$A$	Flächenmaß
$A_i$	Flächennormalenvektor (mit $ A_i  = A$ )
$\mathcal{A}$	Adaptionsmarkierer
<b>b</b>	Quelltermvektor des linearen Gleichungssystems
$\mathcal{B}$	Blätter des Binärbaums
$b$	eingetauchter Körper
$c_L, c_D, c_p$	Auftriebs-, Widerstands- und Druckbeiwert
$C$	kartesische Gitterzelle, die ein KV repräsentiert
$C_R, L, LL$	rechtes, linkes, nächstes linkes Kontrollvolumen
<b>De</b>	Dean-Zahl
$d_i^{LR}$	Verbindungsvektor zwischen linkem und rechtem KVZ
$d_w$	Wandabstand
$E$	Elastizitätsmodul
$F$	Volumenfluss
$F_i$	Kraftvektor
$f_i$	Volumenkraftvektor
<b>f</b>	Lastvektor (enthält Kräfte und Momente)
$f$	Flächenelement
$f^{IB}$	von IB getroffenes Flächenelement
$\mathcal{F}$	FSI Iteration
$\mathcal{G}$	Adaptionsschritt
$G$	Adaptionsgruppe
$H$	Helizität ( $H = u_i \omega_i$ )
$h$	Charakteristisches Längenmaß eines Kontrollvolumens
<b>I</b>	Einheitsmatrix
<b>K</b>	Systemsteifigkeitsmatrix
<b>K<sub>e</sub></b>	Elementsteifigkeitsmatrix
$k, k_1 \dots k_8$	Knotenpunkte des Rechengitters
$k_h$	hängender Knotenpunkt
$\mathcal{K}_{1,2}$	Kinder des Binärbaums
$L$	Gitterlevel

$l$	Länge
$\mathcal{L}$	Level des Binärbaums
$\mathcal{L}_{\max}$	Höchstes Level des Binärbaums
$\mathcal{R}$	Wurzel des Binärbaums
$\mathbf{L}$	linke Dreiecksmatrix
$M$	Drehmoment
$M_1 \dots M_n$	zeitliche Konfiguration des Oberflächengitters
$\dot{m}$	Massenfluss
$n$	Normalenrichtung
$n_i$	Normalenvektor
$N(\cdot)$	Anzahl von $(\cdot)$
$\mathcal{N}$	Knoten des Binärbaums
$\mathcal{O}(\cdot)$	Fehlerordnung von $(\cdot)$
$p$	Druck
$P$	betrachtetes Kontrollvolumen
$p, p_1 \dots p_3$	Knotenpunkte des Oberflächengitters
$\mathcal{P}$	Elter des Binärbaums
$\mathbf{P}_{\mathbf{L}, \mathbf{R}}$	linksseitiger, rechtsseitiger Präkonditionierer
$\mathbf{pl}, \mathbf{pr}$	Zeiger zu den Nachbarkoeffizienten in Vektor <b>val</b>
$\mathbf{pz}$	Zeiger zum zentralen Koeffizienten in Vektor <b>val</b>
$R_{ij}$	Richtungskosinus
$\mathbf{r}$	Residuenvektor
$\mathcal{R}$	Residuum
$Re$	Reynolds-Zahl
$S$	Quellterm
$\mathcal{S}$	Suchbox des Binärbaums
$\mathcal{S}$	Adaptionssensor
$St$	Strouhal-Zahl
$\mathbf{T}$	Transformationsmatrix
$t$	Zeit
$t_s$	Dicke des Schalenelements
$\mathbf{U}$	rechte Dreiecksmatrix
$\mathbf{u}$	Deformationsvektor (enthält Verschiebungen und Momente)
$u_i$	Geschwindigkeitsvektor
$u_i^*$	Vektor sekundärer Geschwindigkeiten $\left(u_i^* = u_i - (u_j n_j) u_i\right)$
$u, v, w$	Geschwindigkeitskomponenten
$u_s, v_s, w_s$	Verschiebungen des Schalenelements
$V$	Volumen
$\dot{V}$	Volumenfluss
$Wo$	Womersley-Zahl
$\mathbf{x}$	Lösungsvektor des linearen Gleichungssystems
$x, y, z$	Koordinaten (kartesisch)



## Griechische Bezeichnungen

$\beta$	Gewichtungsfaktor für <i>Flux Blending</i>
$\Gamma_b$	Berandung des eingetauchten Körpers $b$
$\Gamma_\phi$	Diffusionskoeffizient
$\Delta x, y, z$	Abmessungen des Kontrollvolumens
$\delta_{ij}$	Einheitstensor
$\delta x, y, z$	Abstandskomponenten zwischen benachbarten KVZ
$\epsilon$	Untere Fehlerschranke
$\epsilon_{ijk}$	$\epsilon$ -Tensor
$\Theta_i$	Verdrehungswinkel um die lokale Koordinatenachse $i$
$\kappa$	Plattensteifigkeit des Schalenelements
$\Lambda$	Rechenaufwand
$\lambda$	Hebelarm
$\mu$	Dynamische Viskosität
$\nu$	Kinematische Viskosität
$\nu_s$	Querkontraktionszahl des Schalenelements
$\pi$	Kreiszahl ( $\pi = 3.14159 \dots$ )
$\pi_{ij}$	Spannungstensor
$\Pi$	Zuordnungsliste der Gitterindizierung
$\rho_s$	Dichte des Schalenelements
$\varrho$	Dichte des Fluids
$\tau_{ij}$	Schubspannungstensor
$\phi$	Allgemeine Variable
$\chi$	Markierungsvariable
$\Psi$	Massenflussverhältnis
$\Omega$	Rechengebiet
$\Omega_f$	Strömungsgebiet
$\Omega_b$	nicht-Strömungsgebiet
$\omega_i$	Wirbelstärkevektor ( $\omega_i = u_i \epsilon_{ijk} \frac{\partial u_k}{\partial x_j}$ )

## Sonstige Bezeichnungen und Indizes

$(\cdot)^*$	Größe einer vorherigen Lösungsiteration
$(\cdot)_{i,j,k}$	Indizes eines Vektors
$(\cdot)_f$	bezogen auf das Flächenelement $f$
$(\cdot)_\Delta$	bezogen auf das Dreieckselement $\Delta$
$(\cdot)_{e,w,n,s,t,b}$	Flächenelement (nach Kompassnotation)
$(\cdot)_{E,W,N,S,T,B}$	Kontrollvolumen (nach Kompassnotation)
$(\cdot)_{NB}$	Stellvertretend für benachbarte Kontrollvolumen
$(\cdot)_{BC}$	am Rand
$(\cdot)_{IN}$	am Einströmrand
$(\cdot)_{OUT}$	am Ausströmrand
$(\cdot)_{SYM}$	am Symmetrierand
$(\cdot)_{WALL}$	am Wandrand
$(\cdot)$	in Bezug auf ein lokales Koordinatensystem
$(\cdot)$	gemittelte Größe
$(\cdot)^{RMS}$	RMS-Wert einer Größe
$(\cdot)^\diamond$	interpolierte Größe
$\Delta$	Dreieckselement des Oberflächengitters
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	Skalarprodukt zweier vektorieller Größen
$ a_i $	Betrag eines Vektors ( $ a_i  = \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + a_3^2}$ )
$a_i \times b_i$	Kreuzprodukt zweier Vektoren ( $a_i \times b_i = \epsilon_{ijk} a_j b_k$ )
$\partial(\cdot)$	Rand von $(\cdot)$

## Abkürzungen

1D, 2D, 3D	ein-, zwei-, dreidimensional
BiCGSTAB	Bi-Conjugate Gradient Stabilized
CDS	Central-Differencing-Scheme
CFD	Computational Fluid Dynamics
CG	Conjugate Gradient
CPU	Central Processing Unit
CSR	Compressed-Row-Storage
CRS	Compressed Row Storage
FE(M)	Finite-Elemente(-Methode)
FSI	Fluid-Struktur-Interaktion
IB	Immersed Boundary
KV	Kontrollvolumen
KVZ	Kontrollvolumenzentrum
LES	Large Eddy Simulation
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes
UDS	Upwind-Differencing-Scheme
(V)CT	(Volumen) Computer Tomographie

# 1. Einleitung

## 1.1. Motivation

In den letzten Jahren hat die Numerische Strömungsmechanik (CFD) Einzug in nahezu alle ingenieurwissenschaftlichen Tätigkeitsfelder erhalten. Der Grund hierfür ist vor allem in der stetig wachsenden Rechenleistung moderner Computersysteme zu sehen. Die anfänglich begrenzten Rechenkapazitäten reduzierten die Anwendung der CFD auf Fälle kleiner Reynolds-Zahlen, die mit wenig Gitterpunkten auskommen, oder auf 2D Vereinfachungen. Dennoch konnten die Simulationen zu dieser Zeit nur auf Supercomputern durchgeführt werden. Zum heutigen Zeitpunkt ist es insbesondere durch den Trend hin zu Mehrkernprozessoren möglich, umfangreiche 3D Simulationen auf herkömmlichen Arbeitsplatzcomputern durchzuführen.

Verwendung findet die CFD klassischerweise in Bereichen wie der Hydro- und Aerodynamik oder in jenen der Strömungsmaschinen. Hinzu kommen Gebiete wie die Meteorologie, Geophysik oder die Umweltwissenschaften, die sich nicht ausschließlich, aber eben auch mit der Bewegung von Fluiden auseinander setzen.

Seit jüngerer Zeit besteht zudem ein stärker werdendes Interesse, die entwickelten Verfahren auch für interdisziplinäre Fragestellungen jenseits der genannten Einsatzfelder heranzuziehen. Vor allem von Seiten der Biologie und der Medizin (häufig vereint unter dem Begriff der *Biofluidmechanik*) existiert der Wunsch nach geeigneten Simulationsverfahren, um Strömungsphänomene auch hier vorhersagen zu können. Zum einen geht es dabei um das eigentliche Verständnis der physikalischen Vorgänge; andererseits jedoch um konkrete Anwendungen, wie beispielsweise die Frage nach der Optimierung einer Herzpumpe oder auf welche Weise Einfluss auf die Verteilung eines inhalierten Medikaments genommen werden kann. Ein wesentlicher Unterschied zu den eher klassischen Aufgabenstellungen besteht darin, dass es sich hierbei um *natürlich* entstandene, also bedeutend komplizierter zu beschreibende Geometrien handelt. Des Weiteren sind diese Geometrien in der Realität meist nicht starr sondern beweglich und stehen ggf. mit dem Fluid in Interaktion.

Die Komplexität der zu berücksichtigenden Geometrien lassen CFD-Methoden, welche auf einer strukturierten Vernetzung beruhen, ausscheiden. Ein voll unstrukturiertes Vorgehen auf Basis von Tetra- oder gar Polyedergittern wäre hingegen in der Lage, die schwierigen Oberflächen zu beachten. Jedoch sind diesen Verfahren Grenzen gesetzt, wenn der Aspekt der Dynamik hinzukommt. Dann wird in jedem Zeitschritt eine Anpassung des Rechnetzes erforderlich. Aber auf diese Weise lassen sich nur kleine Deformationen abbilden. Tatsächlich gibt es aus derzeitiger Sicht nur zwei Möglichkeiten, um eine erfolgreiche Simulation der physikalischen Vorgänge

in derartigen Anwendung zu gewährleisten: Zum einen wären hier die s. g. *Partikelbasierten Verfahren* zu nennen, die das Fluid nicht im Sinne der Kontinuums-hypothese beschreiben sondern als Ansammlung von Teilchen. Das ursprünglich für die Astrophysik entwickelte *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH) Verfahren [86] ist eines von ihnen. Ein weiteres Verfahren stellt die *Lattice Boltzmann Methode* [13] dar, bei der die Boltzmann Gleichung der statistischen Mechanik zur Beschreibung der Wechselwirkung zwischen den Teilchen verwendet wird.

Im Gegensatz dazu existieren s. g. *Immersed Boundary Methoden* [84], welche im Fokus dieser Arbeit stehen. Das Prinzip beruht auf einem einfachen Hintergrundgitter, welches zur Diskretisierung der strömungsbeschreibenden Gleichungen herangezogen wird. Zur Definition der eigentlichen Geometrien und zur Realisierung dessen Randbedingungen wird eine zusätzliche Oberflächendiskretisierung quasi in das Hintergrundgitter hinein getaucht (englisch: *to immerse*). Kernpunkt der Immersed Boundary Methode ist die Erfüllung der Randbedingungen an der Position des Oberflächengitters, wobei die Berechnung der Strömungslösung allein auf dem Hintergrundgitter durchgeführt wird. Der Vorteil dieser Methode liegt in der Trennung von Rechengitter und Oberflächenbeschreibung. Sofern die räumliche Auflösung des Rechengitters die eingetauchte Oberfläche erfassen kann, spielt die Komplexität der Oberfläche keine Rolle. Durch einen Austausch der Oberflächenbeschreibung können auf einfache Weise bewegte Geometrien modelliert werden. Ein weiterer Vorteil ist, dass ein bereits bestehendes CFD-Verfahren um die Funktionalität eingetauchter Randbedingungen erweitert werden kann. Weitere Details zur IB Methode und den Stand der Forschung werden in einem getrennten Kapitel behandelt (siehe hierzu den Abschnitt 1.4).

## 1.2. Zielsetzung

Ziel dieser Arbeit ist es, ein bestehendes Finite-Volumen-Verfahren zur Strömungssimulation um Immersed Boundaries zu erweitern. Die Auswahl innovativer Algorithmen, eine hohe Effizienz sowie die Robustheit des Verfahrens sollen dabei im Vordergrund stehen. Nach der Validierung und Verifizierung der umgesetzten Methoden findet das Verfahren u. a. Anwendung im Bereich der Atemwegsströmungen.

Der am Fachgebiet „Numerische Methoden der Thermo-fluiddynamik“ entwickelte strukturierte Strömungslöser ELAN basiert auf der Finite-Volumen-Methode. Zur Diskretisierung werden Rechengitter mit allgemein krummlinigen Koordinaten verwendet. Die relevanten Gleichungen werden sequenziell gelöst, wobei die Kopplung zwischen Geschwindigkeiten und Druck über den SIMPLE-Algorithmus realisiert wird. Im Rahmen dieser Arbeit soll die Immersed Boundary Methode auf Basis des Programmpakets ELAN umgesetzt werden.

Zur effektiven Nutzung des Verfahrens ist ein kartesisches Hintergrundgitter unter der Berücksichtigung hängender Knotenelemente zu verwenden. Zudem bietet sich der Einsatz adaptiver Gitterverfahren an, um eine effiziente und dynamische Anpas-

sung des kartesischen Volumengitters an die Geometrie bzw. die Strömungslösung vornehmen zu können. Dazu sind entsprechende Adaptionssensoren zu definieren, mit Hilfe derer über die Gitteradaption entschieden werden kann. Für derartige Rechengitter ist eine unstrukturierte Datenhaltung unabdingbar, was zudem einen Wechsel zu einem geeigneten Gleichungslöser mit sich bringt. Die Oberflächengitter, welche die Immersed Boundaries darstellen, werden durch Dreieckselemente beschrieben. Das Einbringen dieses Oberflächennetzes in das kartesische Rechengitter führt zu einer Aufteilung in Strömungsgebiete und nicht-Strömungsgebiete. Zu deren Identifizierung ist eine effiziente Suche der vom Oberflächengitter geschnittenen Volumenzellen zu entwerfen und zu implementieren. Neben dem Erfüllen von Randbedingungen an den Außengrenzen des kartesischen Rechengitters, besteht die wesentliche Herausforderung darin, Randbedingungen an den Immersed Boundaries bereit zu stellen. Hierzu ist ein s. g. *Ghost-Cell* Ansatz zu wählen, bei dem die außerhalb des Strömungsgebiets liegenden Zellen zur Realisation der Randbedingungen herangezogen werden. Da Ghost-Cell Ansätze bekanntermaßen Probleme hinsichtlich der Massenerhaltung im Wandbereich aufweisen, ist diesem Aspekt besondere Aufmerksamkeit zukommen zu lassen. Nach Umsetzung und Validierung der einzelnen Bestandteile sollen zusätzliche Erweiterungen vorgenommen werden, wie die Berechnung integraler Kraftgrößen. Um zeitlich veränderliche Geometrien darzustellen, ist es erforderlich, geeignete Routinen zur Behandlung bewegter Randbedingungen zu implementieren. Mit diesen Voraussetzungen sollte das Verfahren grundsätzlich in der Lage sein, mit Methoden zur Simulation strukturemechanischer Deformationen kombiniert zu werden. Auf diese Weise ließen sich auch Fragestellungen der Fluid-Struktur-Simulation (FSI) simulieren. Mittels s. g. *Schalenelemente*, die sich beispielsweise in Form von Dreieckselementen umsetzen lassen, kann das mechanische Verhalten einer Vielzahl dünnwandiger Strukturen beschrieben werden. Da die Oberflächendiskretisierung bereits aus Dreieckselementen besteht, bietet es sich an, diese direkt in die Struktursimulation einfließen zu lassen. Es soll daher ein auf Schalenelementen basiertes Finite-Elemente (FE) Programm entwickelt werden, welches anschließend über eine lose Kopplung mit dem CFD-Verfahren vereint werden soll. Die Validierung aller einzelnen Programmpakete an entsprechend dafür gewählten Testfällen ist obligatorisch.

Parallel zur Methodenentwicklung steht die Anwendung mit projektbezogenen Aufgabenstellungen im Vordergrund. Dabei liegt der Schwerpunkt im Bereich der *Atemwegsströmungen*, die in unterschiedlichen Geometrien (generisch wie natürlich; starr oder bewegt) vollzogen, verglichen und analysiert werden sollen. Zudem ist ein weiterer Anwendungsfall aus dem Bereich der Fluid-Struktur-Interaktion zu untersuchen.

### 1.3. Rahmenbedingungen und eigener Beitrag zur Arbeit

Der zuvor genannte, bestehende Strömungslöser ELAN bildet die Basis für die Realisierung der Immersed Boundary Methode. Neben der Entscheidung über die Umsetzung in Form eines Ghost-Cell Ansatzes wurden bereits einige grundlegende Vorarbeiten außerhalb des Rahmens dieser Arbeit durchgeführt. Dazu zählt u. a. die Gestaltung der unstrukturierten Datenhaltung und die erforderliche Umstellung auf den FORTRAN 90 Standard. Auch erste, unvollständige Ansätze zur Behandlung von Immersed Boundaries standen im Vorhinein zur Verfügung, die in einer eigenen Arbeit [51] bereits für einfache Testfälle validiert wurden. Die wesentlichen Eigenleistungen dieser Arbeit bezüglich der methodischen Umsetzung können wie folgt zusammengefasst werden:

- Adaptive Gittertechniken
- Suchbaum gestützte Identifizierung des Rechengebiets
- Randbedingungen an Immersed Boundaries
- Erweiterungen für dynamische Immersed Boundaries
- Implementierung des auf Schalenelementen beruhenden FE-Verfahrens
- Umsetzung der Kopplung zwischen CFD- und FE-Verfahren

Im Zusammenhang mit dem Anwendungsteil spielen die Kooperationspartner vom Deutschen Krebsforschungszentrum (DKFZ) eine wesentliche Rolle. Sie lieferten neben den Oberflächenbeschreibungen der Lungengeometrien auch die nötigen Angaben zu den herrschenden Randbedingungen. Weitere Methoden zur Aufbereitung der Daten (Beschnitt der Geometrie, Interpolation der Deformationsfelder) sowie zur geeigneten Auswertung und Visualisierung der Simulationsergebnisse (Betrachtung mitbewegter Schnittebenen bzw. dynamischer Beobachtungspunkte) sind ebenfalls selbst erbrachte Leistungen.

### 1.4. Aufbau der Arbeit

Der eigentliche Inhalt dieser Arbeit teilt sich in vier Abschnitte auf, welche die folgenden Bezeichnungen tragen:

- **Theorie**
- **Immersed Boundary Methode**
- **Umsetzung des Simulationsverfahrens**
- **Anwendungsfälle**

Der **theoretische** Teil fasst die wichtigsten numerischen Gesichtspunkte zusammen, die als Grundlage für die weiteren Kapitel von Bedeutung sind. Dazu zählen neben den Grundgleichungen der Strömungsmechanik die Finite-Volumen basierte Diskretisierung auf kartesischen Gittern sowie die Vorstellung des Druckkorrekturverfahrens. Außerdem wird die herkömmliche Behandlung von Randbedingungen an den Außengrenzen eines Rechengitters vor Augen geführt, um eine klare Ab-

grenzung zu denjenigen Randbedingungen zu schaffen, die an eingetauchten Oberflächengittern zu finden sind. Der Vollständigkeit halber wird das Lösen der auftretenden unstrukturierten Gleichungssysteme diskutiert.

Der Abschnitt mit dem Titel **Immersed Boundary Methode** gibt einen Überblick zur Entstehung und Entwicklung der Immersed Boundary Methode. Er erhebt keinerlei Anspruch auf Vollständigkeit; stattdessen sollen wichtige Standpunkte der Forschung hervorgehoben und Aspekte beleuchtet werden, die für die vorliegende Arbeit von besonderer Relevanz sind. Neben den Vor- und Nachteilen der Methodik soll auch die Frage nach der Praxistauglichkeit beantwortet werden.

Im Kapitel **Umsetzung des Simulationsverfahrens** folgt die Beschreibung aller eigenständig erarbeiteter und umgesetzter Methoden. Die Reihenfolge entspricht dabei nicht dem zeitlichen Verlauf der Umsetzung sondern einer sinnvollen thematischen Anordnung. Dieser Teil wird ergänzt durch Test- und Validierungsfälle, die die Funktionsweise und die Korrektheit der Implementierung im Rahmen der gemachten Annahmen belegen. Infolgedessen wird auf einen separaten Abschnitt zur Validierung und Verifizierung verzichtet. Wann immer es notwendig erscheint, wird Bezug auf den numerischen Aufwand sowie das Fehlerverhalten genommen. Insbesondere dieser Teil der Arbeit ist durch eine Vielzahl schematischer Darstellungen angereichert. Wenn dies zu einer besseren Übersichtlichkeit führt, werden gelegentlich auch 2D Ansichten einer eigentlich dreidimensionalen Situation verwendet.

Das Kapitel **Anwendungsfälle** beschreibt den Einsatz des entwickelten Verfahrens jenseits einfacher Validierungsfälle. Dabei teilt sich das Anwendungsgebiet in zwei Teile: 1. *Strömung in den zentralen Atemwegen* und 2. *Strömung um einen elastischen Zylinder*. Die Atemwegsströmungen bilden hierbei einen besonderen Schwerpunkt. Beim zweiten Anwendungsfall steht die Kopplung des CFD-Verfahrens mit dem eigens entwickelten FEM-Programm zur Berechnung strukturmechanischer Deformationen im Vordergrund.

Im Anschluss der vorgestellten Kapitel findet sich eine **Zusammenfassung**, welche die wesentlichen Erkenntnisse der Arbeit wieder- und einen Ausblick für die Zukunft gibt. Der **Anhang** ist in zwei Abschnitte gegliedert; der erste umfasst zusätzliche Informationen zur Umsetzung, der zweite zur Anwendung.





## 2. Theorie

In dem vorliegenden Kapitel sollen die theoretischen Grundlagen dargestellt werden, die zum Verständnis der weiteren Abschnitte erforderlich sind. Hiermit sind insbesondere Kapitel 3 und 4 gemeint, in denen die Immersed Boundary Methode sowie die eigene programmtechnische Umsetzung der Numerik beschrieben ist. Ausgehend von den Grundgleichungen der Strömungsmechanik werden zunächst die Navier-Stokes Gleichungen hergeleitet. Anschließend wird die numerische Behandlung dieser Gleichungen diskutiert, wobei auf jeden Term einzeln eingegangen wird. Ein wichtiger Aspekt bei der numerischen Strömungsmechanik ist die Kopplung zwischen dem Druck mit dem Geschwindigkeitsfeld, da für die Bestimmung des Drucks keine explizite Gleichung zur Verfügung steht. Es folgt eine kurze Übersicht über die konventionelle Behandlung von Randbedingungen an den Begrenzungen des Rechengitters. Die Diskretisierung der Bilanzgleichungen durch die Finite-Volumen-Methode führt auf ein lineares Gleichungssystem. Die Algorithmen zum Lösen derartiger Gleichungssysteme sind von hoher Bedeutung für die Effizienz des gesamten Verfahrens und daher ebenfalls Gegenstand dieses Theorieabschnitts.

### 2.1. Bilanzgleichungen der Strömungsmechanik

#### Massenbilanz

Das Gesetz von der Erhaltung der Masse sagt aus, dass in einem betrachteten System zu keinem Zeitpunkt Masse erzeugt oder vernichtet wird. Die Massenbilanz in der für die Fluidmechanik gängigen raumfesten (Eulerschen) Betrachtungsweise [103] lautet:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0, \quad (2.1)$$

wobei  $\rho$  die Dichte,  $t$  die Zeit,  $u_i$  die Geschwindigkeitskomponenten und  $x_i$  die Raumkoordinaten in Einsteinscher Indexnotation ( $i = 1, 2, 3$ ) darstellen. Ist die Dichte des Fluids weder vom Ort noch von der Zeit abhängig, so wird das Strömungsfeld als *inkompressibel* bezeichnet. Dadurch vereinfacht sich die Massenbilanz zu:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0. \quad (2.2)$$

Dieser Ausdruck ist equivalent zur Divergenz des Geschwindigkeitsfelds, weshalb inkompressible Strömungen auch *divergenzfrei* genannt werden.

### Impulsbilanz

Die Impulsbilanz (hier ebenfalls in Eulerscher Betrachtungsweise) stellt das zweite Newtonsche Gesetz dar. Es besagt, dass die Impulsänderungen eines betrachteten Fluidelements mit den Kräften, die auf dieses einwirken, im Gleichgewicht stehen.

$$\frac{\partial(\varrho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\varrho u_j u_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial \pi_{ij}}{\partial x_j} + \varrho f_i \quad (2.3)$$

Die beiden Terme der linken Seite von Gleichung (2.3) beschreiben die Impulsänderungen in Form einer substantiellen Ableitung. Volumenkräfte wie Gravitations- oder Zentrifugalkräfte sind in  $f_i$  zusammengefasst. Der erste Ausdruck auf der rechten Seite beinhaltet spannungsbedingte Kräfte des Fluids. Der Tensor  $\pi_{ij}$  enthält sowohl Scher- als auch Normalspannungen. Die Scherspannungen resultieren aus dem molekularbedingten Impulsaustausch innerhalb des Fluids; die Normalspannungen werden sowohl vom Druck als auch vom molekularen Impulsaustausch hervorgerufen. Für ein Newtonsches Fluid schreibt sich der Tensor  $\pi_{ij}$  als:

$$\pi_{ij} = -\delta_{ij} p + \underbrace{\mu \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)}_{\tau_{ij}} - \frac{2}{3} \mu \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k}. \quad (2.4)$$

Einsetzen von  $\pi_{ij}$  in die Impulsbilanz (2.3) führt mit der Berücksichtigung der Inkompressibilität auf:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{1}{\varrho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right] - \frac{1}{\varrho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + f_i. \quad (2.5)$$

Unter der Annahme, dass die dynamische Viskosität  $\mu$  räumlich konstant ist, vereinfacht sich der Ausdruck zu:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = f_i - \frac{1}{\varrho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2}. \quad (2.6)$$

Dabei ist  $\nu = \mu / \varrho$  die kinematische Viskosität des Fluids. Die partiellen Differentialgleichungen (2.2) und (2.5) bilden die inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen. Sie stellen vier Gleichungen zur Bestimmung der vier Unbekannten ( $u$ ,  $v$ ,  $w$  und  $p$ ) bereit.

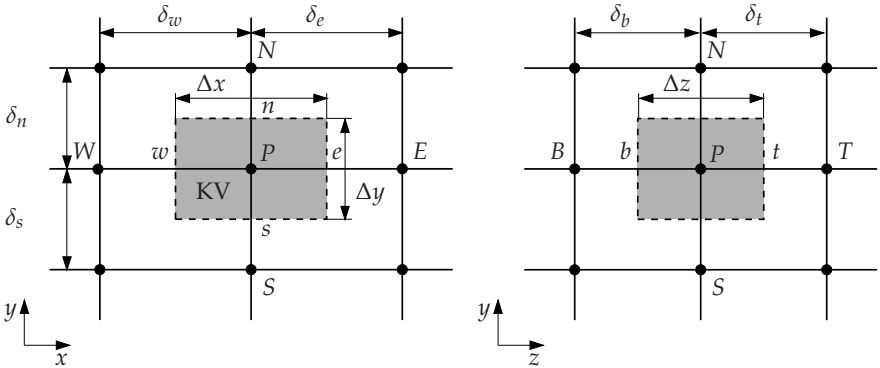
## 2.2. Diskretisierung der Bilanzgleichungen

Zur numerischen Berechnung der unbekannten Feldgrößen  $u, v, w$  und  $p$  müssen die kontinuierlichen Gleichungen (2.5) und (2.2) in räumlich wie zeitlich diskrete Formulierungen überführt werden. Dazu existieren verschiedene Ansätze. Die

Wichtigsten sind die *Finite-Elemente*-, die *Finite-Differenzen*- und die *Finite-Volumen-Methode*. Diese Arbeit basiert vordergründig auf der Finite-Volumen-Methode, die am häufigsten zur Simulation von Strömungen genutzt wird. Im Abschnitt 4.6 wird jedoch auch ein strukturmehchanisches Verfahren besprochen, welches auf der Finite-Elemente-Methode beruht.

### 2.2.1. Finite-Volumen-Methode

Bei der Finite-Volumen-Methode wird der Strömungsbereich mittels eines Rechnengitters in diskrete Kontrollvolumen (KV) eingeteilt. Ein beispielhafter Ausschnitt eines solchen Gitters ist in Grafik 2.1 dargestellt. Benachbarte Kontrollvolumen einer Zelle  $P$  werden nach der Kompassnotation mit  $NB = N, S, E, W, T, B$  bezeichnet. Alle Feldvariablen werden im geometrischen Zentrum der Kontrollvolumen gespeichert.



**Abb. 2.1.:** Gitterausschnitt mit Darstellung eines Kontrollvolumens  $P$ . Benachbarte Zellen werden mit Großbuchstaben ( $N, S, E, W, T, B$ ), angrenzende Kontrollvolumenflächen  $f$  durch Kleinbuchstaben ( $n, s, e, w, t, b$ ) gemäß der Kompassnotation gekennzeichnet.

chert (*nicht-versetzte* Gitter). Diese Anordnung ist die am häufigsten anzutreffende Umsetzung des Finite-Volumen Verfahrens [33]. Ausgangspunkt des Ansatzes ist die Integration der Differentialgleichung über das Kontrollvolumen. Für die Auswertung des Integrals sind weiterhin Annahmen über den Verlauf der Variable innerhalb des Kontrollvolumens notwendig. Die Diskretisierung für eine Zelle  $P$  führt auf eine Gleichung, welche neben dem eigenen Beitrag auch entsprechende Anteile (*Koeffizienten*) benachbarter Zellen enthält. Die Vereinigung aller Gleichungen resultiert schließlich in einem linearen Gleichungssystem, welches zur Bestimmung der gesuchten Variablen gelöst werden muss. Zur Diskretisierung der Navier-Stokes Gleichungen wird auf eine allgemeine (inkompressible) Form einer Transportglei-

chung [92] für eine beliebige Variable  $\phi$  zurückgegriffen:

$$\underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\text{Instat.}} + \underbrace{u_j \frac{\partial \phi}{\partial x_j}}_{\text{Konv.}} = \underbrace{\frac{1}{\varrho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right)}_{\text{Diff.}} + \underbrace{S^\phi}_{\text{Quelle}} \quad (2.7)$$

Diese Gleichung beinhaltet einen instationären, einen konvektiven und einen diffusiven Anteil sowie einen Quellterm. Je nach Wahl der Veränderlichen  $\phi$ , des Diffusionskoeffizienten  $\Gamma^\phi$  und des Quellterms  $S^\phi$  lassen sich mittels dieser Transportgleichung die inkompressible Massen- oder die Impulsbilanz darstellen. Teile der Gleichung, die nicht den explizit ausgewiesenen Termen zugeordnet werden können, werden im Quellterm berücksichtigt. Die resultierende Gleichung für ein Kontrollvolumen  $P$  schreibt sich mit seinen Koeffizienten  $a_{(\cdot)}$  und dem Quellterm  $S_P$  wie folgt:

$$a_P \phi_P = \sum_{NB} a_{NB} \phi_{NB} + S_P. \quad (2.8)$$

### 2.2.2. Diskretisierung der einzelnen Terme

Im Folgenden ist es das Ziel die Koeffizienten und Quellterme für die einzelnen Ausdrücke der allgemeinen Transportgleichung (2.7) zu bestimmen.

#### Instationärer Term

Der instationäre Term der Impulsgleichungen wird zunächst über das Kontrollvolumen integriert. Die zeitliche Ableitung innerhalb des Volumens  $V_P$  wird dabei als konstant angenommen.

$$\int \frac{\partial \phi}{\partial t} dV = \frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_P V_P \quad (2.9)$$

In der Arbeit von XUE [129] wird der kompressible instationäre Ausdruck zunächst nach der Produktregel aufgespalten, wobei die zeitliche Änderung der Dichte durch die diskretisierte Massenbilanz ersetzt wird. Der so entstandene Zusatzterm ähnelt dem konvektiven Ausdruck und wird bei der Diskretisierung von eben diesem berücksichtigt.

Für die Approximation der zeitlichen Ableitung gibt es unterschiedliche Herangehensweisen [33]. In diesem Fall wird eine voll implizite Diskretisierung mittels eines quadratischen rückwärtigen Differenzenquotienten verwendet.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_P V_P = \frac{3\phi_P^t - 4\phi_P^{t-\Delta t} + \phi_P^{t-2\Delta t}}{2\Delta t} V_P + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (2.10)$$

Diese Diskretisierung stützt sich auf zwei zurückliegende Zeitstufen und hat eine Fehlerordnung von  $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ . Die Anteile der vorherigen Zeitschritte werden im

Quellterm der allgemeinen Diskretisierungsgleichung (2.8) berücksichtigt. Damit lauten die Beiträge durch die Instationarität:

$$a_{NB} = 0 \quad \text{sowie} \quad a_p = \frac{3}{2} \frac{V_p}{\Delta t} \quad \text{und} \quad S_p = \frac{V_p}{\Delta t} \left( 2\phi_p^{t-\Delta t} - \frac{1}{2}\phi_p^{t-2\Delta t} \right). \quad (2.11)$$

Alle weiteren Terme der Transportgleichung gelten zum aktuellen Zeitpunkt  $t$ . Auf eine explizite Kennzeichnung wird aus Gründen der besseren Übersicht jedoch verzichtet.

### Konvektiver Term

Die räumliche Integration des nicht-linearen konvektiven Terms wird nach dem Satz von Gauss in ein Oberflächenintegral überführt.

$$\int u_j \frac{\partial \phi}{\partial x_j} dV = \int u_j \phi dA_j \quad (2.12)$$

Dieses kann mit Hilfe der Mittelpunktsregel (2. Ordnung) als eine Summe über alle Flächen approximiert werden. Dabei beschreibt  $\phi_f$  den Variablenwert im Zentrum der Fläche, und  $F_f = u_j \cdot A_{j,f}$  kann als *Fluss* über die Fläche aufgefasst werden. Der Flächennormalenvektor  $A_{j,f}$  zeigt stets weg vom betrachteten Kontrollvolumen  $P$  in Richtung der entsprechenden Nachbarzelle.

$$\int u_j \phi dA_j \approx \sum_f u_{j,f} \phi_f A_{j,f} = \sum_f \phi_f F_f. \quad (2.13)$$

Die Flüsse  $F_f$  an den Kontrollvolumenflächen werden aus den Geschwindigkeiten einer vorhergehenden Lösungsiteration  $(\cdot)^*$  ermittelt.

$$\begin{aligned} F_e &= u_e^* \Delta y \Delta z & F_n &= v_n^* \Delta x \Delta z & F_t &= w_t^* \Delta x \Delta y \\ F_w &= -u_w^* \Delta y \Delta z & F_s &= -v_s^* \Delta x \Delta z & F_b &= -w_b^* \Delta x \Delta y \end{aligned} \quad (2.14)$$

Dieses Vorgehen führt zu einer Linearisierung des nicht-linearen konvektiven Terms. Da an den Kontrollvolumenflächen keine Geschwindigkeiten gespeichert werden, müssen diese an den Flächen interpoliert werden.

$$u_{i,f} = (1 - \lambda_f) u_{i,F} + \lambda_f u_{i,P} \quad (2.15)$$

Die Definition der Hebelarme  $\lambda_f$  findet sich in Gleichung (2.17). Zur Approximation des Variablenwertes an den Kontrollvolumenflächen ( $\phi_f$ ) stehen zwei Möglichkeiten zur Verfügung: Das Upwind-Differenzen-Schema (UDS) und das Zentral-Differenzen-Schema (CDS). Beide unterscheiden sich wesentlich in der Fehlerordnung und hinsichtlich der numerischen Stabilität. Diese zwei Schemata sowie eine Mischform aus beiden (*Flux Blending*) werden nun näher erläutert.

### CDS

Das Zentral-Differenzen-Schema approximiert die Variable  $\phi_f$  an der Fläche über eine lineare Interpolation mit Hilfe des Hebelarmes  $\lambda_f$  zwischen dem betrachteten ( $P$ ) und dem benachbarten Kontrollvolumen ( $F$ ). Dieses Verfahren ist von zweiter Ordnung, jedoch nur für kleine Gitterweiten stabil [33].

$$\phi_f = (1 - \lambda_f) \phi_F + \lambda_f \phi_P \quad (2.16)$$

Die Hebelarme sind durch die Geometrie des Gitters gegeben, wobei  $x_{i,f}$  den Ortsvektor des Flächenmittelpunkts darstellt.

$$\lambda_f = \frac{|x_{i,f} - x_{i,P}|}{|x_{i,F} - x_{i,P}|} \quad (2.17)$$

Für ein das zentrale Differenzenschema lauten die Koeffizienten:

$$\begin{aligned} a_E &= (1 - \lambda_e) F_e & a_N &= (1 - \lambda_n) F_n & a_T &= (1 - \lambda_t) F_t \\ a_W &= (1 - \lambda_w) F_w & a_S &= (1 - \lambda_s) F_s & a_B &= (1 - \lambda_b) F_b \end{aligned} \quad (2.18)$$

Die weiteren Beiträge zur Diskretisierung lauten:

$$a_P = \sum_{NB} a_{NB} \quad \text{und} \quad S_P = 0. \quad (2.19)$$

### UDS

Beim Upwind-Differenzen-Schema wird die Variable an der Kontrollvolumenfläche durch das entsprechend stromauf liegende Kontrollvolumen approximiert<sup>1</sup>. Dieses Verfahren ist lediglich von erster Fehlerordnung bezüglich der Gitterweite, jedoch numerisch uneingeschränkt stabil [33]. Für Werte der Variable  $\phi$  an den Kontrollvolumenflächen ergibt sich für das UDS Verfahren:

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_P, & \text{für } F_f > 0 \\ \phi_F, & \text{für } F_f < 0 \end{cases} \quad (2.20)$$

Für die Darstellung der Koeffizienten findet der Maximum-Operator Anwendung, der den numerisch größeren Wert zweier Variablen liefert.

$$\begin{aligned} a_E &= -\max(-F_e, 0) & a_N &= -\max(-F_n, 0) & a_T &= -\max(-F_t, 0) \\ a_W &= -\max(-F_w, 0) & a_S &= -\max(-F_s, 0) & a_B &= -\max(-F_b, 0) \end{aligned} \quad (2.21)$$

Die übrigen Beiträge zur Diskretisierung lauten damit:

$$a_P = \sum_{NB} a_{NB} \quad \text{und} \quad S_P = 0. \quad (2.22)$$

---

<sup>1</sup> Bezüglich der Kontrollvolumenfläche ist von dem stromauf liegenden KV ein größerer Einfluss zu erwarten als von dem stromab gelegenen.

### Flux Blending

Beim *Flux Blending* werden sowohl UDS als auch CDS Anteile gleichzeitig genutzt. Dabei findet eine Gewichtung (*Blending*) über einen Faktor  $\beta$  zwischen beiden Verfahren statt. Der Konvektionsfluss an einer Fläche  $f$  ist dann gegeben durch:

$$\phi_f = \beta \phi_f^{\text{CDS}} + (1 - \beta) \phi_f^{\text{UDS}}. \quad (2.23)$$

Ein rein zentrales Differenzenschema wird durch  $\beta = 1$  erreicht. Für Werte von  $0 < \beta < 1$  wird eine Mischung aus CDS und UDS ermöglicht, während  $\beta = 0$  ein pures Upwind Verfahren zur Folge hat. In der programmtechnischen Umsetzung [104] wird ein *Deferred Correction* [64] Ansatz verwendet. Dieser basiert auf dem UDS Verfahren, wobei ein weiterer Korrekturanteil  $\phi_f^\Delta$  explizit auf der rechten Seite des Gleichungssystems zu berücksichtigen ist. Derart lassen sich auf einheitliche Weise neben dem CDS auch andere Verfahren höherer Ordnung realisieren.

$$\phi_f = \phi_f^{\text{UDS}} + \beta (\phi_f^{\text{CDS}} - \phi_f^{\text{UDS}}) = \phi_f^{\text{UDS}} + \beta \phi_f^\Delta \quad (2.24)$$

Der stets vorhandene UDS Anteil stärkt die Diagonaldominanz des Gleichungssystems und damit die numerische Stabilität des gesamten Verfahrens.

Die Koeffizienten beim Flux Blending entsprechen den denen des UDS Verfahrens (2.21) und (2.22). Weitere Beiträge kommen nur zum Quellterm hinzu.

$$S_p = \sum_f F_f \beta \phi_f^\Delta \quad (2.25)$$

### Diffusiver Term

Das Volumenintegral des diffusiven Terms kann nach dem Satz von Gauss in ein Oberflächenintegral überführt werden. Die Dichte  $\varrho$  wird im Folgenden dem Diffusionskoeffizienten  $\Gamma^\phi$  zugeschrieben, auf eine gesonderte Kennzeichnung wird jedoch verzichtet.

$$\int \frac{1}{\varrho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) dV = \int \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_j} dA_j \quad (2.26)$$

Das Oberflächenintegral lässt sich schließlich schreiben als eine Summe über alle angrenzenden Kontrollvolumenflächen  $f$ .

$$\int \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_j} dA_j \approx \sum_f \Gamma_f^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \Big|_f A_{j,f} \quad (2.27)$$

Der Diffusionskoeffizient an der Fläche  $\Gamma_f^\phi$  wird entsprechend eines Hebelarmes  $\lambda_f$  linear zwischen den Kontrollvolumen  $P$  und  $F$  interpoliert.

$$\Gamma_f^\phi = (1 - \lambda_f) \Gamma_P^\phi + \lambda_f \Gamma_F^\phi \quad (2.28)$$

Mit dem Abstand  $\delta_f$  (2.30) zwischen den Kontrollvolumenzentren wird der Gradient an der Fläche zentral approximiert. Durch die Beschränkung auf rein kartesische

Gitter ist eine weitere Korrektur des Gradienten, wie sie z. B. in [29] vorgestellt ist, nicht notwendig.

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right|_f = \frac{(\phi_F - \phi_P)}{\delta_f} \quad (2.29)$$

Der Abstand zwischen den Kontrollvolumenzentren ist wie folgt definiert:

$$\delta_f = |x_{i,F} - x_{i,P}|. \quad (2.30)$$

Die vollständige Diskretisierung des Diffusionsterms, welche für ein äquidistantes Gitter eine Fehlerordnung von  $\mathcal{O}(\Delta x^2)$  aufweist, lautet damit:

$$\sum_f \Gamma_f^\phi \left. \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right|_f A_{j,f} = \sum_f \left[ (1 - \lambda_f) \Gamma_F^\phi + \lambda_f \Gamma_P^\phi \right] \frac{(\phi_F - \phi_P)}{\delta_f} A_{j,f}. \quad (2.31)$$

Um das Ergebnis in der allgemeinen Form (2.8) darzustellen, werden die einzelnen Anteile nach den Koeffizienten sortiert:

$$a_{NB} = \frac{\Gamma_f^\phi}{\delta_f} A_f; \quad a_P = \sum_{NB} a_{NB}; \quad S_P = 0. \quad (2.32)$$

### Quellterm

Der Quellterm der diskretisierten Impulsbilanzgleichungen (2.5) besteht aus dem Anteil des Druckgradienten und den Volumenkräften.

$$S^\phi = -\frac{1}{\varrho} \frac{\partial p}{\partial x_j} + f_i \quad (2.33)$$

Beide Ausdrücke werden als konstant innerhalb des Kontrollvolumens angesehen. Das Volumenintegral über den Quellterm wird mit dem Satz von Gauss in ein Oberflächenintegral und anschließend in eine Summe über alle angrenzenden Kontrollvolumenflächen überführt.

$$\int -\frac{1}{\varrho} \frac{\partial p}{\partial x_j} + f_i \, dV = -\frac{1}{\varrho_P} \sum_f \left( p_f A_{j,f} \right) + f_{i,P} V_P \quad (2.34)$$

Die nun benötigten Drücke an den Kontrollvolumenflächen  $p_f$  werden aus angrenzenden Zellen der vorherigen Lösungssiteration  $(\cdot)^*$  interpoliert.

$$p_f = (1 - \lambda_f) p_F^* + \lambda_f p_P^* \quad (2.35)$$

In dieser Formulierung fällt der Druck am eigentlichen Kontrollvolumen  $P$  weg, was theoretisch zu unphysikalischen Lösungen führen kann. Dies wird jedoch durch die im Abschnitt 2.3 vorgestellte Interpolation nach RHIE und CHOW unterbunden. Im Sinne der allgemeinen Transportgleichung (2.7) wird der diskretisierte Quellterm jedoch wieder zusammengefasst dargestellt.

$$\int S^\phi \, dV = S_P^\phi V_P \quad (2.36)$$



### 2.2.3. Vollständig diskretisierte Transportgleichung

An dieser Stelle werden die Ergebnisse der zuvor diskretisierten Einzelterme der Impulsbilanzgleichungen zusammengefasst. Es ist dabei weiterhin zu berücksichtigen, dass alle Terme, die nicht anderweitig gekennzeichnet sind, zum aktuellen Zeitpunkt  $t$  gelten.

$$\begin{aligned}
 a_{NB} &= -\max(-F_f, 0) + \frac{\Gamma_f^\phi}{\delta_f} A_f \\
 a_P &= \frac{3}{2} \frac{V_P}{\Delta t} + \sum_{NB} a_{NB} \\
 S_P &= \left( S_P^\phi + \frac{2\phi_P^{t-\Delta t} - \phi_P^{t-2\Delta t}}{2\Delta t} \right) V_P + \sum_f F_f \beta \phi_f^\Delta
 \end{aligned} \tag{2.37}$$

## 2.3. Kopplung von Druck- und Geschwindigkeitsfeld

Da für die Bestimmung des Drucks keine explizite Gleichung zur Verfügung steht, muss an dieser Stelle ein anderer Weg gewählt werden. Es wird das SIMPLE<sup>2</sup> Druckkorrekturverfahren genutzt, welches sich implizit auf die diskretisierte Massenbilanz stützt. Es beruht auf der Tatsache, dass beim Vorliegen der korrekten Lösung für den Druck die Impulsbilanzgleichungen<sup>3</sup> die Massenbilanz erfüllen. Ursprünglich wurde dieser Algorithmus für eine versetzte Variablenanordnung entwickelt. Später, durch die Einführung einer geeigneten Interpolationsvorschrift zur Bestimmung der Massenflüsse an den Kontrollvolumenflächen nach RHIE und CHOW [98], wurde der Algorithmus auch für nicht-versetzte Gitter anwendbar.

### Geschwindigkeitsinterpolation nach RHIE und CHOW [98]

Die diskretisierte Massenbilanz (2.50) des Druckkorrekturverfahrens (vergleiche Abschnitt 2.3.1) basiert auf den Massenflüssen an den Kontrollvolumenflächen. Hierfür ist eine Interpolation notwendig, da die Geschwindigkeiten im Zentrum der Kontrollvolumen gespeichert werden. Ein lineares Schema wie

$$u_{i,f} = (1 - \lambda_f) u_{i,F} + \lambda_f u_{i,P} \tag{2.38}$$

kann jedoch zur Entkopplung zwischen dem Druck- und den Geschwindigkeitsfeldern führen, da während der Auswertung von (2.50) der Wert des betrachteten Kontrollvolumens  $P$  nicht mehr enthalten ist. Um diese Problematik zu umgehen, werden in dem Ansatz nach RHIE und CHOW [98] zunächst die diskretisierten Im-

<sup>2</sup>Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations, PATANKAR und SPALDING [93].

<sup>3</sup>Die Impulsbilanzgleichungen enthalten den Gradienten des Drucks.

pulsbilanzgleichungen nach den Geschwindigkeiten aufgelöst:

$$u_{i,p} = \underbrace{\frac{\sum_{NB} (a_{NB} u_{i,NB}) + \hat{S}_p}{a_p}}_{\hat{u}_{i,p}} - \frac{V_p}{a_p} \frac{\partial p}{\partial x_i} \Big|_p \quad (2.39)$$

Dabei wird vom Quellterm  $S_p$  der Druckgradient abgespalten und der verbleibende Rest in  $\hat{S}_p$  umbenannt. Der erste Term ( $\hat{u}_{i,p}$ ) wird auch als *Pseudogeschwindigkeit* bezeichnet; eine Größe, die sich ohne den Einfluss des Drucks einstellen würde. Bei der Bestimmung der Werte  $u_{i,f}$  auf den Kontrollvolumenflächen werden beide Anteile getrennt behandelt. Die Pseudogeschwindigkeiten werden linear interpoliert.

$$u_{i,f} = \underbrace{(1 - \lambda_f) \hat{u}_{i,F} + \lambda_f \hat{u}_{i,p}}_{\hat{u}_{i,f}} - \left( \frac{V_p}{a_p} \frac{\partial p}{\partial x_i} \right)_f \quad (2.40)$$

Der abgespaltene Druckterm an der Fläche wird direkt über die angrenzenden Kontrollvolumina approximiert.

$$\left( \frac{V_p}{a_p} \frac{\partial p}{\partial x_i} \right)_f \approx \left[ (1 - \lambda_f) \frac{V_p}{a_p} \Big|_F + \lambda_f \frac{V_p}{a_p} \Big|_p \right] \frac{\partial p}{\partial x_i} \Big|_f \quad (2.41)$$

Dabei ist der Druck im betrachteten Kontrollvolumen  $P$  direkt enthalten, wodurch ein Entkoppeln zwischen Druck- und Geschwindigkeitsfeldern verhindert wird. Ein Einsetzen von (2.41) in (2.40) führt auf die vollständige Interpolationsvorschrift.

$$u_{i,f} = (1 - \lambda_f) \hat{u}_{i,F} + \lambda_f \hat{u}_{i,p} - \left[ (1 - \lambda_f) \frac{V_p}{a_p} \Big|_F + \lambda_f \frac{V_p}{a_p} \Big|_p \right] \frac{\partial p}{\partial x_i} \Big|_f \quad (2.42)$$

Weiterentwicklungen dieses Ansatzes von LIEN und LESCHZINER [76] bzw. KNACKE [69] berücksichtigen in konsistenter Weise in (2.41) auch den transienten Anteil des Quellterms sowie die Verwendung von Relaxationsparametern.

### Geschwindigkeitskorrektur

Die anfänglich gewählte Initialisierung des Druckfelds  $p^*$  wird unter normalen Bedingungen nicht der tatsächlichen Lösung des Drucks  $p$  entsprechen. Die auf der Basis von  $p^*$  berechneten Geschwindigkeiten  $u_i^*$  werden daher auch noch nicht die Massenerhaltung erfüllen. Durch eine entsprechende Korrektur des Drucks und der Geschwindigkeiten ( $p'$  bzw.  $u_i'$ ) kann dies jedoch erreicht werden.

$$\begin{aligned} p &= p^* + p' \\ u_i &= u_i^* + u_i' \end{aligned} \quad (2.43)$$

Dabei wird zunächst die Druckkorrektur  $p'$  bestimmt und anschließend daraus die Korrektur der Geschwindigkeiten. Zur Herleitung der Geschwindigkeitskorrekturgleichungen für das Kontrollvolumen  $P$  wird der Ausdruck (2.39) in die Beziehung

für die Geschwindigkeitskorrektur ( $u'_i = u_i - u_i^*$ ) eingesetzt, wobei alle  $i$  Raumrichtungen berücksichtigt werden.

$$u'_{i,p} = \underbrace{\hat{u}_{i,p} - \frac{V_p}{a_p} \frac{\partial p}{\partial x_i} \Big|_P}_{u_{i,p}} - \underbrace{\left[ \hat{u}_{i,p}^* - \frac{V_p}{a_p} \frac{\partial p^*}{\partial x_i} \Big|_P \right]}_{u_{i,p}^*} \quad (2.44)$$

Unter der Annahme, dass die Differenz  $(\hat{u}_{i,p} - \hat{u}_{i,p}^*)$  mit fortschreitender Konvergenz verschwindet und unter Beachtung von  $(p' = p - p^*)$  verbleibt nunmehr

$$u'_{i,p} = - \frac{V_p}{a_p} \frac{\partial p'}{\partial x_i} \Big|_P. \quad (2.45)$$

Einsetzen von (2.45) in (2.43) führt auf die vollständigen Geschwindigkeitskorrekturgleichungen für das Kontrollvolumen  $P$ .

$$u_{i,p} = u_{i,p}^* - \frac{V_p}{a_p} \frac{\partial p'}{\partial x_i} \Big|_P \quad (2.46)$$

Die Korrekturgleichungen für die Geschwindigkeiten auf den Kontrollvolumenflächen lauten:

$$u_{i,f} = u_{i,f}^* - \underbrace{\left( \frac{\Delta V_p}{a_p} \frac{\partial p'}{\partial x_i} \right)_f}_{u'_{i,f}}. \quad (2.47)$$

Für den ersten Term wird auf die entkopplungsfreie Interpolation nach (2.42) zurückgegriffen.

$$u_{i,f}^* = (1 - \lambda_f) \hat{u}_{i,f}^* + \lambda_f \hat{u}_{i,p}^* - \left[ (1 - \lambda_f) \frac{V_p}{a_p} \Big|_F + \lambda_f \frac{V_p}{a_p} \Big|_P \right] \frac{\partial p^*}{\partial x_i} \Big|_f \quad (2.48)$$

Die Interpolation des zweiten Ausdrucks nach (2.41) resultiert in:

$$u'_{i,f} = \left[ (1 - \lambda_f) \frac{V_p}{a_p} \Big|_F + \lambda_f \frac{V_p}{a_p} \Big|_P \right] \frac{\partial p'}{\partial x_i} \Big|_f. \quad (2.49)$$

### 2.3.1. SIMPLE Druckkorrekturverfahren

Grundlage für die Berechnung der Druckkorrektur ist die diskretisierte Massenbilanz.

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} \Big|_P \approx \left( \frac{u_e - u_w}{\Delta x} + \frac{v_n - v_s}{\Delta y} + \frac{w_t - w_b}{\Delta z} \right) V_P \quad (2.50)$$

Für die Geschwindigkeiten  $u_{i,f}$  an den Kontrollvolumenflächen werden die zuvor hergeleiteten Beziehungen (2.47) mit (2.48) und (2.49) eingesetzt. Dies führt auf eine Gleichung zur Berechnung der Druckkorrektur  $p'$ .

$$a_p p'_p = \sum_{NB} a_{NB} p'_{NB} + S_p \quad (2.51)$$

Ein Vereinigen der Gleichungen aller Kontrollvolumen führt wie bei den Impulsbilanzgleichungen auf ein Gleichungssystem, welches numerisch gelöst werden muss. Der vollständige iterative Berechnungsablauf des Strömungsfelds unter Verwendung der SIMPLE Druckkorrektur ist in folgender Box zusammengefasst. Um das Druckniveau der inkompressiblen Strömungssimulation festzulegen, wird das gesamte Druckfeld korrigiert. Dazu wird der berechnete Druck eines gewählten *Referenzpunkts* vom gesamten Feld abgezogen. Im Referenzpunkt herrscht somit ein Druck von  $p = 0$ .

1. Abschätzung des Druckfelds  $p^*$
2. Lösen der Impulsgleichungen  $u_i^*$
3. Berechnung des Massenflusses an den KV Flächen  $F_f$
4. Lösen der Druckkorrekturgleichung  $p'$
5. Korrektur des Drucks:  $p = p^* + p'$
6. Korrektur der Geschwindigkeiten:  $u_i = u_i^* + u'_i$
7. Gehe zu Abschnitt 2. bis  $p' \approx 0$

### 2.4. Randbedingungen

Um die diskretisierten Gleichungen der Impulsbilanzen und der Druckkorrektur numerisch zu lösen, ist es erforderlich *Randbedingungen* an den Außengrenzen des Rechengitters zu definieren und zu erfüllen. Aus rein mathematischer Sicht werden zwei wesentliche Randbedingungstypen unterschieden. Bei einem s. g. *Dirichlet*-Rand wird ein Wert der Variable  $\phi$  an der Berandung  $\partial\Omega$  direkt vorgegeben:

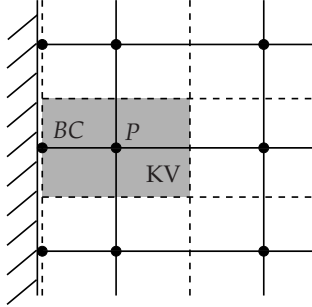
$$\phi = B_1 \quad \text{auf} \quad \partial\Omega \quad (2.52)$$

Bei einer *Neumann*-Randbedingung hingegen wird der Gradient der Variable in einer Richtung  $n$  vorgeschrieben.

$$\frac{\partial\phi}{\partial n} = B_2 \quad \text{auf} \quad \partial\Omega \quad (2.53)$$

An dieser Stelle wird die konventionelle Umsetzung von Randbedingungen an den äußeren Begrenzungen des Rechengebiets kurz vorgestellt. Die Realisierung von Randbedingungen an eingetauchten Oberflächengittern (*Immersed Boundaries*) wird in Abschnitt 4.5 ausführlich diskutiert.

Die Situation an der Gitterberandung ist in Abbildung 2.2 verdeutlicht. Die Rand-



**Abb. 2.2.:** Das Kontrollvolumen  $P$  grenzt an den Rand des Rechengebiets. Auf dem Rand selbst liegt ein fiktives Kontrollvolumen  $BC$ , welches keine räumliche Ausdehnung besitzt.

bedingungen sind i. A. an der Position einer Kontrollvolumenfläche und nicht im Zentrum zu erfüllen. Um dies zu erreichen, werden fiktive Kontrollvolumen (s. g. *Randzellen*) zur Verfügung gestellt, die am Rande des Rechengebiets gelegen sind und selbst keine räumliche Ausdehnung besitzen. Damit fällt die Position des Zellzentrums ( $BC$ ) mit der Lage der Kontrollvolumenfläche (*Randfläche*) zusammen, an der die Randbedingung zu erfüllen ist. Der Wert einer Variableninterpolation nach (2.16) auf solch eine Randfläche wird somit allein durch den in der Randzelle vorliegenden Wert bestimmt. Je nach Randbedingungstyp werden die Variablenwerte für die Randzellen gesetzt oder modifiziert, um die geforderte Bedingung zu erfüllen.

### Einströmrund

Beim Einströmrund werden die zum Lösen der Impulsbilanzgleichungen geforderten Geschwindigkeiten  $u_i^{IN}$  auf der Randzelle vorgegeben (Dirichlet-Rand). Das Produkt aus vorgegebener Geschwindigkeit und zugehörigem Koeffizienten ist somit bekannt und geht auf der rechten Seite des Gleichungssystems ein.

$$a_P u_{i,P} - \sum_{NB} a_{NB} u_{i,NB} = S_P + \sum_{BC} a_{BC}^{IN} u_{i,BC}^{IN} \quad (2.54)$$

In (2.54) steht der Index  $BC$  stellvertretend für alle an  $P$  angrenzenden Kontrollvolumen, die eine Randzelle vom Typ Einströmrund darstellen. Dementsprechend

umfasst der Index  $NB$  hier nur die verbleibenden inneren Nachbarzellen. Beim Lösen der Druckkorrektur wird ähnlich vorgegangen, wobei zunächst die Werte der Druckkorrektur  $p'$  linear vom Strömungsfeld auf die Randzelle extrapoliert werden.

### Ausströmrund

Der Ausströmrund wird im stationären als gradientenfrei in Randnormalenrichtung  $n$  angenommen (Neumann-Rand).

$$\frac{\partial u_i}{\partial n} = 0 \quad (2.55)$$

Dazu werden formal die Geschwindigkeiten der Randzelle ( $BC$ ) mit denen des betrachteten Kontrollvolumens ( $P$ ) gleichgesetzt. Da jedoch der zentrale Koeffizient der Summe aller Nachbarkoeffizienten entspricht, heben sich diese Anteile gegeneinander auf. Es liegt also nahe, den Beitrag über die Randzelle erst gar nicht zu berücksichtigen.

Im Instationären wird eine s. g. *konvektive* Bedingung [108] präferiert, wobei mit  $\bar{U}$  eine mittlere konvektive Ausströmgeschwindigkeit bezeichnet wird.

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \bar{U} \frac{\partial u_i}{\partial n} = 0 \quad (2.56)$$

Dieser Ausdruck wird für die erste Zelle im Strömungsgebiet diskretisiert und dann nach der gesuchten Geschwindigkeit auf dem Rand  $u_i^{out}$  aufgelöst. Die Details finden sich in der Arbeit von XUE [129]. Anschließend wird der Rand im Sinne einer Dirichlet-Randbedingung behandelt.

Zur Bestimmung der Massenflüsse über die Randflächen werden die Geschwindigkeiten konstant nach außen auf die Randzellen  $BC$  extrapoliert. Um stets die globale Massenbilanz zu erfüllen und damit die Konvergenz zu beschleunigen, werden die Geschwindigkeiten der Randzellen korrigiert, wie z. B. von SOHANKAR et al. [108] vorgestellt.

$$u_i^{out*} = u_i^{out} \cdot \Psi \quad \text{mit} \quad \Psi = \frac{\dot{m}_{IN}}{\dot{m}_{OUT}} \quad (2.57)$$

Der Korrekturfaktor  $\Psi$  bestimmt sich aus dem Verhältnis aller ein- ( $\dot{m}_{IN}$ ) bzw. ausströmenden Massenflüsse ( $\dot{m}_{OUT}$ ). Der Druck  $p$  sowie die Druckkorrektur  $p'$  werden linear auf die Randzellen extrapoliert.

### Wandrand

An einer Wandberandung haftet das Fluid, so dass dieses bei ruhender Wand keine Geschwindigkeit aufweist ( $u_i^{wall} = 0$ ). Diese Information wird jedoch selten direkt in Form einer Dirichlet-Randbedingung realisiert [33], um die Geschwindigkeiten am Rand direkt vorzugeben. Stattdessen kann die Umsetzung auf einer von der

Wand ausgeübten Flächenkraft [129] geschehen.

$$F_i^{WALL} = -pA_i + \mu A_i \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial n} \approx -p^{WALL} A_i + \mu A_i \left( \frac{\bar{u}_i^{WALL} - \bar{u}_i^P}{\delta_{BC}} \right) \quad (2.58)$$

Die Länge  $\delta_{BC}$  entspricht dem Abstand zwischen dem Kontrollvolumenzentrum  $P$  und dem Zentrum der Randfläche  $BC$  gemäß (2.30). Mit  $\bar{u}_i$  wird der parallel zur Wand verlaufende Anteil der Geschwindigkeit  $u_i$  bezeichnet. Er kann bestimmt werden, indem der normal zur Wand projizierte Geschwindigkeitsanteil abgezogen wird.

$$\bar{u}_i = u_i - (u_j \cdot n_j) n_i \quad (2.59)$$

Einsetzen des Ausdrucks in (2.58) liefert:

$$F_i^{WALL} = \underbrace{-p^{WALL} A_i}_{\text{explizit}} - \underbrace{\frac{\mu A}{\delta_{BC}} \left[ u_i^P (1 - n_i^2) \right]}_{\text{implizit}} - \underbrace{\frac{\mu A}{\delta_P} \left[ n_i (n_{i+1} u_{i+1}^P + n_{i+2} u_{i+2}^P) \right]}_{\text{explizit}}. \quad (2.60)$$

Für die Indizes  $i$ ,  $i+1$ ,  $i+2$  gilt in diesem Fall statt der Summenkonvention eine zyklische Permutation, mit der Werte von 1 bis 3 durchlaufen werden. Die einzelnen Terme werden der Kennzeichnung nach implizit im zentralen Koeffizienten oder explizit im Quellterm beachtet [129]. Der Druck und die Druckkorrektur werden linear entlang der Gitterlinien vom Innern des Rechengebiets auf den Rand extrapoliert.

### Symmetrierand

Die Herangehensweise beim Symmetrierand entspricht dem Vorgehen bei der Wandberandung. Hier werden die in Bezug zum Symmetrierand parallelen Anteile der Geschwindigkeiten vom inneren Kontrollvolumen  $P$  auf die Randzelle  $BC$  gesetzt. Dadurch werden die Gradienten in Wandnormalenrichtung sowie die Massenflüsse über die angrenzenden Randflächen eliminiert.

$$\bar{u}_i^{SYM} = u_i^P - (u_j^P n_j) n_i \quad (2.61)$$

Aus der modifizierten Geschwindigkeit wird anschließend eine Flächenkraft bestimmt, deren Anteile analog zur Wandberandung sowohl explizit als auch implizit in die Diskretisierung eingehen. Für den Druck sowie die Druckkorrektur wird eine Nullgradientenbedingung verwendet, so dass auch für die korrigierten Geschwindigkeiten keine Massenflüsse am Symmetrierand auftreten.

## 2.5. Lösen des Gleichungssystems

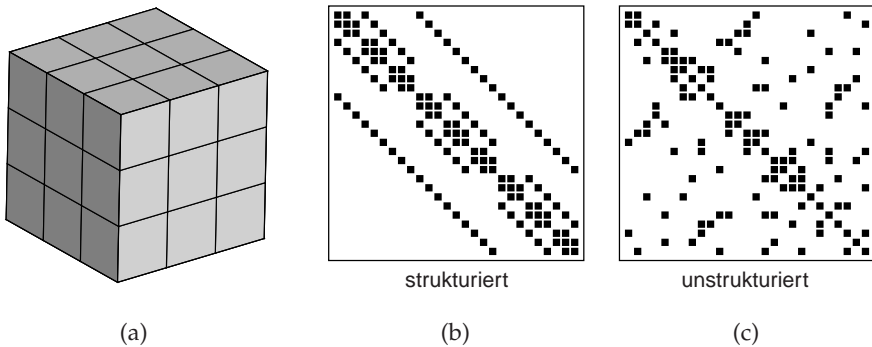
Die Diskretisierung der Impulsbilanzgleichungen und der Druckkorrektur führen jeweils auf ein Gleichungssystem, welches es zu lösen gilt.

$$\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (2.62)$$

Dabei ist  $\mathbf{A}$  die Koeffizientenmatrix,  $\mathbf{x}$  der gesuchte Lösungsvektor und  $\mathbf{b}$  die rechte Seite bzw. die Quelle des Gleichungssystems. Für ein Rechengitter mit  $N^C$  Kontrollvolumen hat die Matrix die Dimension  $(N^C \times N^C)$  und beide Vektoren sind von der Größe  $(N^C)$ .

### 2.5.1. Struktur der Koeffizientenmatrix

Die Struktur der Koeffizientenmatrix ist durch die Beschaffenheit des Rechengitters und die verwendete Diskretisierung gegeben [101]. Im vorliegenden Fall basiert die Diskretisierung lediglich auf den direkt angrenzenden Kontrollvolumen. Sind keine hängenden Knoten präsent, so weist die entsprechende Zeile in der Koeffizi-



**Abb. 2.3.:** Beispielgitter mit 27 Gitterzellen (a); Vergleich der zugehörigen Matrixstruktur bei strukturierter (b) und unstrukturierter (c) Datenhaltung.

entenmatrix neben dem Diagonaleintrag maximal sechs weitere Einträge auf. Die Randzellen sind nicht Bestandteil des Gleichungssystems, so dass für die äußeren Kontrollvolumen entsprechend weniger Matrixeinträge vorhanden sind. In Abbildung 2.3a ist ein beispielhaftes Gitter dargestellt, welches einmal strukturiert und ein anderes Mal unstrukturiert gespeichert wird. Nebenstehend (Abbildung 2.3b/c) ist jeweils die Gestalt der Matrix dargestellt, wobei von Null verschiedene Einträge durch (■) gekennzeichnet sind. Mit der regelmäßigen Indizierung der Zellen entsprechend der drei Raumrichtungen  $(i, j, k)$  besteht die Koeffizientenmatrix bei strukturierter Speicherung aus einer Haupt- und weiteren Nebendiagonalen. Bei einer unstrukturierten Speicherung werden die Zellen durch einen einzigen Index  $(i)$  nummeriert. Die Reihenfolge in der die Zellen nummeriert sind, kann dabei quasi willkürlich ausfallen. Im strukturierten Fall sind die Zellen implizit über die Indizierung der Knotenpunkte definiert. Auch die benachbarten Zellen lassen sich sofort über die Variation eines Indizes (z. B.  $i + 1, j, k$ ) ausmachen. Derartige Informationen müssen in der unstrukturierten Variante explizit in Zuordnungslisten (s. g. *Connectivity*) gespeichert werden. Siehe hierzu Anhang A.2. Wesentliche Vor- und



Nachteile der unterschiedlichen Datenhaltungen sind in Tabelle 2.1 zusammengefasst. Die Entscheidung, ob eine strukturierte oder unstrukturierte Speicherung erfolgen soll, bestimmt neben der Vorgehensweise bei der Diskretisierung insbesondere die in Frage kommenden Gleichungslöser. Bei strukturierten Gittern können beispielsweise die Diagonalen in Form einzelner Vektoren gespeichert werden. Zum iterativen Lösen des Gleichungssystems stehen Verfahren bereit, die diese Struktur gezielt ausnutzen, wie beispielsweise der SIP Solver [113] in der Arbeit von XUE [129]. In der vorliegenden Arbeit wird auf Grund der höheren Flexibilität und ins-

Eigenschaft	strukturiert	unstrukturiert
➤ einfache Speicherung der Matrixstruktur	✓	✗
➤ explizite Speicherung der Koinzidenz	✗	✓
➤ erhöhter Rechenaufwand durch Koinzidenz	✗	✓
➤ Ausnutzung der Diagonalstruktur beim Lösen	✓	✗
➤ geeignet für mehrere Level hängender Knoten	✗	✓
➤ effiziente Löser vorhanden	✓	✓
➤ erhöhter Aufwand beim Postprozess	✓	✗

**Tab. 2.1.:** Vor- und Nachteile strukturierter sowie unstrukturierter Speicherung des Rechengitters.

besondere der Eignung für hängende Knotenelemente eine unstrukturierte Datenhaltung favorisiert.

Da die Koeffizientenmatrix nur dünn besetzt (*sparse*) ist, wird auf eine vollständige Speicherung der gesamten Matrix verzichtet. Stattdessen werden nur die wirklich vorhandenen (von Null verschiedenen) Einträge im *CRS*<sup>4</sup> Format (siehe Anhang A.3) gespeichert. Zum effizienten Lösen solcher Gleichungssysteme werden meist s. g. *Krylov-Unterraum-Verfahren* eingesetzt.

### 2.5.2. Krylov-Unterraum-Verfahren

Um das Gleichungssystem (2.62) lösen zu können, muss die Matrix  $\mathbf{A}$  zunächst *regulär* sein. Statt einer *direkten* Berechnung der Inversen  $\mathbf{A}^{-1}$ , die auf die Lösung  $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}$  führt, wird das Gleichungssystem *iterativ* gelöst. Nach jeder Iteration  $m$  erfolgt eine Aktualisierung des momentanen Lösungsvektors  $\mathbf{x}_m$ . Konvergiert das Verfahren, so gilt:

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \mathbf{x}_m = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}. \quad (2.63)$$

Bei der Auswahl eines geeigneten Löser sind die mathematischen Eigenschaften der Koeffizientenmatrix ausschlaggebend, die für den gegebenen Anwendungsfall der CFD in Tabelle 2.2 zusammengefasst sind. Aufgrund dieser Kriterien verrin-

<sup>4</sup>Compressed-Row-Storage [101]

Eigenschaft	erfüllt?
➤ regulär	✓
➤ groß ( $n \approx 10^3$ bis $10^6$ ) und dünn besetzt	✓
➤ band- oder blockstrukturiert	✗
➤ symmetrische Besetzungsstruktur	✓
➤ Symmetrie ( $\mathbf{A}_{ij} = \mathbf{A}_{ji}$ )	✗
➤ positiv definit	✗
➤ diagonaldominant	✓
➤ gut konditioniert	✗

**Tab. 2.2.:** Mathematische Eigenschaften der Koeffizientenmatrix.

gert sich die Auswahl möglicher bzw. sinnvoller Löser auf die Gruppe der *Krylov-Unterraum-Verfahren*. Ein solcher Unterraum ist definiert [81] als:

$$K_m = \text{span}\{\mathbf{r}_0, \mathbf{A} \mathbf{r}_0, \dots, \mathbf{A}^{m-1} \mathbf{r}_0\}. \quad (2.64)$$

Hierbei sind  $\mathbf{x}_0$  die gewählte Startlösung und  $\mathbf{r}_0 = (\mathbf{A} - \mathbf{b} \mathbf{x}_0)$  das zugehörige Residuum. Die  $m$ -te Iterierte des Lösungsvektors bestimmt sich aus

$$\mathbf{x}_m \in \mathbf{x}_0 + K_m, \quad (2.65)$$

mit der Forderung, dass das aktuelle Residuum  $\mathbf{r}_m$  senkrecht auf der Menge aller Vektoren des Unterraums  $L_m$  steht ( $\mathbf{r}_m \perp L_m$ ). An dieser Stelle wird deutlich, dass es sich um eine *Projektionsmethode* handelt. Es lässt sich beweisen [81], dass für spätestens  $m = N^C$  Iterationen die exakte Lösung des Problems gefunden wird. Bei größeren Gleichungssystemen ist diese Eigenschaft jedoch wenig praxisrelevant, da  $N^C$  sehr groß ist und i. A. schon nach wenigen Iterationen eine Lösung akzeptabler Genauigkeit erreicht wird.

Ausgehend vom CG-Verfahren<sup>5</sup>, welches jedoch nur für symmetrisch, positiv definite Matrizen anwendbar ist, lassen sich eine Reihe anderer Verfahren ableiten, die MEISTER [81] vergleichend gegenüber stellt. Für den Einsatz mit beliebigen regulären Koeffizientenmatrizen, kommen im Wesentlichen folgende Löser in Frage:

- GMRES (General Minimal RESidual)
- BiCG (Bi-Conjugate Gradient)
- CGS (Conjugate Gradient Squared)
- BiCGSTAB (Bi-Conjugate Gradient STABILized)

Das GMRES-Verfahren leidet im Vergleich zu den Übrigen an einem hohen Rechen- sowie Speicheraufwand [81]. Das BiCG-Verfahren benötigt zwar weniger Speicher, nutzt aber rechenzeitaufwändige Multiplikationen mit  $\mathbf{A}^T$ . Des Weiteren kann es zu einem plötzlichen Verfahrensabbruch kommen [81]. Das CGS-Verfahren ist eine Variante von BiCG, die ohne kostspielige Multiplikationen mit  $\mathbf{A}^T$  auskommt

<sup>5</sup>Conjugate Gradient

und von einer verbesserten Konvergenzrate profitiert; allerdings können hier mitunter starke Oszillationen im Residuenverlauf auftreten. Das schließlich ausgewählte BiCGSTAB-Verfahren wurde von VAN DER VORST [123] entwickelt und veröffentlicht. Es basiert auf CGS, wobei eine zusätzliche Minimierung die starken Oszillationen unterbindet. Der Algorithmus des BiCGSTAB-Verfahrens befindet sich im Anhang unter A.1. Für eine Herleitung des BiCGSTAB-Verfahrens siehe [81, 123]. Innerhalb einer Iteration werden vier Skalarprodukte und zwei Matrix-Vektor Multiplikation durchgeführt. Da die Matrix dünn besetzt ist, fällt diese Operation jedoch unwesentlich mehr ins Gewicht. Neben der Matrix  $\mathbf{A}$  müssen 8 Vektoren gespeichert werden.

### 2.5.3. Präkonditionierung

Zur Beschleunigung und Stabilisierung des Löser wird ein *Präkonditionierer* eingesetzt. Das allgemein präkonditionierte Gleichungssystem zu (2.62) lautet:

$$\mathbf{P}_L \mathbf{A} \mathbf{P}_R \mathbf{y} = \mathbf{P}_L \mathbf{b} \quad \text{mit} \quad \mathbf{x} = \mathbf{P}_R \mathbf{y}. \quad (2.66)$$

$\mathbf{P}_L$  und  $\mathbf{P}_R$  werden als linker bzw. rechter Präkonditionierer bezeichnet. Wenn  $\mathbf{I}$  die Einheitsmatrix darstellt, gilt:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_L \neq \mathbf{I}, \mathbf{P}_R = \mathbf{I} &\rightarrow \text{linksseitig präkonditioniert} \\ \mathbf{P}_L = \mathbf{I}, \mathbf{P}_R \neq \mathbf{I} &\rightarrow \text{rechtsseitig präkonditioniert} \\ \mathbf{P}_L \neq \mathbf{I}, \mathbf{P}_R \neq \mathbf{I} &\rightarrow \text{beidseitig präkonditioniert.} \end{aligned} \quad (2.67)$$

An einem linksseitig präkonditionierten System  $\mathbf{P}_L \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{P}_L \mathbf{b}$  lässt sich die Funktionsweise der Präkonditionierung am besten verdeutlichen: Der theoretisch optimale Präkonditionierer wäre  $\mathbf{P}_L = \mathbf{A}^{-1}$ , denn mit ihm liefert das präkonditionierte System bereits die eigentliche Lösung  $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}$ . Je besser die Näherung  $\mathbf{P}_L \approx \mathbf{A}^{-1}$  erfüllt ist, desto höher fällt i. A. die Konvergenzsteigerung aus. Allerdings ist häufig schon durch eine sehr grobe Näherung das Gesamtverfahren deutlich zu beschleunigen. Bei der Bestimmung eines Präkonditionierers wird demnach eine Matrix  $\approx \mathbf{A}$  gesucht, welche sich (im Gegensatz zu  $\mathbf{A}$  selbst) sehr leicht invertieren lässt. Eine sehr grobe Näherung ist z. B. eine Matrix, die lediglich die Diagonalelemente von  $\mathbf{A}$  enthält  $\mathbf{A} \approx \text{DIAG}(\mathbf{A})$ . Der Präkonditionierer lässt sich dann durch Invertieren der einzelnen Diagonalelemente bestimmen. Wesentlich leistungsfähiger sind Präkonditionierer, die auf einer unvollständigen Zerlegung der Matrix  $\mathbf{A}$  basieren. Die vollständige LU-Zerlegung lautet  $\mathbf{A} = \mathbf{L} \mathbf{U} + \mathbf{F}$ , wobei  $\mathbf{L}$  und  $\mathbf{U}$  die linke untere bzw. rechte obere Dreiecksmatrix darstellen. Bei der unvollständigen LU-Zerlegung (ILU) gilt  $\mathbf{A} \approx \mathbf{L} \mathbf{U}$ . Dabei ist es nicht notwendig den Präkonditionierer  $\mathbf{P}_L = (\mathbf{L} \mathbf{U})^{-1}$  direkt zu bestimmen. Die Multiplikation mit ihm wird implizit durch Vorwärts- und Rückwärtselimination realisiert. Bei der einfachsten Version (ILU-0) besitzt der Präkonditionierer die selbe Matrixstruktur, wie die Matrix  $\mathbf{A}$ . Leistungsfähigere Varianten wie ILU-T [101] erlauben über einen Schwellwert gesteuert auch zusätzliche

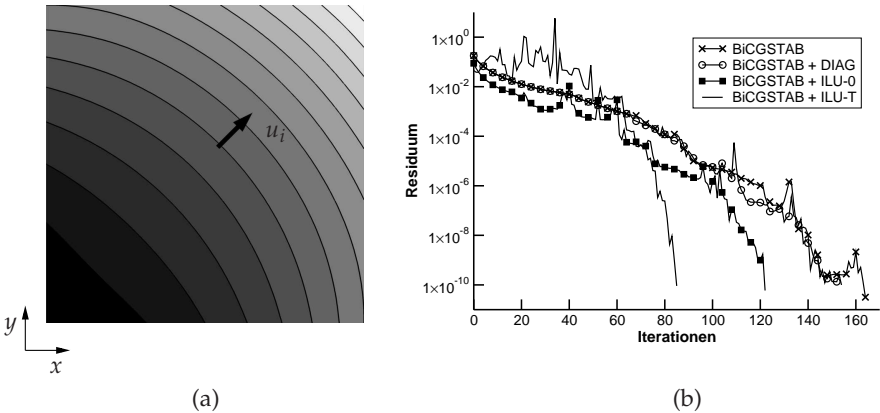
Einträge (*fill-in*) abweichend der Matrixstruktur von **A**. Jedoch steigt hier der Rechenbedarf zur Bestimmung des Prädiktionierers u. U. stark an. Eine umfangreiche Übersicht zum Thema Prädiktionierung findet sich u. a. in CHEN [12].

### 2.5.4. Testfall: Konvektions-Diffusions Gleichung

Die Anwendung auf ein Konvektions-Diffusions Problem zeigt, dass das BiCGSTAB-Verfahren für das Lösen der diskretisierten Navier-Stokes Gleichungen eine sinnvolle Wahl ist [80]. Die Konvektions-Diffusions Gleichung lautet für eine skalare Variable  $\phi$  in 2D:

$$\begin{aligned} u_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i} - \Gamma^\phi \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i^2} &= 0 & \text{für} & \quad x, y \in \Omega \\ \phi &= \phi_\partial & \text{für} & \quad x, y \in \partial\Omega. \end{aligned} \quad (2.68)$$

Die Ausdrücke (2.68) werden der Einfachheit halber mit der Finite-Differenzen-Methode auf einem Einheitsquadrat mit 64 mal 64 Punkten diskretisiert. Die zunächst strukturierte Speicherung wird vor dem Lösen in das unstrukturierte CRS Format überführt. Für den Diffusionskoeffizienten wird  $\Gamma^\phi = 0.5$  und für die Anströmung  $u_i = (\frac{\sqrt{2}}{2} \quad \frac{\sqrt{2}}{2})^T$  gewählt. Auf dem Rande  $\partial\Omega$  gilt in Anlehnung an den Testfall



**Abb. 2.4.:** Lösung der 2D Konvektions-Diffusions Gleichung für  $\phi$  auf einem Gitter mit  $64 \times 64$  Punkten (a); Verlauf des Residuums (b).

nach MEISTER [81] die Dirichlet-Bedingung  $\phi_\partial = x^2 + y^2$ . In Abbildung 2.4a ist die Lösung von  $\phi$  dargestellt, Abbildung 2.4b zeigt den Verlauf des Residuums für verschiedene Prädiktionierer. Der BiCGSTAB-Löser für diesen Testfall stammt aus einer frei verfügbaren MATLAB Routine nach BARRETT et al. [8], die unvollständigen Zerlegungen sind direkt in MATLAB verfügbar.

Zumindest im ersten Bereich zeigt der BiCGSTAB-Löser ohne Prädiktionierung

einen glatten, später einen leicht oszillatorischen Verlauf. Das Abbruchkriterium von  $\approx 1 \times 10^{-10}$  wird nach etwa 160 Iterationen erreicht. Die Diagonalpräkonditionierung zeigt hier keine erkennbare Verbesserung des Lösungsverhaltens. ILU-0 erreicht das Abbruchkriterium nach bereits 120 Iterationen und das Residuum läuft stets unterhalb der nicht-vorkonditionierten Version. ILU-T zeigt zunächst starke Oszillationen, erreicht die Konvergenz jedoch schon nach etwa 80 Iterationen, benötigt aber im Vorhinein mehr Zeit für die Bestimmung des Präkonditionierers. Es zeigt sich, dass das gesamte Lösungsverhalten sehr dynamisch reagiert. Bei einer leicht veränderten Auflösung oder einem geringfügig abweichendem Diffusionskoeffizient, unterscheiden sich die Residuenverläufe stark. Auch das Verhalten zwischen den unterschiedlichen Präkonditionierern ist davon abhängig. Es kann keine Eindeutige Aussage über das Lösungsverhalten unterschiedlicher Präkonditionierer in Abhängigkeit von den für die Strömungsmechanik gängigen Kennzahlen (Reynolds-Zahl, Mach-Zahl, usw.) getroffen werden [82]. Es ist vielmehr für jede individuelle Anwendung zu prüfen, welcher Präkonditionierer sich als am effizientesten erweist. Im Einzelfall sollte auch die Wahl eines anderen Löser (beispielsweise GMRES) in Betracht gezogen werden [82].



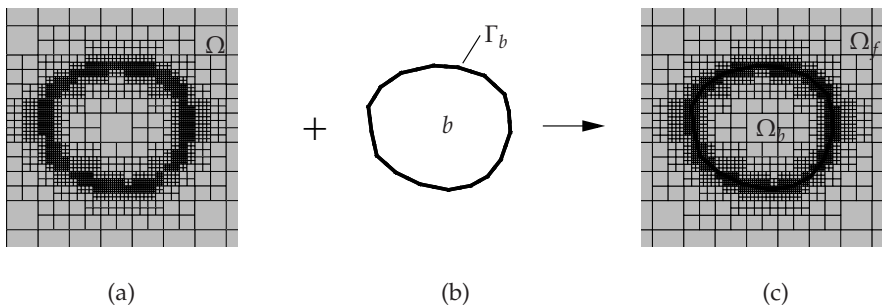
### 3. Immersed Boundary Methode<sup>1</sup>

*„The complication of generating a body-fitted grid is exchanged for complications associated with the implementation of the surface boundary conditions.“*

DADONE und GROSSMAN [22]

#### 3.1. Grundprinzip eingetauchter Randbedingungen

Die Immersed Boundary Methode (IB Methode) ist eine besondere Art des Erfüllens von Randbedingungen in der numerischen Strömungsmechanik. Das Prinzip wird in Abbildung 3.1 schematisch verdeutlicht: In ein vorzugsweise (nicht jedoch zwangsläufig) kartesisches Rechengitter ( $\Omega$ ), welches den gesamten strömungsrelevanten Bereich umfasst, wird die diskretisierte Berandung ( $\Gamma_b$ ) eines um- oder durchströmten Körpers ( $b$ ) eingetaucht (englisch: *to immerse*). Die zu lösenden Transportgleichungen (hier die inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen) werden auf dem kartesischen Rechengitter diskretisiert und die Randbedingungen werden an der Position des eingetauchten Körpers erfüllt. Eine wesentliche Tatsache ist hierbei,



**Abb. 3.1.:** Prinzip der Immersed Boundary Methode: Kartesisches Rechengitter  $\Omega$  (a); Oberflächendiskretisierung  $\Gamma_b$  des zu umströmenden Körpers  $b$  (b); Oberfläche eingetaucht in das kartesische Rechengitter (c).

dass die Diskretisierung des eingetauchten Körpers in der Regel nicht mit Punkten des Rechengitters zusammenfällt. Dies zeigt den grundsätzlichen Unterschied zu den häufiger verwendeten *körperangepassten* Rechengittern. Durch die vorgestellte Herangehensweise existieren immer auch Bereiche des Rechengitters innerhalb

<sup>1</sup> Die verwendeten Bezeichnungen in diesem Kapitel sind z. T. aus der Arbeit von MITTAL und IACCARINO [84] übernommen.

des Körpers ( $\Omega_b$ ), die nicht zum Strömungsbereich ( $\Omega_f$ ) gehören. Die eigentliche Herausforderung liegt im Erfüllen der Randbedingungen auf dem kartesischen Rechengitter an der Position des Oberflächengitters. Die Frage nach der tatsächlichen Fehlerordnung oder ob das Verfahren die *Konservativität* im Randbereich bewahrt, können nicht immer eindeutig beantwortet werden und stehen fortwährend zur Diskussion [50, 84, 94, 115]. Unter dem Begriff IB Methode, welcher von PESKIN [96] geprägt wurde, sind in dieser Arbeit analog zu [84] alle Verfahren zu verstehen, die nach dem o. g. Prinzip fungieren, auch wenn diese häufig eigene Bezeichnungen für sich beanspruchen:

- *Immersed Interface Method* [50]
- *Cartesian Grid Method* [3, 122, 130]
- *Penalty Method* [66]
- *Fictitious Domain Method* [42, 132]
- *Virtual Boundary Method* [102]
- *Mirroring Immersed Boundary Method* [79]
- *Level-Set Based Cut-Cell Method* [47]

Der Grundgedanke dieser Ansätze ist jedoch stets identisch: Die Strömungssimulation soll auf einem einfachen Hintergrundgitter durchgeführt werden, wobei die Randbedingungen an einer zusätzlich zur Verfügung gestellten Oberflächendiskretisierung erfüllt werden. Eine detaillierte Übersicht über die unterschiedlichen Varianten, deren numerischen Ansätze sowie Angaben über die zu Grunde liegende Diskretisierung sowie die Fehlerordnung findet sich in BANDRINGA [7].

Die eingebrachte Berandung  $\Gamma_b$  kann sowohl die Oberfläche eines starren als auch die eines deformierbaren Körpers darstellen. Grundsätzlich ist es jedoch auch möglich auf diese Art die Phasengrenzen unterschiedlicher Fluide [5] zu modellieren. Die Trennung zwischen eingetauchter Oberfläche und Rechengitter ermöglicht durch ein Austauschen der Oberfläche die Simulation bewegter und deformierbarer Körper, ohne dass das Rechengitter modifiziert werden muss. Dabei sind der Komplexität der Oberflächendiskretisierung prinzipiell keine Grenzen gesetzt.

Um die Randbedingungen an eingetauchten Körpern zu Erfüllen, wird ganz allgemein ein zusätzlicher Kraftterm in die Navier-Stokes Gleichungen eingebracht. Nach MITTAL und IACCARINO [84] wird grundsätzlich unterschieden, ob dies vor der Diskretisierung (*kontinuierlicher Zwangsansatz*) oder nach der Diskretisierung (*diskreter Zwangsansatz*) geschieht. Beim kontinuierlichen Zwangsansatz werden die modifizierten Navier-Stokes Gleichungen auf dem Rechengitter diskretisiert und für dieses gelöst. Der enthaltene Zwangsterm erfüllt auf diese Weise an der Position des eingetauchten Körpers die Randbedingungen. Beim diskreten Zwangsansatz werden die Navier-Stokes Gleichungen zunächst auf bekannte Weise diskretisiert. Anschließend wird eine Modifikation der Koeffizienten und Quellterme an denjenigen Zellen des Gitters vorgenommen, die im Randgebiet des eingetauchten Körpers liegen.



### 3.2. Ursprung und Entwicklung des Verfahrens

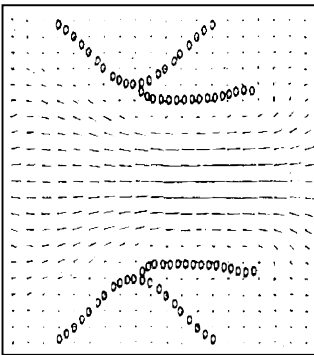
Zum ersten Mal taucht der Begriff *Immersed Boundary Method* im Jahre 1972 in einer Arbeit von C. S. Peskin auf, die sich mit der Untersuchung von Strömungen um flexible Herzklappen befasst [95]. Abbildung 3.2a zeigt das simulierte Strömungsfeld um die flexible Herzklappe. Peskin berechnet die Strömung auf einem rein kartesischen Gitter Eulerscher Betrachtungsweise ( $x_i$ ), wobei die Geometrie der Herzklappen durch einzelne masselose Punkte ( $k$ ) in Lagrangescher Darstellung ( $X_i^k$ ) approximiert wird. Diese Lagrangepunkte weisen die selben lokalen Geschwindigkeiten  $u_i$  wie das Fluid auf.

$$\frac{\partial X_i^k}{\partial t} = u_i(X_i^k, t) \quad (3.1)$$

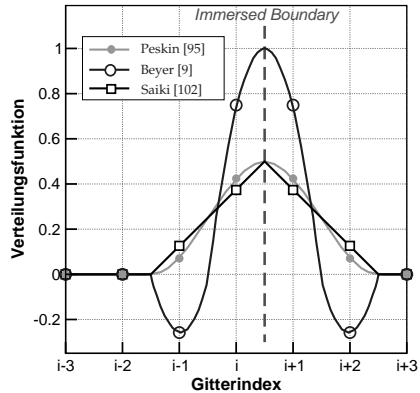
Das Erfüllen der Randbedingung wird dadurch erreicht, dass zusätzliche Kraftterme  $f_i$  in die kontinuierliche Form der Navier-Stokes Gleichungen eingefügt werden. Diese zusätzlichen Terme besitzen folgende Struktur:

$$f_i(x_i, t) = \sum_k F_i^k(t) \delta(|x_i - X_i^k|). \quad (3.2)$$

Dabei stellt  $F_i^k$  den eigentlichen Zwangsterm da, der über die  $\delta$ -Funktion einzig an der Position der Lagrangepunkte aufgeprägt wird. In der Arbeit von Peskin beruht der Kraftterm  $F_i^k$  auf dem konstitutiven Gesetz eines Hookeschen Materials für den eingetauchten Körper, was diesen Ansatz in der ursprünglichen Form nur für elastische Körper anwendbar macht. Weiterentwicklungen des Verfahrens [9, 71, 95, 102]



(a)



(b)

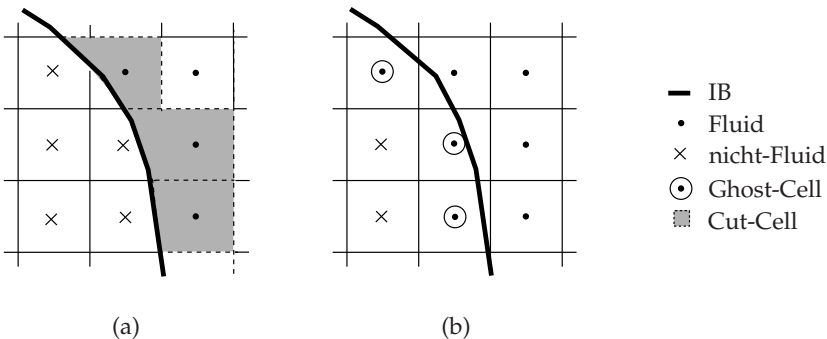
**Abb. 3.2.:** Simulierte Strömung um eine Herzklappe aus dem Jahre 1972 nach PESKIN [95] (a). Unterschiedliche Diskretisierungen der Verteilungsfunktion nach MITTAL und IACCARINO [84] (b).

konzentrieren sich zunächst auf die Wahl glatter Verteilungsfunktionen, die in der Lage sind, den Zwangsterm in geeigneter Weise auf das Rechengitter zu übertragen. Einige dieser Verteilungsfunktionen sind zum Vergleich in Abbildung 3.2b dargestellt. All diese Ansätze liefern jedoch im Bereich der Wand eine unscharfe bzw. verwischte Lösung. Um bei der Simulation auch starre Körper berücksichtigen zu können, führen GOLDSTEIN et al. [43] ein physikalisch motiviertes *Feedback Forcing* ein, deren Ansatz einem mechanischen Feder-Dämpfer Modell gleichkommt. Die Steifigkeit des Körpers wird sehr hoch gewählt, wodurch sich kleine Verschiebungen ergeben, die jedoch durch hervorgerufene Rückstellkräfte wieder kompensiert werden. GOLDSTEIN et al. [43] wenden das entwickelte Verfahren auf eine 2D Zylinderumströmung sowie eine 3D Kanalströmung mit in Strömungsrichtung orientierten Rillen an. SAIKI und BIRINGEN [102] implementieren ebenfalls ein *Feedback Forcing* und präsentieren die Funktionsweise an einer stationären wie instationären 2D Zylinderumströmung. GLOWINSKI et al. [42] entwickelten eine s. g. *Fictitious Domain Method*, wobei der eingebrachte Körper mit Hilfe von Lagrangemultiplikatoren im Strömungsfeld repräsentiert wird. Um die Leistungsfähigkeit ihres Ansatzes aufzuzeigen, berechnen GLOWINSKI et al. [42] die instationäre Strömung eines nichtlinearen Fluids durch einen Zylinder. Ein relativ neues Verfahren von TAIRA und COLONIUS [114] setzt die Zwangskraft ebenfalls mit Hilfe von Lagrangemultiplikatoren um. Das Hinzufügen dieser Zwangsbeziehungen zum bestehenden Gleichungssystem führt schließlich auf eine algebraische Struktur, die der eines *Fractional-Step* Ansatzes entspricht. Hierbei werden mehrdimensionale Probleme in die Form eindimensionaler Teilschritte überführt. Die resultierenden Gleichungssysteme sind symmetrisch und positiv definit, so dass effiziente CG-Löser verwendet werden können.

Die bisher genannten Verfahren beruhen alle auf einem kontinuierlichen Zwangsansatz. Parallel dazu wurden Methoden mit einem diskreten Zwangsansatz entwickelt, die einen entsprechenden Kraftterm zum Erfüllen der Randbedingungen in die diskretisierten Transportgleichungen einfügen. Um die Wandhaftung am eingetauchten Körper zu gewährleisten, prägt MOHD-YUSOF [85] in seinem Verfahren invertierte Geschwindigkeiten auf diejenigen Zellen auf, die gerade außerhalb der Berandung liegen. Dies entspricht einer Interpolation, welche die Geschwindigkeiten an der Position der Wand verschwinden lässt. Durch diesen Zwangsansatz wird im nächstfolgenden Zeitschritt die Randbedingung an der Immersed Boundary exakt erfüllt. Allerdings wird in dem Ansatz von MOHD-YUSOF [85] nur der zur Wand tangentielle Geschwindigkeitsanteil interpoliert; der möglicherweise vorhandene wandnormale Anteil bleibt erhalten, was zu einer Art künstlichen Staupunktströmung im Innern des Körpers führt. VERZICCO et al. [124] behalten die Methode von MOHD-YUSOF [85] bei und wenden sie erfolgreich auf eine praxisrelevante Problemstellung an: Mittels einer LES wird der Einströmvorgang in ein dynamisches Zylinder-Kolben-Modell eines Motors simuliert.

### Cut-Cell Ansatz

Das unter dem Namen *Cartesian Grid Method* entwickelte Verfahren von CLARKE et al. [15] und später [2, 73] basiert ebenfalls auf eingetauchten Geometrien. In einem der Simulation vorangehenden Arbeitsschritt werden die vom Oberflächengitter geschnittenen Zellen derart in ihrer Gestalt modifiziert, dass die neuen Zellflächen näherungsweise auf der Oberfläche gelegen sind. Auf diese Weise wird eine glatte Repräsentation des eingetauchten Körpers möglich. Zum Erfüllen der Randbedingungen wird jedoch weiterhin ein diskreter Zwangsansatz unter Anwendung verschiedener Interpolationsvarianten gewählt. Derartige *Cut-Cell* Ansätze [84] (siehe Abbildung 3.3a) bieten meist eine hohe Fehlerordnung und erfüllen die Konservativität an der Berandung problemlos, da durch die Anpassung der wandnahen Zellen ein nahezu körperangepasstes Gitter erzeugt wird. Jedoch sind diese Verfahren in der Umsetzung wesentlich anspruchsvoller als alternative Verfahren, bei denen das kartesische Rechnetz unangetastet bleibt. Durch die Anpassung der geschnittenen Gitterbereiche entstehen beliebig geartete Zellen, die dann nicht mehr kartesischer Natur sind. YE et al. [130] stellen ein 2D Verfahren vor, bei dem eine bilineare Interpolation der Variablen für die Massenflussintegration der degenerierten Zellen vollzogen wird. Als komplexeren Testfall simulieren YE et al. [130] die Strömung um ein statisches Schaufelgitter einer Turbine.



**Abb. 3.3.:** Beim Cut-Cell Ansatz (a) werden die geschnittenen Zellen modifiziert und an deren neu entstandenen Flächenelementen werden die Randbedingungen erfüllt. Beim der Ghost-Cell Methode werden die gespeicherten Zellvariablen der außerhalb des Strömungsgebiets liegenden Zellen verändert, so dass die Randbedingungen erfüllt werden (b).

GÜNTHER et al. [47] nutzen für ein Level-Set Cut-Cell Verfahren s. g. *Marching Cubes* aus dem Gebiet der Computergrafik, um im Dreidimensionalen alle möglichen Schnittvarianten der kartesischen Zellen mit der Oberflächendiskretisierung effizient zu erfassen.

#### **Ghost-Cell Ansatz**

Die Arbeit von FADLUN et al. [32] greift die Zwangsansätze von GOLDSTEIN et al. [43] und MOHD-YUSOF [85] auf. Diese fordern, dass die Positionen des eingetauchten Körpers mit denen der Zellzentren des Rechengitters übereinstimmen. Für komplexe Geometrien ist diese Bedingung jedoch nicht erfüllt. Um die Zwangsansätze auch auf solche Fälle zu erweitern, führen FADLUN et al. [32] eine Interpolation der Geschwindigkeiten im Wandbereich ein. Dabei sollen die interpolierten Geschwindigkeiten, welche in die Zwangsterme eingehen, an der Position des eingetauchten Körpers die Wandrandbedingung exakt erfüllen. Für die Interpolation werden drei Schemata mit einer steigenden Genauigkeit bis zweiter Ordnung vorgestellt. Während FADLUN et al. [32] die Geschwindigkeiten für die jeweils erste Zelle im Strömungsgebiet interpolieren, bestimmen TSENG und FERZIGER [119] die Geschwindigkeiten für die erste Zelle, die gerade nicht mehr zum Strömungsgebiet zählt. Diese Zellen, die zwar nicht direkt zum Strömungsfeld zählen, jedoch an dieses angrenzen und zur Erfüllung der Randbedingungen beitragen, werden *Ghost-Cells* genannt (siehe Abbildung 3.3b). Ansätze, die darauf beruhen, werden daher entsprechend als Ghost-Cell Verfahren bezeichnet. KALITZIN und IACCARINO [60] interpolieren ebenfalls die Geschwindigkeiten der jeweils ersten Zelle im Strömungsfeld, wobei zunächst eine Interpolation in Wandnormalenrichtung und anschließend eine tangential zur Wand durchgeführt wird. Das Verfahren liefert nahezu identische Ergebnisse für eine dünne angeströmte Platte unter verschiedenen Anstellwinkeln zum Rechengitter. DE PALMA et al. [24] nutzen eine einfache lineare Interpolation der Geschwindigkeiten für die erste Zelle im Strömungsfeld. Ergebnisse zweidimensionaler Simulationen inkompressibler wie kompressibler Zylinderumströmungen zeigen eine hohe Übereinstimmung im experimentellen Vergleich. Die zuletzt genannten Verfahren [24, 60] nutzen zur effizienten Identifizierung der von der IB geschnittenen Zellen s. g. *Ray-Tracing* Algorithmen [106], wie sie sonst in der Computergrafik zum Einsatz kommen. DADONE und GROSSMAN [22] markieren jeweils die ersten zwei Zellen außerhalb des Strömungsbereichs als Ghost-Cells. Anschließend werden durch eine Spiegelung an der IB dazu korrespondierende Zellen im Strömungsfeld erzeugt. Zu Bestimmung der Zwangsterme für die Ghost-Cells werden zunächst die Geschwindigkeiten auf die korrespondierenden Zellen interpoliert, wobei diese dann über die IB zurück auf die Ghost-Cells invertiert werden. Ein Vorgehen, welches ebenfalls auf einer Spiegelung der Geschwindigkeiten an der IB beruht, ist die *Immersed Boundary Mirroring Method* von MARK [79]. Der Ansatz ist von zweiter Ordnung und wird in den Bereichen partikelbeladener Strömungen sowie der Fluid-Struktur-Kopplung angewendet. GHIAI et al. [40] verfolgen eine ähnliche Herangehensweise in 2D, die jedoch nicht auf kartesische Rechengitter beschränkt ist. Für einen ins Strömungsgebiet projizierten *Image Point* werden die Feldvariablen über eine bilineare Interpolation aus vier umliegenden Zellen bestimmt, die dann auf die Ghost-Cells invertiert werden. LIU et al. [77] beschreiben ein gleichartiges Konzept, welches für den 3D Fall eine entsprechende trilineare Interpolation nutzt. Die erfolgreiche Umsetzung zeigt die Anwendung auf zahlreiche kompressible Stoßprobleme.

#### **Problem der Massenerhaltung**

Eines der wesentlichen Probleme bei Ghost-Cell Ansätzen ist die Gewährleistung der Massenerhaltung an den angeschnittenen Zellen. Im Wandbereich ist die Konservativität keine von sich aus erfüllte Bedingung, wie dies sonst bei Finite-Volumen Verfahren der Fall ist. Nach BANDRINGA [7] erfüllen nur die wenigsten Ghost-Cell Verfahren diese Eigenschaft. Nicht eingehalten wird die Konservativität u. a. von folgenden Ghost-Cell Varianten von YE et al. [130] sowie FADLUN et al. [32]. Der Grund dafür ist nach IKENO und KAJISHIMA [57] folgender: Bei den genutzten Rekonstruktionen wird zwar die Wandhaftung im Sinne der Impulsbilanzgleichungen erfüllt, die Rolle des Drucks jedoch oft außer Acht gelassen. Dies gilt insbesondere dann, wenn aufgrund einer Interpolation oder Spiegelung ein unphysikalisches Strömungsfeld im Innern des Körpers auftritt. Um das Problem zumindest teilweise zu umgehen, gibt es unterschiedliche Konzepte: GILMANOV und SOTIROPOULOS [41] sowie TSENG und FERZIGER [119] prägen dem Druck eine Neumann-Randbedingung auf, so dass keine wandnormalen Gradienten auftreten, die für einen Massenfluss über die IB sorgen. MARK [79] und KANG et al. [61] erfüllen die Massenerhaltung an den Grenzflächen der geschnittenen Zellen, indem bei der Bestimmung des Drucks das nicht-Strömungsgebiet ausgelassen wird. KIM et al. [65] kompensieren auftretende Massendefekte durch zusätzliche Quelle-Senke Terme in der Kontinuitätsgleichung. Um die Divergenzfreiheit der geschnittenen Zellen zu garantieren, stellt PELLER [94] ein Konzept vor, bei dem die Massenflüsse an den Zellflächen korrigiert werden. Liefert die Interpolation der Geschwindigkeiten einen Massendefekt in einer geschnittenen Zelle, so wird dieser durch eine Flusskorrektur an allen Flächen gleichermaßen kompensiert. Bei der Berechnung der Druckkorrektur, welche auf den Massenflüssen über die Zellflächen beruht, ist die Konservativität schließlich wieder gegeben.

#### **Adaptive Gitter**

MITTAL und IACCARINO [84] haben gezeigt, dass für eine steigende Reynolds-Zahl die erforderliche Anzahl an Zellen für ein rein kartesisches Rechengitter wesentlich schneller ansteigt, als bei einem körperangepassten. Um bei kartesischen Gittern eine hinreichend feine Auflösung im Wandbereich gewährleisten zu können, ist es praktisch erforderlich, die Zellen lokal zu verfeinern. Dies kann einerseits außerhalb des Strömungslösers geschehen, als auch dynamisch adaptiv während der Simulation [2, 77, 99, 122]. Werden die Zellen derart gespeichert, dass für jede Verfeinerungsstufe ein vollständiges Gitter vorhanden ist, so kann die Methode mit einem *Mehrgitterverfahren* gekoppelt werden, was zu einer deutlichen Beschleunigung des Gesamten Verfahrens führen kann, wie in der Arbeit von HARTMANN et al. [49]

### **3.3. Vor- und Nachteile der Immersed Boundary Methode**

Der eigentliche Nutzen der Immersed Boundary Methode liegt in der Tatsache, dass für das Rechengbiet und die Körperbeschreibung zwei unabhängige Diskretisierungen verwendet werden. Daraus ergeben sich einige wesentliche Aspekte, die

gegenüber der herkömmlichen Herangehensweise unter Anwendung körperangepasster Rechengitter einen deutlichen Vorteil darstellen:

- Komplexe Geometrien möglich
- Bewegte Geometrien möglich
- Verkürzter Präprozess
- Hoher Automatisierungsgrad möglich
- Hohe Effizienz

Unter der Voraussetzung, dass das zugrundeliegende Verfahren robust und allgemeingültig umgesetzt ist, dürfen die eingetauchten Oberflächen eine beliebige Komplexität aufweisen. Dabei gilt es lediglich zu berücksichtigen, dass die kleinsten Strukturen des Oberflächennetzes noch vom Rechengitter erfasst werden müssen. D.h. dieses sollte in Bezug auf die Oberfläche über eine geeignete Auflösung verfügen. Die Trennung zwischen beiden Diskretisierungen erlaubt ein Austauschen der Geometriebeschreibung während der Simulation (z. B. durch eine zum nächsten Zeitschritt hin verschobene oder verformte Geometrie), ohne dass das Rechengitter modifiziert werden muss. Dabei wird jedoch verlangt, dass die Oberflächengeometrie den Bereich des Rechengitters nicht verlässt. Auf diese Weise lassen sich bewegte Körper realisieren, die ohne Gitterdeformationsalgorithmen auskommen, wie sie für körperangepasste Gitter benötigt werden. Durch den Wegfall der zeitaufwändigen Generierung eines körperangepassten Rechengitters wird der Präprozess maßgeblich verkürzt. Die Gitter auf die hier zurückgegriffen wird, lassen sich wesentlich schneller erzeugen: Die Diskretisierung der Körperoberfläche, beispielsweise mit Dreieckselementen, lässt sich entweder direkt aus einem CAD-System realisieren oder mit Hilfe einer Software zur Gittergenerierung. Ein kartesisches Rechengitter lässt sich ebenso zeitnah erstellen oder basierend auf der Oberflächendiskretisierung vollautomatisch und adaptiv erzeugen [26, 47]. Die bei kartesischen Gittern wegfallende Berücksichtigung der *Krummlinigkeit* sowie die einfache Möglichkeit der *lokalen Gitterverfeinerung* stellen durch die hohe Effizienz und Flexibilität einen wichtigen Vorteil dar.

Ein deutlicher Nachteil ist die wesentlich kompliziertere Umsetzung der Randbehandlung an der Position des eingetauchten Rechengitters. Ein Grund dafür ist die Tatsache, dass die Oberflächenbeschreibung das Rechnetz beliebig schneiden darf. Dadurch entsteht eine Vielzahl unterschiedlicher Konstellationen, an denen die Randbedingungen erfüllt werden sollen. Häufig können Sonderbehandlungen in der programmtechnischen Umsetzung notwendig werden, die in Form von Bedingungsabfragen oder Verzweigungen einem effizienten Ablauf entgegenwirken. Des Weiteren ist es in allen hier genannten Verfahren unabdingbar, vor der eigentlichen Simulation die vom Oberflächengitter getroffenen kartesischen Zellen zu identifizieren. Diese Schnittpunktbestimmung stellt im einfachsten Fall ein Suchproblem dar, welches quadratisch mit der Zahl der Rechenzellen sowie der Anzahl verwendeter Oberflächenelemente (meist Dreiecke) skaliert. An dieser Stelle ist ebenfalls ein erhöhter programmtechnischer Aufwand zu verzeichnen, um die Suche nach

Schnittpunkten intelligent und zeitsparend zu implementieren. Ein weiterer Nachteil ist durch die Tatsache gegeben, dass mit einem kartesischem Gitter (selbst unter Anwendung lokaler Gitterverfeinerung) wesentlich mehr Gitterzellen notwendig sind, als bei der Nutzung eines entsprechenden körperangepassten Gitters [84]. Hier kann das Rechengitter im Wandbereich sukzessive in einer Richtung verdichtet werden. Die Berücksichtigung hoher Reynolds-Zahlen auf kartesischen Gittern ist besonders problematisch, wenn die zur Auflösung der dünnen Grenzschichten erforderlichen Kriterien an des Rechengitters nicht erfüllt sind. Hier zeigen die Randbedingung zudem einen starken Einfluss auf die Genauigkeit und Stabilität des Verfahrens [60]. DE PALMA et al. [24] kommen zu der Aussage, dass für hohe Reynolds-Zahlen in jedem Fall eine adaptive Wandfunktion mit einer nichtlinearen Interpolation erforderlich ist.

### 3.4. Praxisrelevanz des Verfahrens

Die Nutzung von IB Methoden erstreckt sich über die gesamte Bandbreite der numerischen Strömungsmechanik. Abgesehen von Validierungsrechnungen findet jedoch ein Großteil der eigentlichen Anwendung in Bereichen statt, in denen die Aufgabe darin besteht, bewegte oder komplexe Geometrien zu berücksichtigen. Aufgrund der Schwierigkeit mit kartesischen Gittern den wandnahen Bereich hoch aufzulösen, werden IB Verfahren vergleichsweise selten genutzt, um Strömungen hoher Reynolds-Zahlen zu berechnen [61]. Bewegte Geometrien sind insbesondere im Bereich der Fluid-Struktur-Kopplung anzutreffen, wie z. B. die Berechnung einer Fahne im Wind [66], eines sich öffnenden Fallschirms [67] oder eine elastischen Faser in einer Strömung [79]. Auch zur Simulation partikelbeladener Strömungen kommen IB Methoden zum Einsatz [121, 132].

Komplexe Geometrien finden sich u. a. in der Biofluidmechanik. Hierzu zählen primär medizinisch relevante Strömungsvorgänge wie solche in Blutkreisläufen [88, 107] oder den Atemwegen [54]. GILMANOV und SOTIROPOULOS [41] simulieren mit ihrer IB Methode einen schwimmenden Fisch sowie einen Ruderfußkrebs. Dabei ist die Oberfläche der Tiere sowohl kompliziert als auch dynamisch. Neben den natürlichen Strukturen aus der Biofluidmechanik stellen jedoch auch viele technische Bauteile aus strömungsmechanischer Sicht eine anspruchsvolle Geometrie dar. Hier kann die manuelle Erzeugung eines strukturierten Rechnetzes zu einem zeitintensiven oder gar unlösbaren Problem werden. In diesem Fall wäre der Einsatz von IB Verfahren profitabel. Trotz der genannten Vorteile blieb die Anwendung der IB Methode innerhalb des industriellen Umfelds zunächst aus, obwohl die Eignung dazu von vielen Seiten bekräftigt wurde [61, 124]. Seit geraumer Zeit existiert jedoch für den kommerziellen CFD Löser ANSYS ein entsprechendes IB Modul [39], dessen Anwendung besonders im Rahmen des Designprozesses als sinnvoll erscheint. Denn hier geht es oft nur um eine grobe Abschätzung der Strömungsverhältnisse, die jedoch möglichst schnell verfügbar sein soll.



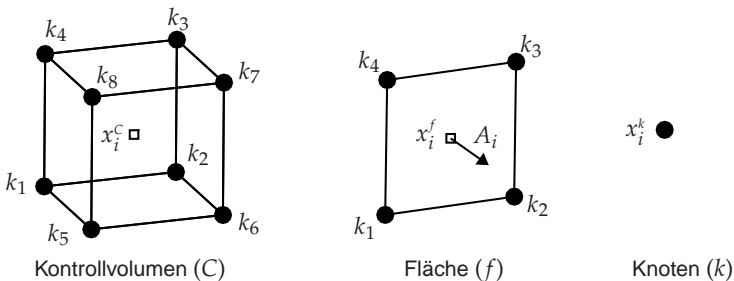


## 4. Umsetzung des Simulationsverfahrens

Die vorherigen Abschnitte bilden die theoretischen Grundlagen für diese Arbeit. In Kapitel 2 sind die Diskretisierung der Transportgleichungen auf kartesischen Gittern, die Behandlung des Drucks, die Realisierung von Randbedingungen im herkömmlichen Sinne sowie geeignete Verfahren zum Lösen der auftretenden Gleichungssysteme beschrieben. Kapitel 3 gibt schließlich einen Überblick über die Immersed Boundary Methode und die unterschiedlichen Möglichkeiten, Randbedingungen an eingetauchten Körpern zu erfüllen. An dieser Stelle soll die praktische Umsetzung der zuvor theoretisch behandelten Themen präsentiert werden.

### 4.1. Kartesisches Rechengitter

In Abbildung 4.1 ist ein kartesisch ausgerichtetes *Kontrollvolumen*  $C$  gezeigt. Es ist durch zwei sich diagonal gegenüberstehende Knotenelemente (z. B.  $k_1$  und  $k_7$ ) vollständig definiert. In der Umsetzung werden dem Kontrollvolumen jedoch alle acht *Knotenpunkte* ( $k_1 \dots k_8$ ) zugeordnet. Jedes dieser Elemente  $k$  ist definiert durch seine raumfesten Koordinaten  $x_i^k$ . Es existieren keine freien (die weder Kontrollvolumen noch Fläche angehören) und keine mehrfach identischen Knoten (mit gleichen Koordinaten). Die räumliche Ausdehnung des Kontrollvolumens bestimmt sich aus  $\Delta x_i = x_i^{k_7} - x_i^{k_1}$ , wodurch die Lage des Kontrollvolumenzentrums mit  $x_i^C = 0.5(x_i^{k_7} + x_i^{k_1})$  gegeben ist. In Abhängigkeit von der Anzahl angrenzender



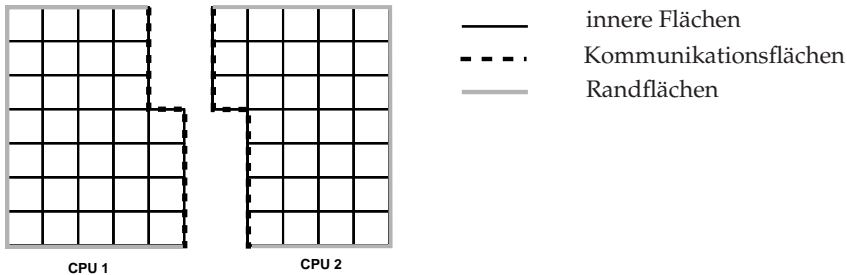
**Abb. 4.1.:** Das Kontrollvolumen ist durch seine Knotenpunkte definiert und von Flächenelementen umschlossen.

Nachbarzellen ist ein Kontrollvolumen von 6 oder mehr *Flächenelementen*  $f$  umgeben (siehe auch Abschnitt 4.1.3). Den Flächenelementen werden ebenfalls alle vier

Eckpunkte ( $k_1 \dots k_4$ ) zugeordnet und das Zentrum der Fläche ist gegeben durch  $x_i^f = 0.5(x_i^{k_3} + x_i^{k_1})$ . Der Vektor  $A_i$  steht senkrecht auf der Fläche, und zeigt stets in Richtung des rechten angrenzenden Kontrollvolumens ( $C_R$ ), wobei der Betrag des Vektors dem Flächeninhalt entspricht:  $A_i = (x_i^{k_2} - x_i^{k_1}) \times (x_i^{k_3} - x_i^{k_2})$  mit  $|A_i| = A^f$ . Die Flächenelemente spielen bei der Umsetzung eine besondere Rolle, weshalb ihre Funktion an dieser Stelle hervorgehoben werden soll.

### 4.1.1. Aufgabe der Flächenelemente

Es werden drei Flächentypen unterschieden, die in Abbildung 4.2 veranschaulicht werden. Bei der Berechnung der erforderlichen Koeffizienten und Quellterme für die Kontrollvolumen wird flächenbasiert vorgegangen. Dabei werden sukzessive alle *inneren Flächenelemente* betrachtet, von denen aus die jeweils angrenzenden Kontrollvolumen berücksichtigt werden. Daher werden für jede dieser Flächen die Indizes der angrenzenden Zellen ( $C_L, C_R$ ) sowie der zugehörige geometrische Hebelarm  $\lambda_f$  (siehe Gleichung 2.17) gespeichert. Die Bestimmung der Nachbarzellen ist Teil des Präprozesses (siehe Anhang A.5). Im Fall einer Parallelrechnung wird



**Abb. 4.2.:** Rechengitter mit Inneren, Kommunikations- und Randflächen.

das Rechengebiet mit Hilfe der Softwarebibliothek Metis [62] in kleinere Teilgebiete zerteilt, um auf diesen die Simulation getrennt voneinander durchzuführen. Das Verfahren basiert auf Methoden der Graphenzerlegung; neben einer ausgewogenen Lastverteilung wird auch ein möglichst geringes Kommunikationsaufkommen angestrebt. Um während der Simulation den Datenaustausch zu gewährleisten, werden s. g. *Kommunikationsflächen* [129] verwendet. Schließlich existiert die Möglichkeit auf herkömmliche Art Randbedingungen zu setzen, weshalb die äußersten Flächen als *Randflächen* zu verstehen sind. An die Kommunikations- und Randflächen grenzt jeweils nur ein inneres Kontrollvolumen ( $C_L$ ). Um die Werte zum Datenaustausch bereit zu halten bzw. um die Randbedingungen zu erfüllen stellt  $C_R$  ein imaginäres Kontrollvolumen dar, welches keine räumliche Ausdehnung besitzt und dessen Zentrum mit dem der Fläche übereinstimmt. Es handelt sich dabei also quasi um die Fläche selbst.

### Bestimmung der Gradienten

Die Bestimmung der Gradienten, der in den Kontrollvolumen gespeicherten Größen ( $u, v, w, p$  usw.) stützt sich ebenfalls auf die Flächenelemente. Um den Gradienten einer Größe  $\phi$  zu bestimmen, wird der Satz von Gauss diskretisiert und umformuliert.

$$\int \frac{\partial \phi}{\partial x_j} dV = \int \phi dA_j \quad (4.1)$$

Da sowohl die Variable  $\phi$  als auch der Gradient als konstant innerhalb des Kontrollvolumens angenommen werden, kann das Volumenintegral in ein Produkt mit dem Volumen überführt werden. Unter Anwendung der Mittelpunktsregel (2. Ordnung) lässt sich das Oberflächenintegral in eine Summe der Variable  $\phi$  über die angrenzenden Flächenelemente überführen. Der Variablenwert an den Kontrollvolumenflächen ( $\phi^f$ ) bestimmt sich nach (2.16). Für den Gradienten eines Kontrollvolumens  $P$  folgt schließlich:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right|_P \approx \frac{\sum_f \phi_f A_{j,f}}{V_P}. \quad (4.2)$$

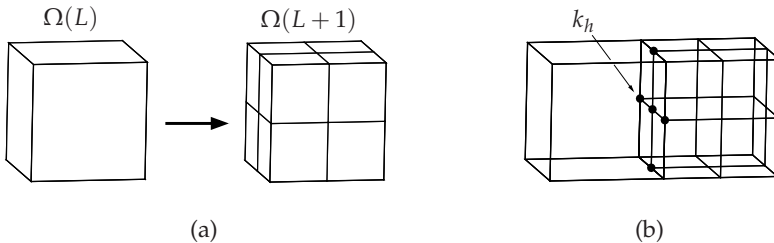
#### 4.1.2. Flächenbasierte Diskretisierung

In Kapitel 2 ist die Diskretisierung der Impulsbilanzgleichungen und der Druckkorrekturgleichung beschrieben. Diese resultiert für jedes Kontrollvolumen  $P$  in einer Gleichung (2.8), welche die Anteile der entsprechend angrenzenden Kontrollvolumen berücksichtigt. Die Bestimmung der Koeffizienten kann auf unterschiedliche Weise vollzogen werden, wobei das vollständig aufgebaute Gleichungssystem davon unabhängig ist. Anstatt für alle Kontrollvolumen die Koeffizienten der benachbarten Zellen direkt zu bestimmen, wurde für den Strömungslöser ELAN [129] ein anderer Weg gewählt: Es werden nacheinander sämtliche Flächenelemente  $f$  in Betracht gezogen und die zu berücksichtigenden Beiträge auf die Koeffizienten der links ( $C_L$ ) und rechts ( $C_R$ ) angrenzenden Zelle aufgeschlagen (siehe auch Abbildung A.3 im Anhang). So werden auf eine einheitliche Weise neben den inneren Bereichen auch die Randbedingungen und die zur parallelen Kommunikation erforderlichen Datenfelder berücksichtigt. Dieses Vorgehen ist vom ELAN-Löser direkt übernommen worden.

#### 4.1.3. Lokale Verfeinerung durch hängende Knotenelemente

Die einfachste Möglichkeit, die Auflösung des Rechengitters zu verbessern, ist die Erhöhung der Punktdichte, was in allen drei Raumrichtungen vollzogen, schnell zu unpraktikablen Zellzahlen führt. Andererseits kann das Gitter auch entlang seiner Gitterlinien verdichtet oder aufgeweitet werden. Bei körperangepassten Rechengittern kann auf diese Weise die Auflösung in Richtung der Wand gezielt erhöht werden. Bei kartesischen Gittern hingegen muss die Verteilungsfunktion entlang paralleler Gitterlinien stets identisch ausfallen, damit die Zellen kartesisch bleiben. Die

Gitterlinien eines kartesischen Gitters folgen jedoch den Raumrichtungen  $(x, y, z)$ , die meist nicht mit der Berandung des darin eingetauchten Körpers zusammenfallen. Eine Erhöhung der Zelldichte in Richtung des eingetauchten Körpers ist somit nicht möglich. Ein Ausweg stellt die *lokale Verfeinerung* einzelner Zellen dar



**Abb. 4.3.:** Isotrope Verfeinerung eines Kontrollvolumens in 8 Zellen (a); hängende Knotenelemente (b).

(Abbildung 4.3a). Dabei entstehen am Übergang zwischen unterschiedlichen Verfeinerungsstufen (auch *Gitterlevel*) s. g. *hängende Knotenelemente*  $k_h$  (siehe Abbildung 4.3b). Als hängende Knoten werden diejenigen bezeichnet, die für die Kontrollvolumen der höheren Verfeinerungsstufe  $(L+1)$  einen Eckpunkt darstellen jedoch an den Zellen des niedrigeren Levels  $(L)$  auf eine Kante oder den Flächenmittelpunkt treffen. Im Rahmen dieser Arbeit werden ausnahmslos *isotrope* Verfeinerungen mit einem Teilungsverhältnis von 1:2 betrachtet. Dabei wird ein Kontrollvolumen in acht Zellen identischer Größe geteilt, indem die Kantenlängen der Ursprungszelle jeweils halbiert werden.

Ein Rechengitter, welches viele Verfeinerungsstufen aufweist, lässt sich nicht ohne Weiteres strukturiert speichern. Während in anderen Arbeiten [27, 49] semi-strukturierte oder hierarchische Ansätze zum Tragen kommen, wird in diesem Fall die vollständig *unstrukturierte* Datenhaltung favorisiert (siehe Anhang A.2). An der Grenze unterschiedlicher Gitterlevel (Beispiel Abbildung 4.3b) treffen nun die vier Flächenelemente der feineren Zellen auf eine unverfeinerte. In dieser Konstellation wird die ursprüngliche Fläche der unverfeinerten Zelle verworfen und stattdessen die vier kleineren beibehalten. Diese vier Flächen haben die unverfeinerte linke Zelle als ihr angrenzendes Kontrollvolumen gemeinsam. Die Konservativität im Bereich hängender Knoten wird durch eine entsprechende Aufteilung der Flüsse auf alle Teilflächen gewährleistet [118]. Es ist möglich, derartige Rechengitter mit existierenden Programmen wie z. B. ICEM [19] zu erstellen. Ein wesentlich effizienterer Weg ist jedoch die automatische Erstellung des Rechengitters auf Grund vorgegebener Parameter. Wird das Gitter basierend auf dem Abstand zum Oberflächen-gitter erzeugt, kann dieser Vorgang bereits als *Gitteradaption* bezeichnet werden. Eine Weiterentwicklung dessen stellt die *dynamische Gitteradaption* dar, eine Anpassung des Rechengitters, die während der Simulation vollzogen wird. Im folgenden Abschnitt ist die dynamische Adaption des Rechengitters beschrieben, die in

Hinblick auf kartesische Gitter die flexibelste und effizienteste Möglichkeit darstellt, um eine geeignete räumliche Auflösung zu gewährleisten. Die Berechnung auf einem adaptierten Rechengitter kann mitunter eine bessere Konvergenz aufweisen, als auf einem rein kartesischen Gitter [63].

## 4.2. Dynamische Gitteradaption

Der wesentliche Nachteil rein kartesischer Rechengitter ist die unzureichende Fähigkeit, Grenzschichten örtlich aufzulösen [16]. Um diese Eigenschaft zu kompensieren und dennoch die Vorzüge eines kartesischen Rechengitters nutzen zu können, wird eine möglichst flexible *Gitteradaption* bevorzugt, die in Bereichen, in denen es notwendig ist, eine ausreichend feine Gitterauflösung liefert.

Die im Folgenden vorgestellte dynamische Gitteradaption umfasst neben der *Verfeinerung*, bei der eine Zelle in 8 kleinere geteilt wird, auch die Möglichkeit einer *Vergrößerung*, bei der zusammenhängende 8 Zellen zu einer zusammengefasst werden. Zunächst wird das prinzipielle Vorgehen der Adaption präsentiert (Abschnitt 4.2.1) und anschließend auf die Details eingegangen (Abschnitte 4.2.2 bis 4.2.5).

### 4.2.1. Konzept und Herangehensweise

Da die Gitteradaption im Sinne einer optionalen Funktionalität zu verstehen ist, soll die Adaption an nur wenigen Punkten eingreifen, so dass sich kein Mehraufwand ergibt, wenn die Adaption nicht genutzt wird. In Abbildung 4.4 ist der Ablauf des Strömungslösers skizziert, wobei die Abschnitte der Gitteradaption hervorgehoben sind. Die eigentliche Adaption kann an zwei Stellen vollzogen werden: Zum einen vor der eigentlichen Strömungsberechnung zum anderen innerhalb der iterativen Berechnung. Die Gitteranpassung kann dann einmal oder aber mehrfach ausgeführt werden. Das Vorgehen während der Adaption ist in der nachstehenden grauen Box aufgeführt: Grundlage bildet ein *Adaptionssensor* ( $\mathcal{S}$ ), der analog zum Strömungsfeld für jede Volumenzelle des Strömungsgebiets bestimmt wird. Mit Hilfe dieses Sensors und unter Beachtung oberer ( $\mathcal{S}^+$ ) bzw. unterer ( $\mathcal{S}^-$ ) Grenzen, wird lokal über die Verfeinerung oder Vergrößerung einzelner Zellen entschieden. Vor der eigentlichen Verfeinerung

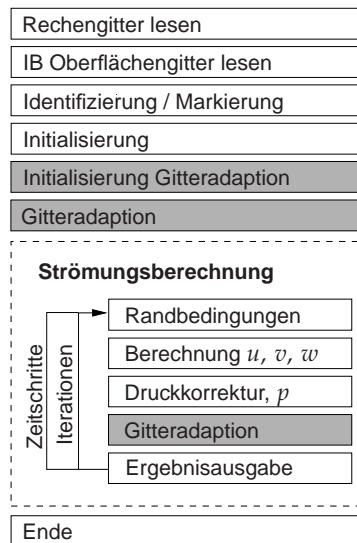


Abb. 4.4.: Ablauf der Gitteradaption.

oder Vergrößerung wird sichergestellt, dass die vereinbarten Restriktionen eingehalten werden. Dabei können weitere Zellen zur Verfeinerung oder Vergrößerung markiert werden oder der vorherige Vorschlag wieder verworfen werden, um die Restriktionen zu erfüllen. Wenn die genaue Anzahl der zu modifizierenden Zellen feststeht, können nötige Hilfsfelder dimensioniert und eine Zuordnung zwischen dem alten und dem neuen Gitterindex hergestellt werden. Es ist anzumerken, dass der gesamte Vorgang der Gitteradaption auf der Möglichkeit der dynamischen Speicherverwaltung in Fortran 90 beruht, die es erlaubt Datenfelder während der Laufzeit dynamisch zu erstellen und zu dimensionieren.

1. Berechnung des Adaptionssensors  $\mathcal{S}$  (Abschnitt 4.2.2)
2. Bestimmung der zu verfeinernden und zu vergrößernden Zellen auf Basis von  $\mathcal{S}$
3. Berücksichtigung der Restriktionen (Abschnitt 4.2.1)
4. Erzeugung der Zuordnungen: altes  $\leftrightarrow$  neues Gitter
5. Verfeinerung / Vergrößerung der dazu vorgesehenen Zellen (Abschnitt 4.2.3 und 4.2.4)
6. Arbeitsschritte des Präprozesses (Abschnitt 4.2.5)
7. Interpolation der Feldgrößen auf das neue Gitter
8. Markierung und Identifikation (Abschnitt 4.4)

Anschließend werden die dazu markierten Zellen vergrößert oder verfeinert, gefolgt von den Aufgaben des Präprozesses (vergleiche Anhang A.5). Bevor mit der Strömungsberechnung fortgefahren werden kann, müssen die Feldgrößen des alten auf das neue Gitter übertragen werden.

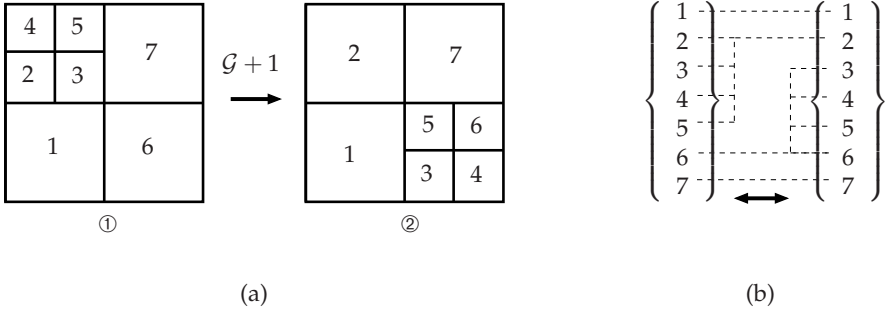
#### Umdimensionierung der Datenfelder

Bei jedem Adaptionsschritt  $\mathcal{G}$  müssen nahezu alle Datenfelder umdimensioniert werden, da sich neben der Anzahl der Kontrollvolumen auch die Zahl der Flächen, und Knoten ändert. Nachdem das Einhalten der Restriktionen der Gitteradaption sichergestellt ist, steht die Anzahl der zu verfeinernden und zu vergrößernden Zellen fest. Das Vorgehen bei der Umdimensionierung ist stets ähnlich:

Zunächst wird ein Hilfsfeld mit der neuen Feldgröße erzeugt. Anschließend werden die Dateninhalte an die richtige Stelle des Hilfsfelds gespeichert. Dann wird das ursprüngliche Feld im Speicher wieder freigegeben (*Deallokierung*) und unter dem alten Namen mit der neuen Dimensionierung wieder angelegt (*Allokierung*). Abschließend werden die Daten vom Hilfsfeld in das neudimensionierte Feld zurückgespeichert und das Hilfsfeld verworfen.

Für die Indizierung der Kontrollvolumen werden zwei Zuordnungslisten (II) er-

stellt, um während der Adaption das Arbeiten zwischen dem alten und dem neuen Gitter zu ermöglichen. Sie werden u. a. genutzt, um die Lösung vom alten auf das neue Gitter zu übertragen. In Abbildung 4.5a ist ein einfaches Gitter dargestellt, welches innerhalb eines Adaptionsschritts modifiziert wird. Zu Anschauungszwecken handelt es sich um eine 2D Vereinfachung. In diesem Schritt werden die Zellen 2, 3, 4, 5 vergrößert und die Zelle 6 verfeinert. Bei einer Vergrößerung wird das Indexfeld um drei (in 3D sieben) Zellen verringert, wobei die neue Zelle den Platz einer der zu vergrößernden Zellen einnimmt. Bei einer Verfeinerung kommen drei (in 3D sieben) Einträge zum Indexfeld hinzu. Dadurch, dass eine Verfeinerung und eine Vergrößerung ausgeführt wird, ändert sich die Größe des Datenfelds hier nicht. In der Abbildung 4.5b ist die Zuordnung zwischen der Gitternummerierung veranschaulicht. Die Zuordnungslisten  $\Pi$  haben jeweils die Dimension des momentan betrachteten



**Abb. 4.5.:** Adaption eines 2D Beispielgitters: In einem Schritt werden Zellen 2,3,4,5 vergrößert und Zelle 6 verfeinert (a). Darstellung der Zuordnung zwischen der alten und neuen Gitterindizierung (b).

Gitters. Die enthaltenen Einträge zeigen auf den Gitterindex des jeweils anderen Gitters. Für das gezeigte Beispiel lauten die Zuordnungslisten:

$$\Pi^{① \rightarrow ②} = \begin{Bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 3 \\ 7 \end{Bmatrix} \quad \Pi^{② \rightarrow ①} = \begin{Bmatrix} 1 \\ 2 \\ 6 \\ 6 \\ 6 \\ 6 \\ 7 \end{Bmatrix} \quad (4.3)$$

Bei dieser Methode werden die neuen Kontrollvolumen jeweils an der Position der ursprünglich zu verfeinernden Zellen in der Indexliste eingefügt. Ein umgekehrtes Vorgehen wird bei der Vergrößerung praktiziert. Dies wirkt sich positiv auf den Erhalt der Bandbreite der Matrix aus, sofern das Startgitter in dieser Hinsicht bereits über eine geeignete Nummerierung verfügt. Die Alternative, ein Anhängen neuer

Elemente am Ende der Liste, würde die Bandbreite und damit das Lösungsverhalten negativ beeinträchtigen. In diesem Fall ließe sich die Bandbreite nur durch eine geeignete neue Nummerierung wie z. B. nach der Methode von CUTHILL und MCKEE [21] wieder verbessern.

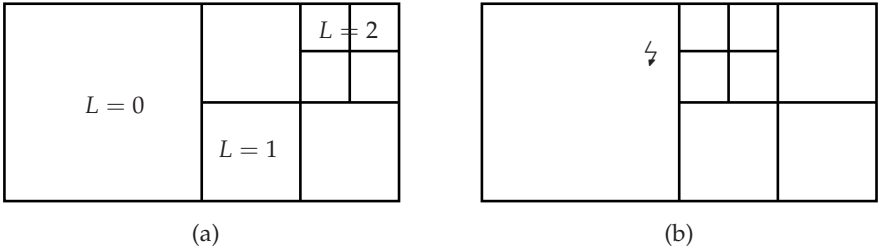
##### Regeln und Restriktionen

Bei der Umsetzung werden einige Regeln bzw. Restriktionen festgelegt, die während des Adaptionprozesses eingehalten und kontrolliert werden müssen. Die *sensorbasierte* Markierung von Zellen zur Verfeinerung oder Vergrößerung (siehe Abschnitt 4.2.2) ist zunächst nur vorläufiger Natur. Erst wenn alle nachfolgend aufgelisteten Anforderungen erfüllt sind, steht endgültig fest, welche Zellen wie modifiziert werden.

1. Prinzipiell ist die Anzahl der Gitterlevel unbegrenzt, in der Praxis ist es jedoch sinnvoll, eine maximale Grenze  $L_{\max}$  festzulegen, die nicht überschritten werden darf (d. h. eine weitere Verfeinerung dieser Zellen findet nicht statt). Die untere Schranke bildet  $L_{\min}$ , welche für ein unverfeinertes Anfangsgitter den Wert  $L_{\min} = 0$  annimmt. Eine weitere Vergrößerung ( $L < L_{\min}$ ) wird nicht erlaubt.
2. Die maximale Anzahl an Adaptionsschritten  $N^G$  ist grundsätzlich ebenfalls unbegrenzt. Die Adaptionsschritte können entweder direkt nacheinander ausgeführt werden oder nach einer gewissen Zahl an Iterationen bzw. Zeitschritten.
3. Je Adaptionsschritt  $G$  kann eine Zelle entweder um eine Stufe ( $L + 1$ ) verfeinert oder mit den jeweils zugehörigen Kontrollvolumen um eine Stufe ( $L - 1$ ) vergrößert werden.
4. Die Verfeinerung oder Vergrößerung ist immer isotrop, wie in Abbildung 4.3a gezeigt.
5. Bei einer lokalen Gittervergrößerung werden immer die acht Zellen zusammengefasst, die auch vor ihrer Verfeinerung eine Zelle bildeten.
6. Sind von zwei benachbarten Zellen gleichen Gitterlevels eine zur Verfeinerung und eine zur Vergrößerung markiert, so wird die Vergrößerung verworfen und die Verfeinerung wird durchgeführt.
7. Ist eine Zelle zur Vergrößerung vorgesehen, so werden die zugehörigen sieben Zellen (siehe Abschnitt 4.2.4) ebenfalls zur Vergrößerung vorgeschlagen. Ist jedoch eine dieser Zellen zum Verfeinern markiert, so wird die Vergrößerung verworfen, und die Verfeinerung für die dafür vorgesehenen Zellen durchgeführt.



8. Über die Zellflächen benachbarte Kontrollvolumen dürfen eine Differenz von maximal  $\Delta L = 1$  Level aufweisen (siehe Abbildung 4.6). D.h. an eine Seite einer Zelle grenzen maximal vier Nachbarzellen.
9. Die angrenzenden Kontrollvolumen jener Flächen  $f^B$ , die von der IB getroffen werden, müssen das gleiche Gitterlevel aufweisen.



**Abb. 4.6.:** Gitter mit erlaubtem (a) und nicht-erlaubtem Teilungsverhältnis (b).

Um das Einhalten der vorgegebenen Regeln zu garantieren, wird in einem Iterativen Ablauf so lange verfahren, bis keine Verletzungen der Restriktionen mehr auftreten. Dabei wird hauptsächlich der Adaptionsmarkierer  $\mathcal{A}$  verändert. D. h. eine Vergrößerung kann beispielsweise verworfen und durch eine Verfeinerung ersetzt werden. Das Verfeinern besitzt gegenüber dem Vergrößern eine gewisse Priorität, so dass im Zweifelsfall eher eine Zelle zu viel verfeinert als vergrößert wird. Da die möglichen Komplikationen lediglich an Grenzen unterschiedlicher Gitterlevel auftreten, ist die Überprüfung vom rechnerischen Aufwand her vernachlässigbar.

#### 4.2.2. Sensorbasierte Adaption und Adaptionkontrolle

Häufig werden Fehlerschätzer als Adaptionssensoren verwendet [3]. In dieser Arbeit dienen Größen als Adaptionskriterium, die unmittelbar aus dem Strömungsfeld abgeleitet werden können. Dabei lassen sich prinzipiell auch verschiedene Sensorgößen mit einander kombinieren. Sobald der Sensor in einer Zelle den vorgegebenen Bereich zwischen den Schranken  $\mathcal{S}^+$  und  $\mathcal{S}^-$  verlässt, werden diese zur Verfeinerung oder Vergrößerung markiert:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{S} > \mathcal{S}^+ &\longrightarrow \mathcal{A} = +1 \quad (\text{Verfeinerung}) \\
 \mathcal{S} < \mathcal{S}^- &\longrightarrow \mathcal{A} = -1 \quad (\text{Vergrößerung}) \\
 \mathcal{S}^+ > \mathcal{S} > \mathcal{S}^- &\longrightarrow \mathcal{A} = 0 \quad (\text{keine Änderung})
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

##### Wandabstand

Um das Gitter zu einer Wandberandung des Oberflächennetzes hin zu Verfeinern, kann der Wandabstand  $d_w$  ausgenutzt werden. Es wird

$$\mathcal{S} = -d_w \quad (4.5)$$

definiert, um die Konsistenz zum Ansatz (4.4) zu erhalten. Damit für  $d_w < d_w^{\min}$  eine Verfeinerung und für  $d_w > d_w^{\max}$  eine Vergröberung stattfinden kann, sind die Sensorgrenzen als  $(\mathcal{S}^+ = -d_w^{\min})$  und  $(\mathcal{S}^- = -d_w^{\max})$  festgelegt. Der Wandabstand ist definiert als Distanz von einem Kontrollvolumenzentrum  $C$  zum nächstgelegenen Dreieckszentrum des Oberflächengitters:  $d_w = \min(|x_i^A - x_i^C|)$ . Um alle Kontrollvolumen im Bereich des Oberflächengitters bei der Verfeinerung zu berücksichtigen, ist  $d_w^{\min} \gtrapprox 0.5\sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2 + \Delta z^2}$  zu erfüllen, was den maximalen Abstand vom Zellzentrum zu den Eckpunkten darstellt. Die Sensorgrenzen können für jede Adaptionsstufe  $\mathcal{G}$  individuell festgelegt werden.

##### Wirbelstärke

Mit einem Sensor basierend auf dem Betrag der Wirbelstärke  $\omega_i$  können Bereiche großer Rotation erkannt und verfeinert werden. Zur Normierung der Größe, wird ein charakteristisches Längenmaß  $h$  des Kontrollvolumens (hier die Raumdiagonale der Zelle) verwendet. Der Exponent  $3/2$  ist an die Arbeit von COIRIER [16] angelehnt:

$$\mathcal{S} = |\omega_i| h^{3/2} \quad (4.6)$$

Mit fortschreitender Verfeinerung sinkt das charakteristische Zellmaß  $h$ , so dass sich bei konstanter Wirbelstärke, die Sensorgröße verringert. Die Wahl der Sensorgrenzen  $\mathcal{S}^+$  und  $\mathcal{S}^-$  erfolgt manuell und fallabhängig.

##### Absolutgeschwindigkeit

Um beispielsweise den das Totwassergebiet eines umströmten Körpers besser aufzulösen, eignet sich ein Sensor, der auf der Absolutgeschwindigkeit  $|u_i|$  beruht. Weder mit dem Wandabstand noch über einen Wirbelstärkesensor kann dieser Bereich, in dem sich das Fluid sehr langsam bewegt, ausgemacht werden. Die obere Sensorgrenze kann  $\mathcal{S}^+$  beispielsweise in Abhängigkeit auf die mittlere Anströmgeschwindigkeit gebildet werden.

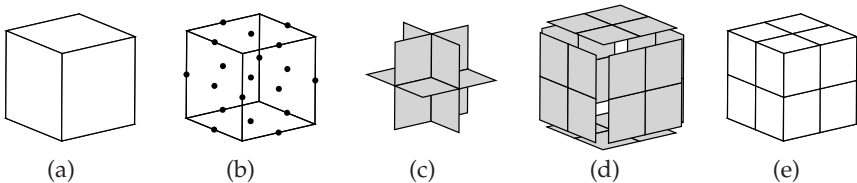
$$\mathcal{S} = -|u_i| \quad (4.7)$$

##### Manuelle Bereichsauswahl

Oft ist es jedoch wünschenswert, einen eigens gewählten Bereich zu verfeinern, der sich nicht sinnvoll durch einen Sensor im eigentlichen Sinne beschreiben lässt. Für diesen Fall ist es möglich, die Eckpunkte von Begrenzungsboxen zu definieren. Innerhalb dieser Bereichsauswahl kann die Markierungsvariable  $\mathcal{A}$  manuell festgelegt werden.

### 4.2.3. Gitterverfeinerung

Die *Gitterverfeinerung* wird für jede dafür markierte Zelle ( $\mathcal{A} = +1$ ) durchgeführt. In Abbildung 4.7 sind die einzelnen Teilschritte veranschaulicht. Alle neu erzeugten Kontrollvolumen werden, wie in Abschnitt 4.2.1 beschrieben, in die umdimensionierte Zuordnungsliste einsortiert. Die Mittelpunkte der Seitenkanten, das Zell-



**Abb. 4.7.:** Verfeinerungsprozess am Beispiel einer einzelnen Gitterzelle (a). Nach der Bestimmung der 19 neuen Knotenpunkte (b) werden die 12 Inneren (c) und nachfolgend die 24 äußeren Flächenelemente (d) erzeugt. Abschließend ersetzen acht neue Kontrollvolumen die ursprüngliche Zelle (e).

zentrum und die Flächenzentren bilden zusammen mit den ursprünglichen Knotenpunkten die Basis für die neuen Kontrollvolumen. Die 19 neuen und die acht bereits existierenden Knoten werden lokal (je momentan betrachteter Zelle) stets einheitlich nummeriert, woraus sich konsequent die neuen Volumen- und Flächenelemente erzeugen lassen. Da stets von mehreren zu verfeinernden Zellen auszugehen ist, die z. T. aneinander angrenzen, ist das Verhindern identischer Knoten- und Flächenelemente die eigentliche Herausforderung der Gitterverfeinerung. Daher werden die neu erzeugten Knoten- wie Flächenelemente zunächst nur temporär zwischengespeichert. Vor der endgültigen Speicherung müssen die benachbarten Gitterbereiche überprüft werden, damit keine identischen Elemente mehrfach gespeichert werden.

### Volumenelemente

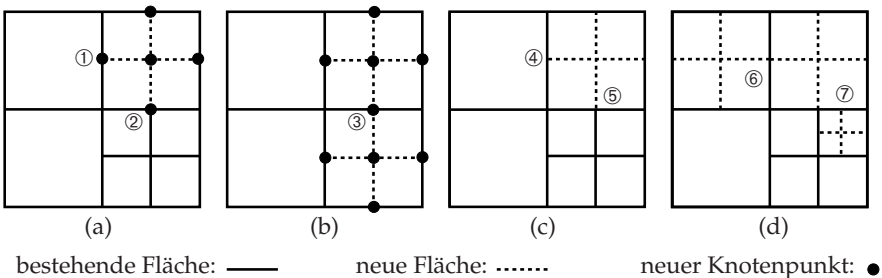
Die acht neu erzeugten Volumenelemente werden in der Liste der Kontrollvolumen hinzugefügt. Dies geschieht durch eine Aufspreizung der Liste (wie in Abschnitt 4.2.1 an einem Beispiel veranschaulicht) an den Zellpositionen, an denen Verfeinerungen stattfinden. Hinter dem Eintrag einer zu verfeinernden Zelle werden sieben freie Speicherplätze eingefügt, an denen die acht neuen Zellen gespeichert werden. Der Grund, weshalb die Elemente nicht am Ende angehängt werden liegt in der Forderung, die Bandbreite der Koeffizientenmatrix (allein die Nummerierung der Volumenelemente und die Diskretisierungsschemata bestimmen die Bandbreite) möglichst gering zu halten.

##### Knotenelemente

Insgesamt sind die acht neuen Kontrollvolumen durch 27 Knotenpunkte definiert. Abgesehen von den acht bereits bestehenden Eckpunkten der Ursprungszelle kann nur über den inneren Punkt mit Sicherheit gesagt werden, dass er weder zuvor existieren noch doppelt erzeugt werden konnte. Dieser wird in jedem Fall gespeichert. Die verbleibenden 18 Knoten gilt es bezüglich der drei folgenden Möglichkeiten hin zu überprüfen, die auch in Abbildung 4.8 (a), (b) dargestellt sind:

1. Der Knoten existiert nicht, er soll gespeichert werden. (Abbildung 4.8, ①)
2. Der Knoten existiert bereits durch ein höheres Gitterlevel einer benachbarten Zelle. Der Knoten soll nicht (doppelt) gespeichert werden. (Abbildung 4.8, ②)
3. Der Knoten existiert bereits, weil er bei der vorherigen Betrachtung einer zu verfeinernden benachbarten Zelle (siehe Punkt 1) bereits gespeichert wurde. Dieser Knoten soll nicht erneut gespeichert werden. (Abbildung 4.8, ③)

Zur Verifizierung der Situation müssen alle an die unverfeinerte Zelle angrenzenden Volumen (nicht nur die über die Flächen sondern auch die über die Ecken angrenzenden Kontrollvolumen) betrachtet werden. Ausgehend von den acht Eckpunkten der Zelle werden mit Hilfe einer Zuordnungsumkehr (siehe Anhang A.6) die jeweils anhängenden Kontrollvolumen hinsichtlich identischer Knotenelemente überprüft. Anschließend werden nur beizubehaltende Knoten gespeichert. Da, anders als bei den Volumenelementen, die Knoten beliebig nummeriert sein dürfen, können die so ermittelten neuen Knoten am Ende der bestehenden Knotenliste angefügt werden.



**Abb. 4.8.:** Unterschiedliche Situationen während der Verfeinerung, bei denen mehrfache Knoten- (a), (b) und Flächenelemente (c), (d) auftreten, die nicht doppelt gespeichert werden sollen.

### Flächenelemente

Die 12 erzeugten Flächen innerhalb der zu verfeinernden Zelle (Abbildung 4.7c) sind in jedem Fall neu und noch nicht existent. Für die restlichen 24 Flächen (Abbildung 4.7d) ist ein Abgleich mit den Flächenelementen der angrenzenden Nachbarzellen erforderlich. Dabei muss auch der Flächentyp ermittelt werden. Die neuen Flächen werden mit dem Flächentyp deklariert, den die vorherige zu entfernende Fläche aufweist. Im Fall einer Randfläche müssen auch die Angaben über den Randbedingungstyp sowie dessen Eigenschaften übertragen werden. Für die 24 Flächen des verfeinerten Kontrollvolumens ( $L + 1$ ), können vier unterschiedliche Situationen (siehe Anhang 4.8c, 4.8d) auftreten:

1. Die Fläche grenzt an eine Zelle geringeren Gitterlevels ( $L$ ), welche nicht verfeinert wird ( $\mathcal{A} = 0$ ). Die ursprüngliche große Fläche wird verworfen und die betrachtete sowie drei weitere werden gespeichert (Abbildung 4.8, ④).
2. Die Fläche grenzt an eine Zelle geringeren Gitterlevels ( $L$ ), und auch diese Zelle soll verfeinert werden ( $\mathcal{A} = 1$ ). Die ursprüngliche Fläche wird verworfen. Die betrachtete Fläche und 3 weitere werden nun ein Mal gespeichert (Abbildung 4.8, ⑥).
3. Die Fläche grenzt an eine Zelle gleichen Gitterlevels ( $L + 1$ ), die nicht weiter verfeinert wird ( $\mathcal{A} = 0$ ). Die Fläche besteht schon, sie muss nicht erneut gespeichert werden (Abbildung 4.8, ⑤).
4. Die Fläche grenzt an eine Zelle gleichen Gitterlevels ( $L + 1$ ), die weiter bis auf das Level  $L + 2$  verfeinert wird. Die momentan betrachtete Fläche wird nicht gespeichert, da die jeweils kleineren Teilflächen der benachbarten Zellen gespeichert werden (Abbildung 4.8, ⑦).

Alle Flächenelemente werden in der programmtechnischen Umsetzung in einer Liste geführt, wobei zunächst die Innerern, dann die Kommunikations- und am Ende die Randflächen stehen (vergleiche auch Abschnitt A.5). Nachdem die genaue Anzahl neuer Innerer, Kommunikations- und Randflächen ermittelt wurde, wird die Liste entsprechend erweitert und die Flächen dort einsortiert.

#### 4.2.4. Gittervergrößerung

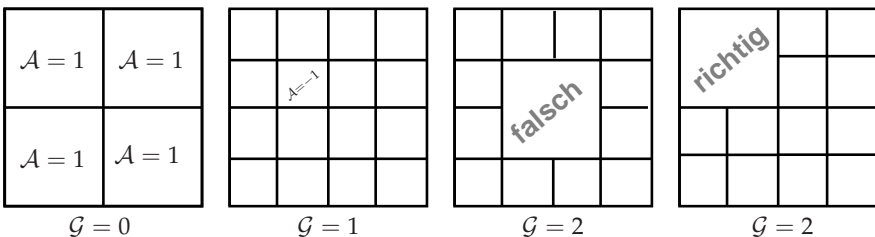
Die *Gittervergrößerung* ist die konsequente Umkehr der Gitterverfeinerung. Damit bei einer Vergrößerung das ursprüngliche (unverfeinerte) Gitter wieder erreicht wird, ist es essentiell, genau diejenigen Gitterzellen zu vereinigen, die auch zu einem früheren Zeitpunkt eine Zelle bildeten. In Abbildung 4.9 ist ein 2D Beispiel gezeigt: Im ersten Adaptionsschritt ( $\mathcal{G} = 1$ ) werden alle vier Zellen des Ursprungsgitters verfeinert und eine von ihnen für den nächsten Schritt ( $\mathcal{G} = 2$ ) zur Vergrößerung markiert. Werden nun die falschen Zellen zur Vergrößerung hinzugezogen entsteht ein inkonsistentes Gitter, so dass der Ausgangszustand von  $\mathcal{G} = 0$  nicht mehr erreicht werden kann.

### Adaptionsgruppen

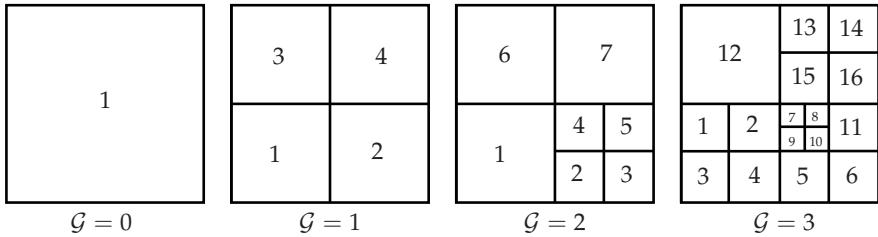
Eine Lösung für das zuvor geschilderte Problem bieten s. g. *Adaptionsgruppen*, welche die Information bereit halten, welche Zellen jeweils eine Einheit bilden. Bei jeder Verfeinerung werden die acht neuen Zellen in Form einer Gruppe gespeichert. Soll zu einem späteren Zeitpunkt eine Vergrößerung ausgeführt werden, so sind immer die Zellen einer vollständigen Gruppe zusammenzufassen. In Abbildung 4.10 ist der fortschreitende Aufbau der Adaptionsgruppen anhand von drei Adaptionsschritten für ein einfaches 2D Rechengitter gezeigt. Das Startgitter besteht lediglich aus einer einzelnen Zelle, die daher auch nicht in einer Gruppe geführt wird. Im ersten Adaptionsschritt ( $\mathcal{G} = 1$ ) wird die einzig vorhandene Gitterzelle verfeinert und die neuen Zellen bilden eine Gruppe  $G_1(1)$ . Als zusätzliche Information wird das Gitterlevel, welches diese Zellen aufweisen ( $L = 1$ ) gespeichert. Daher kann auch von einem *Gruppenlevel* gesprochen werden, dessen Bedeutung später deutlich wird.

$$G_1 = \begin{Bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 1 \end{Bmatrix} \quad G_2 = \begin{Bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 3 \\ 6 & 4 \\ 7 & 5 \\ 1 & 2 \end{Bmatrix} \quad G_3 = \begin{Bmatrix} 1 & 5 & 7 & 1 & 13 \\ 5 & 6 & 8 & 2 & 14 \\ 12 & 7 & 9 & 3 & 15 \\ 13 & 11 & 10 & 4 & 16 \\ 1 & 2 & 3 & 2 & 2 \end{Bmatrix} \quad (4.8)$$

Im Schritt  $\mathcal{G} = 2$  wird eine Zelle weiter verfeinert, wodurch eine weitere Gruppe hinzukommt (siehe  $G_2(2)$ ). Auch werden die Zellnummern in den Gruppen mit jedem Adaptionsschritt aktualisiert. In der ersten Gruppe repräsentiert nun die erste der verfeinerten Zellen (Nummer 2) die Zelle des vorherigen Adaptionsschritts (ebenfalls Nummer 2). Die Verfeinerung der Zellen 4, 1 und 7 im Schritt zu  $\mathcal{G} = 3$  führt schließlich auf fünf Gruppen in  $G_3$ . Die erste Gruppe von  $G_3$  ( $G_3(1)$ ) beschreibt weiterhin den Zustand von  $\mathcal{G} = 1$ , obwohl nur noch die Zelle 12 das ursprüngliche Gitterlevel aufweist (welches mit dem Gruppenlevel übereinstimmt). Die Speicherung des Gruppenlevels dient zur Überprüfung, ob eine Gruppe in der momentanen Konstellation wieder zu einer Zelle zusammengefasst werden kann oder nicht. Nur wenn das Gitterlevel  $L$  aller Zellen einer Gruppe mit dem Gruppenlevel iden-



**Abb. 4.9.:** Werden beim Vergrößern die falschen Zellen zusammengefasst, kann ursprüngliche Zustand später nicht mehr erreicht werden.



**Abb. 4.10.:** Ein einfaches 2D Gitter wird über drei Adaptionsschritte verfeinert. Mit jeder Verfeinerung kommt eine neue Adaptionsgruppe hinzu.

tisch ist, kann eine Vereinigung der Zellen stattfinden. Demnach ist für die Gruppen  $G_3(3, 4, 5)$  des Gitters ( $\mathcal{G} = 3$ ) eine Vergrößerung prinzipiell möglich, während dies für die Gruppen  $G_3(1)$  und  $G_3(2)$  nicht gilt.

Eine Einschränkung ist dadurch gegeben, dass keine Vergrößerung von Gittern möglich ist, die außerhalb des Programms verfeinert wurden und für die diese Adaptionsgruppen nicht zur Verfügung stehen. Ein nachträgliches Erzeugen der Adaptionsgruppen ist momentan nicht möglich.

### Volumenelemente

Bei der Vereinigung acht zusammengehöriger Zellen zu einer wird die Liste der Kontrollvolumen lokal komprimiert. Von den acht Speicherplätzen verbleibt einer, der die vergrößerte Zelle enthält, die sieben nicht mehr benötigten werden daraus entfernt.

### Knotenelemente

Bei der Gittervergrößerung werden keine neuen Knotenpunkte erzeugt. Die vergrößerte Zelle sowie die umgebenden Flächenelemente werden aus bestehenden Knotenelementen definiert. Stattdessen ist es erforderlich, die Knoten, die nicht mehr verwendet werden, zu entfernen. Würden nach jeder Vergrößerung die nicht verwendeten Knoten im System verbleiben, so würde dies aus programmtechnischer Sicht ein s. g. *Speicherleck* darstellen. Um die zu eliminierenden Knoten zu identifizieren, wird wie folgt vorgegangen: Es werden nacheinander alle Volumen- und Flächenelemente betrachtet und ihre definierenden Knotenpunkte als *verwendet* markiert. Alle verbleibenden nicht markierten Knoten können anschließend entfernt werden, wobei ein Komprimieren der Liste erforderlich ist.

### Flächenelemente

Für jede Vergrößerung werden zunächst die sechs umliegenden Flächenelemente erzeugt. Parallel dazu bestehen anfangs die Flächenelemente der ursprünglichen Zel-

len. Die innen liegenden 12 Flächen (siehe Abbildung 4.7c) können direkt gelöscht werden. Über die außen liegenden bzw. die sechs neu erzeugten Flächen muss entschieden werden, ob sie benötigt werden oder nicht. Prinzipiell können hier die gleichen Konstellationen an Flächenelementen auftreten, wie im Fall der Verfeinerung (siehe Abschnitt 4.2.3). Eine weitere zu berücksichtigende Konstellation ist die, dass von zwei benachbarten Zellen (Level  $L$  bzw.  $L + 1$ ) je eine verfeinert und die andere vergrößert werden soll.

##### 4.2.5. Abschließende Aufgaben

Um die Gitteradaption abzuschließen, bleiben noch weitere verschiedene Aufgaben übrig, die zwar nicht alle im Detail erläutert, aber zumindest genannt werden sollen: Nach der sensorbasierten Verfeinerung und Vergrößerung des Rechengitters fehlen noch wichtige Informationen, die sonst im Präprozess (siehe Anhang A.5) erzeugt werden. Dazu zählen im Wesentlichen:

- Ermittlung der an die Flächen grenzenden Kontrollvolumen
- Generierung der Koeffizientenmatrix im CRS Format
- Positionsbestimmung von Nachbarzellen innerhalb der Koeffizientenmatrix

Im Anschluss werden die gespeicherten Strömungsdaten vom alten auf das neue Gitter übertragen: Die acht neuen Zellen bei einer Verfeinerung erhalten jeweils den Variablenwert der ursprünglichen, unverfeinerten Zelle. Im umgekehrten Fall bei der Vergrößerung wird die neue Zelle mit einem über alle acht ursprüngliche Kontrollvolumen gemittelten Wert initialisiert. Bis zu diesem Zeitpunkt bestehen das ursprüngliche und das adaptierte Gitter parallel. Der Transfer der Strömungsdaten geschieht über die Zuordnungslisten, die in Abschnitt 4.2.1 beschrieben sind. Erst danach ersetzt das neue Gitter das Alte vollständig, wobei sämtliche bis dahin genutzten Hilfsfelder wieder entfernt werden.

Durch die sich während der Gitteradaption ändernde Zellnummerierung ist auch die Zellnummer des Druckreferenzpunkts (Vergleiche Abschnitt 2.3.1) neu zu bestimmen. Für das neue Rechengitter müssen schließlich die Zellvolumina, die geometrischen Hebelarme und die Massenflüsse über die Flächen aktualisiert werden. Bevor mit der Berechnung des Strömungsfelds fortgefahren werden kann, ist auch die Identifizierungs- und Markierungsprozedur (siehe Abschnitt 4.4) zu wiederholen, um die Schnittpunkte des Oberflächengitters mit dem neuen Rechengitter zu ermitteln.

##### Besonderheiten zur Parallelisierung

Prinzipiell ist die Gitteradaption auch für Parallelrechnungen möglich. Einige der vorgestellten Mechanismen wie z. B. das Überprüfen der Restriktionen oder das Entfernen doppelter Gitterelemente müssen dann über die Gittergrenzen hinweg zwischen den unterschiedlichen Recheneinheiten ausgeführt werden. Dabei werden die Kommunikationsflächen zum Datenaustausch genutzt. Sind auch Gitterbereiche



am Rande von Kommunikationsflächen von der Adaption betroffen, ist eine Anpassung der Kommunikationslisten ebenfalls notwendig. Das Hauptproblem, welches bei Parallelrechnungen auftritt, ist eine ungleiche Lastverteilung. Der Grund dafür ist, dass die Teilbereiche des Rechengitters meist unterschiedlich von der Adaption betroffen sind [90]. Im ungünstigsten Fall steigt der Rechenaufwand einer einzelnen CPU stark an, so dass alle weiteren Recheneinheiten permanent auf diese eine warten müssen. Ein Ausweg ist die komplette Neuverteilung des gesamten Rechengitters, wie sie beispielsweise in folgenden Arbeiten zum Einsatz kommt [4, 83]. Derartige Ansätze basieren auf einer parallelen Variante der Graphenzerlegung [126]. Zur programmtechnischen Umsetzung einer automatischen Neuverteilung, die zum aktuellen Stand der Arbeit jedoch noch nicht realisiert ist, wäre beispielsweise die Software Bibliothek ParMetis [62] geeignet.

#### 4.2.6. Testfälle und Verifikation

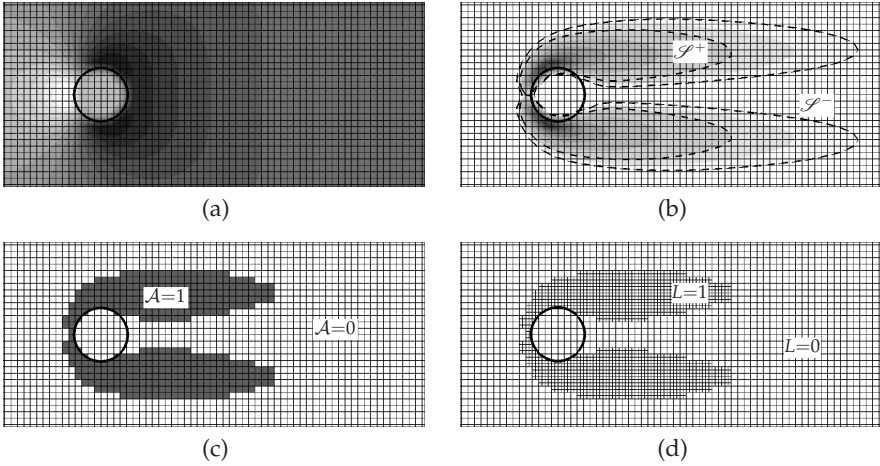
Während der Entwicklung der dynamischen Gitteradaption wurde eine Umgebung unterschiedlichster Testfälle geschaffen, um an einfachen Beispielen alle auftretenden Konstellationen an zu verfeinernden und zu vergrößernden Zellen zu erzeugen. Einige dieser Testfälle befinden sich im Anhang unter A.7. Um die Korrektheit der Implementierung zu überprüfen (Verifikation), kann ein adaptiertes Gitter exportiert werden und den herkömmlichen Präprozess durchlaufen. Abgesehen von der Reihenfolge der Nummerierung sollten dabei keine Unterschiede auftreten. Im Weiteren werden zwei Beispiele gezeigt, um den Vorgang der Adaption zu demonstrieren.

#### Funktionsweise des Adaptionssensors

In Abbildung 4.11 sind die verschiedenen Zwischenstationen eines einzelnen Adaptionsschritts am Beispiel einer stationären Zylinderumströmung veranschaulicht: Zunächst wird auf dem groben Startgitter die Strömung berechnet (4.11a). Es folgt die Berechnung des Wirbelstärke-Adaptionssensors (4.11b). Unter Berücksichtigung der Sensorgrenzen  $\mathcal{S}^+$  und  $\mathcal{S}^-$  werden die zu modifizierenden Zellen definiert (4.11c). Da das Startgitter ein Level von  $L = 0$  aufweist findet für  $\mathcal{S} < \mathcal{S}^-$  keine Vergrößerung statt. Abbildung 4.11d zeigt schließlich das vollständig verfeinerte Gitter, auf welches die zunächst berechnete Startlösung übertragen wird. Nach einer weiteren Phase der Strömungsberechnung auf dem neuen Rechengitter würde der Vorgang der Adaption wiederholt werden, bis eine hinreichende Gitterauflösung erzielt ist.

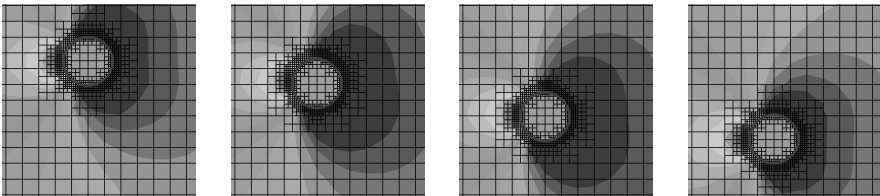
#### Bewegte Geometrie

Bei bewegten Geometrien kann die Anpassung des Rechengitters in jedem Zeitschritt geschehen. Abbildung 4.12 zeigt, wie die Adaption dafür sorgt, dass der verfeinerte Bereich der Geometrie folgt. Die Zone nahe der Wand ( $d_w < d_w^{\min}$ ) ist zur



**Abb. 4.11.:** Veranschaulichung der Gitteradaption am Beispiel einer Zylinderumströmung unter Verwendung des Wirbelstärke-Adaptionssensors. Initiale Berechnung des Strömungsfelds (a); Berechnung des Adaptionssensors  $\mathcal{S}$  (b); Definition der zu verfeinernden Zellen (c); Gitter nach der Verfeinerung (d).

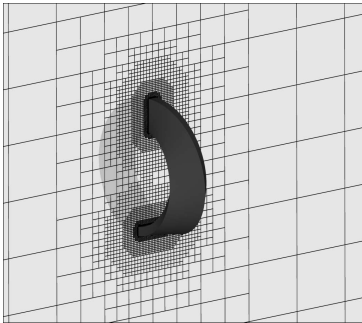
Verfeinerung vorgesehen, während weiter außen ( $d_w > d_w^{\max}$ ) eine Vergrößerung die verfeinerten Bereiche rückstandslos wieder entfernt. Zur besseren Anschaulichkeit ist das Maximale Gitterlevel auf  $L_{\max} = 3$  begrenzt. Vor der Simulation (vergleiche Abbildung 4.4) werden drei Adaptionsschritte benötigt, damit zum Beginn der instationären Simulation das um drei Level verfeinerte Gitter vorliegt.



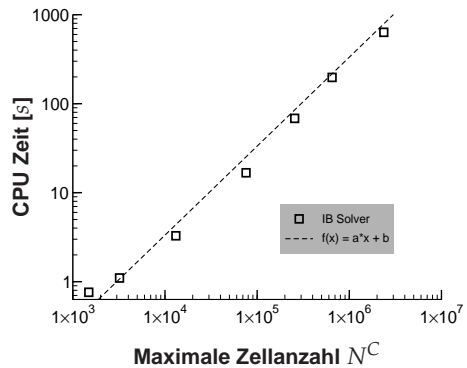
**Abb. 4.12.:** Adaption des Rechengitters für eine bewegte Geometrie: Druckfeld und Rechengitter für unterschiedliche Zeitschritte im Fall eines harmonisch oszillierenden Zylinders.

### Numerischer Aufwand

Zur Bewertung des numerischen Aufwands der Gitteradaption wird ein kartesisches Rechengitter in Bezug auf den Wandabstand verfeinert. Bei der eingetauchten Oberflächengeometrie handelt es sich um die Triangulierung eines s. g. Möbiusbandes. Das Anfangsgitter, welches in sieben Adaptionsschritten verfeinert wird, besteht aus 1280 Zellen. Der Endzustand ist in Abbildung 4.13a veranschaulicht. Mit steigendem Adaptionsschritt  $\mathcal{G}$  sinkt der Abstand, bezüglich dessen eine Verfeinerung stattfinden soll. Abbildung 4.13b zeigt die je Adaptionsschritt benötigte Rechenzeit in Abhängigkeit der momentanen Gesamtanzahl an Zellen  $N^C(\mathcal{G})$ . Die Rechenzeiten beziehen sich auf den reinen Adaptionsschritt, der Aufwand zur Bestimmung des Wandabstands ist dabei nicht mit inbegriffen. Es zeigt sich eine lineare Abhängigkeit der Rechenzeit von der Anzahl an Zellen. Der meiste Aufwand verbirgt sich hinter der Identifizierung identischer Knoten- und Flächenelemente. Hier ist auch das größte Verbesserungspotential für eine weitere Beschleunigung des Adaptionsverfahrens zu sehen.



(a)



(b)

**Abb. 4.13.:** Adaptiv erzeugtes Rechengitter um die Oberfläche eines Möbiusbandes (a); Rechenzeiten der Gitteradaption in Abhängigkeit der Gesamtzahl kartesischer Rechenzellen (b).

### 4.3. Diskretisierung der Immersed Boundary

Die Oberfläche  $\Gamma_b$  des in das Rechengebiet  $\Omega$  eingetauchten Körpers  $b$  wird durch *Dreieckselemente* ( $\Delta$ ) beschrieben. Abbildung 4.14a zeigt ein einzelnes Dreieckselement, welches durch die Raumkoordinaten  $x_i^p$  der drei Knotenpunkte ( $p_1, p_2, p_3$ ) definiert ist. Das Dreieckszentrum ist durch

$$x_i^\Delta = \frac{1}{3}(x_i^{p_1} + x_i^{p_2} + x_i^{p_3}) \quad (4.9)$$

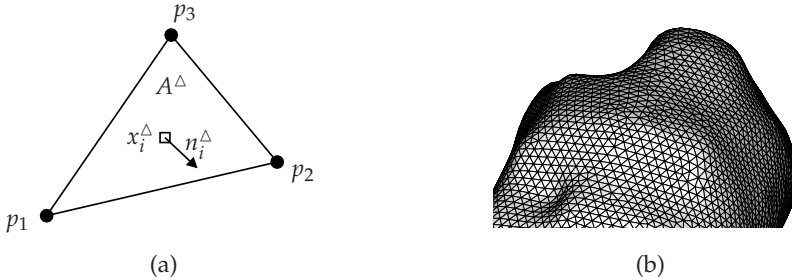
gegeben. Der Normalenvektor kann über das normierte Kreuzprodukt zweier Kantenvektoren gebildet werden. Das Oberflächengitter muss die Anforderung erfüllen, dass alle Normalenvektoren stets in Richtung des Strömungsgebiets zeigen.

$$n_i^\Delta = \frac{(x_i^{p_1} - x_i^{p_2}) \times (x_i^{p_1} - x_i^{p_3})}{|(x_i^{p_1} - x_i^{p_2}) \times (x_i^{p_1} - x_i^{p_3})|} \quad (4.10)$$

Für den Flächeninhalt gilt mit den drei Kantenlängen des Dreiecks  $l_1, l_2, l_3$  sowie  $s = 0.5(l_1 + l_2 + l_3)$ :

$$A^\Delta = \sqrt{s(s - l_1)(s - l_2)(s - l_3)}. \quad (4.11)$$

Für die Diskretisierung einer Oberfläche mit Dreiecken gibt es zahlreiche unterschiedliche Ansätze [36]. Einer, mit dem sich beliebig komplexe Oberflächen approximieren lassen, ist die s. g. *Delauny-Triangulierung* [44]. In Bezug auf die Auf-



**Abb. 4.14.:** Dreieckselement ( $\Delta$ ) mit seinen geometrischen Eigenschaften (a). Beispielhafte Oberflächendiskretisierung  $\Gamma_b$  eines eingetauchten Körpers  $b$  (b).

gabe, eine Randbedingung für die Strömungssimulation darzustellen, sollte eine möglichst exakte Wiedergabe der Realen Geometrie durch das Dreiecksnetz erfolgen. Dabei sind die Größenverhältnisse zwischen den Dreieckselementen und den kartesischen Gitterzellen ein wesentlicher Anhaltspunkt. Obwohl das Verfahren robust implementiert ist, sollten beide Gitterelemente im Schnittbereich eine ähnliche Größenordnungen aufweisen. Die Gründe hierfür werden in den Abschnitten 4.5.3

und 4.4.2 ersichtlich, in denen die Kräfteberechnung und die effiziente Suche geschnittener Zellen vorgestellt wird. Es wird von einer geschlossenen Oberfläche ausgegangen, die weder Löcher noch Bereiche der Selbstdurchdringung aufweisen darf. Es existieren keine freien und keine mehrfach identischen Knotenpunkte im Netz. Die Speicherung erfolgt unstrukturiert, wie im Anhang unter A.2 erläutert. Es können mehrere separate Oberflächennetze berücksichtigt werden, denen während der Strömungssimulation unterschiedliche Randbedingungstypen zugeordnet werden können. Siehe hierzu Abschnitt 4.5, in dem die Randbedingungen an eingetauchten Oberflächen vorgestellt werden.

#### 4.4. Identifizierung und Markierung

Da das Oberflächengitter die Grenze zwischen dem Strömungsgebiet und dem nicht-Strömungsgebiet repräsentiert, ist es notwendig vor der Simulation die geschnittenen Bereiche zu *identifizieren* und die Zellen durch eine entsprechende *Markierung* dem Strömungsgebiet oder dem nicht-Strömungsgebiet zuzuordnen. Anschließend kann das nicht-Strömungsgebiet von der Simulation ausgeschlossen werden.

In Abbildung 4.15 sind zwei Gitterzellen dargestellt, die von einem Dreieck des Oberflächengitters geschnitten werden. Nun ist es die Aufgabe, diejenigen Flächen ( $f^{ib}$ ) zweier benachbarter Zellen ( $C_L$ ,  $C_R$ ) ausfindig zu machen, deren Verbindungsline  $d_i^{LR}$  von einem Dreieck im Punkt  $x_i^s$  geschnitten werden.

##### 4.4.1. Auffinden der Schnittpunkte

Ein Schnittpunkt liegt zum einen innerhalb des betroffenen Dreieckselements und zum anderen auf der Verbindungsline ( $d_i^{LR}$ ) zweier benachbarter Kontrollvolumenzentren. Um diese Schnittpunkte zu finden und die zugehörigen Flächenelemente zu identifizieren wird wie in der Arbeit von TREMBLAY und FRIEDERICH [117] vorgegangen, indem die Dreieckselemente des Oberflächennetzes und die Zellverbindungsline sukzessive auf Schnittpunkte überprüft werden. Zunächst werden die Kantenvektoren des Dreiecks definiert.

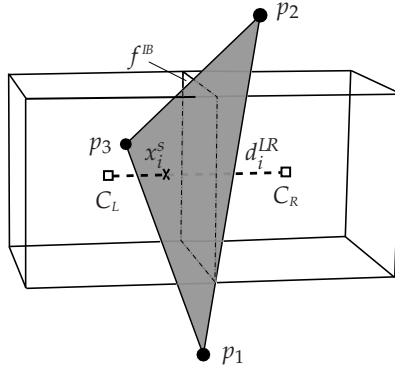
$$\begin{aligned} s_i^1 &= x_i^{p_1} - x_i^{p_2} \\ s_i^2 &= x_i^{p_1} - x_i^{p_3} \\ s_i^3 &= x_i^{p_2} - x_i^{p_3} \end{aligned} \quad (4.12)$$

Der Verbindungsvektor zwischen den benachbarten Kontrollvolumen bestimmt sich aus:

$$d_i^{LR} = x_i^{C_L} - x_i^{C_R}. \quad (4.13)$$

Anschließend werden zwei Vektoren gebildet, die von den beiden Kontrollvolumenzentren zu einem gemeinsamen Punkt innerhalb des Dreiecks (hier  $p_1$ ) zeigen:

$$\begin{aligned} v_i^L &= x_i^{p_1} - x_i^{C_L} \\ v_i^R &= x_i^{p_1} - x_i^{C_R}. \end{aligned} \quad (4.14)$$



**Abb. 4.15.:** Verbindungslinie zwischen benachbarten Kontrollvolumenzentren wird von einem Dreieckselement im Punkt  $x_i^S$  geschnitten. Das angrenzende Flächenelement wird als *getroffen* markiert

Die Hilfsgrößen  $d_1$  und  $d_2$  bilden ein Skalarprodukt zwischen  $v^L$  bzw.  $v^R$  und dem Flächennormalenvektor des Dreiecks  $n_i^\Delta$ .

$$\begin{aligned} d_1 &= v_i^L n_i^\Delta \\ d_2 &= v_i^R n_i^\Delta \end{aligned} \quad (4.15)$$

Besitzen  $d_1$  und  $d_2$  identische Vorzeichen, so liegt das betrachtete Dreieckselement nicht im Bereich zwischen den Kontrollvolumenzentren  $C_L$ ,  $C_R$  und kann somit den Verbindungsvektor  $d_i^{LR}$  nicht schneiden. Unterscheiden sich die Vorzeichen, so liegt das Dreieck in Bezug auf die Richtung  $d_i^{LR}$  zwischen den Kontrollvolumenzentren  $C_L$ ,  $C_R$  und eine weitere Betrachtung ist erforderlich.

Der potentielle Schnittpunkt  $x_i^S$  bestimmt sich aus:

$$x_i^S = x_i^{C_L} + l_p \cdot d_i^{LR}, \quad (4.16)$$

wobei  $l_p$  dem projizierten und normierten Abstand zum Punkt  $p_1$  entspricht:

$$l_p = \frac{d_1}{n_i^\Delta d_i^{LR}}. \quad (4.17)$$

Zunächst werden drei Vektoren  $r_i^1$ ,  $r_i^2$ ,  $r_i^3$  gebildet, die in der Ebene des Dreiecks liegen, senkrecht auf den Kanten  $s_i^1$ ,  $s_i^2$ ,  $s_i^3$  stehen und nach innen gerichtet sind.

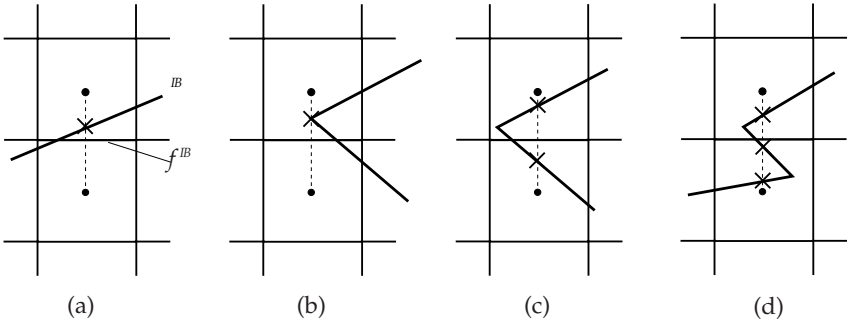
$$\begin{aligned} r_i^1 &= s_i^1 \times n_i^\Delta \\ r_i^2 &= s_i^2 \times n_i^\Delta \\ r_i^3 &= s_i^3 \times n_i^\Delta \end{aligned} \quad (4.18)$$

Des Weiteren wird je ein Vektor von der Mitte der Dreiecksseite zum möglichen Schnittpunkt  $x_i^s$  gebildet.

$$\begin{aligned} q_i^1 &= x_i^s - \left( x_i^{p_1} + \frac{1}{2} s_i^1 \right) \\ q_i^2 &= x_i^s - \left( x_i^{p_3} + \frac{1}{2} s_i^2 \right) \\ q_i^3 &= x_i^s - \left( x_i^{p_2} + \frac{1}{2} s_i^3 \right) \end{aligned} \quad (4.19)$$

Nur für den Fall, dass alle  $j = 1, 2, 3$  Skalarprodukte  $q_i^j r_i^j$  positiv sind, schneidet die Verbindungslinie  $d_i^{LR}$  die Ebene, die durch  $n_i^\Delta$  definiert ist, *innerhalb* des Dreiecks. Dann ist  $x_i^s$  der Schnittpunkt zwischen  $d_i^{LR}$  und dem Dreieckselement  $\Delta$ .

Abschließend erfolgt eine Sonderbehandlung entsprechender Grenzfälle, die schematisch in Abbildung 4.16 gegenübergestellt sind. Dabei werden zunächst mehrfach identische Schnittpunkte eliminiert. Anschließend wird entschieden, ob das



**Abb. 4.16.:** Unterschiedliche Schnittpunktkonstellationen für ein potentiell getroffenes Flächenelement  $f^{IB}$ : Bei einem Schnittpunkt wird die Fläche als getroffen markiert (a). Mehrfach identische Schnittpunkte werden bis auf Einen eliminiert (b). Eine gerade Anzahl unterschiedlicher Schnittpunkte wird nicht als Treffer berücksichtigt (c). Eine ungerade Anzahl an Schnittpunkten wird wie ein Treffer berücksichtigt.

Flächenelement als getroffen behandelt wird und somit eine Grenze zwischen dem Strömungsgebiet und dem nicht-Strömungsgebiet bildet. Ein Sonderfall ist durch eine s. g. *dünne Wand* gegeben, die im Abschnitt 4.5.3 näher betrachtet wird.

#### Aufwand der Schnittpunktsuche

Die beschriebene Prozedur erfordert, dass jedes vorhandene Dreieckselement mit sämtlichen Verbindungsvektoren auf einen möglichen Schnittpunkt hin überprüft wird. Bei Parallelrechnungen wird zwar nur ein Teil des Rechengitters bearbeitet,

es wird jedoch stets das gesamte Oberflächennetz berücksichtigt. Damit steigt der Aufwand quasi quadratisch, da für einen komplexeren Fall oder eine verbesserte Auflösung die Zahl der Dreiecks- ( $N^\Delta$ ) und der Flächenelemente<sup>1</sup> ( $N^f$ ) proportional zueinander steigen. Demzufolge skaliert der Rechenaufwand  $\Lambda$  der Schnittpunktsuche etwa mit

$$\Lambda \sim N^\Delta \cdot N^f, \quad (4.20)$$

was für große Simulationen oder solche mit bewegten Geometrien (hier muss die Schnittpunktsuche in jedem Zeitschritt wiederholt werden) nicht praktikabel ist. Eine deutliche Verbesserung dieser Situation lässt sich mit Hilfe einer geeigneten Datenstruktur und einer lokal eingeschränkten Suche erreichen. Hierzu werden die Elemente des Oberflächen- und des Rechengitters nach ihrer geometrischen Lage in einem *Suchbaum* organisiert.

### 4.4.2. Binärer Suchbaum

Um das Auffinden der Schnittpunkte zwischen der Oberflächendiskretisierung und den Zellen des Rechengebiets zu beschleunigen, wird ein *binärer Suchbaum* (oder kurz *Binärbaum*) verwendet. Die Vorgehensweise ist motiviert durch den Ansatz von BONET und PERAIRE [10], aber dennoch von Grund auf anders, da nicht das Rechengitter an sich, sondern nur lokale Abschnitte in Form eines Binärbaums organisiert werden.

Suchbäume [70] bilden Datenstrukturen, die besonders effizient durchsucht werden können. Für sie existieren schnelle Algorithmen zum Hinzufügen, Löschen und Auffinden abgelegter Datensätze.

#### Aufbau des Binärbaums

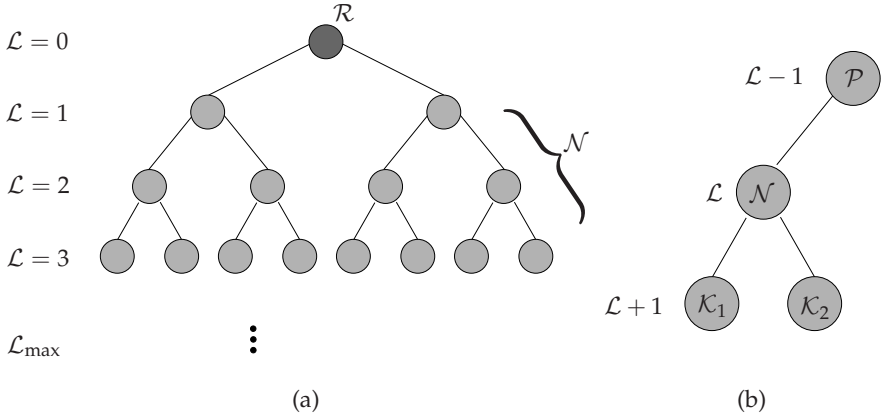
In Abbildung 4.17a ist ein Binärbaum abgebildet. Er besteht aus *Knotenpunkten*,  $\mathcal{N}$ , die auf unterschiedlichen Leveln  $\mathcal{L}$  angeordnet sind. Der Knoten auf dem untersten Level ( $\mathcal{L} = 0$ ) wird als *Wurzel* ( $\mathcal{R}$ ) und die Knoten auf dem höchsten Level ( $\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\max}$ ) als *Blätter* ( $\mathcal{B}$ ) bezeichnet. Jeder Knotenpunkt (ausgenommen der Blattknoten) besitzt zwei *Kinder* ( $\mathcal{K}_1, \mathcal{K}_2$ ), die auf dem nächsthöheren Level ( $\mathcal{L} + 1$ ) angesiedelt sind. Des Weiteren besitzt jeder Knoten (mit Ausnahme des Wurzelknotens) genau einen *Elter* ( $\mathcal{P}$ ), welcher auf dem nächst niedrigeren Level ( $\mathcal{L} - 1$ ) angeordnet ist (siehe Abbildung 4.17b).

Die zu speichernden Objekte (hier sind es Elemente des Rechengitters), werden innerhalb der Knoten gespeichert. Dem Wurzelknoten ist dabei der gesamte Datenbestand zugewiesen, wobei sich die Daten eines jeden Knotens vollständig auf seine beiden Kinder aufteilen. Je Level entstehen  $N^\mathcal{N} = 2^\mathcal{L}$  Knoteneinträge, und die Gesamtzahl aller Knoten im Binärbaum beträgt  $N_{\text{ges}}^\mathcal{N} = (2^{(\mathcal{L}_{\max} + 1)} - 1)$ .

---

<sup>1</sup>Die Anzahl der Flächenelemente hängt mit der Anzahl der Gitterzellen  $N^C$  zusammen, siehe Anhang A.4





**Abb. 4.17.:** Binärbaum mit  $\mathcal{L}_{\max}$  Level (a); Elter ( $\mathcal{P}$ ) und Kinder ( $\mathcal{K}_1, \mathcal{K}_2$ ) eines Knotens  $\mathcal{N}$  (b).

#### Suche von Objekten im Binärbaum

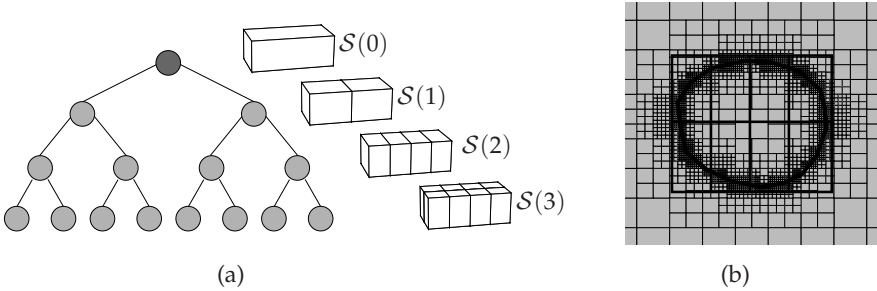
Eine definierte Anzahl an Operationen ist erforderlich, um ein bestimmtes Objekt  $G$  innerhalb des Baums zu lokalisieren. Wird davon ausgegangen, dass ein bestimmter Knoten  $\mathcal{N}$  das gesuchte Objekt  $G$  definitiv enthält, so kann leicht überprüft werden, welchem Kind ( $\mathcal{K}_1$  oder  $\mathcal{K}_2$ ) dieses Objekt auf dem nächstfolgenden Level ( $\mathcal{L} + 1$ ) zugeordnet wird. Dieser Vorgang wird ausgehend vom Wurzelknoten so lange wiederholt, bis die Blattknoten des Baums erreicht sind. Dann kann mit Sicherheit gesagt werden, in welchem Blatt ( $\mathcal{B}$ ) sich das gesuchte Objekt  $G$  befindet. Der Aufwand der Suche skaliert linear mit  $\mathcal{L}_{\max}$ . Das beschriebene Vorgehen lässt sich in Form einer rekursiven Funktion umsetzen, deren Algorithmus im Anhang unter A.9 verdeutlicht wird.

#### Schnittpunktsuche im Binärbaum

Ziel ist es, alle inneren Flächenelemente des Rechengebiets in einem Binärbaum zu organisieren, so dass an jedem Blatt nur die Flächen eines bestimmten Teilbereiches des Rechengitters hinterlegt sind. Ein möglicher Schnittpunkt mit einem Dreieck ist dann allein in dem Teilbereich zu suchen, in dem sich auch das Dreieck befindet.

Um die Flächenelemente des Rechengitters in den Binärbaum zu sortieren, wird zunächst eine Struktur aus s. g. *Suchboxen* ( $\mathcal{S}$ ) erzeugt, die durch einen Binärbaum repräsentiert werden kann. Anschließend werden einmalig die Flächenelemente den Suchboxen und damit den Knoten des Suchbaums zugewiesen.

Ein Quader, der das Oberflächennetz vollständig umfasst, bildet den Ausgangspunkt und damit den Wurzelknoten (siehe  $\mathcal{S}(0)$  in Abbildung 4.18). In jedem weite-



**Abb. 4.18:** Zerteilung des Rechengebiets in Suchboxen  $\mathcal{S}(\mathcal{L})$ , die in einem Binärbaum repräsentiert werden (a). Die 2D Suchboxen umfassen das Oberflächengitter  $\Gamma_b$  des exemplarischen 2D Testfalls (b).

ren Schritt werden die bestehenden Boxen, die den Knoten  $\mathcal{N}$  des Binärbaums entsprechen, in zwei neue Boxen ( $\mathcal{K}_1$ ,  $\mathcal{K}_2$ ) geteilt. Die Teilung findet dabei stets entlang der Mitte der längsten Seitenkante statt. In der Abbildung 4.18b ist die Organisation der Suchboxen im Binärbaum verdeutlicht. In Abbildung 4.18b ist die 2D Anwendung anhand des exemplarischen Testfalls aus Abschnitt 3.1 zu sehen.

Nach dem strukturellen Aufbau des Suchbaums werden die Flächenelemente des Rechengitters in diesen einsortiert. Befindet sich das Zentrum eines Flächenelements innerhalb einer Suchbox, so wird es dieser zugeordnet. Die Zuordnung der Flächen bezüglich der Blattknoten kann durch wenige Operationen geschehen:

Zu allererst wird verifiziert, ob sich das betrachtete Flächenelement überhaupt in dem Gebiet der äußersten Suchbox befindet oder nicht. Ist dies der Fall, wird ausgehend vom Wurzelknoten überprüft, ob das Flächenelement dem Kind  $\mathcal{K}_1$  oder  $\mathcal{K}_2$  zugeordnet wird. Der Vorgang wird wiederholt, bis das höchste Level des Suchbaums erreicht ist. Dort werden die Flächen in den jeweiligen Blattknoten  $\mathcal{B}$  gespeichert.

1. Erzeugung der Suchboxen mit einer Baumstruktur bis zu Level  $\mathcal{L}_{\max}$
2. Zuweisung der in den Boxen liegenden Flächen zu den Blättern  $\mathcal{B}$  (Anhang A.9)
3. Anfügen weiterer angrenzender Flächen im Randbereich der Boxen
4. Für alle Dreiecke ( $\triangle$ ) des Oberflächengitters  $\Gamma_b$ 
  - Auffinden der Box  $S$ , die das Dreieck ( $\triangle$ ) enthält (Algorithmus A.9)
  - Schnittpunktsuche (Kap. 4.4.1) für alle  $f \in S$

Im Randbereich der Suchbox könnte es später dazu kommen, dass Schnittpunkte nicht gefunden werden, wenn sich das relevante Flächenelement (durch die Länge des Zentrums) in einer anderen Suchbox als das Dreieckselement befindet. Aus diesem Grunde werden im Randbereich der Suchbox weitere Flächenelemente hinzugefügt, die an die bereits Gefundenen angrenzen (dazu wird u. a. die im Anhang A.6 skizzierte *Zuordnungsumkehr* verwendet). Der so entstandene Überlappungsbereich stellt sicher, dass alle Schnittpunkte gefunden werden. Dies bedeutet jedoch auch, dass die Flächen, die am Rande einer Suchbox positioniert sind, mehrfach gespeichert werden. Sind alle Flächenelemente in dem Binärbaum gespeichert, beginnt die eigentliche Suche nach den Schnittpunkten:

Der Reihe nach werden alle Dreieckselemente der IB betrachtet. Dabei wird zunächst (analog zu den Flächenelementen) ermittelt, in welcher Suchbox das Dreieck gelegen ist. Während der Schnittpunktsuche (siehe Abschnitt 4.4.1) werden schließlich nur noch diejenigen Flächen in Betracht gezogen, die der jeweiligen Suchbox angehören. Der Ablauf ist in der nebenstehenden Box kompakt zusammengefasst.

### Effizienzsteigerung

Der rechnerische Aufwand der Schnittpunktsuche mit Hilfe des Binärbaums teilt sich in zwei ausschlaggebende Anteile: Zum einen müssen die Elemente des Rechnegitters einmalig in den Binärbaum einsortiert werden und zum anderen erfolgt dann (für jedes Dreieck) die Schnittpunktsuche in einem lokal eingeschränkten Bereich. Das Erzeugen der Suchboxen und dessen Datenstruktur kann bezüglich des rechnerischen Aufwands her vernachlässigt werden. Abbildung 4.19 veranschaulicht die unterschiedlichen Aufwände in Abhängigkeit der Levelzahl. Dazu wird die Identifizierung des Testfalls einer Zylinderumströmung (vergleiche auch Abbildung 4.20) für unterschiedliche maximale Levelzahlen ( $\mathcal{L}_{\max} = 1 \dots 13$ ) durchgeführt. Für die Gesamtrechenzeit bzw. den Gesamtaufwand zeigt sich ein Optimum hinsichtlich der maximalen Baumtiefe  $\mathcal{L}_{\max}^{\text{opt}}$ . Die Effizienzsteigerung ist begrenzt durch den Aufwand, die Flächenelemente in den Binärbaum zu sortieren. Dieser steigt insbesondere durch die Erzeugung des zuvor genannten Überlappungsbereichs für größer werdende Binärbäume stark an. Der Aufwand der eigentliche Schnittpunktsuche, die für jedes Dreieck durchgeführt wird, ist fortwährend quadratischer Natur:

$$\Lambda \sim N^{\Delta} \cdot N_{\mathcal{B}}^f. \quad (4.21)$$

Jedoch enthält der dabei beachtete Blattknoten mit  $N_{\mathcal{B}}^f$  nur einen Teil aller vorhandenen Flächenelemente  $N^f$ . Die Anzahl der in einem Blattknoten gespeicherten Elemente sinkt mit der Levelzahl des Binärbaums. In Tabelle 4.1 sind die CPU Zeiten ohne ( $t_0$ ) und mit ( $t_{\text{tree}}$ ) Verwendung des Binärbaums für unterschiedliche Anwendungsfälle gegenübergestellt. Die Rechenzeiten  $t_{\text{tree}}$  gelten jeweils für das bestmögliche Level  $\mathcal{L}_{\max}^{\text{opt}}$ . In Abbildung 4.20 ist die benötigte Rechenzeit in Abhängigkeit von  $\mathcal{L}_{\max}$  für die genannten Fälle gezeigt. Es zeigt sich für alle Beispiele ein ähnlicher Verlauf, wobei das Optimum bezüglich der maximalen Levelzahl unterschied-

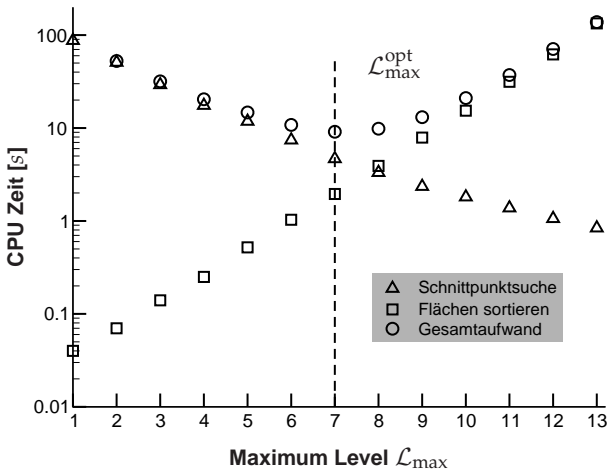
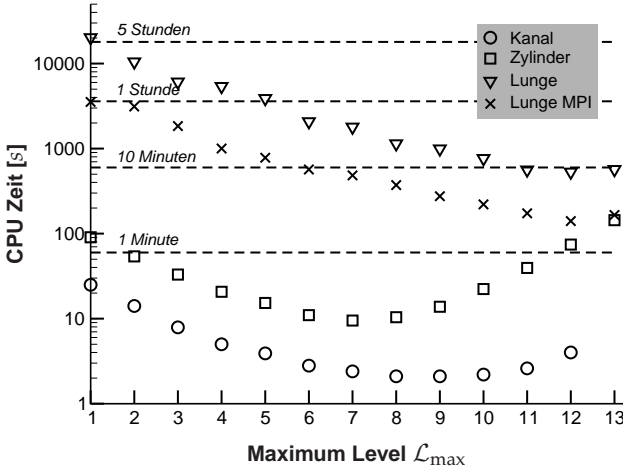


Abb. 4.19.: Die Rechenzeit weist ein Optimum bezüglich der Größe des verwendeten Binärbaums auf.

Anwendungsfall	$t_0$ [s]	$t_{\text{tree}}$ [s]	$N^f$	$N^\Delta$	$\mathcal{L}_{\max}^{\text{opt}}$
Kanal	20	2	69503	9664	9
Zylinder	599	10	1516488	9508	7
Lunge	10548	530	2700846	92246	12
Lunge MPI	2137	141	681817	92246	12

Tab. 4.1.: Gegenüberstellung der Rechenzeiten für das Auffinden der Schnittpunkte mit ( $t_{\text{tree}}$ ) und ohne ( $t_0$ ) Baumsuche für verschiedene Anwendungsfälle.

lich ausfällt. Die Lage des Optimums  $\mathcal{L}_{\max}^{\text{opt}}$  ist im Wesentlichen von der Topologie der beiden Gitter abhängig, kann jedoch nicht ohne Weiteres analytisch vorhergesagt werden. Die gezeigten Testfälle variieren nicht nur hinsichtlich der Gittergrö-



**Abb. 4.20.:** Rechenzeit in Abhängigkeit der maximalen Levelzahl  $\mathcal{L}_{\max}$  für unterschiedliche Anwendungsfälle.

ßen  $N^{\Delta}$  und  $N^f$  bzw.  $N^C$ . Auch das Verhältnis der räumlichen Ausdehnung von Oberflächen- zu Rechengitter ist zwischen den Testfällen unterschiedlich. So nimmt der Zylinder nur einen kleinen Teil des gesamten Rechengebiets ein, während sich die Abmaße der generischen Lungengeometrie beinahe über das gesamte Gebiet erstrecken. Die Größe der initialen Suchbox, die den Wurzelknoten des Binärbaums darstellt, entspricht den Abmaßen des Oberflächengitters. Im Fall der Zylinderumströmung enthält dieser Anfangsbereich bereits nur noch einen Teil der insgesamt vorhandenen Flächen, was eine starke Aufwandsreduktion bedeutet. Somit verringert sich beim Zylinder die Zeit der Schnittpunktsuche mit dem Faktor 60 viel stärker als beispielsweise beim Kanalttestfall (etwa Faktor 10), bei dem beide Gitter ebenfalls ähnliche Abmaße besitzen.

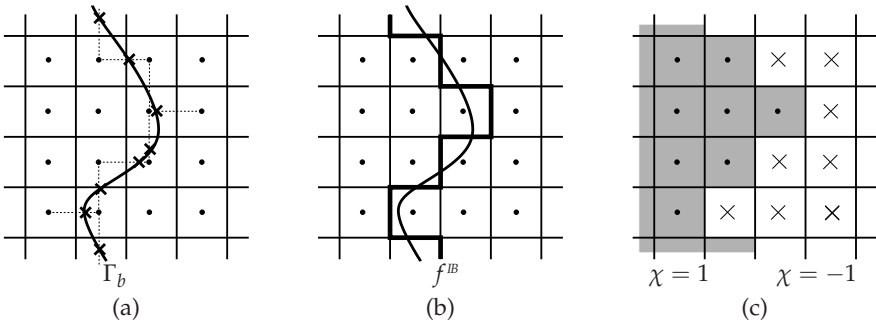
Die maximale Baumtiefe  $\mathcal{L}_{\max}$  ist in der programmtechnischen Umsetzung theoretisch nicht limitiert. Da für jeden Blattknoten  $\mathcal{B}$  die ihm zugewiesenen Flächenelemente gespeichert werden müssen, steigt der Speicherbedarf für große Binärbäume stark an. Das liegt u. a. daran, dass während des strukturellen Aufbaus nur schlecht abgeschätzt werden kann, wie viele Flächenelemente später in den Blattknoten gespeichert werden müssen, was zu einer steten Überdimensionierung der Speicherfelder führt.

Übertrifft ein Dreieckselement die Größe der Gitterzellen um ein Vielfaches, so könn-

te sich dieses im Extremfall über mehrere Suchboxen erstrecken. Für diesen Fall können Schnittpunkte unentdeckt bleiben, da nur diejenige Suchbox auf Schnittpunkte hin untersucht wird, welche das Dreieckszentrum beinhaltet. Daher wird (vergleiche Abschnitt 4.3) gefordert, dass die Dreieckselemente die gleiche Größenordnung aufweisen, wie die umliegenden kartesischen Rechenzellen.

#### 4.4.3. Markierung des Strömungs- und des nicht-Strömungsgebiets

Nach der Bestimmung der Schnittpunkte zwischen dem Oberflächengitter und den Verbindungslinien benachbarter Kontrollvolumenzentren gilt es die Gitterzellen eindeutig als *Strömungs-* oder *nicht-Strömungsgebiet* zu deklarieren. Abbildung 4.21a zeigt die gefundenen Schnittpunkte für ein 2D Beispiel sowie die zugehörigen getroffenen Flächenelemente  $f^{IB}$  (Abbildung 4.21b). Diese Zellflächen, die zusammen eine geschlossene Oberfläche bilden, repräsentieren die Grenze zwischen dem Strömungsgebiet und dem nicht-Strömungsgebiet. Unabhängig von dem Vorgang der Schnittpunktsuche mit all seinen Details kann gesagt werden, dass einzig die Lage des Kontrollvolumenzentrums darüber entscheidet, ob eine angeschnittene Zelle zum Strömungsgebiet oder zum nicht-Strömungsgebiet gehört. Diese Eigenschaft wird über eine s. g. *Markierungsvariable*  $\chi$  festgelegt (Abbildung 4.21c). Für einen



**Abb. 4.21.:** Das Oberflächengitter schneidet die Verbindungsvektoren  $d_i^{LR}$  in den Schnittpunkten  $x_i^s$  (a); getroffene Flächenelemente  $f^{IB}$  (b) unterteilen das Gitter in Strömungsgebiet  $\chi = 1$  und nicht-Strömungsgebiet  $\chi = -1$  (c).

Variablenwert von  $\chi = 1$  befindet sich die Zelle im Strömungsgebiet, während das nicht-Strömungsgebiet mit  $\chi = -1$  gekennzeichnet wird. Um ausgehend von den getroffenen Flächenelementen  $f^{IB}$  das Rechengebiet zu markieren, wird wie folgt verfahren (siehe auch Anhang A.10):

Zunächst wird die Markierungsvariable für das ganze Feld mit 0 initialisiert, und für die erste Zelle wird der Wert  $\chi = 1$  vorgegeben. Anschließend werden sukzessive alle Flächenelemente betrachtet. Grenzt die Fläche an ein bereits markiertes Kontrollvolumen, wird der Wert an die Nachbarzelle übertragen, wobei dieser in-

vertiert wird, falls es sich dabei um eine getroffene Fläche handelt. Die Prozedur wird so lange wiederholt, bis das gesamte Gebiet vollständig markiert ist. Der numerische Aufwand dieser Aufgabe fällt im Vergleich zur Findung der Schnittpunkte quasi nicht ins Gewicht.

Für den Vorgang der Markierung wird zu Beginn die erste Zelle willkürlich als Strömungsgebiet definiert, was mitunter falsch sein kann. Dies kann mit Hilfe des Druckreferenzpunkts (Vergleiche Abschnitt 2.3.1) überprüft und ggf. korrigiert werden. Liegt der Druckreferenzpunkt nach der Markierung im nicht-Strömungsgebiet, wird das Vorzeichen der Markierungsvariable für das gesamte Feld invertiert. Während einer Parallelrechnung findet die Schnittpunktsuche sowie auch die Markierungsprozedur jeweils auf Teilbereichen des Rechengitters statt. Es existiert jedoch nur ein Druckreferenzpunkt, der sich in einem Teilabschnitt des Gitters befindet. Zur Überprüfung und Korrektur der Markierungsvariable werden ausgehend von dem Gitterabschnitt, der den Druckreferenzpunkt beinhaltet, benachbarte Segmente des Gitters überprüft, indem ein Austausch der Markierungsvariable über die Kommunikationsflächen durchgeführt wird.

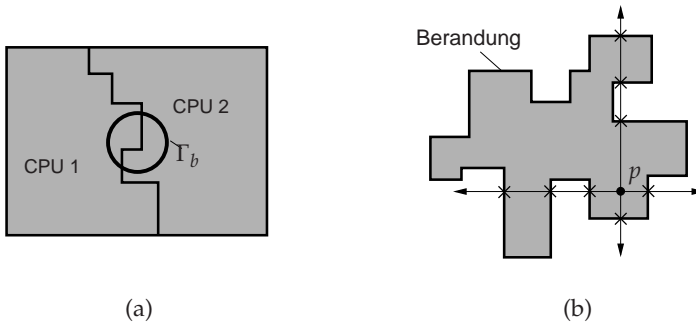
#### **Strömungsgebiet und nicht-Strömungsgebiet während der Simulation**

Der Aufbau der Koeffizientenmatrix erfolgt i. d. R. im Präprozess, einem der Simulation vorangehenden Arbeitsschritt. In der Matrix sind sämtliche Zellen enthalten, wenngleich einige von diesen im weiteren Verlauf zum nicht-Strömungsgebiet zählen und für die keine Variablen bestimmt werden sollen. Um diese Zellen von der Berechnung auszusparen, ohne die Struktur des Gleichungssystems zu verändern, wird ein Weg gewählt, der in ähnlicher Weise auch in der numerischen Strukturmechanik (*Penalty Methode*) genutzt wird, um innerhalb eines bestehenden Gleichungssystems Randbedingungen zu erfüllen. Vor dem Lösen des Gleichungssystems werden für Zellen des nicht-Strömungsgebiets der Diagonaleintrag der Koeffizientenmatrix zu Eins und alle übrigen Koeffizienten der selben Zeile zu Null gesetzt. Die Einträge im Lösungsvektor sowie im Quellterm werden ebenfalls zu Null gesetzt. Dies resultiert in einer Art trivialen Lösung ( $1 \cdot 0 = 0$ ) für die Zellen des nicht-Strömungsgebiets. Diese bereits vor dem Lösen erfüllten Gleichungen sind linear unabhängig von den übrigen Teilen des Gleichungssystems und beeinflussen dessen Lösungsverhalten nicht [82].

#### **4.4.4. Bestimmung der Dreiecke innerhalb des Rechengitters**

Im Fall einer Parallelisierung wird das Rechengitter in Teilgebiete zerlegt, wobei die eigentliche Simulation auf unterschiedlichen Recheneinheiten stattfindet. Die Oberflächenbeschreibungen hingegen sind vollständig auf jeder Recheneinheit verfügbar. Die Situation wird in Abbildung 4.22a verdeutlicht. Für die spätere Ermittlung der Kräfte (siehe Kapitel 4.5.3) auf dem eingetauchten Oberflächengitter ist es jedoch essentiell zu wissen, welche der Dreieckselemente tatsächlich innerhalb des jeweiligen Teilgebiets des Rechengitters liegen. Die Schnittpunktsuche ermittelt

lediglich diejenigen Dreiecke, die eine Verbindungslinie benachbarter Kontrollvolumen schneidet. Solche, die zwar im Rechengebiet positioniert sind aber keinen



**Abb. 4.22.:** Zerteiltes Rechengitter und global verfügbare Oberflächenbeschreibung  $\Gamma_b$  (a). Ob ein Dreieckselement innerhalb des Rechengebiets liegt, wird mit Hilfe einer *Punkt-in-Polygon* Suche in Form eines Strahlenansatzes ermittelt. Ein Punkt im Innern liefert für jeden von ihm aus gebildeten Strahl eine ungerade Anzahl an Schnittpunkten mit dem berandenden Polygon (b).

Schnittpunkt liefern, werden daher nicht mit dem Rechengebiet in Verbindung gebracht. Bei einer nicht-parallelen Simulation entfällt dieses Problem, da sich hierbei alle Dreiecke des Oberflächengitters innerhalb des einzigen Rechengitters befinden.

#### Punkt-in-Polygon Suche

Ein Dreieckselement wird als *innerhalb* eines Rechengebiets bezeichnet, sobald dessen Zentrumspunkt  $x_i^\Delta$  von der Berandung des Rechengitters (gegeben durch Rand- und Kommunikationsflächen) eingeschlossen ist. Ob ein Dreieck im Innern des Rechengebiets liegt oder nicht, kann durch eine *Punkt-in-Polygon* Suche festgestellt werden. Dazu existieren unterschiedliche Ansätze [48]; an dieser Stelle wird ein s. g. Strahlenansatz gewählt. Siehe hierzu Abbildung 4.22b.

Ausgehend von dem Punkt  $p$  werden Strahlen in jede (positive wie negative) Koordinatenrichtung generiert. Anschließend werden die Schnittpunkte der Strahlen mit dem geschlossenen Polygon bestimmt. Ist die Anzahl der Schnittpunkte für jeden Strahl ungerade, so liegt der Punkt  $p$  innerhalb des Polygons, andernfalls liegt er außerhalb.

In der praktischen Umsetzung stellt  $p$  den Zentrumspunkt  $x_i^\Delta$  des Dreiecks dar. Durch die rein kartesische Ausrichtung der Berandungsflächen des Rechengitters ergibt sich eine Vereinfachung: Bei der Suche nach den Schnittpunkten mit einem Strahl in Richtung  $i$  sind nur Flächen zu betrachten, deren Normalenvektor ebenfalls in diese (oder die entgegengesetzte) Richtung zeigt. Um einen Schnittpunkt zu finden, werden die Koordinaten der Flächeneckpunkte  $k_1$  und  $k_3$  (siehe Abbildung 4.1 *mitte*) in den verbleibenden Richtungen ( $i + 1$  und  $i + 2$  unter Anwendung



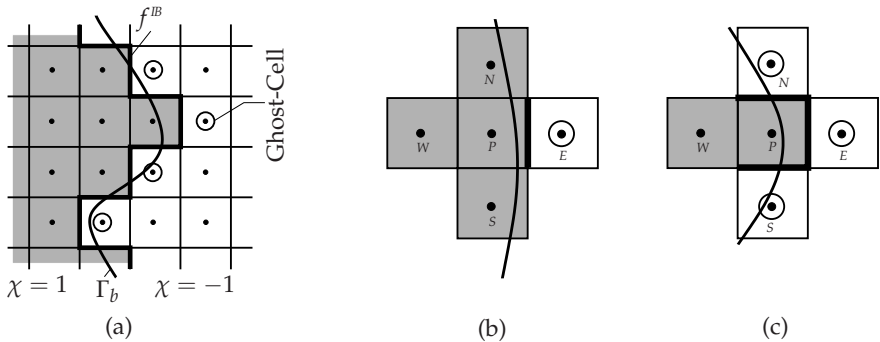
einer zyklischen Permutation) mit denen des Punkts  $x_i^\Delta$  verglichen. Existiert ein Schnittpunkt mit einer berandenden Fläche, so gilt:

$$\begin{aligned} x_{i+1}^{k_1} &< x_{i+1}^\Delta < x_{i+1}^{k_3} \\ x_{i+2}^{k_1} &< x_{i+2}^\Delta < x_{i+2}^{k_3}. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Für den Rechenaufwand gilt folgende Abhängigkeit:  $\Lambda \sim N^\Delta \cdot N^{f*}$ , wobei  $N^\Delta$  die Anzahl der Dreieckselemente und  $N^{f*}$  die Anzahl der Außenflächen (diese ist oft um Größenordnungen kleiner, als die Anzahl der inneren Flächen) darstellt. Bei dem Vorgehen werden die unterschiedlichen Koordinatenrichtungen nacheinander betrachtet, weshalb die Flächen zunächst den Koordinatenrichtungen zugeordnet werden. Im Vergleich zur Schnittpunktsuche fällt dieser Arbeitsschritt daher nur unwesentlich ins Gewicht.

#### 4.5. Randbedingungen an Immersed Boundaries

In diesem Abschnitt wird das Aufprägen von Randbedingungen an Immersed Boundaries, den eingetauchten Oberflächengittern beschrieben. Einen Überblick über die unterschiedlichen Herangehensweisen anderer Arbeitsgruppen ist in Kapitel 3 gegeben. Aufgrund der Tatsache, dass bei diesem Verfahren keinerlei Modifikationen des Rechengitters vorgenommen werden müssen, wird ein in Abschnitt 3.2 vorgestellter *Ghost-Cell*-Ansatz verfolgt. Der in dieser Arbeit verwendete Ansatz zur Wand-



**Abb. 4.23.:** Ghost-Cells des 2D Testfalls (a); Zelle des Strömungsgebiets mit einer angrenzenden Ghost-Cell (b); Zelle mit drei angrenzenden Ghost-Cells (c).

behandlung ähnelt dem von MOHD-YUSOF [85], bzw. [119]. Obgleich eine Vielzahl an Abhandlungen [22, 84, 119] existieren, welche die Umsetzung der Wandrandbedingung durch Ghost-Cells diskutieren, so finden sich dennoch kaum Hinweise über die Realisierung anderer Randbedingungstypen, wie z. B. der Ausströmrandbedingung. Es ist davon auszugehen, dass häufig nur die Wandrandbedingung als

Immersed Boundary umgesetzt wird. Im Fall einer *Umströmung* wird auf diese Weise nur der umströmte Körper ausgeführt, wobei die Randbedingungen des Fernfelds in herkömmlicher Weise an den Grenzen des Rechengitters aufgeprägt werden. Im Folgenden werden neben der Wand- auch die Einström- und Ausströmrandbedingung an Immersed Boundaries vorgestellt. Alle vorgestellten IB Randbedingungen können mit den klassischen Randbedingung an den Grenzen des Rechengebiets kombiniert werden.

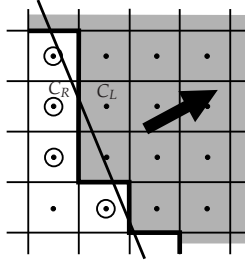
In Abbildung 4.23a sind die Ghost-Cells für eine beispielhafte 2D Konfiguration gezeigt. Je nachdem, wie das Oberflächengitter das Rechengitter schneidet, grenzt die erste Zelle im Strömungsgebiet an eine (Abbildung 4.23b) oder mehrere (Abbildung 4.23c) Ghost-Cells. Mit der Annahme, dass keine hängenden Knoten im Bereich des Oberflächengitters vorzufinden sind, grenzt eine Zelle (in 3D) maximal an fünf Ghost-Cells. Die Ghost-Cells befinden sich außerhalb des Strömungsgebiets und sind von der Berechnung der Impulsbilanzgleichungen und der Druckkorrektur ausgeschlossen.

Durch das flächenbasierte Vorgehen der Diskretisierung wird den an eine Fläche  $f$  grenzenden Kontrollvolumen ein entsprechender Koeffizientenbeitrag zugeschrieben. Die Betrachtung sämtlicher Flächenelemente führt für jedes Kontrollvolumen zu einer Diskretisierung nach Gleichung (2.8). Da für eine Ghost-Cell keine Variablen gespeichert werden, hat diese keine Wirkung in Bezug auf die Diskretisierung der im Strömungsbereich liegenden Nachbarzelle. Vielmehr fehlt der Diskretisierungsanteil durch die nicht berücksichtigte Ghost-Cell. Es sind nun ein Variablenwert und ein zugehöriger Koeffizientenanteil dahingehend zu bestimmen, dass die geforderte Randbedingung im Schnittpunkt mit dem Oberflächengitter erfüllt wird. Diese nun explizit bekannten Diskretisierungsanteile werden dann dem Quellterm der angrenzenden Strömungszelle zugeschrieben. Im Abschnitt zur Wandrandbedingung 4.5.3 wird dieses Vorgehen im Detail betrachtet.

Bei der Behandlung der Randbedingungen spielt das Oberflächengitter, welches diese repräsentiert nur noch eine untergeordnete Rolle. Vielmehr sind die getroffenen Flächen  $f^{\text{IB}}$  sowie die zugehörigen Schnittpunkte  $x_i^s$  (vergleiche auch Abschnitt 4.4.3, 4.4.1) die charakterisierenden Größen.

##### 4.5.1. Einströmrandbedingung

Bei einem Einströmrand werden die Geschwindigkeiten  $u_i^N(t)$  für die Ghost-Cells zu jedem Zeitpunkt  $t$  vorgegeben. Im Fall eines bewegten Einströmrandes addieren sich zu den vorgegebenen Geschwindigkeiten die des Randes selbst. Der Druck sowie Druck- und Geschwindigkeitsgradienten werden von der *linken* angrenzenden Strömungszelle ( $C_L$ ) konstant auf die Ghost-Cells übertragen. Diese werden dabei stets als *rechte* angrenzende Kontrollvolumen ( $C_R$ ) betrachtet, wie in Abbildung 4.24 veranschaulicht. Die getroffene Zelle wird während der Diskretisierung wie eine innere Zelle behandelt, wodurch die Strömungszelle  $C_L$  einen Koeffizientenanteil von der Ghost-Cell  $C_R$  erhält. Für diese Randbedingung ist es unerheblich, ob ein oder mehrere Ghost-Cells an eine Strömungszelle grenzen. Die zu setzenden Werte für



**Abb. 4.24.:** Einströmrand an einer IB.

die Ghost-Cells  $C_R$  bestimmen sich nach:

$$\begin{aligned} u_i^{C_R} &= u_i^N(t) & p^{C_R} &= p^{C_L} \\ \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \Big|^{C_R} &= \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \Big|^{C_L} & \frac{\partial p}{\partial x_j} \Big|^{C_R} &= \frac{\partial p}{\partial x_j} \Big|^{C_L} \end{aligned} \quad (4.23)$$

Einen Koeffizientenbeitrag für die Ghost-Cell  $C_R$  selbst gibt es nicht, da diese beim Lösen des Gleichungssystems vernachlässigt wird. Über die Zellflächen des Einströmrandes wird ein Nullgradient für die Druckkorrektur angenommen, so dass hier kein Koeffizientenbeitrag geliefert wird. Da beim Einströmrand die Massenflüsse über die getroffenen Zellflächen eindeutig definiert sind, werden diese nicht im Sinne der Druckkorrektur korrigiert. In Abhängigkeit der Zellzentrenskordinaten der Ghost-Cells ist es zudem möglich, ein lokal variierendes Einströmprofil vorzugeben. Während der Berechnung der Druck- und Geschwindigkeitsgradienten (vergleiche Abschnitt 4.1.1) liefern die Ghost-Cells, die zuvor explizit mit Geschwindigkeits- sowie Druckwerten belegt wurden, einen korrekten Beitrag über die angrenzenden Flächenelemente. Eine Korrektur des Gradienten ist somit nicht erforderlich.

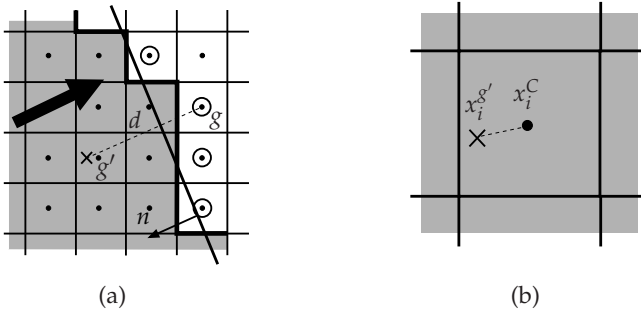
#### 4.5.2. Ausströmrandbedingung

Der Ausströmrand ist in Form einer Neumann-Randbedingung implementiert. Die Richtung, in der die Gradienten des Geschwindigkeitsfelds verschwinden, ist die lokale Normalenrichtung ( $n$ ) des Oberflächengitters, welches den Ausströmrand definiert.

$$\frac{\partial u_i}{\partial n} = 0 \quad (4.24)$$

Praktisch wird ähnlich wie bei der Einströmrandbedingung vorgegangen: Auf den Ghost-Cells gezielt vorgegebene Variablenwerte liefern während der Diskretisierung entsprechende Koeffizientenbeiträge für die angrenzenden Zellen im Strömungsfeld. Die besondere Herausforderung bei der Ausströmrandbedingung ist die Er-

mittlung der passenden Variablenwerte für die Ghost-Cells. Bei einem körperangepassten Rechengitter, dessen Gitterlinien nahezu senkrecht auf den Rand treffen, genügt eine konstante Extrapolation der Geschwindigkeiten von den inneren Zellen auf die Randzellen. Ein solches Vorgehen würde hier der Strömung die Richtung des kartesischen Gitters aufzwingen. Um einen geeigneten Geschwindigkeitsvektor für die Ghost-Cells zu bestimmen, so dass in der Richtung von  $n$  keine Änderungen auftreten, wird das Zellzentrum der Ghost-Cell ( $g$ ) über eine Distanz ( $d$ ) ins Strömungsgebiet *gespiegelt*. Dabei ist der Abstand  $d$  zwischen dem *Spiegelpunkt*  $g'$  und IB zunächst frei skalierbar. Die gradientenfreie Randbedingung wird da-



**Abb. 4.25.:** Zur Realisierung des Ausströmrandes werden die Zellzentren der Ghost-Cells  $g$  am Oberflächengitter ins Innere des Strömungsgebiets gespiegelt (a). Für diesen Punkt  $g'$  mit seinen Koordinaten  $x_i^{g'}$  wird ein Geschwindigkeitsvektor bestimmt, der anschließend auf die Ghost-Cell übertragen wird (b).

durch erreicht, dass die Geschwindigkeitskomponenten des Spiegelpunkts ( $g'$ ) auf die Ghost-Cell ( $g$ ) übertragen werden ( $u_i^g = u_i^{g'}$ ). Die Verwendung der im Zentrum gespeicherten Geschwindigkeiten jener Zelle  $C$ , welche den Spiegelpunkt beinhaltet, stellt eine unzureichende Näherung dar. Eine höherwertige Approximation für den Punkt  $g'$  wird über eine Korrektur mit Hilfe der entsprechenden Gradienten erreicht. Dabei wird zunächst der Abstandsvektor  $\Delta x_i^{g'C} = x_i^{g'} - x_i^C$  ermittelt (vergleiche Abbildung 4.25b). Die Geschwindigkeiten für den Spiegelpunkt und damit für die Ghost-Cell lauten dann:

$$u_i^g = u_i^{g'} = u_i^C + \left. \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right|^C \Delta x_j^{g'C}. \quad (4.25)$$

Theoretisch würde dieses Vorhaben auch ohne eine Spiegelung unter Verwendung der direkt an die Ghost-Cells angrenzenden Strömungszellen gelingen. Voraussetzung dafür wäre jedoch die Kenntnis der Geschwindigkeitsgradienten in eben diesen Zellen, die dann zur Korrektur genutzt werden können. Praktisch scheitert dieses Vorgehen jedoch daran, dass der Gradient für die an den Rand grenzenden Zel-

len nicht korrekt bestimmt werden kann. Der Grund dafür ist, dass zur Ermittlung der Gradienten bereits Geschwindigkeiten auf den Ghost-Cells vorhanden sein müssen, welche die Nullgradientenrandbedingung des Ausströmrandes bereits erfüllen. Andernfalls würden die Geschwindigkeiten mit einem falschen Gradienten „korrigiert“ werden.

Liegt der gewählte Abstand  $d$  zwischen  $g$  und  $g'$  etwa in der Größenordnung zwei bis drei Zelleinheiten, so ist gewährleistet, dass die Korrektur auf Gradienten zurückgreift, bei deren Bestimmung keine Ghost-Cells beteiligt sind.

Die Geschwindigkeits- und Druckgradienten werden von der Zelle  $C$ , die den Spiegelpunkt  $g'$  enthält, konstant auf die Ghost-Cell  $g$  übertragen.

$$\left. \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right|_g = \left. \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right|_C \quad \left. \frac{\partial p}{\partial x_j} \right|_g = \left. \frac{\partial p}{\partial x_j} \right|_C \quad (4.26)$$

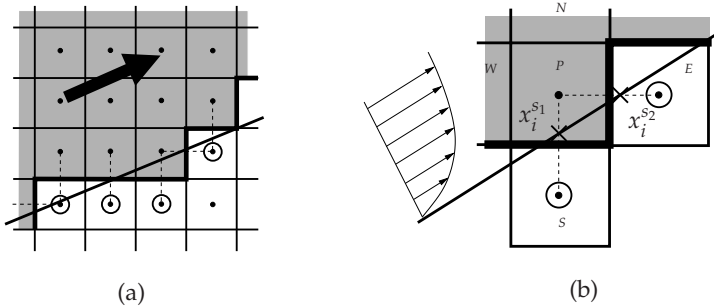
Für den Druck gilt die Nullgradientenbedingung am Ausströmrand nicht. Er wird linear vom Spiegelpunkt auf die Ghost-Cell extrapoliert. Ähnlich wie beim Einströmrand wird über die Austrittsflächen ein Nullgradient für die Druckkorrektur angenommen. Im Fall eines zeitlich veränderlichen Ausströmrandes werden die Anteile der Bewegung zu den Geschwindigkeiten der Ghost-Cells am Ausströmrand addiert. Die Austrittsflächen des Rechengitters bleiben unberücksichtigt von der Geschwindigkeitskorrektur durch den SIMPLE Algorithmus (siehe Abschnitt 2.3.1). Stattdessen werden die Geschwindigkeiten auf den Austrittsflächen und den Ghost-Cells im Sinne der globalen Massenflusskorrektur (Abschnitt 2.4) modifiziert.

### 4.5.3. Wandrandbedingung

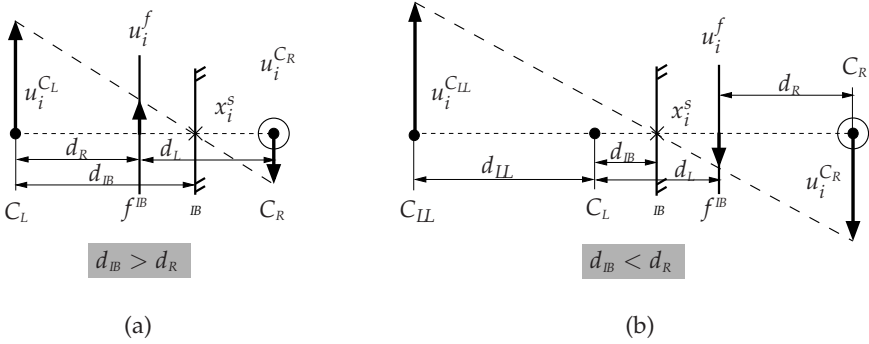
Die Wandrandbedingung ist hinsichtlich der Aufgabe komplexe Geometrien bei der Strömungssimulation zu berücksichtigen die wichtigste Randbedingung. Das Fluid, welches die Wand selbst nicht durchströmen kann, haftet (bedingt durch die Wandreibung) an dieser. Im Fall einer ruhenden Wand verschwinden die Geschwindigkeiten des Fluids an der Wand. Ist sie hingegen bewegt, so besitzt das Fluid an der Wand die Geschwindigkeit der Wand selbst. Das Erfüllen der IB Wandrandbedingung unterscheidet sich grundsätzlich von dem Vorgehen bei körperangepassten Gittern (vergleiche Abschnitt 2.4). In Abbildung 4.26a ist die prinzipielle Situation einer Wandberandung veranschaulicht. Abbildung 4.26b zeigt die Schnittpunkte  $x_i^{s_1}$  und  $x_i^{s_2}$  des betrachteten Kontrollvolumens  $P$  im Detail. Die Diskretisierung für ein Kontrollvolumen  $P$  im Innern des Strömungsgebiets lautet:

$$a_P \phi_P - (a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S) = S_P. \quad (4.27)$$

Um die Wandhaftung in den Schnittpunkten – also direkt an der Position des eingetauchten Oberflächengitters – zu erreichen, wird durch Interpolation ein geeigneter Variablenwert  $\phi_{(\cdot)}^\diamond$  für die Ghost-Cell ermittelt. Auf die gleiche Weise wird auch ein zugehöriger Koeffizient  $a_{(\cdot)}^\diamond$  bestimmt. Da diese Anteile  $a_{(\cdot)}^\diamond \phi_{(\cdot)}^\diamond$  nun explizit bekannt



$$a_P \phi_P - (a_W \phi_W + a_N \phi_N) = S_P + a_E^\diamond \phi_E^\diamond + a_S^\diamond \phi_S^\diamond, \quad (4.28)$$



**Abb. 4.27.:** In Abhängigkeit der Lage des Schnittpunkts  $x_i^S$  basiert der für die Ghost-Cell  $C_R$  bestimmte Geschwindigkeitswert entweder auf dem linken  $C_L$  (a) oder auf der nächsten linken Kontrollvolumen  $C_{LL}$  (b).

terpolationsvarianten sind durch die Gleichungen (4.29) bzw. (4.30) gegeben.

$$\left. \begin{aligned} u_i^f &= u_i^{C_L} \left( 1 - \frac{d_R}{d_{IB}} \right) + u_i^{IB} \left( \frac{d_R}{d_{IB}} \right) \\ u_i^{C_R} &= u_i^{C_L} \left( 1 - \frac{1}{d_{IB}} \right) + u_i^{IB} \left( \frac{1}{d_{IB}} \right) \end{aligned} \right\} d_{IB} \geq d_R \quad (4.29)$$

$$\left. \begin{aligned} u_i^f &= u_i^{C_{LL}} \left( \frac{d_{IB} - d_R}{d_{IB} + d_{LL}} \right) + u_i^{IB} \left( 1 - \frac{d_{IB} - d_R}{d_{IB} + d_{LL}} \right) \\ u_i^{C_R} &= u_i^{C_{LL}} \left( \frac{d_{IB} - 1}{d_{IB} + d_{LL}} \right) + u_i^{IB} \left( 1 - \frac{d_{IB} - 1}{d_{IB} + d_{LL}} \right) \end{aligned} \right\} d_{IB} < d_R \quad (4.30)$$

Die Gewichte der Interpolation bestimmen sich aus den geometrischen Größen des Rechengitters sowie der Lage der Schnittpunkte.

$$\begin{aligned} d_L &= |x_i^f - x_i^{C_L}| / |x_i^{C_L} - x_i^{C_R}| & d_R &= |x_i^S - x_i^{C_L}| / |x_i^{C_L} - x_i^{C_R}| \\ d_{IB} &= |x_i^S - x_i^{C_L}| / |x_i^{C_L} - x_i^{C_R}| & d_{LL} &= |x_i^{C_{LL}} - x_i^{C_L}| / |x_i^{C_L} - x_i^{C_R}| \end{aligned} \quad (4.31)$$

Für die Ghost-Cell S des eingangs genannten Beispiels (Abbildung 4.26b) würde somit die einfache Interpolationsvorschrift nach (4.29) und für die Ghost-Cell E die modifizierte Variante (4.30) zum Einsatz kommen. Ein weiteres Problem kann sich für die zweite Formulierung der Interpolation einstellen, wenn die Zelle  $C_{LL}$  nicht verfügbar ist. In Abbildung 4.23b ist diese Situation gegeben: Die alternative Interpolationsvorschrift für die Ghost-Cell N würde auf dem Wert der Zelle S beruhen, die jedoch ebenfalls eine Ghost-Cell kennzeichnet. Falls also die benötigte Zelle  $C_{LL}$

nicht in Form einer Strömungszelle vorliegt, wird eine weitere Ausnahmeregelung getroffen.

$$\begin{aligned} u_i^f &= u_i^{IB} + \left( x_j^{IB} - x_j^f \right) \left. \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right|_* \\ u_i^{CR} &= u_i^{IB} + \left( x_j^{IB} - x_j^{CR} \right) \left. \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right|_* \end{aligned} \quad (4.32)$$

Dabei werden die Geschwindigkeiten der Ghost-Cell und der Flächenelemente allein durch die Werte an der Wand ( $u_i^{IB}$ ) in Verbindung mit Gradienten der vorherigen Lösungsiteration (\*) ermittelt. Insbesondere dann, wenn diese Vorschrift für beide sich gegenüberliegende Ghost-Cells angewendet werden muss, stellt sich erst nach einigen Iterationen ein sinnvoller Wert in der beinahe isolierten Strömungszelle ein. Da diese Situation nur sehr vereinzelt auftritt, ist dieser Nachteil jedoch hinnehmbar.

Die lineare Interpolation der Wandgeschwindigkeiten führt auf eine räumlich Fehlerordnung von  $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ .

Da die an einer Wandrandbedingung involvierten Ghost-Cells weder Druck- noch Geschwindigkeitswerte enthalten, liefern die getroffenen Flächen  $f^{IB}$  einen falschen Anteil bei der Bestimmung der Gradienten (vergleiche Abschnitt 4.1.1). Dieser muss also im Sinne der zuvor durchgeführten Interpolation der Geschwindigkeiten nachträglich korrigiert werden. Zunächst wird der über die Fläche gelieferte falsche Beitrag der Ghost-Cell (mit dem Variablenwert Null) vom Gradienten abgezogen. Anschließend wird der Anteil neu bestimmt, wobei nun die an der Fläche interpolierten Geschwindigkeiten (entsprechend der Gleichungen (4.29), (4.30) bzw. (4.30)) verwendet werden.

#### Massenerhaltung an der Wand

Die Massenerhaltung ist ein Aspekt, dem eine besondere Aufmerksamkeit gilt. Die Konservativität an der Wandberandung von Ghost-Cell Ansätzen ist von sich aus nicht gegeben. Vielmehr konzentriert sich hier der zusätzliche Aufwand, um die Massenerhaltung zu gewährleisten (vergleiche auch Abschnitt 3.2).

Die zur Erfüllung der Wandhaftung herangezogenen Interpolationsschemata gelten nur für die Impulsbilanzgleichungen und vernachlässigen zunächst den Druck. Nachfolgend wird gezeigt, wie die Konservativität der Wandberandung in dem vorliegenden Verfahren erreicht wird. Eine wesentliche Bedeutung hat an dieser Stelle das SIMPLE Druckkorrekturverfahren, welches auf der diskretisierten Massenbilanz basiert. Bei körperangepassten Rechengittern verschwindet der Massenfluss über die Randflächen einer Wandrandbedingung, wodurch keine Masse das System verlassen kann. Eine solche Forderung würde hier jedoch zu einer stufenartigen Approximation der Geometrie führen und dem eigentlichen Konzept widersprechen. Auf diese Weise würde u. a. die Verfahrensordnung verringert werden. Damit die eingetauchte Geometrie und nicht die stufenartige Darstellung des Strömungsgebiets als Wand wahrgenommen wird, müssen Massenflüsse über die Randflächen





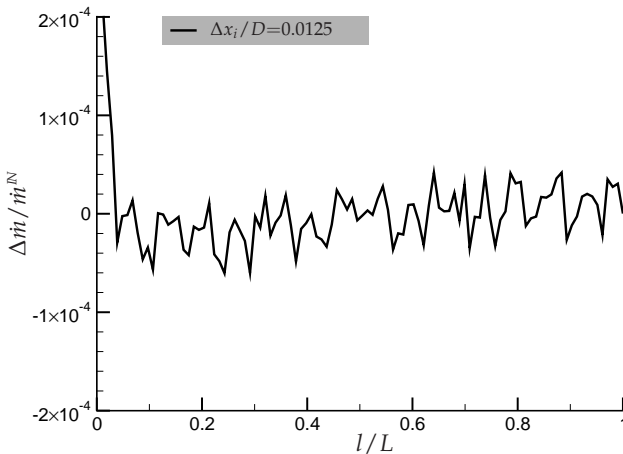
$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0 \quad (4.33)$$

ein Teil davon aus dem Strömungsgebiet herausragt oder umgekehrt. Im Fall dieses Beispiels kann daher nicht garantiert werden, dass der Massenfluss, der zwischen den Zellen  $P$  und  $E$  ausgetauscht wird, dem zwischen den Kontrollvolumen  $E$  und  $NE$  entspricht.

Abbildung 4.29 verdeutlicht die Massenerhaltung für eine Rohrströmung. Der Durchmesser des Rohres, welches unter einem Winkel von  $\alpha = 20^\circ$  im Rechengitter positioniert ist, wird mit etwa 80 Zellen aufgelöst. Zur Ermittlung des Massenflusses werden über die Rohrlänge äquidistant 100 Schnittebenen senkrecht zur Längsachse erzeugt. Die Streuung des Signals, ist dadurch zu begründen, dass durch die stufenartige Approximation des Strömungsgebiets die Flächen der erzeugten Schnittebenen nicht exakt gleich sind. Die Ermittlung des Massenflusses (ausgeführt mit Tecplot) beruht auf einer Integration über die räumlich variierende Schnittfläche. Aufgrund dieser Ergebnisse kann die Aussage getroffen werden, dass die Massenerhaltung im Bereich der Wandrandbedingung hinreichend erfüllt wird.

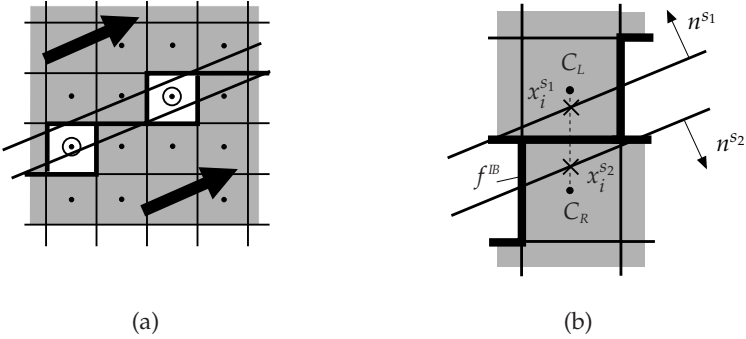
#### Dünne Wand

Eine besondere Situation ist für den Fall gegeben, dass ein sehr dünner Körper umströmt werden soll. Dabei liegen die zwei Oberflächen, die die Wandrandbedingungen repräsentieren, im Verhältnis zur Zellgröße des Rechengitters, sehr nahe beieinander (siehe Abbildung 4.30a). Die bisher vorgestellte Wandrandbedingung nutzt die außerhalb der getroffenen Zellflächen ( $f^{ib}$ ) liegenden Zellen des nicht-Strömungsgebiets zum Erfüllen der Randbedingung (vergleiche Abbildung 4.26).



**Abb. 4.29.:** Abweichung des Massenstroms für eine sich entwickelnde Rohrströmung (Länge  $L$ , Höhe  $D = 0.2L$ ,  $Re = 20$ ) bei einem Winkel von  $\alpha = 20^\circ$  zwischen dem Oberflächen- und Rechengitter.

Hier tritt jedoch die Situation ein, dass beide an die getroffene Fläche angrenzenden Zellen zum Strömungsgebiet zählen, wobei zu beiden Seiten hin eine Wandrandbedingung erfüllt werden soll. Um dies zu erreichen, muss zunächst gewährleistet werden, dass die zwei Schnittpunkte  $x_i^{s1}$  bzw.  $x_i^{s2}$  beide gespeichert werden. Wie in Abschnitt 4.4.1 erwähnt, würden zwei Schnittpunkte keinen Treffer für die Fläche liefern und demzufolge verworfen werden (siehe Abbildung 4.16c). Der Winkel zwi-



**Abb. 4.30:** Eine dünnwandige Struktur wird durch zwei nah aneinander grenzende Oberflächen dargestellt (a). Dabei müssen die getroffenen Flächen  $f^{IB}$  zu beiden Seiten hin eine Wandrandbedingung erfüllen (b).

schen den Normalenvektoren  $n^{s1}$  und  $n^{s2}$  wird als Kriterium genutzt, um ein Aus-sortieren in dieser Situation zu verhindern. Bei der Markierung des Rechengebiets (vergleiche Abschnitt 4.4.3) ist indes zu berücksichtigen, dass bei den doppelt getroffenen Flächen kein Wechsel zwischen Strömungsgebiet und nicht-Strömungsgebiet erfolgt.

Beim Erfüllen einer einfachen IB Wandrandbedingung werden nacheinander alle Schnittpunkte in Betracht gezogen, die jeweils mit einer Strömungszelle und einer Ghost-Cell assoziiert werden. Für eine dünne Wand existieren jedoch keine Ghost-Cells. Daher wird im Fall der dünnen Wand die dem Schnittpunkt näher gelegene Zelle als Strömungszelle und die andere formal als Ghost-Cell behandelt. Für den Schnittpunkt  $x_i^{s1}$  bildet  $C_L$  die Strömungszelle und  $C_R$  die Ghost-Cell. Für den zweiten Schnittpunkt ( $x_i^{s2}$ ) verhält es sich genau umgekehrt. Dieses Vorgehen ist einzig dadurch möglich, dass bei Wandrandbedingungen innerhalb der Ghost-Cell keine Werte gespeichert werden.

##### Bewegte Wandrandbedingung

Eine bewegte Wand wird dadurch realisiert, dass die eingetauchte Oberflächenbeschreibung nach jedem Zeitschritt ( $\Delta t$ ) durch eine entsprechend verschobene oder verformte Oberfläche ersetzt wird. Während der Diskretisierung kommen nun die Wandgeschwindigkeiten  $u_i^B$  innerhalb der Interpolationsvorschriften zum Tragen. Diese werden für jedes Element des Oberflächengitters durch einmaliges Ableiten der Dreieckszentrums-lage  $x_i^\Delta(t)$  nach der Zeit  $t$  bestimmt. Die Geschwindigkeiten, die für das gesamte Element gelten, werden über einen rückwärtigen Differenzenquotienten zweiter Ordnung approximiert.

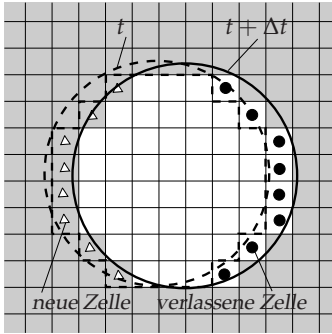
$$u_i^B = \frac{\partial x_i^\Delta}{\partial t} \approx \frac{3x_i^\Delta(t) - 4x_i^\Delta(t - \Delta t) + x_i^\Delta(t - 2\Delta t)}{2\Delta t} \quad (4.34)$$

Nach jedem Zeitschritt ist das Prozedere der Identifizierung und Markierung (vergleiche Abschnitt 4.4) erneut durchzuführen, da sich mit der Verschiebung der Oberflächenbeschreibung auch die Schnittpunkte mit dem raumfesten Rechengitter ändern. Prinzipiell sollten die maximal auftretenden Verschiebungen in einem Zeitschritt die Größenordnung der im Wandbereich liegenden Zellen nicht übertreffen. Unabhängig davon kommt es durch die Dynamik der Oberfläche zu zwei Gegebenheiten (siehe Abbildung 4.31a):

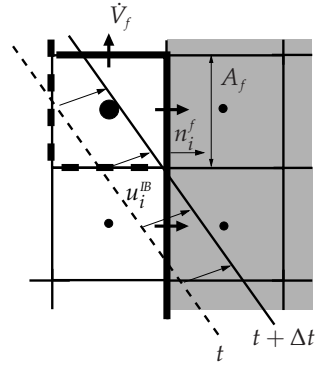
1. Eine Zelle im Strömungsgebiet befindet sich im nächsten Zeitschritt nicht mehr im Strömungsgebiet (*verlassene Zelle*).
2. Eine Zelle außerhalb des Strömungsgebiets ist im nächsten Zeitschritt Teil des Strömungsgebiets (*neue Zelle*).

Der erste Punkt bedarf keiner besonderen Beachtung, da die Werte der ehemaligen Strömungszelle eliminiert werden und somit kein Unterschied zu anderen Zellen außerhalb des Strömungsgebiets mehr existiert. Der umgekehrte Fall führt jedoch zu der Tatsache, dass plötzlich Zellen Teil des Strömungsgebiets sind, für die weder Geschwindigkeits- noch Druckwerte vorhanden sind. Das gleiche gilt für die zurückliegenden Zeitstufen des Geschwindigkeitsfelds, die in die Diskretisierung des instationären Terms eingehen. Eine Initialisierung dieser Zellen mit den Werten Null führt zu Problemen: Während sich zwar für die Geschwindigkeiten schnell physikalische Werte einstellen, verursacht ein falscher Druck starke Störungen, so dass die gesamte Lösung divergieren kann. Für den Umgang mit solchen neu zum Strömungsgebiet hinzukommenden Zellen existieren unterschiedliche Herangehensweisen [105]. In dieser Arbeit werden die betreffenden Kontrollvolumen mit den Werten initialisiert, die an der Wand selbst vorherrschen ( $u_i^B$  und  $p^B$ ). Der Druck  $p^B$  wird zunächst jedoch nur mit den Schnittpunkten des Oberflächengitters assoziiert und anschließend auf das Oberflächengitter übertragen. Auf diese Weise bleibt der Druck der Oberfläche zugeordnet, auch wenn sich in Folge von dessen Dynamik die Schnittpunkte ändern. Die neugefundenen Schnittpunkte sowie die zum Strömungsgebiet hinzu kommenden Zellen werden abschließend mit den auf der Oberfläche gespeicherten Variablen belegt.

Die Bewegung des eingetauchten Körpers führt in den meisten Fällen zu einer Verdrängung des umgebenden Fluids. Bei körperangepassten Gittern und der Verwendung von Gitterdeformationsalgorithmen werden diese lokalen Volumenänderungen im Sinne des *Space Conservation Law* [30] in Form zusätzlicher Flussterme berücksichtigt. In der vorliegenden Arbeit wurden diese volumetrischen Anteile in der Umsetzung des Verfahrens zunächst außer Acht gelassen, wie u. a. bei [25, 79, 84]. Ist das verdrängte Volumen klein, ist dieser Ansatz zu rechtfertigen. Fälle, bei denen die Bewegung des Fluids jedoch erst durch den Verdrängungseffekt hervorgerufen



(a)



(b)

**Abb. 4.31.:** Im Fall einer bewegten IB kommen neue Zellen zum Strömungsgebiet hinzu, andere Zellen verlassen dieses. Art der Darstellung nach [105] (a). Das von der bewegten IB verdrängte Fluid wird als zusätzlicher Volumenfluss an den getroffenen Zellflächen berücksichtigt (b).

wird, (z. B. ein beweglicher Kolben in einem Rohr) lassen sich auf diese Weise jedoch nicht modellieren. Der Anteil des verdrängten Fluids lässt sich schreiben als:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_f} dV = \int_{\Gamma_b} u_i^B dA_i. \quad (4.35)$$

Es entspricht dem Volumen, welches von der IB mit der Geschwindigkeit  $u_i^B$  und der Fläche  $A_i$  in einem bestimmten Zeitraum überstrichen wird. In Anlehnung an die Arbeit von SEO und MITTAL [105] wird im dynamischen Fall ein zusätzlicher Volumen- bzw. Massenfluss für die getroffenen Flächen ermittelt. Abbildung 4.31b zeigt die Lageänderung der IB zwischen zwei Zeitschritten und die dadurch hervorgerufenen Flüsse an den getroffenen Flächen. Zur Bestimmung der Volumenflüsse wird die Geschwindigkeit der IB ( $u_i^B$ ) auf die Normale ( $n_i^f$ ) der Zellfläche ( $A_f$ ) projiziert:

$$\dot{V}_f = (u_i^B n_i^f) A_f. \quad (4.36)$$

### Bestimmung der vom Fluid induzierten Kräfte

Dieser Abschnitt erläutert die Bestimmung der Kräfte, die das Fluid auf die Oberfläche der Wandberandung ausübt. Die Gesamtkraft  $F_i$  setzt sich aus einer Druckkraft  $F_i^p$  und einer Reibungskraft  $F_i^f$  zusammen. Dabei stellt die Druckkraft den normalen und die Reibungskraft den tangentialen Anteil in Bezug auf die Oberfläche dar. Während bei der Umsetzung der Wandrandbedingung nur die Schnittpunkte und die getroffenen Flächenelemente ( $f^{IB}$ ) relevant sind, muss nun die gesamte Wandoberfläche in Betracht gezogen werden. Es gilt für jedes Dreieckselement ( $\Delta$ ) der Wand einen Kraftvektor zu ermitteln, der seinen Angriffspunkt im Dreieckszentrum  $x_i^\Delta$  aufweist. In Abbildung 4.32a und 4.32b sind die Druck- bzw. Reibungskräfte an einem eingetauchten Oberflächengitter dargestellt.

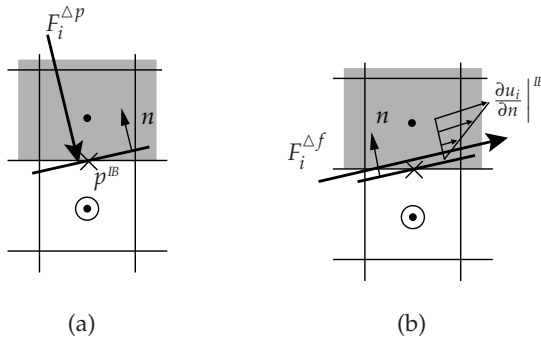


Abb. 4.32.: Druck- (a) und Reibungskraft (b) am eingetauchten Oberflächengitter.

#### Druckkraft

Die Druckkraft für ein Dreieckselement bestimmt sich aus dem Druck an der Wand ( $p^{IB}$ ) und der Fläche  $A^\Delta$ , auf die der Druck senkrecht einwirkt. Über den Normalenvektor der Dreiecksfläche ( $n_i^\Delta$ ) bestimmen sich die einzelnen Komponenten der Kraft.

$$F_i^{\Delta p} = -A^\Delta n_i^\Delta p^{IB} \quad (4.37)$$

Dies erfordert jedoch, dass der Druck  $p^{IB}$  für jedes Dreieckselement bekannt ist. Wie bereits erwähnt, wird der Druck  $p$  zunächst nur für die Schnittpunkte ermittelt. Das Übertragen auf das Oberflächengitter geschieht wie folgt: Von den Schnittpunkten aus lässt sich der Druck direkt auf diejenigen Dreieckselemente transferieren, die für den jeweiligen Schnittpunkt verantwortlich sind. Anschließend wird der Druck  $p$  konstant auf benachbarte Dreieckselemente kopiert, die selbst keinen Schnittpunkt liefern. Dies wird wiederholt, bis sämtliche Dreieckselemente mit einem Druckwert versehen sind.

### Reibungskraft

Die Reibungskraft eines Elements wird bestimmt durch den Spannungstensor  $\tau_{ij}|^B$  an der Wand und die Dreiecksfläche  $A^\Delta$ .

$$F_i^{\Delta f} = -A^\Delta \tau_{ij}|^B n_i^\Delta \quad \text{mit} \quad \tau_{ij}|^B = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^B \quad (4.38)$$

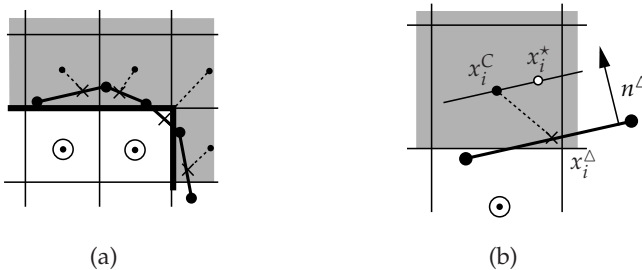
Unter der Voraussetzung, dass das Fluid an der Wand haftet und dass keine Massenflüsse senkrecht zur Wand existieren, treten Änderungen der Geschwindigkeiten nur in Wandnormalenrichtung ( $n_i^\Delta$ ) auf. Damit lassen sich die Gradienten transformieren, so dass nur noch die Geschwindigkeitsänderungen in Wandnormalenrichtung enthalten sind.

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \Big| ^B = \frac{\partial u_i}{\partial n^\Delta} \frac{\partial n^\Delta}{\partial x_j} = \frac{\partial u_i}{\partial n^\Delta} n_j^\Delta \quad (4.39)$$

Einsetzen von (4.39) in (4.38) liefert den vollständigen Ausdruck für die reibungsbedingte Kraft auf das Dreieckselement der Wand.

$$F_i^{\Delta f} = -A^\Delta \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial n^\Delta} n_j^\Delta + \frac{\partial u_j}{\partial n^\Delta} n_i^\Delta \right) n_i^\Delta \quad (4.40)$$

Die primäre Aufgabe bei der Bestimmung der Reibungskraft nach (4.40), ist die Ermittlung des Geschwindigkeitsgradienten in Wandnormalenrichtung  $n$ . Da bei körperangepassten Rechengittern die Gitterlinien meist senkrecht auf die Wand treffen, kann der benötigte Gradient über einen Differenzenquotienten zwischen der Wand selbst und dem ersten darüberliegenden Kontrollvolumen ermittelt werden. In dieser Arbeit darf die Oberfläche, welche die Wand repräsentiert, eine beliebige Orientierung zum Rechengitter aufweisen. Auch eine *wandnächste Strömungszelle*



**Abb. 4.33.:** Jedem Dreieckselement wird eine nahegelegene Strömungszelle zugeordnet; verdeutlicht durch eine gestrichelte Linie (a). Der wandnormale Gradient wird über einen Differenzenquotienten zwischen dem Dreieckszentrum  $x_i^C$  und dem Punkt  $x_i^*$  approximiert (b).

ist nicht definiert. Um den Geschwindigkeitsgradienten berechnen zu können, ist es notwendig, jedem Dreieckselement eine geeignete wandnächste Strömungszelle zuzuweisen. Dazu werden die Geschnittenen und die daran angrenzenden Kontrollvolumen betrachtet. Die schließlich zugeordnete Zelle muss zwei Kriterien erfüllen (siehe Abbildung 4.33a):

1. Der Abstand zwischen dem Kontrollvolumenzentrum und dem Dreieckselement fällt möglichst gering aus.
2. Der Winkel zwischen der Verbindungslinie (Dreieckszentrum – Kontrollvolumenzentrum) und der Normalenrichtung des Dreiecks ( $n_i^\Delta$ ) ist möglichst klein.

Da die Verbindungslinie zwischen dem Dreieckszentrum  $x_i^\Delta$  und dem assoziierten Kontrollvolumenzentrum  $x_i^C$  i. d. R. nicht der Normalenrichtung  $n^\Delta$  des Dreiecks entspricht, wird die Verbindungslinie auf den Normalenvektor projiziert, wodurch ein weiterer Punkt ( $x_i^*$ ) entsteht (siehe Abbildung 4.33b). Dieser Punkt wird zur Approximation des wandnormalen Geschwindigkeitsgradienten verwendet:

$$\frac{\partial u_i}{\partial n^\Delta} \approx \frac{u_i^C - u_i^B}{l^*} \quad \text{mit} \quad l^* = |x_i^* - x_i^\Delta|. \quad (4.41)$$

Die Summe aus der Druck- und der Reibungskraft bildet die vom Fluid verursachte Gesamtkraft auf ein Dreieckselement  $\Delta$  der Wand.

$$F_i^\Delta = F_i^{\Delta p} + F_i^{\Delta f} \quad (4.42)$$

Zur Bestimmung integraler Beiwerte steht somit noch eine Summation über alle Dreieckselemente aus, wobei die Anteile für Auftrieb ( $c_l$ ) und Widerstand ( $c_p$ ) entsprechend der Anströmungsrichtung definiert sind.

#### 4.5.4. Validierung der IB Randbedingungen

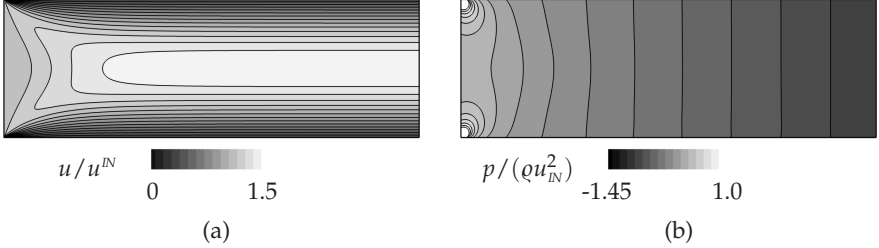
In diesem Abschnitt sind einige Testfälle gezeigt, die zur Validierung der Randbedingungen mit dem vorgestellten Verfahren herangezogen wurden. Einige von diesen sind in ähnlicher Weise bereits in anderen Arbeiten diskutiert [51, 52]. Um zu jedem Zeitpunkt die Funktionstüchtigkeit des Verfahrens zu gewährleisten, ist die Validierung und Verifizierung des Programms notwendigerweise zum Bestandteil des Entwicklungsprozesses geworden.

#### Kanalströmung

Der erste Testfall ist die laminare Einlaufströmung in einen ebenen Kanal (Höhe  $h$ , Länge  $l = 3h$ ). Dabei werden die Einström-, Auström- und Wandrandbedingungen durch ein eingetauchtes Oberflächengitter realisiert. Die Reynolds-Zahl von  $Re_h = 20$  ist bewusst klein gewählt, so dass die Strömung nach kurzer Einlaufänge

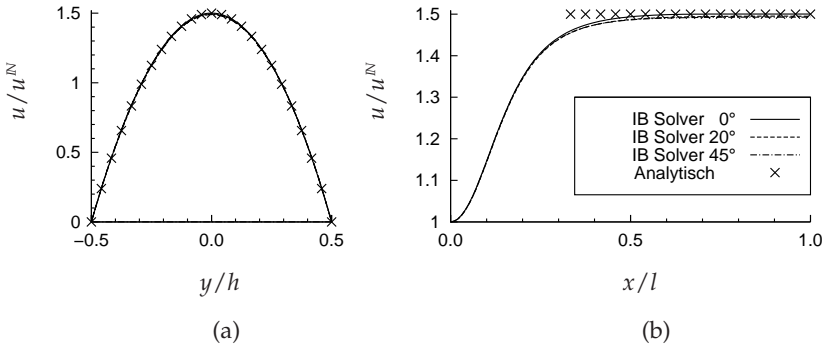


vollständig ausgebildet ist. Für dieses voll entwickelte Geschwindigkeitsprofil existiert eine analytische Lösung [103], mit der das simulierte Ergebnis verglichen werden kann. In Abbildung 4.34 ist das berechnete Geschwindigkeits- und Druckfeld



**Abb. 4.34.:** Berechnete Geschwindigkeits- (a) und Druckverteilung (b) der laminaren Kanalströmung.

dargestellt. Ab etwa einem Drittel der Kanallänge ist das Strömungsfeld voll entwickelt und ein konstanter Druckgradient stellt sich ein. Bei einem kartesisch ausgerichteten Kanal werden keine Zellen des Rechengitters schräg geschnitten, welches die eigentliche Herausforderung an das Verfahren darstellt. Daher wird der Kanal unter unterschiedlichen Winkeln ( $0^\circ$ ,  $20^\circ$ ,  $45^\circ$ ) zum Rechengitter simuliert. Die angegebenen Geschwindigkeiten ( $u$ ,  $v$ ) und die Koordinaten ( $x$ ,  $y$ ) gelten dann im jeweils rotierten System. Abbildung 4.35a zeigt die Geschwindigkeitsverteilung am Kanalaustritt sowie die Entwicklung der Geschwindigkeit in der Kanallängsachse (Abbildung 4.35b). Die berechneten Ergebnisse konvergieren für eine steigende

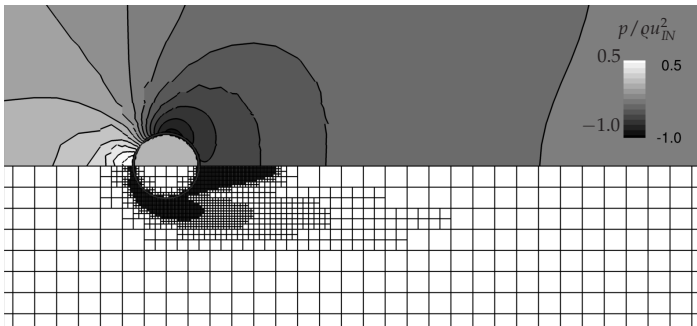


**Abb. 4.35.:** Geschwindigkeitsprofil am Kanalaustritt (a) und Entwicklung der Geschwindigkeit in Längsrichtung des Kanals (b) im Vergleich mit der analytischen Lösung.

Gitterauflösung gegen die analytischen Lösung. Die theoretische Maximalgeschwindigkeit von  $u^{\max} = 1.5u^{\text{IN}}$  wird für die jeweils rotierten Kanalgitter ( $20^\circ$ ,  $45^\circ$ ) höchstens um 0.4% unterschritten. Der nicht rotierte Fall trifft die maximale Geschwindigkeit exakt. Die Ergebnisse zeigen beinahe eine Unabhängigkeit von der Lage des Oberflächen- im Verhältnis zum Rechengitter.

#### Zylinderumströmung

Als Validierung für eine Außenströmung wird ein stationär umströmter Kreiszylinder (Durchmesser  $d$ ) bei einer Reynolds-Zahl von  $\text{Re}_d = 20$  simuliert. In dieser Konstellation bildet sich hinter dem Zylinder ein symmetrisches Rezirkulationsgebiet aus. Das ermittelte Druckfeld sowie das zugrundeliegende Rechengitter sind in Abbildung 4.36 zu sehen. Ausgehend von einem sehr groben, äquidistanten Gitter wird das Rechengitter während der Simulation im Bereich des eingetauchten Körpers weiter verfeinert. Hierfür wird primär das Wirbelstärkekriterium genutzt, um den Bereich hoher Scherung in der Grenzschicht zu verfeinern. Damit auch das Gebiet der stationären Rezirkulation besser erfasst wird, werden zudem Zellen verfeinert, für deren Absolutgeschwindigkeit  $|u_i| < 0.1 |u_i^{\text{IN}}|$  gilt. Alle vom Oberflächen-gitter geschnittenen Zellen weisen das höchste Gitterlevel ( $L_{\max} = 7$ ) auf. Für derartige 2D Testfälle ist die Gitteradaption jedoch nur bedingt sinnvoll, da durch die

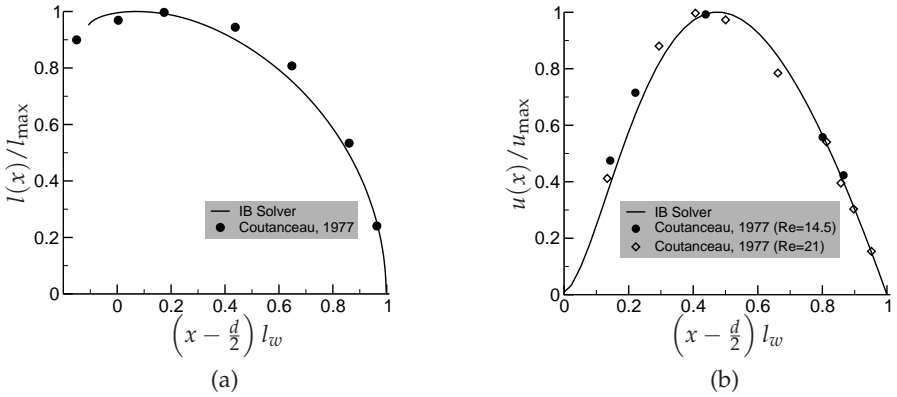


**Abb. 4.36.:** Berechnetes Druckfeld des umströmten Zylinders (*oben*) auf einem Rechengitter, welches nach zweierlei Kriterien während der Simulation adaptiert wird (*unten*). Die Sprünge der Konturlinien im Bereich hängender Knotenelemente sind lediglich darstellungsbedingt.

isotrope Verfeinerung auch Zellen in Richtung der Symmetrieebene erzeugt werden, die nicht benötigt werden. Die berechneten Ergebnisse stimmen sehr gut mit denen überein, die auf einem sehr feinen, nicht-adaptierten Gitter erreicht werden. Für den gewählten Testfall existieren zahlreiche experimentelle Ergebnisse, die zur Validierung des Verfahrens genutzt werden können. In diesem Fall werden die Eigenschaften des Rückstromgebiets mit Experimenten von COUTANCEAU und BOUARD [20]

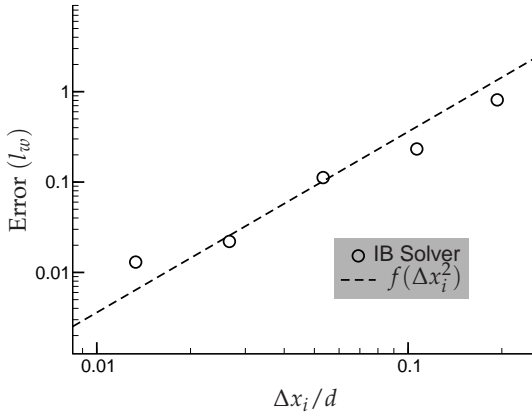
verglichen. Abbildung 4.37a zeigt die geometrischen Eigenschaften des Rezirkulationsgebiets, dessen maximale Ausbreitung in Längsrichtung mit  $l_w$  und in Querrichtung mit  $l_{\max}$  bezeichnet wird. Abbildung 4.37b veranschaulicht die Verteilung der Geschwindigkeiten innerhalb der Symmetrieachse des Nachlaufs. In beiden Fällen gibt es eine gewisse Abweichung zwischen der berechneten Lösung und den gemessenen Werten. Im Bereich nah am Zylinder wird das Ablösegebiet etwas größer und weiter stromab etwas niedriger vorhergesagt. Die maximal auftretende Geschwindigkeit ist im Vergleich zum Experiment etwas weiter stromab zu finden. Insgesamt kann aber dennoch von einer guten Übereinstimmung gesprochen werden.

Anhand einer Gitterkonvergenzstudie kann die gesamte Fehlerordnung des Ver-



**Abb. 4.37.:** Geometrische Eigenschaften der Ablösung (a) und Geschwindigkeitsverteilung innerhalb des Rezirkulationsgebiets (b) im Vergleich mit experimentellen Ergebnissen [20].

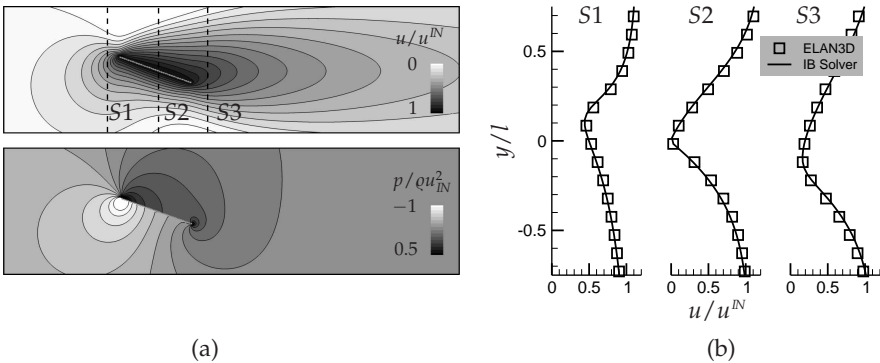
fahrens abgeschätzt werden. Darin enthalten sind neben der Diskretisierung innerhalb des Strömungsgebiets auch die Randbedingung, die in diesem Fall durch eine IB Wand beschrieben ist. Dazu wird die Simulation der Zylinderumströmung ( $Re = 20$ ) auf sechs verschiedenen (nicht-adaptiven) Rechengittern ausgeführt. Ein grobes Startgitter wird dabei sukzessive durch eine Verdopplung der Gitterpunkte in  $x$ - wie  $y$ -Richtung verfeinert. Als Fehlerindikator wird die skalare Größe der Ablöselänge  $l_w$  im Nachlauf des Zylinders betrachtet. Da die Angaben experimenteller Größen [133] hier stark schwanken, dient die Lösung des feinsten Gitters als Referenz. Bezüglich dieses Wertes werden die Fehler auf den übrigen Gittern ermittelt. Der Referenzwert selbst, der definitionsgemäß einen Fehler von Null aufweist, wird anschließend nicht beachtet. In Abbildung 4.38 ist der Fehler in Abhängigkeit von der Gitterauflösung aufgetragen. Anhand der zusätzlich eingezeichneten Funktion  $f(\Delta x_i) = c_0 \Delta x_i^2$  ist das quadratische Verhalten der Fehlerentwicklung zu erkennen. Dies bestätigt, dass das Verfahren von räumlich zweiter Fehlerordnung ist.



**Abb. 4.38.:** Die Ergebnisse der Gitterkonvergenzstudie zeigen die Entwicklung des Fehlers in Abhängigkeit der Gitterauflösung  $\Delta x_i$ .

### Strömung um eine angestellte Platte

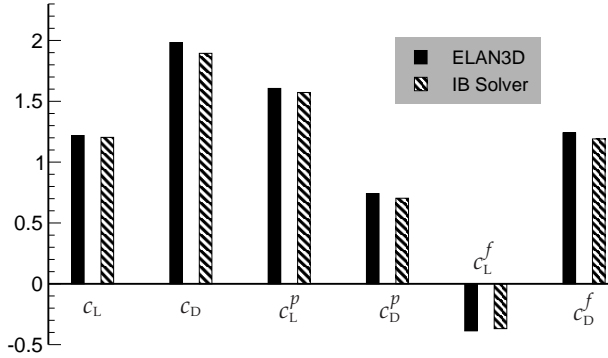
Die laminare Strömung  $Re_l = 20$  um eine dünne angestellte Platte (Länge  $l$ , Anstellwinkel  $\alpha = 20^\circ$ ) dient als Testfall, um die Vorhersage der auftretenden Kräfte zu bewerten. Abbildung 4.39 zeigt zunächst die Charakteristik des Strömungsfelds



**Abb. 4.39.:** Umströmte Platte unter einem Anstellwinkel von  $20^\circ$ : Druck- und Geschwindigkeitskonturen (a); Vergleich von Geschwindigkeitsprofilen mit ELAN [129] (b).

sowie eine gute Übereinstimmung mit Ergebnissen des hinreichend validierten Strömungslösers ELAN [129]. Aus den lokal wirkenden Druck- und Reibungskräften an der Plattenoberfläche werden entsprechend der Anströmrichtung die globalen Grö-

ßen Auftrieb ( $c_L$ ) und Widerstand ( $c_D$ ) gebildet. Diese Kraftbeiwerte, die sich ihrerseits in einen Druck- ( $c_L^p$ ,  $c_D^p$ ) und einen Reibungsanteil ( $c_L^f$ ,  $c_D^f$ ) aufspalten lassen, sind in Abbildung 4.40 Ergebnissen des ELAN-Lösers gegenübergestellt. Die mit

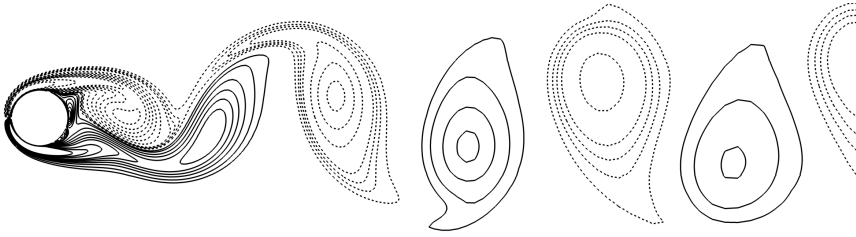


**Abb. 4.40.:** Vergleich der integralen Beiwerte (Auftrieb:  $c_L$ , Widerstand:  $c_D$ ) sowie deren Zusammensetzung (Druck:  $p$ , Reibung:  $f$ ) zwischen IB Strömungslöser und ELAN [129] für die Plattenströmung.

dem eigenen Verfahren bestimmten Beiwerte weisen gewisse Differenzen im Vergleich zum Strömungslöser ELAN auf. Da das Flächenmaß und der Flächennormalenvektor eines Dreiecks exakt berechnet werden können, sind die Abweichungen auf die Bestimmung des wandnormalen Geschwindigkeitsgradienten bzw. die Approximation des auf die Wand wirkenden Drucks zurückzuführen. Dabei spielen insbesondere diejenigen Dreieckselemente eine Rolle, die selbst keinen Treffer in Bezug auf die Schnittpunktsuche liefern, für die aber dennoch eine Oberflächenkraft bestimmt werden muss. Dennoch können die Ergebnisse hinsichtlich der Vorhersage der auftretenden Kräfte als gut eingestuft werden.

### Strömung um einen oszillierenden Zylinder

Zur Validierung der bewegten Wandrandbedingung wird ein transversal zur Anströmung oszillierender Zylinder (Durchmesser  $d$ ) berechnet. Die Reynolds-Zahl ( $Re_d = 185$ ), die Auslenkungsamplitude ( $A$ ) und die Frequenzen ( $f$ ) der Oszillation entsprechen den Untersuchungen von GUILMINEAU und QUEUTEY [46] bzw. PHAM et al. [97]. Für die Strömung um den ruhenden Zylinder bildet sich bei dieser Reynolds-Zahl eine laminare Kármánsche Wirbelstraße stromab des Zylinders aus [133]. Die Ergebnisse dieser natürlichen, instationären Strömung ( $St_0 = 0.190$ ,  $\bar{c}_D = 1.32$ ,  $c_L^{RVS} = 0.39$ ) stimmen bereits gut mit denen von [46] überein ( $St_0 = 0.195$ ,  $\bar{c}_D = 1.29$ ,  $c_L^{RVS} = 0.443$ ). Abbildung 4.41 zeigt die Wirbelstraße der natürlichen Strömung um den Zylinder bei  $Re = 185$ . Im dynamischen Fall bewegt sich der Zylinder harmonisch mit einer Amplitude von  $A = 0.2d$  und einer Frequenz von  $f$  um seine



**Abb. 4.41.:** Konturen positiver (—) und negativer (-----) Wirbelstärke der natürlichen Zylinderumströmung ( $Re = 185$ ).

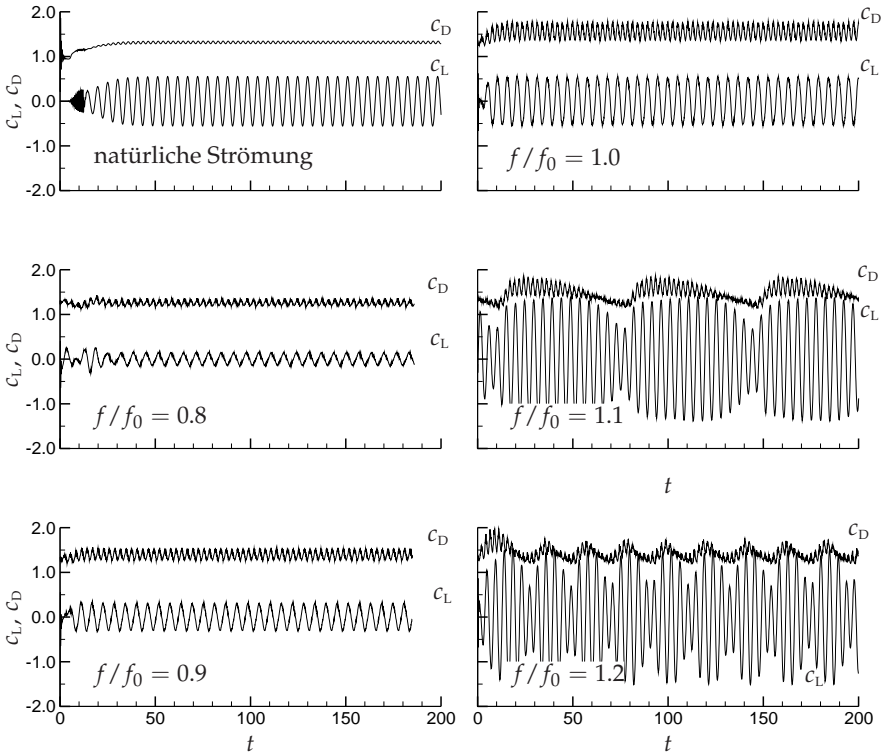
Ursprungslage. Die Frequenz wird im Verhältnis zur Frequenz des Wirbelabwurfs  $f_0$  der natürlichen Strömung gewählt, welche durch die Strouhal-Zahl gegeben ist:

$$St_0 = \frac{f_0 d}{u^{IN}} \quad (4.43)$$

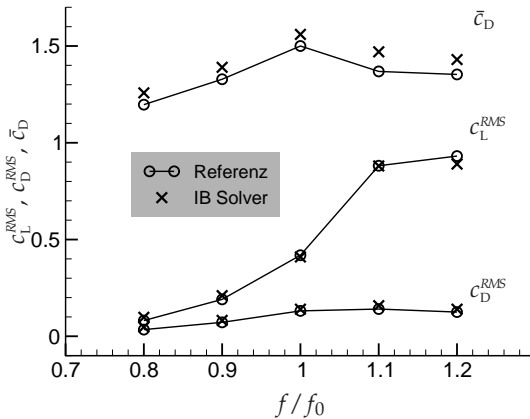
In Bezug auf [46] werden Frequenzverhältnisse von  $f/f_0 = 0.8$  bis  $f/f_0 = 1.2$  untersucht. Der Zylinder, welcher als IB ausgeführt ist, wird wie in [97] mit 80 Zellen im Durchmesser aufgelöst. Eine Periode  $T_0$  der natürlichen Strömung wird mit  $n = T_0/\Delta t = 210$  Zeitschritten erfasst. Der daraus resultierende Zeitschritt wird für alle Untersuchungen beibehalten. Das maximale Frequenzverhältnis von  $f/f_0 = 1.2$  wird dementsprechend noch durch 175 Zeitschritte aufgelöst. Im Vergleich zur natürlichen Strömung wird die Anzahl innerer Iterationen um den Faktor drei erhöht, um bewegungsbedingte Störungen abklingen zu lassen. Als Konvektionsschema wird ein Flux-Blending bei 99% CDS verwendet.

Abbildung 4.42 zeigt den zeitlichen Verlauf von Auftriebs- und Widerstandsbeiwerten für die untersuchten Frequenzverhältnisse sowie für die natürliche Strömung. Für ein Frequenzverhältnis bis  $f/f_0 = 1.0$  ähnelt das Verhalten der Kraftbeiwerte dem der natürlichen Strömung. Die Signale erscheinen regelmäßig und die Strouhal-Zahlen entsprechen exakt den Frequenzen der aufgeprägten Oszillation ( $St = 0.15$  bei  $f/f_0 = 0.8$  und  $St = 0.17$  bei  $f/f_0 = 0.8$ ). Auch die Amplituden und die Mittelwerte ändern sich im Vergleich zur natürlichen Strömung. Für Frequenzverhältnisse oberhalb  $f/f_0 = 1.0$  sind die Beiwerte überlagert von einer weiteren dominanten Frequenz ( $St_1 = 0.21$ ,  $St_2 = 0.19$  bei  $f/f_0 = 1.1$  sowie  $St_1 = 0.23$ ,  $St_2 = 0.18$  bei  $f/f_0 = 1.2$ ). Dabei ist die zweite Strouhal-Zahl unterhalb der ersten angesiedelt, welche der Anregungsfrequenz entspricht. Durch die Überlagerung dieser zwei Frequenzen gleicher Größenordnung kommt es zu der typischen Erscheinung einer *Schwebung*. Es ist zu erkennen, dass sowohl die Auftriebs- als auch die Widerstandsbeiwerte alle dynamischen Fälle zusätzlich mit hochfrequenten Schwankungen überlagert sind. Hierfür gibt es zwei Erklärungen: Zum einen kommen Zellen zum Strömungsgebiet hinzu bzw. verlassen dieses [105]. Andererseits kann es durch

die Bewegung der Geometrie zwischen zwei Zeitschritten zu einer geänderten Konstellation bei der Interpolation kommen. LIAO et al. [75] schlagen ein alternatives Interpolationsschema vor, welches eben diese beschriebenen Oszillationen unterbindet. Unabhängig davon zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen von GUILMINEAU und QUEUTEY [46]. In Abbildung 4.43 werden die zeitlich gemittelten Kraftbeiwerte sowie deren Schwankungsgrößen in Abhängigkeit des Frequenzverhältnisses mit den Ergebnissen von GUILMINEAU und QUEUTEY [46] verglichen. Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung für den gesamten untersuchten Frequenzbereich. Einzig die Werte des mittleren Widerstandsbeiwertes der eigenen Untersuchung liegen um etwa 4% oberhalb der Referenzdaten.



**Abb. 4.42.:** Zeitverlauf des Auftriebsbeiwertes  $c_L$  und des Widerstandsbeiwertes ( $c_D$ ) für verschiedene Frequenzverhältnisse  $f/f_0$  sowie für die natürliche Umströmung des Zylinders (dargestellt ist jeder vierte Punkt der Simulation).



**Abb. 4.43.:** Zeitgemittelte Kraftbeiwerte sowie deren Schwankungsgrößen für verschiedene Frequenzverhältnisse des oszillierenden Zylinders im Vergleich zu Ergebnissen von GUILMINEAU und QUEUTEY [46].

#### 4.6. Kopplung mit einem Verfahren zur Struktursimulation

Unter der Fluid-Struktur-Interaktion (FSI) wird die *Kopplung* zwischen strömungs- und strukturmekanischen Simulationsverfahren verstanden. Sie wird dort angewendet, wo die Kräfte des Fluids auf eine mechanische Struktur wirken, die sich daraufhin verschiebt oder verformt, wodurch es wiederum zu einer Rückwirkung auf das Strömungsfeld kommt. Bei der numerischen Behandlung können dazu Verfahren der Strömungssimulation mit solchen der Strukturmechanik gekoppelt werden. Eine wesentliche Herausforderung bei der Simulation derart gekoppelter Problemstellungen ist die Möglichkeit des Strömungslösers, bewegte Wandrandbedingungen zu realisieren. Da die Umsetzung bewegter Wandrandbedingungen sowie die Bestimmung der vom Fluid verursachten Kräfte auf die Oberfläche bereits gegeben ist, sind nunmehr zwei weitere Voraussetzungen zu erfüllen, um FSI Problemstellungen simulieren zu können:

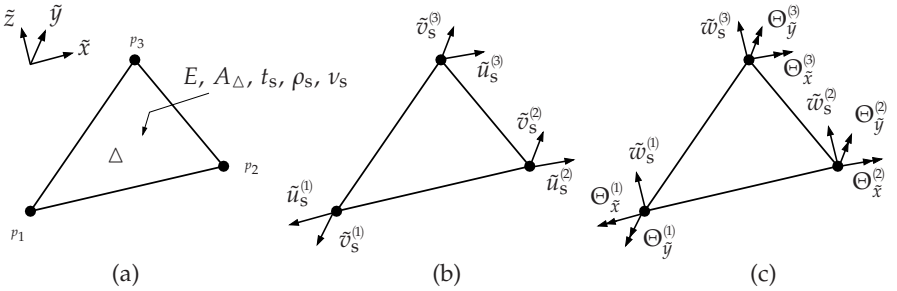
Zunächst wird ein geeignetes strukturmekanisches Simulationsverfahren benötigt und zum anderen ein geeigneter Algorithmus, um die Strömungs- und Struktursimulation zu koppeln.

In dem hier vorgestellten Verfahren werden s. g. *Schalenelemente* in Form eines eigenständigen Programms umgesetzt. Es basiert auf der Finite-Elemente-Methode (FEM) und der linearen Elastizitätstheorie. Um die Vereinigung zwischen beiden Programmen zu erreichen, wird eine *lose* bzw. *iterative Kopplung* gewählt, bei der Strömungslöser zu gegebenem Zeitpunkt die notwendigen Daten an den FEM Löser übergibt und diesen aufruft.



#### 4.6.1. Strukturmechanisches Schalelement

Ein *Schalelement* stellt in der Strukturmechanik eine Kombination aus einem *Scheibenelement* sowie einem *Plattenelement* [136] dar. Es wird genutzt, um allgemein dünnwandige Strukturen wie Behälter, Karosserien oder Flugzeugrümpfe zu modellieren. Durch die gute Vernetzbarkeit wird es oft in Form von Dreieckselementen implementiert. In Abbildung 4.44a ist das Dreieckselement, welches in einem lokalen Koordinatensystem in der  $\tilde{x}$ - $\tilde{y}$ -Ebene liegt, dargestellt. Zu den rein geometrischen Eigenschaften des Dreiecks (siehe Abschnitt 4.3) kommen die Dicke  $t_s$ , der Elastizitätsmodul  $E$ , die Dichte  $\rho_s$  sowie die Querkontraktionszahl  $\nu_s$  hinzu. Abil-



**Abb. 4.44.:** Dreieckselement  $\Delta$  mit seinen mechanischen Eigenschaften (a). Das Scheibenelement erfasst Deformationen  $\tilde{u}_s^{(n)}, \tilde{v}_s^{(n)}$  in der  $\tilde{x}$ - $\tilde{y}$ -Ebene (b). Das Plattenelement stellt Verschiebungen senkrecht zur Ebene des Dreiecks  $\tilde{w}_s^{(n)}$  sowie Verdrehungen  $\Theta_{\tilde{x}}^{(n)}, \Theta_{\tilde{y}}^{(n)}$  dar (c).

dung 4.44b repräsentiert den Anteil des Scheibenelements: Es existieren Knotenverschiebungen  $\tilde{u}$  und  $\tilde{v}$ , die in der Ebene des Dreiecks liegen. Um diese hervorzurufen können in den drei Eckknoten Kräfte  $F_{\tilde{x}}$  und  $F_{\tilde{y}}$  angreifen. Die Abbildung 4.44c zeigt den Plattenanteil des Schalelements, welches Deformationen senkrecht zur Dreiecksebene ( $\tilde{w}$ ) und zusätzlich auch Verdrehungen um die lokalen Koordinatenachsen ( $\Theta_{\tilde{x}}, \Theta_{\tilde{y}}$ ) aufweisen kann. Bei dem Plattenelement greifen Kräfte ( $F_{\tilde{z}}$ ) senkrecht zur Ausrichtung des Elements an. Zusätzlich zu den Kräften können in den Knoten Drehmomente ( $M_{\tilde{x}}, M_{\tilde{y}}$ ) angreifen. Die Elementsteifigkeitsbeziehungen beschreiben den Zusammenhang zwischen den Knotenverschiebungen und angreifenden Lasten:

$$\tilde{\mathbf{K}}_e \tilde{\mathbf{u}} = \tilde{\mathbf{f}} \quad (4.44)$$

Der Vektor  $\tilde{\mathbf{u}}$  enthält die unbekannten Verschiebungen und Verdrehungen der Knoten.  $\tilde{\mathbf{f}}$  bezeichnet die in den Knoten angreifenden Kräfte und Momente und  $\tilde{\mathbf{K}}_e$  ist die *Elementsteifigkeitsmatrix*. Das Gleichungssystem für ein Schalelement lautet:

$$\begin{bmatrix} & & \\ & \tilde{\mathbf{K}}_e & \\ & & \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \tilde{u}_s^{(1)} \\ \tilde{v}_s^{(1)} \\ \tilde{w}_s^{(1)} \\ \Theta_{\tilde{x}}^{(1)} \\ \Theta_{\tilde{y}}^{(1)} \\ \tilde{u}_s^{(2)} \\ \tilde{v}_s^{(2)} \\ \tilde{w}_s^{(2)} \\ \Theta_{\tilde{x}}^{(2)} \\ \Theta_{\tilde{y}}^{(2)} \\ \tilde{u}_s^{(3)} \\ \tilde{v}_s^{(3)} \\ \tilde{w}_s^{(3)} \\ \Theta_{\tilde{x}}^{(3)} \\ \Theta_{\tilde{y}}^{(3)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_{\tilde{x}}^{(1)} \\ F_{\tilde{y}}^{(1)} \\ F_z^{(1)} \\ M_{\tilde{x}}^{(1)} \\ M_{\tilde{y}}^{(1)} \\ F_{\tilde{x}}^{(2)} \\ F_{\tilde{y}}^{(2)} \\ F_z^{(2)} \\ M_{\tilde{x}}^{(2)} \\ M_{\tilde{y}}^{(2)} \\ F_{\tilde{x}}^{(3)} \\ F_{\tilde{y}}^{(3)} \\ F_z^{(3)} \\ M_{\tilde{x}}^{(3)} \\ M_{\tilde{y}}^{(3)} \end{bmatrix} \quad (4.45)$$

Kernpunkt bei der Formulierung derartiger Strukturelemente ist die Bestimmung der Elementsteifigkeitsbeziehung  $\tilde{\mathbf{K}}_e$  unter der Wahl geeigneter *Ansatzfunktionen* für die möglichen Verformungen. Das Schalenelement wird durch eine Kombination eines linearen Scheibenelements [112] mit einem Plattenelement nach SPECHT [110] gewonnen. Im Gegensatz zum Scheibenelement ist die Herleitung des Plattenelements wesentlich anspruchsvoller, da hier die Integration der gewählten Ansatzfunktionen in Dreieckskoordinaten erforderlich wird. An dieser Stelle sei auf das Buch von STEINKE [112] verwiesen, welches als Grundlage für das implementierte Schalenelement dient.

### Transformation in globale Koordinaten

Die in Gleichung (4.44) gegebene Elementsteifigkeitsbeziehung gilt in Bezug auf ein lokales Koordinatensystem, bei dem das Dreieckselement in der  $\tilde{x}$ - $\tilde{y}$ -Ebene liegt. Da dies in der praktischen Anwendung nicht gegeben werden kann, ist es notwendig das Gleichungssystem auf die globalen Koordinaten zu transformieren, in denen auch das Oberflächengitter definiert ist.

$$\underbrace{\tilde{\mathbf{K}}_e \tilde{\mathbf{u}} = \tilde{\mathbf{f}}}_{\text{lokal}} \longrightarrow \underbrace{\mathbf{K}_e \mathbf{u} = \mathbf{f}}_{\text{global}} \quad (4.46)$$

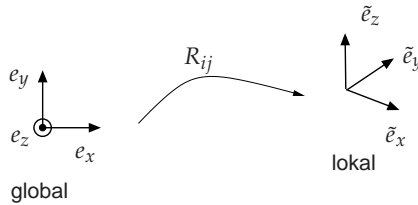
Gleichung (4.47) bildet eine Transformation des Ausdrucks (4.44) von seinem lokalen in das globale Koordinatensystem. Dabei ist  $\mathbf{T}$  eine Transformationsmatrix. Der Übergang zwischen beiden Koordinatensystem kann über den *Richtungskosinus*

(4.48) der Einheitsvektoren beider Systeme hergestellt werden [111] (siehe Abbildung 4.45).

$$\mathbf{K}_e \mathbf{u} = \left( \mathbf{T}^T \tilde{\mathbf{K}}_e^* \mathbf{T} \right) \mathbf{T} \tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{T} \tilde{\mathbf{f}} = \mathbf{f} \quad (4.47)$$

$$R_{ij} = \cos \left( \angle(e_i, e_j) \right) = \tilde{e}_i e_j \quad (4.48)$$

Die Transformationsmatrix  $\mathbf{T}$  besitzt eine Blockstruktur, wobei die Blöcke entlang der Diagonalen mit dem Richtungskosinus  $R_{ij}$  besetzt sind. Die Matrix  $\mathbf{K}_e$  besitzt



**Abb. 4.45:** Transformation der Einheitsvektoren zwischen dem lokalem und globalem Koordinatensystem mittels der Matrix des Richtungskosinus  $R_{ij}$ .

eine größere Dimension, da durch die Koordinatentransformation nun auch Verdrehungswinkel  $\Theta_z$  auftreten können. Daher wird  $\tilde{\mathbf{K}}_e$  zunächst in eine entsprechend dimensionierte Matrix  $\tilde{\mathbf{K}}_e^*$  einsortiert, die dann in die Koordinatentransformation (4.47) eingeht. Die ermittelten Kräfte liegen bereits in globalen Koordinaten vor und auch die nach der Berechnung vorliegenden Verschiebungen und Verdrehungen werden in den globalen Koordinaten weiterverwendet, so dass die Transformation nur für die Steifigkeitsmatrix erforderlich ist.

#### 4.6.2. Umsetzung des Verfahrens zur Struktursimulation

Der prinzipielle Ablauf des realisierten FEM Verfahrens für stationäre Probleme ist in der nachfolgenden Box skizziert. Hauptaufgabe ist die Berechnung der Elementsteifigkeit für jedes Element. Nach der Transformation in das globale Koordinatensystem müssen die Anteile in der *Systemsteifigkeit*  $\mathbf{K}$  zusammengefügt werden. Diese Matrix ist groß, symmetrisch, positiv definit und ebenfalls nur dünn besetzt. Um den Vorgang des Zusammenbaus einfach zu halten, wird diese Matrix zunächst als vollständige (nicht sparse) Matrix aufgebaut. Sind die Steifigkeitsbeiträge aller Elemente berücksichtigt, wird die Matrix in das CRS Format überführt. Ein direkter Aufbau als Sparse Matrix ist zwar wesentlich effizienter, jedoch von der Umsetzung her sehr viel aufwändiger, wie in NGUYEN [87] beschrieben.

1. Einlesen von Gitter-, Randbedingungs- und Steuerdatei
2. Für alle Dreiecke ( $\Delta$ ) des Oberflächengitters  $\Gamma_b$ 
  - Bestimmung der Elementsteifigkeitsbeziehung:  $\tilde{\mathbf{K}}_e^*$
  - Transformation in globale Koordinaten:  $\mathbf{K}_e = (\mathbf{T}^T \tilde{\mathbf{K}}_e^* \mathbf{T})$
  - Assemblierung: Element- in Systemsteifigkeitsmatrix:  $\mathbf{K}_e \rightarrow \mathbf{K}$
3. Setzen der Randbedingungen
4. Erzeugung des Lastvektors  $\mathbf{f}$
5. Lösen des Gleichungssystems  $\rightarrow \mathbf{u}$
6. Ausgabe der Ergebnisse

Es sind zwei unterschiedliche Randbedingungstypen umgesetzt: 1. ein *Festlager*, welches sowohl die Verschiebungen als auch die Verdrehungen in den Knoten unterbindet. 2. ein *Loslager*, bei dem nur Verschiebungen verhindert werden. Um die Randbedingungen zu erfüllen, werden die betroffenen Einträge der zu unterbindenden Knotenfreiheitsgrade aus dem Gleichungssystem eliminiert.

Die auftretenden symmetrischen Gleichungssysteme lassen sich zwar sehr effizient mit dem Konjugierte-Gradienten-Verfahren (CG) lösen. Stattdessen kommt jedoch der im Strömungslöser verwendete BiCGSTAB-Löser zum Einsatz, da dieser als präkonditionierte Variante vorliegt und in Verbindung mit der ILU-0 Vorkonditionierung das bessere Konvergenzverhalten zeigt.

Abschließend werden die Ergebnisse des Lösungsvektors  $\mathbf{u}$  mit den Knotenpunkten des Rechengitters assoziiert und ausgegeben. Eine Berechnung weiterer mechanischer Größen wie z. B. der mechanischen Spannungen  $\sigma_{ij}$  wird derzeit nicht praktiziert, ist jedoch grundsätzlich möglich.

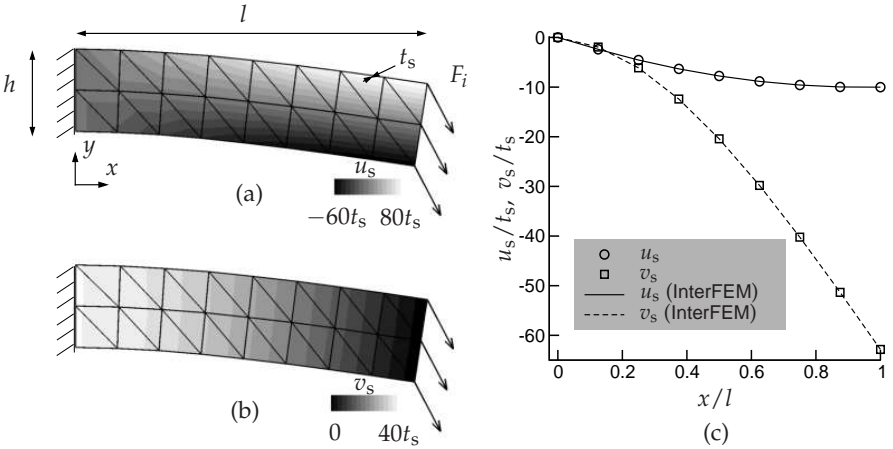
#### 4.6.3. Validierung des Strukturverfahrens

Da das Schalenelement das Scheiben- sowie das Plattenelement vereinigt, ist es in der Lage einzig diese Elementtypen zu repräsentieren, wenn die Lasten entsprechend angreifen. Existieren beispielsweise nur Kräfte in der Ebene des Elements, so verhält sich das Schalen- wie ein Scheibenelement. Ein analoges Szenario lässt das Schalen- als ein reines Plattenelement agieren. Im Folgenden werden drei Testfälle zur Validierung bzw. Verifizierung des Schalenelements gezeigt.

### Schalenelement als Scheibe

Als Testfall zur Verifizierung dient ein bei  $x = 0$  einseitig fest eingespannter ebener Kragträger, an dessen freiem ( $x = l$ ) Ende eine Linienlast angreift. Der Träger weist die Dimensionen  $l, l/h = 4, l/t_s = 1000$  auf und ist mit einem regelmäßigen, aus 32 Elementen bestehenden Netz diskretisiert. Die Linienlast wird auf die drei freien Knotenpunkte aufgeteilt, ihre Anteile betragen je  $F_i = (F, -2F)^T$ .

Die resultierenden Verschiebungen können mit Rechenergebnissen des Programms InterFEM [112] verglichen werden. Die Verformungen des Kragträgers sind in Abbildung 4.46a/b gezeigt, wobei die weiteren mechanischen Kenngrößen des Scheibenelements ( $E, \nu_s, t_s$ ) so gewählt sind, dass deutliche Verschiebungen auftreten. Die

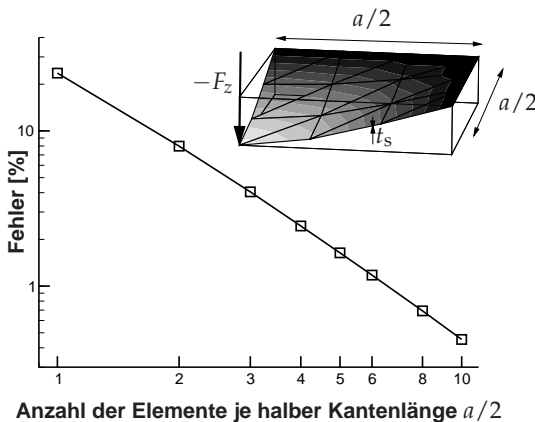


**Abb. 4.46:** Verformter Kragträger mit Darstellung der horizontalen (a) und der vertikalen Verschiebungen (b). Berechnete Verschiebungen der unteren Faser ( $y = 0$ ) im Vergleich mit der Lösung aus InterFEM.

Ergebnisse des Schalenelements entsprechen, bis auf Rechengenauigkeit denen, die mit dem Programm InterFEM erzeugt wurden (siehe Abbildung 4.46c). Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass das lineare Scheibenelement i. d. R. nicht dazu geeignet ist, derartige Biegeprobleme zu berechnen [23]. Daher wird dieser Testfall nur zur Verifizierung, nicht aber zur Validierung mit der Biegetheorie herangezogen. Die gleichen Ergebnisse werden erreicht, wenn die gesamte Konfiguration des Kragträgers beliebig im Raum verdreht angeordnet wird. Dies zeugt für eine fehlerlose Implementierung der Koordinatentransformation für die Elementsteifigkeitsmatrizen.

### Schalenelement als Platte

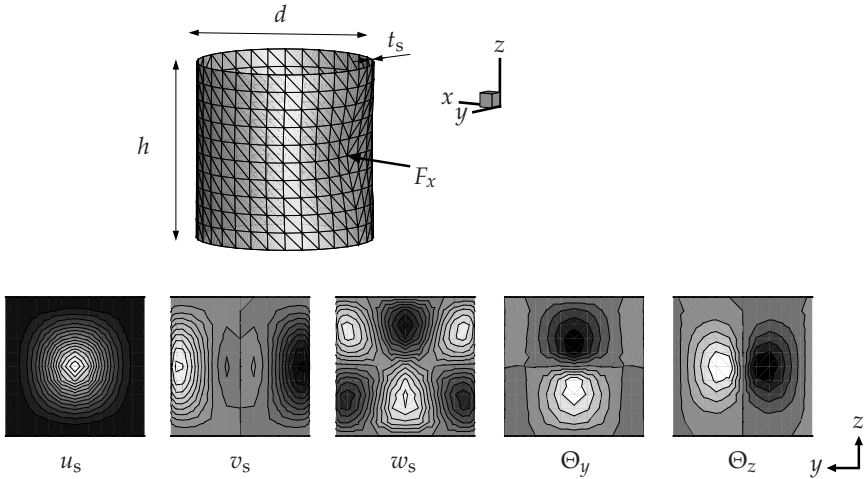
Um das Plattenelement zu validieren, wird als Testfall eine an allen Seiten lose gelagerte quadratische Platte (Kantenlänge  $a$ ) mit einer Einzellast  $-F_z$  im Zentrum genutzt. Für diese s. g. *Naviersche Platte* kann mit Hilfe eines doppelten Fourierreihenansatzes eine analytische Lösung gefunden werden [116]. In einem Konvergenztest wird der Fehler zwischen der analytischen und der berechneten Lösung für die maximale Durchbiegung in der Mitte der Platte betrachtet. Im oberen Abschnitt von Abbildung 4.47 ist ein Quadrant der Platte und die angreifende Punktlast gezeigt. Das Verhältnis zwischen der Kraft und der Plattensteifigkeit  $\kappa = (E t_s^3) / 12(1 - \nu_s^2)$  ist so gewählt, dass ebenfalls deutliche Verformungen auftreten. Mit der steigenden Anzahl verwendeter Elemente konvergiert der Fehler quadratisch gegen die analytische Lösung. Auch der Plattentestfall kann durch eine Transformation beliebig im Raum gelegen sein, ohne dass dies Einfluss auf die Ergebnisse hat.



**Abb. 4.47.:** Konvergenztest für das Plattenelement nach SPECHT [110]; berechnet mit dem eigenen Verfahren. Art der Darstellung nach STEINKE [112].

### 3D Schalenelement

Das vollständige Schalenelement wird ebenfalls mit Ergebnissen des Programms InterFEM [112] verifiziert. Als Testfall dient ein an den Stirnseiten ( $z = 0$  und  $z = h$ ) fest eingespannter Hohlzylinder mit dem Größenverhältnis  $h/d = 1$ . Im Zentrum  $z = h/2$  ist senkrecht zur Oberfläche des Zylinders eine Punktlast  $F_x$  aufgeprägt. Abbildung 4.48 zeigt die übertrieben dargestellten Verformungen des Zylinders sowie die einzelnen Komponenten der Verschiebungen und Verdrehungen. Die gleiche Konfiguration wird mit der Software InterFEM berechnet, wobei die Ergebnisse auch hier exakt übereinstimmen. Ein bei den Schalenelementen bekanntes Problem sind s. g. *Shear-Locking* Phänomene. Dabei reagiert das Element hinsichtlich der



**Abb. 4.48:** Testfall zur Verifizierung des Schalelements: Verschiebungen und Verdrehungen eines Zylinders unter einer zentralen Punktlast. Berechnet mit dem eigenen Verfahren.

Schubverformung unphysikalisch steif, so dass die Biegeverformung dominiert. Dieses Verhalten kommt bei sehr dünnen Elementen  $t_s \rightarrow 0$  vor, da die Biegesteifigkeit ( $\sim t_s^3$ ) schneller abfällt als die Schubsteifigkeit ( $\sim t_s$ ). Andererseits erwartet die Theorie jedoch, dass das Element dünn bezüglich seiner eigentlichen Ausdehnung ist. In der eigenen Implementierung, sowie in InterFEM treten Shear-Locking Probleme gleichermaßen bereits für Dicken von  $t_s/h = 0.01$  auf. Dies gilt es bei der Wahl der Parameter zu beachten.

#### 4.6.4. Kopplungsalgorithmus

Es wird eine iterative Kopplung nach dem Vorbild von YIGIT et al. [131] zwischen dem CFD und dem FEM Verfahren realisiert. Damit ist der Ansatz zwar beschränkt auf schwach gekoppelte Systeme, vorteilhaft ist allerdings der Umstand, dass beide Löser unabhängig voneinander agieren. Außerdem ist die Implementierung wesentlich einfacher als bei s. g. *monolithischen* Kopplungsansätzen.

Der Strömungslöser spielt in diesem Zusammenhang die führende Rolle, so dass dieser den Strukturlöser zu gegebenem Zeitpunkt aufruft. Die Kopplung ist in Abbildung 4.49 skizziert. Der Ablauf beginnt wie bei einer herkömmlichen Strömungsberechnung. Nach einer gewissen Anzahl an inneren Iterationen wird dann der Strukturlöser ausgeführt. Ihm wird das zuvor berechnete Kraftfeld und das aktuelle Oberflächengitter übergeben. Da je Dreieckselement ein Kraftvektor berechnet wird, der im Zentrum des Elements angreift, müssen die Kräfte zunächst auf die

Knotenpunkte interpoliert werden. Dabei werden die drei betreffenden Knoten jeweils mit einem Drittel der Elementlast beaufschlagt. Die Flächenlasten der Elemente rufen neben den Kräften auch Momente hervor [112], die jedoch momentan vernachlässigt werden, da hierfür eine aufwändige Integration über das Dreieckselement erforderlich wird. Mit den vorgegebenen Randbedingungen sowie den mechanischen Eigenschaften der Elemente wird anschließend das Deformationsfeld des Oberflächengitters berechnet. Durch eine Addition der Verschiebungen auf die

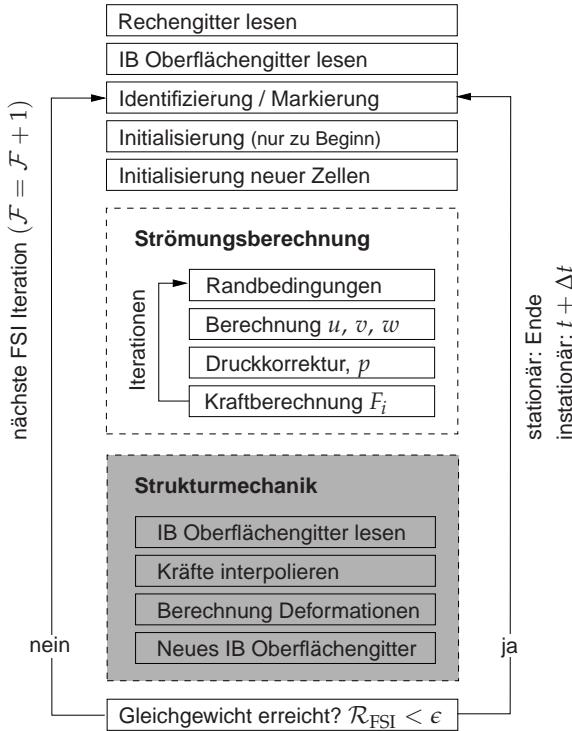


Abb. 4.49.: Iterative Kopplung zwischen Strömungs- und Struktursimulation.

Knotenpunkte des Oberflächengitters wird die neue Geometrie bestimmt. Um die Konvergenz des Iterativen Vorgangs zu kontrollieren, wird ein entsprechendes Residuum  $\mathcal{R}_{FSI}$  formuliert. Dieses bildet sich aus einer Norm der Kräftedifferenzen zweier aufeinander folgender Iterationen  $\mathcal{F}$  und  $\mathcal{F} + 1$ :

$$\mathcal{R}_{FSI} = \sum_{p=1}^{p_{\max}} \sqrt{\sum_{i=1}^3 \left( F_i^{\mathcal{F}+1} - F_i^{\mathcal{F}} \right)^2}^p \quad (4.49)$$



In der Gleichung (4.49) stellen  $F_i$  die Komponenten der Kräfte dar, die in dem Knotenpunkt  $p$  angreifen. Aus der Kraftdifferenz zweier folgender Iterationen wird der Absolutbetrag gebildet, der dann für alle Knotenpunkte  $p = 1$  bis  $p_{\max}$  aufsummiert werden. Stellt sich mit fortschreitender FSI Iteration  $\mathcal{F}$  ein Gleichgewicht zwischen beiden berechneten Lösungen ein, so sinkt die Kraftdifferenz in allen Punkten und das Residuum  $\mathcal{R}_{\text{FSI}}$  konvergiert gegen Null. Für den Fall, dass die Verformungen im Verhältnis zur Größe der umliegenden Strömungszellen pro Zeitschritt sehr groß werden, wird ein Relaxieren der Verformungen notwendig.



## 5. Anwendung des Verfahrens

Dieses Kapitel umfasst die Anwendung des umgesetzten Verfahrens anhand ausgewählter Praxisbeispiele. Dabei handelt es sich um Simulationen, bei denen sich der Einsatz der Immersed Boundary Methode aus folgenden Gründen als sinnvoll herausgestellt hat: Zum einen sind die um- oder durchströmten Geometrien von hoher Komplexität. Des Weiteren sind einige von ihnen zusätzlich zeitlich veränderlich, also dynamisch. Andererseits sind alle beschriebenen Anwendungsfälle laminarer Natur und es herrschen moderate Reynolds-Zahlen. Auf diese Weise kann die Verwendung von kartesischen Rechengittern, welche trotz adaptiver Gittermethoden Defizite in der Auflösung von Grenzschichten aufweisen, gerechtfertigt werden. Die im Folgenden vorgestellten Praxisfälle sind:

1. Strömungen in den zentralen Atemwegen
2. Strömung um einen elastischen Zylinder

Die Strömungsvorhersage in den dynamischen Atemwegsgeometrien war ursprünglich eine der Beweggründe für die Implementierung des hier vorgestellten Verfahrens. Daher spielt diese Anwendung eine besondere Rolle. Ein völlig anderer Anwendungsfall, bei dem die Interaktion zwischen Fluid und Struktur berücksichtigt wird, ist die Strömung um einen elastischen Zylinder.

### 5.1. Strömungen in den zentralen Atemwegen

*„Clearly, the fluid dynamics and biomechanics phenomena occurring in a complete set of realistic pulmonary airways cannot yet be simulated [...]“* KLEIN-STREUER und ZHANG [68]

Die Vorhersage der Strömungsphänomene innerhalb der menschlichen Atemwege ist insbesondere von medizinischem Belang, denn das System *Atmung* ist bis heute nicht vollständig verstanden. Hinzu kommen praktische Aspekte, bei denen die Strömungsvorgänge eine relevante Rolle spielen, wie z. B. die Frage nach der lokalen Verteilung aufgenommener Partikel oder Aerosole [68, 89, 134], seien es Medikamente oder Schadstoffe. Ein Thema, bei dem ein detaillierter Einblick in die Strömungsphänomene von großer Bedeutung ist, stellt das Gebiet der künstlichen Beatmung dar. Im Fall einer akuten Lungenerkrankung (beispielsweise ALI<sup>1</sup>, COPD<sup>2</sup> oder ARDS<sup>3</sup>) ist die künstliche Beatmung der einzig lebenserhaltende Ausweg für

---

<sup>1</sup>Acute Lung Injury

<sup>2</sup>Chronic Obstructive Pulmonary Disease

<sup>3</sup>Acute Respiratory Distress Syndrome

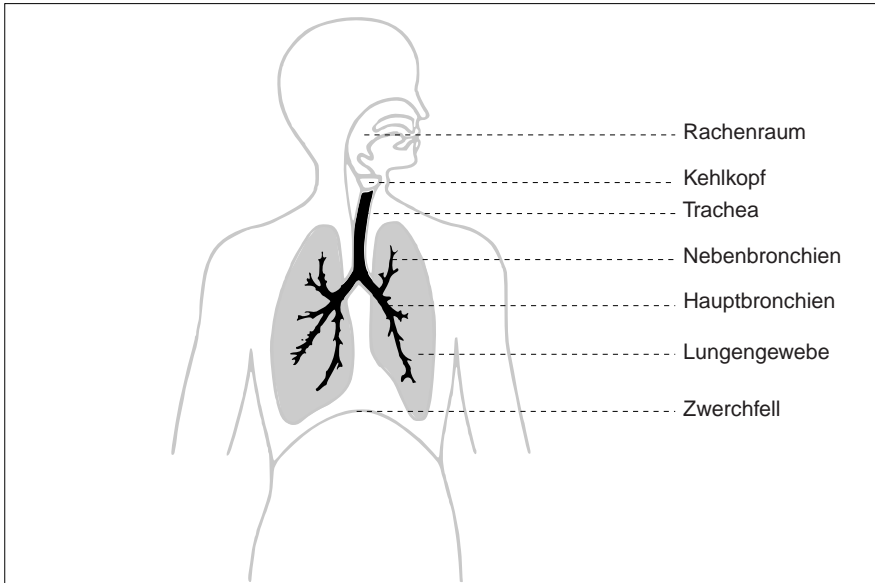
den Patienten. Dabei wird die Zufuhr der ansonsten selbstständig eingeatmeten Luft von einem Beatmungsgerät übernommen. Dies kann auf unterstützende Weise geschehen oder aber das Beatmungsgerät übernimmt die Atmung vollständig. Die richtige Wahl der *Beatmungsparameter*, die in Form eines Beatmungsprotokolls festgelegt werden, ist hierbei entscheidend für den Erfolg der Therapie. Das aufgeprägte Gasvolumen, dessen zeitlicher Verlauf, die Atemfrequenz oder der nach dem Ausatmen verbleibende Druck in den Atemwegen (EEP) sind nur einige der zahlreichen Stellgrößen. Das Problem bei dieser Vielfalt ist, die bestmögliche Konfiguration für den individuellen Patienten zu ermitteln. Die heutige Wahl der Beatmungsparameter basiert zumeist auf empirischen Ansätzen und klinischen Studien. Eine physikalisch motivierte Parameterwahl auf Basis der individuell vorherrschenden Gegebenheiten existiert hingegen nicht [37].

### 5.1.1. Hintergrund und Vorgehen

Die Hauptaufgabe der Lunge ist die Anreicherung des Blutes mit dem Sauerstoff aus der Atemluft. Über den Rachenraum, die Trachea, die Haupt- und die Nebenbronchien sowie weitere Verzweigungen bis hin zur 17. Generation erreicht die Atemluft die Alveolen (siehe Abbildung 5.1). Hier gelangt der Sauerstoff durch Diffusionseffekte in die Blutbahn des Körpers. Um die Lungen während der Einatmung (*Inspiration*) mit Atemluft zu befüllen, bewegt sich das Zwerchfell abwärts, gleichzeitig hebt sich Brustkorb an. Durch das Aufweiten des Lungengewebes entsteht ein Unterdruck in Bezug auf die Umgebung, so dass die Luft in die Lungen strömt [72]. Bei der Phase der Ausatmung (*Expiration*) sind die Bewegungsabläufe des Zwerchfells sowie des Brustkorbs entgegengesetzt, so dass die Luft aus den Atemwegen in die Umgebung gelangt. Dabei verbleibt stets ein Teil des Atemgases (*Totraum*) in den zentralen und unteren Atemwegen.

Diese vereinfachte Beschreibung des Atemablaufs enthält in Hinblick auf seine Simulation bereits wichtige Aussagen: Zum einen ist der strömungsmechanische Gesichtspunkt nur einer unter vielen physikalischen Vorgängen, die während der Atmung allesamt *gekoppelt* auftreten. Vor allem die sich verändernde Geometrie des Trachealbaums und des Lungengewebes bestimmen maßgeblich die Strömung des Atemgases. Andererseits finden die verschiedenen Phänomene auf ganz unterschiedlichen *Größenskalen* statt. Während die Trachea einen Durchmesser von etwa 2 cm aufweist, messen die Alveolen nur etwa 50 bis 250  $\mu\text{m}$ . Unabhängig davon welche Teilbereiche bei einer Simulation berücksichtigt werden sollen, es stellt sich immer das Problem, dass geeignete Rand- und Anfangsbedingungen gefunden und definiert werden müssen.

Diese Arbeit konzentriert sich ausschließlich auf die Strömungssimulation in den zentralen Atemwegen. Dazu zählen neben der Trachea die Haupt- und Nebenbronchien sowie weitere Verzweigungsgenerationen. In den folgenden Abschnitten wird die Strömungssimulation dreier unterschiedlicher Fälle beschrieben, verglichen und diskutiert. Die Anwendungsfälle unterscheiden sich hauptsächlich in den Geometrien. Neben einer generischen Atemwegsgeometrie werden die realen Bronchial-



**Abb. 5.1.:** Begrifflichkeiten aus der Atemphysiologie; die zentralen Atemwege sind schwarz hervorgehoben. Rekonstruiert nach [www.bio.vobs.at/physiologie/a-atmung-kreislauf.htm](http://www.bio.vobs.at/physiologie/a-atmung-kreislauf.htm) (01.07.2012).

bäume eines Menschen und eines Schweins untersucht. Um diese räumlich wie zeitlich zu erfassen und derart aufzubereiten, dass eine Simulation möglich wird, ist die Vorarbeit von Experten aus den Bereichen Radiologie, Anästhesiologie und Medizin-Informatik zwingend erforderlich [34, 35]. Mit der Komplexität der Geometrie steigen die Ansprüche an das numerische Verfahren hinsichtlich Robustheit und Stabilität. Aber auch die Anzahl der zur hinreichenden Auflösung benötigten Gitterzellen steigt mit der Komplexität an.

Die ersten Untersuchungen werden an einem rein generischen, statischen Modell der Atemwege nach WEIBEL [127] durchgeführt. Es folgt eine Analyse der Strömung durch einen starren menschlichen Tracheobronchialbaum, dessen Geometrie auf Ergebnissen der Volumen Computer Tomographie (VCT) beruht. Schließlich wird der unter der Spontanatmung bewegte Trachealbaum eines Schweins untersucht. Diese Geometrien stammen aus zeitlich aufgelösten VCT Experimenten, wodurch die Dynamik des Trachealbaums aufgezeichnet wurde. Der interdisziplinäre Arbeitsablauf zur Erfassung, Auf- und Nachbereitung der realen Lungengeometrien ist im Anhang unter B.1 beschrieben.

Von der Gliederung her werden die drei Anwendungsfälle aus dem Bereich der Atemwegsströmung nicht nacheinander getrennt vorgestellt. Stattdessen werden

sie in den folgenden thematischen Teilabschnitten gemeinsam berücksichtigt:

1. Atemwegsgeometrien
2. Randbedingungen und Setup
3. Ergebnisse
4. Diskussion

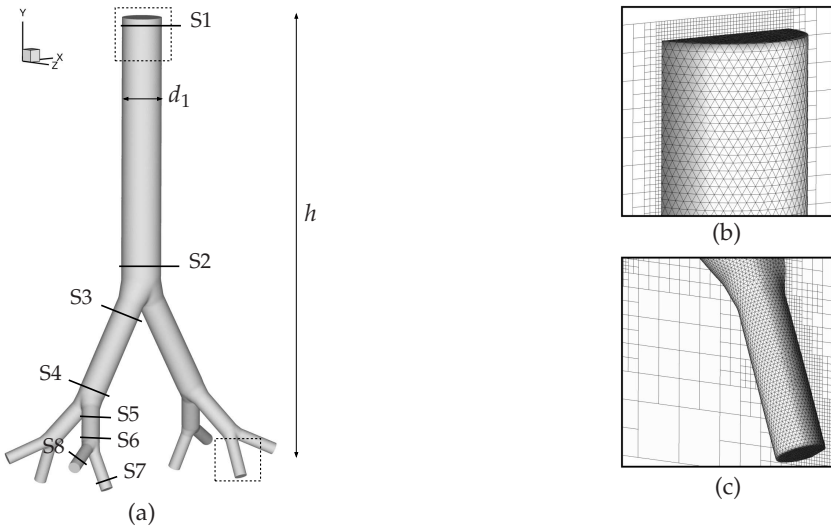
Zur eindeutigen Unterscheidung werden die drei Fälle mit WEIBEL, MENSCH bzw. SCHWEIN) gekennzeichnet. Anstatt sämtliche Ergebnisse zu präsentieren, soll der Fokus hier auf einigen wenigen, dafür repräsentativen Beispielen liegen. Vom Weibel-Modell sowie der realen Lungengeometrie vom Menschen werden jeweils stationäre Simulationsergebnisse während der Phase maximaler Inspiration gezeigt. Beim Trachealbaum des Schweins werden die voll dynamischen Ergebnisse (Wechsel zwischen Inspiration und Expiration unter gleichzeitiger Deformation des Trachealbaums) dargelegt.

### 5.1.2. Atemwegsgeometrien

#### Generisches Lungenmodell (WEIBEL)

Eine vereinfachte, generische Geometrie eines Tracheobronchialbaums ist durch das Lungenmodell nach WEIBEL [127] gegeben. Es beschreibt die zentralen Atemwege durch zylindrische Rohrsegmente, die sich unter einem Winkel ( $\alpha$ ) verzweigen, wobei die Durchmesser ( $d_i$ ) und die Segmentlängen ( $l_i$ ) mit jeder Generation ( $i$ ) abnehmen (siehe Tabelle 5.1). Nicht eindeutig definiert sind hingegen die Übergänge an den Verzweigungen, so dass es in der Umsetzung eines Weibel-Modells gewisse Freiheiten gibt. Die Eigenschaften dieses Modells basieren auf empirischen Untersuchungen menschlicher Atemwege, so dass es einem realen Trachealbaum durchaus nahe kommt. Das hier vorliegende Modell (siehe Abbildung 5.2) weist eine Verzweigungstiefe von vier Generationen auf und ist identisch mit der Geometrie von KABILAN et al. [59]. Aus Gründen der Symmetrie, die das Weibel-Modell besitzt, sind mit den in Abbildung 5.2a eingezeichneten Schnittebenen alle relevanten Bereiche abgedeckt.

Obwohl das Modell wenig detailreich ist, so ist es für die hier vorliegende Arbeit doch von besonderer Bedeutung. Zum einen ist das Oberflächengitter sehr homogen und es existieren weder spitze Winkel zwischen benachbarten Dreiecken noch weist es Hinterschneidungen o.ä. kritische Eigenschaften auf (siehe Abbildung 5.2b, 5.2c). Zum anderen ist das Modell räumlich sehr kompakt, was sich in der Anzahl der benötigten Rechenzellen niederschlägt. Da das Weibel-Modell in anderen Arbeiten [59, 134] bereits ausführlich analysiert wurde, kann dessen Untersuchung auch als weiterer Validierungsfall betrachtet werden. Aus den genannten Gründen und den geringen Anforderungen hinsichtlich der Rechenzeiten, diente das Weibel-Modell stets als Testfall für alle relevanten programmtechnischen Neuerungen. Das kartesische Rechengitter, welches als Schnittdarstellung in den Abbildungen 5.2b, 5.2c zu sehen ist, besitzt fünf Gitterlevel  $L$ . Diese wurden vor der Berechnung des



**Abb. 5.2.:** Vier Generationen Weibel-Modell mit seinen geometrischen Eigenschaften und den definierten Schnittebenen S1 bis S8 (a). Detailausschnitte des Oberflächen- und des Rechengitters (b), (c).

Bezeichnung	Größe
Durchmesser	$d_i \approx d_1, 0.68 d_1, 0.45 d_1, 0.19 d_1$
Längen	$l_i \approx 7 d_1, 3 d_1, 1.5 d_1, 1 d_1$
Höhe	$h \approx 12 d_1$
Verzweigungswinkel	$\alpha = 60^\circ$
Verzweigungstiefe	4 Generationen
Anzahl Ausströmränder	$N^{\text{out}} = 8$
Anzahl Dreieckselemente	$N^\Delta \approx 92\,000$
Anzahl kart. Rechenzellen	$N^C \approx 852\,000$

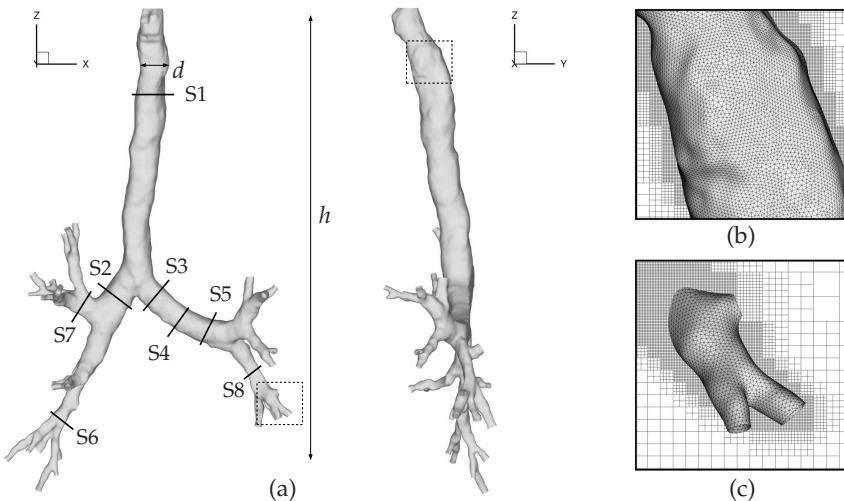
**Tab. 5.1.:** Geometrische Eigenschaften des untersuchten Weibel-Modells.

Strömungsfelds adaptiv in Bezug auf den Wandabstand erzeugt. Alle von der Geometrie angeschnittenen Zellen besitzen das maximale Gitterlevel.

### Menschlicher Trachealbaum (MENSCH)

Die in Abbildung 5.3a dargestellte Geometrie zeigt die Oberflächenbeschreibung eines realen menschlichen Trachealbaums. Der Zeitpunkt dieser Momentaufnahme entspricht der Phase maximaler Inspiration. Die radiologische Bildgebung am lebenden (*in-vivo*) Menschen sowie die Segmentierung der VCT Daten wurden durch die Projektpartner des Deutschen Krebsforschungszentrums (DKFZ) in Heidelberg durchgeführt. Die Nebenbronchien der höchsten Generation sind durch den im Abschnitt B.1.2 vorgestellten Prozess beschnitten und mit definierten Flächen für die Ausströmränder versehen. Gleiches gilt für die Trachea, wohingegen an dieser Stelle der Einströmrand vorgegeben wird. Die maximale Verzweigungstiefe bei diesem Trachealbaum beträgt fünf Generationen; weitere Parameter finden sich in Tabelle 5.2.

Das zugehörige kartesische Rechengitter, welches für zwei Ausschnitte in den Abbildung 5.3b, 5.3c zu sehen ist, weist sieben Gitterlevel auf, die vor der Simulation basierend auf dem Wandabstand adaptiv erzeugt wurden. Sämtliche von der Geometrie geschnittenen Zellen besitzen das maximale Gitterlevel.



**Abb. 5.3.:** Geometrie des menschlichen Tracheobronchialbaums, und Definition der Schnittebenen S1 bis S8 (a). Detailausschnitte des Oberflächen- und des Rechengitters (b), (c).



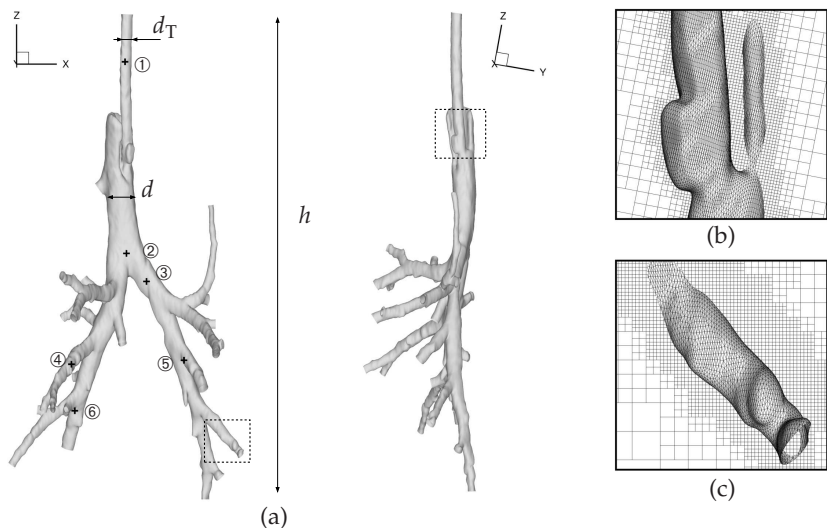
Bezeichnung	Größe
Ersatzdurchmesser Trachea	$d \approx 16 \text{ mm}$
Höhe	$h \approx 240 \text{ mm}$
Verzweigungstiefe	5 Generationen
Anzahl Ausströmränder	$N^{\text{arr}} = 32$
Anzahl Dreieckselemente	$N^{\Delta} \approx 240\,000$
Anzahl kart. Rechenzellen	$N^C \approx 16\,900\,000$

**Tab. 5.2.:** Geometrische Eigenschaften des menschlichen Trachealbaums.

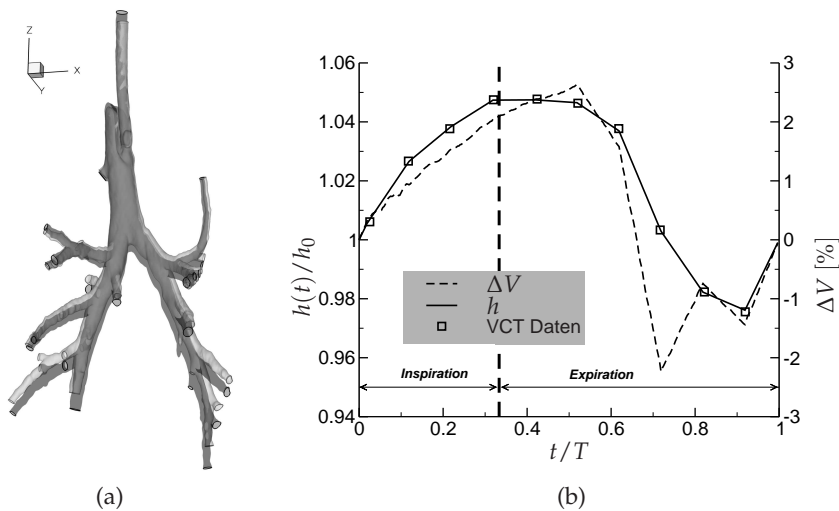
### Dynamischer Trachealbaum eines Schweins (SCHWEIN)

Die folgende Lungengeometrie (siehe Abbildung 5.4a) stammt von einem Hausschwein. Im Unterschied zu den zuvor gezeigten Geometrien wurden bei diesen Untersuchungen mittels VCT mehrere Oberflächen in-vivo für einen vollständigen Atemzyklus gewonnen. Während des Experiments [74] wurde das Hausschwein unter Narkose künstlich beatmet. Die lokale Zufuhr des Atemgases erfolgte über einen Endotrachealtubus, der ebenfalls Teil der segmentierten Daten ist. In Abbildung 5.4a im oberen Drittel ist dieser deutlich zu erkennen. Zur Fixierung des Tubus am Übergang zur Luftröhre wird eine aufblasbare Manschette verwendet, die in Abbildung 5.4b ebenfalls zu erkennen ist. Im Inneren der Geometrie ist die Weiterführung des Tubus nicht vorhanden und geht stattdessen in die Oberfläche der Trachea über. Die Segmentierungstiefe bei diesem Trachealbaum umfasst vier Generationen. Das medizinische Experiment sowie die Segmentierung der VCT Daten erfolgte über die Kooperationspartner vom DKFZ in Heidelberg. Weitere Eigenschaften zum Oberflächen- bzw. Rechengitter finden sich in Tabelle 5.3. Die Dauer eines Atemzyklus (Inspiration, Expiration) beträgt  $T = 3 \text{ s}$ . Abbildung 5.5a zeigt die maximal auftretenden Deformationen anhand zweier Oberflächenkonfigurationen. In dem Diagramm aus Abbildung 5.5b sind die vertikalen Verschiebungen für einen einzelnen Punkt aufgetragen. Dieser Punkt ist am untersten Ausströmrand gelegen. Da eine zeitliche Auflösung des gesamten Atemzyklus mit nur zehn Zeitschritten in der Simulation unmöglich ist, werden weitere Zwischenstufen der Geometrie durch eine lineare Interpolation erzeugt (vergleiche Abschnitt B.1.3). Die Geschwindigkeiten, die bei der Wandbehandlung des eingetauchten Oberflächengitters berücksichtigt werden, bestimmen sich aus einem zentralen Differenzenschema (siehe Abschnitt 4.5.3). Durch die lineare räumliche Interpolation zwischen zwei Konfigurationen ergeben sich demzufolge stückweise konstante Geschwindigkeitsverteilungen.

Das adaptiv erzeugte kartesische Rechengitter besitzt ein maximales Gitterlevel von fünf. Um sämtliche Bereiche, in denen sich das Oberflächengitter während des Atemzyklus aufhält, bei der Adaption zu berücksichtigen, wurde im vorhinein ein einhüllendes Oberflächengitter erzeugt, welches alle zehn Gitterkonfigurationen umfasst.



**Abb. 5.4.:** Geometrie des Tracheobronchialbaums vom Schwein mit Kennzeichnung ausgewählter Beobachtungspunkte ① bis ⑥ (a). Detailausschnitte des Oberflächen- und des Rechengitters (b), (c).



**Abb. 5.5.:** Maximale Oberflächen deformation während eines Atemzyklus  $T$  (a). Zeitliche Änderung der Höhe  $h$  sowie des Volumens (b).

Das Rechengitter ist vor der Simulation mit Hilfe des Wandabstands zur Einhüllenden adaptiv verfeinert worden. Dieses Vorgehen garantiert auch für den dynamischen Fall, dass stets das höchste Gitterlevel für alle vom Oberflächennetz angeschnittenen Zellen vorherrscht.

Bezeichnung	Größe
Durchmesser Endotrachealtubus	$d_T \approx 6 \text{ mm}$
Ersatzdurchmesser Trachea	$d \approx 13 \text{ mm}$
Höhe	$h \approx 255 \text{ mm}$
Volumen	$V \approx 31.6 \text{ ml}$
Verzweigungstiefe	4 Generationen
Anzahl Ausströmränder	$N^{ar} = 24$
Anzahl Dreieckselemente	$N^\Delta \approx 280\,000$
Anzahl kart. Rechenzellen	$N^C \approx 2\,060\,000$

**Tab. 5.3.:** Eigenschaften des Trachealbaums vom untersuchten Hausschwein.

### 5.1.3. Strömungszustand, Randbedingungen und Setup

#### Strömungszustand

Eine der wichtigsten Fragen vor der Simulation ist, welchen Charakter die Strömung in den Atemwegen besitzt. Nach KLEINSTREUER und ZHANG [68] finden sich bei der Betrachtung des gesamten Atemsystems sämtliche Strömungszustände: laminare, transitionelle wie auch turbulente. Die Durchströmung des Nasen- sowie des Rachenraumes [56] hat einen laminaren Charakter. Durch die starken Verengungen im Bereich des Kehlkopfes wird die Atemluft dort deutlich beschleunigt, wodurch es zu einem Umschlag in eine turbulente Strömung kommt [17], die in Abhängigkeit der individuellen Rahmenbedingungen (Geometrie, tatsächliche Geschwindigkeiten, etc.) bis zu den ersten Verzweigungen der Bronchien erhalten bleiben kann [6]. Für die Strömung in den höheren Verzweigungsgenerationen findet in jedem Fall eine Relaminarisierung statt. Zum Verständnis dazu kann aus den lokal vorhandenen mittleren Geschwindigkeiten und den Durchmessern eine *lokale Reynolds-Zahl* [68] gebildet werden. Diese nimmt mit der Verzweigungsgeneration ab und erreicht Werte von  $Re < 0.1$  für die Alveolarebene, in welcher der eigentliche Gasaustausch stattfindet. In anderen Arbeiten [14, 17] wird berichtet, dass die turbulenten Schwankungen bereits in den oberen Abschnitten der Trachea abklingen, wodurch es schließlich zu einer Relaminarisierung der Strömung kommt. In diesem Fall verschwindet die turbulente Viskosität bei RANS Simulationen [14]. Häufig wird daher die Strömung im Trachealbaum als laminar angenommen [59, 89, 109, 134], jedoch nicht ausnahmslos [6, 14, 38]. Eigene Untersuchungen mit dem kommerziellen Strömungslöser StarCD am Testfall MENSCH haben ge-

zeigt, dass bei Verwendung eines Turbulenzmodells die turbulente kinetische Energie schon kurz hinter dem Einströmrand stark abklingt [34]. Für die untersuchten Anwendungsfälle wird daher ebenfalls die Annahme einer laminaren Strömung gemacht.

### Auswahl der Randbedingungen

Die Oberfläche des eigentlichen Trachealbaums wird als Wandberandung umgesetzt. Für den dynamischen Fall (SCHWEIN) wird eine bewegte Wandrandbedingung angenommen. Das von der bewegten Wand verdrängte Volumen bleibt bei dieser Simulation unbeachtet, da die explizite Berücksichtigung dieser Anteile (siehe Abschnitt 4.5.3) erst zu einem späteren Zeitpunkt umgesetzt wurde. Komplexer gestaltet sich dagegen die Wahl der Randbedingungen für die Ebenen des Beschnitts im Bereich der Trachea und der Verzweigungen maximaler Generationstiefe. Für den Einlass kann ein herkömmlicher Einströmrand (vergleiche Abschnitt 4.5.1) genutzt werden. Das Aufprägen konventioneller Ausströmrandbedingungen (siehe Abschnitt 4.5.2) für eine Vielzahl von Auslässen gestaltet sich als problematisch. Ohne die Vorgabe des an jeder Ausflussebene vorliegenden Massenflusses ist das System nicht vollständig definiert. Auf diese Weise könnte sich die Strömung beispielsweise durch einen einzigen Zweig ausbilden, wohingegen durch die übrigen Verzweigungen kein Fluid fließen würde. Bei den dynamischen Simulationen kommt es durch den Übergang von der inspiratorischen zur expiratorischen Phase weiterhin zu einem Wechsel zwischen Ein- und Ausströmebene und umgekehrt.

Die Verwendung von Druckrändern sowohl an der Trachea als auch an den Nebenbronchien würde der Realität am nächsten kommen, sofern die dort vorzugebenden Drücke bekannt wären. Am oberen Ende der Trachea wäre die Vorgabe des Umgebungsdrucks naheliegend. Für die vorherrschenden Drücke an den Beschnittebenen der Nebenbronchien müssten jedoch spekulative Annahmen gemacht werden, da keinerlei verlässliche Messwerte verfügbar sind [11].

In Voruntersuchungen am Testfall MENSCH [34] wurde ein Ansatz getestet, bei dem zunächst sämtliche Randflächen der Nebenbronchien mit einem großen Volumen verbunden wurden. Durch die Deformation des Volumens (ähnlich dem natürlichen Atemablauf; siehe Abschnitt 5.1.1) stellt sich eine Strömungslösung ein, welche allein dazu verwendet wurde, um die auftretenden Massenflüsse über die Ausflussebenen zu ermitteln. Mit den daraus ermittelten Randwerten wurden anschließend die eigentlichen Untersuchungen getätigt. Die Ergebnisse zeigen jedoch nur geringe Unterschiede zu den Simulationen unter Verwendung einheitlicher Ausströmrandbedingungen, weshalb dieser Ansatz nicht weiter verfolgt wurde.

Im Folgenden werden sowohl für den Einlass an der Trachea als auch für die Auslässe Dirichlet-Randbedingungen unter der Vorgabe der Geschwindigkeiten verwendet. Ein derartiges Vorgehen findet sich u. a. in [11, 14]. Welche räumliche Geschwindigkeitsverteilung für die drei Anwendungsfälle zum Einsatz kommt, zeigt die Tabelle 5.4. Da über die Form der Strömungsprofile an den Auslässen keine Aussage getroffen werden kann, wird wie in [11, 14] für die Anwendungen MENSCH und

SCHWEIN ein Blockprofil angenommen. ZHANG et al. [135] untersuchten den Einfluss unterschiedlicher Einströmprofile an einem generischen Lungenmodell und kamen zu der Schluss, dass nach Möglichkeit ein realistisches Einströmprofil verwendet werden sollte. Die prinzipiell auftretenden Strömungsphänomene sind jedoch unabhängig vom Einströmprofil. Bei einem Laminarprofil erscheinen diese allerdings etwas ausgeprägter, als bei Anströmung durch ein Blockprofil [135]. Die Beeinflussung der grundsätzlich auftretenden Strömungsvorgänge in den Atemwegen durch gewisse Variationen in der Behandlung der Austrittsebenen fällt gering aus [35, 89], wodurch die zuvor beschriebene Herangehensweise gerechtfertigt wird. Durch die einheitliche Verwendung von Dirichlet-Rändern für die Ein- und Auslässe können die Geschwindigkeiten zeitabhängig variiert werden, wodurch die Atemzugkurve realisiert werden kann. Die aufzuprägenden Geschwindigkeiten an den Auslässen werden in Bezug auf die jeweilige Austrittsfläche ermittelt. Prinzipiell gilt für das gesamte System die Massenerhaltung.

$$\dot{V}^{IN} = \sum_{n=1}^{N^{OUT}} \dot{V}_n^{OUT} \quad (5.1)$$

Für einen beliebigen Auslass  $n$  ergeben sich die Volumenflüsse aus den Absolutgeschwindigkeiten  $|u_i^{OUT}|_n$  des Blockprofils und der zugehörigen Austrittsfläche  $A_n^{OUT}$ .

$$\dot{V}_n^{OUT} = A_n^{OUT} \cdot |u_i^{OUT}|_n \quad (5.2)$$

Der anteilige Massenfluss eines Austritts wird aus dem flächemäßigen Verhältnis zur Gesamtaustrittsfläche  $A_{ges}^{OUT}$  gebildet.

$$\dot{V}_n^{OUT} = \frac{A_n^{OUT}}{A_{ges}^{OUT}} \cdot \dot{V}^{IN} \quad (5.3)$$

Durch Einsetzen von (5.2) in (5.3) lassen sich schließlich die am Auslass herrschenden Geschwindigkeiten ableiten.

$$|u_i^{OUT}|_n = \frac{\dot{V}^{IN}}{A_{ges}^{OUT}} \quad (5.4)$$

### Dimensionslose Kenngrößen

Für die stationären Anwendungen (WEIBEL, MENSCH) ist die Strömung allein durch die Reynolds-Zahl festgelegt. Diese wird auf die mittlere Anströmgeschwindigkeit ( $\bar{u}^{IN}$ ) am oberen Ende der Trachea und den dort vorliegenden Durchmesser  $d$  bezogen:

$$Re = \frac{\bar{u}^{IN} d}{\nu} \quad (5.5)$$

Eine Ausnahme bildet der Anwendungsfall SCHWEIN, da hier die Zuströmung über den Endotrachealtubus erfolgt. Da die Reynolds-Zahl auch hier in der Trachea gelten soll, werden die dort herrschenden mittleren Geschwindigkeiten nach Stromfadentheorie abgeschätzt. Für die WEIBEL Geometrie ist der Durchmesser der Trachea

eindeutig definiert, für die Fälle MENSCH bzw. SCHWEIN wird ein entsprechender Ersatzdurchmesser ermittelt (siehe Anhang B.2). Die Reynolds-Zahl wird für alle Testfälle auf  $Re_d = 2000$  festgelegt, sie liegt damit im mittleren Bereich zwischen anderen Arbeiten [1, 89, 125].

Eine für oszillatorische Strömungen wichtige Kenngröße ist die *Womersleyzahl* [128]. Sie beschreibt das dimensionslose Verhältnis aus den transienten Trägheitskräften zu den viskosen Reibungskräften und ist definiert als:

$$Wo = \frac{d}{2} \sqrt{\frac{\omega}{\nu}}. \quad (5.6)$$

Dabei ist  $d$  ein lokaler Durchmesser,  $\nu$  die kinematische Viskosität und  $\omega$  die Kreisfrequenz einer innerhalb des Durchmessers pulsierenden Strömung. Bei gleichbleibender Womersleyzahl wird die dynamische Ähnlichkeit einer Strömung bewahrt. Unterhalb einer kritischen Grenze  $Wo^{\text{krit.}} \lesssim 3$  dominieren die viskosen Anteile gegenüber den Trägheitskräften und der Strömungszustand kann als *quasi stationär* betrachtet werden [18, 58]. Die bei der Anwendung SCHWEIN auftretende Womersleyzahl in der Trachea beträgt  $Wo = 2.43$  und bewegt sich damit im typischen Bereich der Normalatmung [1, 31]. In sämtlichen weiteren Verzweigungen fällt sie (durch die kleiner werdenden Durchmesser) geringer aus, so dass bezüglich der Pulsation von einem quasi stationären Verhalten ausgegangen werden kann.

Eine im Zusammenhang mit Atemwegsströmungen gelegentlich [1, 11] diskutierte Größe ist die s. g. *Dean-Zahl* [28].

$$De = Re \sqrt{\frac{d}{2 \cdot R}} \quad (5.7)$$

Die Dean-Zahl wird zur Charakterisierung von Strömungen in gekrümmten (Krümmungsradius  $R$ ) Rohren (Durchmesser  $d$ ) herangezogen. Oberhalb einer kritischen Dean-Zahl, die jedoch stark fallabhängig ist, treten Instabilitäten (s. g. *Deanwirbel*) auf, welche die Hauptströmung überlagern. Da für die Atemwege weder definierte Krümmungsradien noch kritische Dean-Zahlen angegeben werden können, spielt diese Kennzahl hier nur eine untergeordnete Rolle.

Tabelle 5.4 gibt die wichtigsten Parameter der drei untersuchten Fälle wieder.

### Generische Atemzugkurve

Während des medizinischen Experiments wurde das SCHWEIN unter einem inspiratorischen zu expiratorischen Verhältnis von 1:2 beatmet [74]. Da keinerlei spirometrische Aufzeichnung des Volumenstroms durchgeführt wurde, musste das Signal zur Modulation der Geschwindigkeiten an den Rändern generisch rekonstruiert werden. Die dimensionslose Amplitudenfunktion  $\gamma(t)$  der generischen Atemzugkurve, die aus stückweise harmonischen Funktionen gebildet wird, lautet:

$$\gamma(t) = \begin{cases} \gamma_{\text{in}} \sin\left(\frac{3\pi t}{T}\right) & \text{für } 0 < t < T/3 \\ \gamma_{\text{ex}} \sin\left(\frac{3\pi t}{2T} + \frac{\pi}{2}\right) & \text{für } T/3 < t < T. \end{cases} \quad (5.8)$$

Eigenschaft	WEIBEL	MENSCH	SCHWEIN
Einströmrand	Laminarprofil	Blockprofil	Blockprofil
Ausströmrand	Blockprofil	Blockprofil	Blockprofil
Reynolds-Zahl	$Re_{d_1} = 2000$	$Re_d = 2000$	$Re_d = 2000$
Womersley Zahl	–	–	$Wo = 2.43$
Tidalvolumen	–	–	$V_t = 203 \text{ ml}$
Dauer Atemzyklus	–	–	$T = 3 \text{ s}$

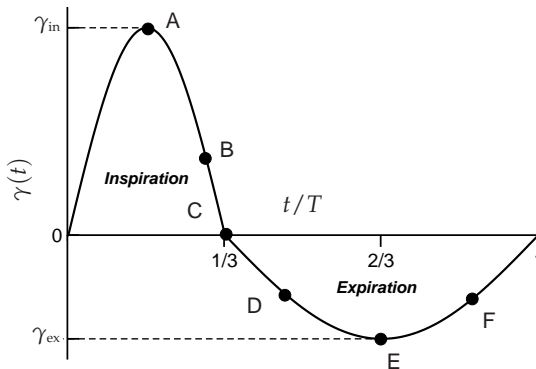
**Tab. 5.4.:** Vergleich wichtiger Parameter der untersuchten Anwendungsfälle.

Die Reynolds-Zahl von  $Re_d = 2000$  gilt für die Phase maximaler Inspiration. Dadurch sind die mittleren Geschwindigkeiten in der Trachea definiert, die Rückschluss über das s. g. *Tidalvolumen*  $V_t$  geben. Aus der Annahme, dass das eingeatmete dem ausgeatmetem Volumen entspricht, folgt:

$$\int_0^{T/3} \gamma_{\text{in}} \sin\left(\frac{3\pi t}{T}\right) dt = \int_{T/3}^T \gamma_{\text{ex}} \sin\left(\frac{3\pi t}{2T} + \frac{\pi}{2}\right) dt. \quad (5.9)$$

Dies führt auf ein Amplitudenverhältnis von  $\gamma_{\text{in}}/\gamma_{\text{ex}} = 2$ . Der zeitliche Funktionsverlauf der Atemzugkurve wird in Abbildung 5.6 verdeutlicht. Das Tidalvolumen bildet sich als zeitliches Integral über die Phase der Inspiration, wobei die Querschnittsfläche  $A^{\text{IN}}$  als konstant angenommen werden kann.

$$V_t = u^{\text{IN}} A^{\text{IN}} \int_0^{T/3} \gamma(t) dt \quad (5.10)$$



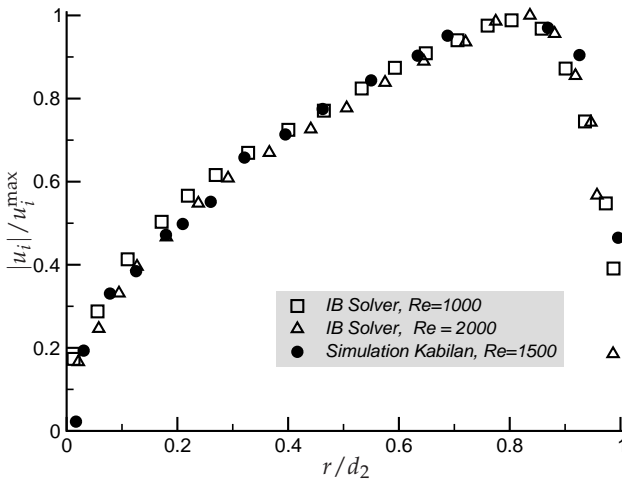
**Abb. 5.6.:** Rekonstruierte Atemzugkurve  $\gamma(t)$  mit einem in- zu expiratorischen Verhältnis von 1:2. Beobachtungszeitpunkte für die Auswertung: A ... F.

### 5.1.4. Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der drei verschiedenen Anwendungsfälle WEIBEL, MENSCH und SCHWEIN nacheinander präsentiert und beurteilt.

#### Ergebnisse WEIBEL

Abbildung 5.7 zeigt den Geschwindigkeitsverlauf über den Durchmesser des Schnittes S3 der ersten Verzweigung (vergleiche Abbildung 5.8) im Vergleich zu Ergebnissen von KABILAN et al. [59]. Zum einen zeigt sich, dass die Abhängigkeit von der Reynolds-Zahl sehr gering ist, und dass die Ergebnisse sehr gut mit denen von KABILAN et al. [59] übereinstimmen. Ein Grund für die gute Übereinstimmung liegt in die Tatsache, dass die selbe Geometrie verwendet wird. Auf den folgenden Sei-

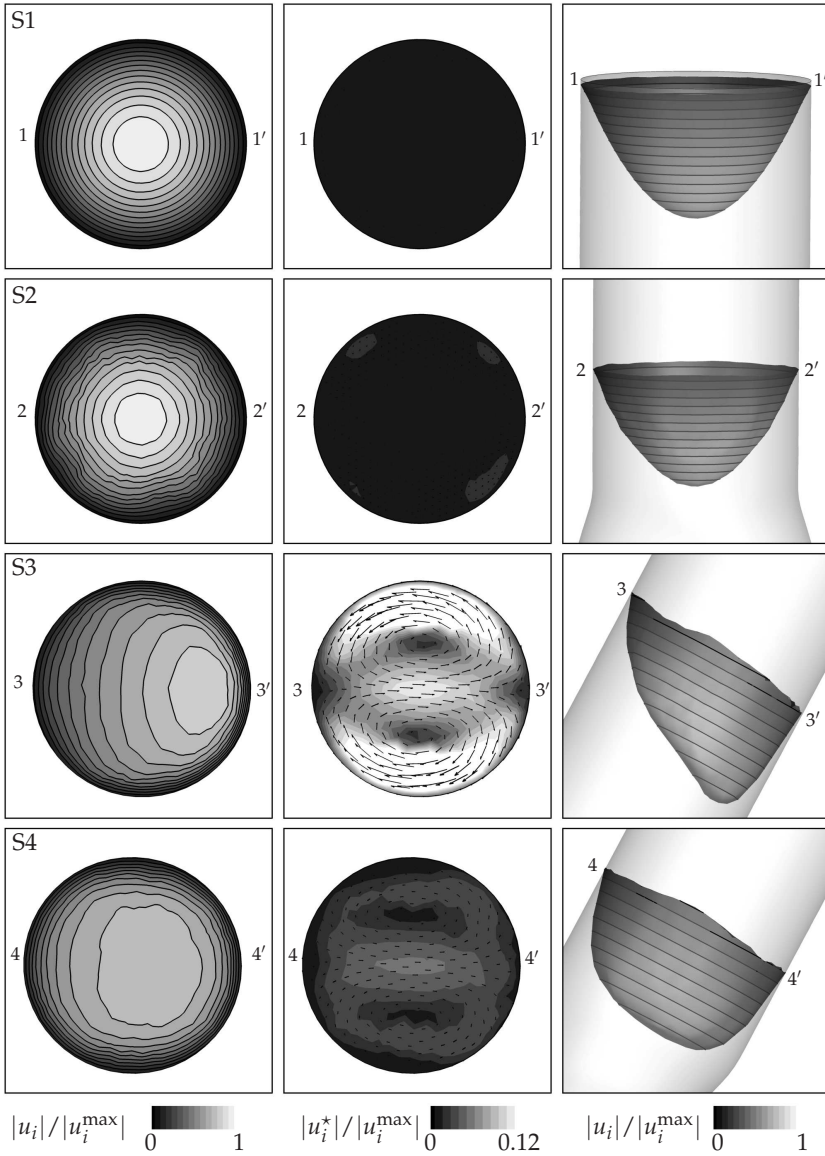


**Abb. 5.7.:** Vergleich des Geschwindigkeitsprofils im Zentrum des Schnittes S3 mit Simulationsergebnissen von KABILAN et al. [59].

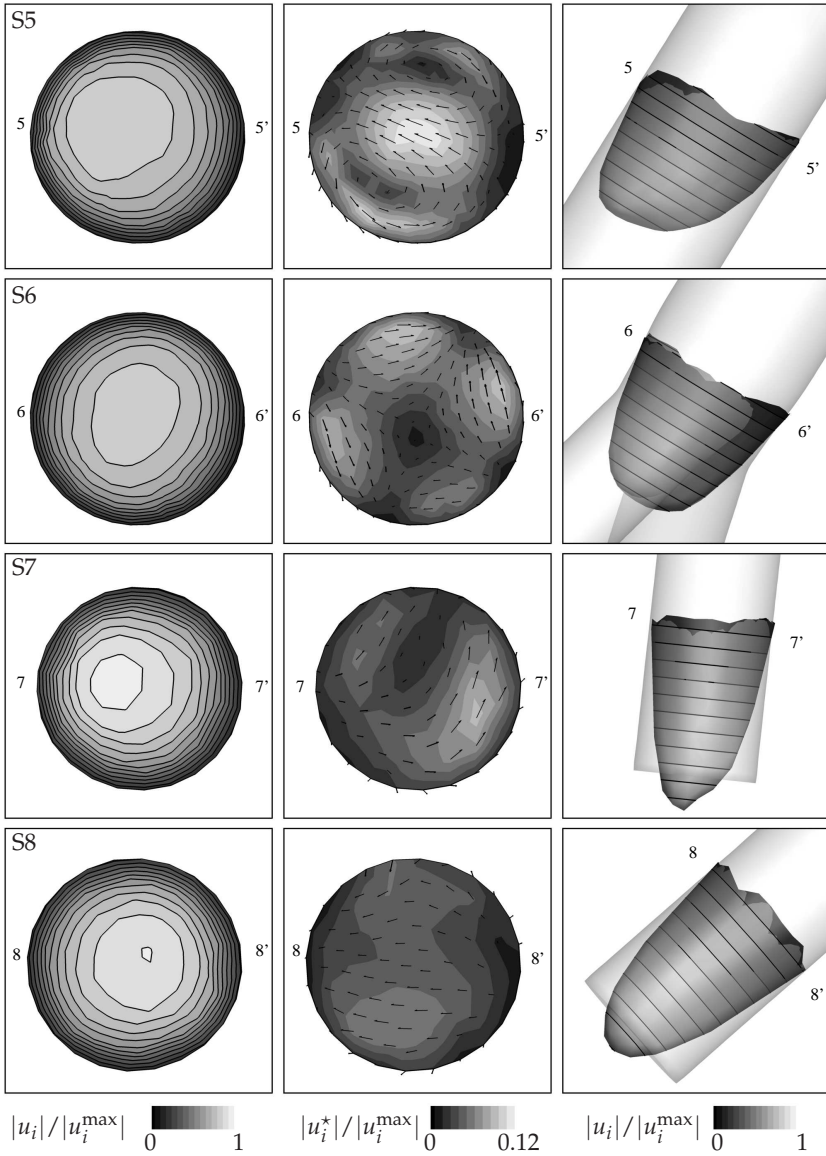
ten sind in den Abbildungen 5.8 und 5.9 die Strömungsprofile unterschiedlicher Schnittebenen dargestellt, die in Abbildung 5.2 definiert sind. Das jeweils linke Bild zeigt die Konturen der Absolutgeschwindigkeit und das rechte das Geschwindigkeitsprofil innerhalb der Geometrie. Das mittlere Bild visualisiert die Geschwindigkeitskomponenten  $u_i^*$  innerhalb der Schnittebene. Diese können bestimmt werden, indem der auf den Normalenvektor der Schnittebene ( $n_i$ ) projizierte Anteil vom Geschwindigkeitsvektor  $u_i$  abgezogen wird:  $u_i^* = u_i - (u_j n_j) n_i$ . Bis kurz vor der ersten Verzweigung bleibt das am oberen Ende der Trachea aufgeprägte Laminarprofil erhalten (S1, S2). Mit der ersten Verzweigung ändert sich das Strömungsprofil stark. Durch die symmetrische Aufteilung des Massenstroms in zwei Äste mit einem grö-



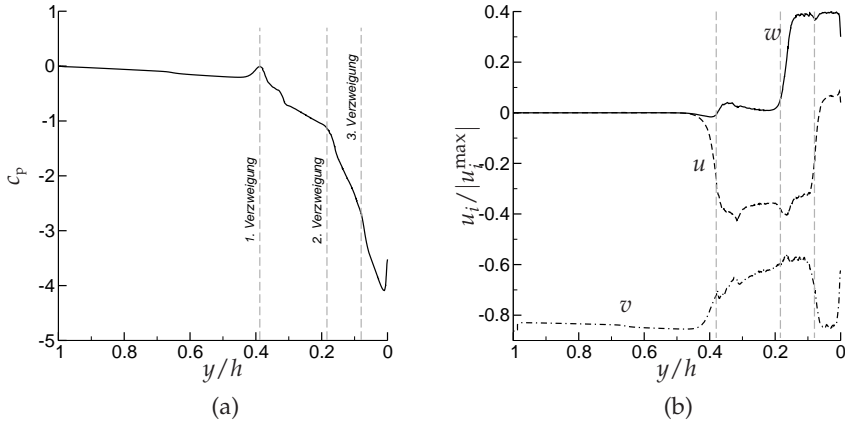
ßeren Gesamtquerschnitt sinken die Absolutgeschwindigkeiten. Das gleiche Phänomen findet sich ebenfalls in den folgenden Verzweigungen. Nach der ersten Verzweigung wird die Hauptströmung von sekundären Fluidbewegungen überlagert (siehe Anhang B.3). Der Schnitt S3 zeigt die deutliche Ausbildung zweier symmetrischer Deanwirbel, der durch die Umlenkung der Hauptströmung formiert werden. Diese klingen jedoch bis zur nächsten Betrachtungsebene (S4) wieder stark ab. Ein analoges Verhalten zeigt sich für alle weiteren Verzweigungen. Eine Generation weiter, in den Schnitten S5 bzw. S6, fällt die Fluidbewegung bedingt durch die Sekundärströmung der vorherigen Verzweigung nun nicht mehr symmetrisch aus. Jeweils direkt hinter der Verzweigung sind die Sekundärströmungseffekte am deutlichsten ausgeprägt und nehmen dann zum Ende des Zweiges hin wieder ab. Auch das Hauptströmungsprofil nähert sich dann wieder einem Laminarprofil. Die Schnittebenen S7 und S8 zeigen die zwei unterschiedlichen Auslässe, die anderen sechs verhalten sich spiegelsymmetrisch dazu. Diese Ebenen sind statt durch rotierende Bereiche mit einer gerichteten Querströmung überlagert. Im Vergleich zwischen den unterschiedlichen Schnitten ist festzuhalten, dass die Sekundärströmungen hinter der ersten Verzweigung am stärksten ausgeprägt sind. Der Grund dafür ist im voll ausgebildeten Geschwindigkeitsprofil (S2) vor der Verzweigung zu sehen. Für die weiteren Generationen ist das Profil vor den Verzweigungen im Zentrum bereits abgeflacht und nicht vollständig ausgebildet, so dass die maximalen Geschwindigkeiten und damit die sekundären Strömungseffekte (siehe S4, S6) geringer ausfallen. Ein sehr ähnliches Bild zeigt sich in den Ergebnissen von ZHANG und KLEINSTREUER [134] in einem Weibel-Modell. Darüber hinaus findet sich dieses Verhalten auch in den Anwendungsfällen MENSCH bzw. SCHWEIN. In der Darstellung 5.10 sind der Druckbeiwert  $c_p$  sowie die drei Geschwindigkeitsanteile entlang der vertikalen Ausdehnung einer Stromlinie gezeigt. Diese verläuft vom oberen Ende der Trachea ( $y/h = 1$ ) durch die Schnittebene S6 bis zu einem Auslass bei  $y/h = 0$ . Innerhalb der Trachea bleibt das vorgegebene Laminarprofil nahezu unverändert. Dies zeigt sich in einem konstanten Druckgradienten und den gleichbleibenden Geschwindigkeiten im Bereich vom Einlass bis etwa  $y/h = 0.5$ . Da die Stromlinie nicht im Zentrum des Geschwindigkeitsprofils verläuft, ist die Geschwindigkeit in  $y$ -Richtung ( $v$ ) geringer als die maximale Geschwindigkeit  $|u_i^{\max}|$ , die nur im Zentrum des Laminarprofils erreicht wird. Ein Maximum von  $c_p$  bei  $y/h \approx 0.4$  zeigt den Druckanstieg in Folge des nahegelegenen Staupunkts an der ersten Verzweigung. Anschließend fällt der Druck im Verlauf über die zweite bis vierte Generation überproportional stark ab. Der Grund hierfür ist die mit der Verzweigungstiefe zunehmende Wandreibung. Ab der ersten Verzweigung treten auch Geschwindigkeiten in den anderen Raumrichtungen auf. Erst kurz vor dem Auslass ( $y/h < 0.05$ ) zeigt sich der Einfluss der Ausströmrandbedingung. Hier wird die Strömung auf die mittlere Geschwindigkeit eines Blockprofils gezwungen. Der Einfluss dieses eher unphysikalischen Blockprofils am Auslass erstreckt sich nur auf einen begrenzten Bereich stromauf.



**Abb. 5.8.:** Konturplots der Absolutgeschwindigkeit  $|u_i|$  (links). Sekundäre Strömungseffekte: Absolutgeschwindigkeit  $|u_i^*|$  innerhalb der Schnittebenen (mitte); Geschwindigkeitsprofile der Schnittebene (rechts).



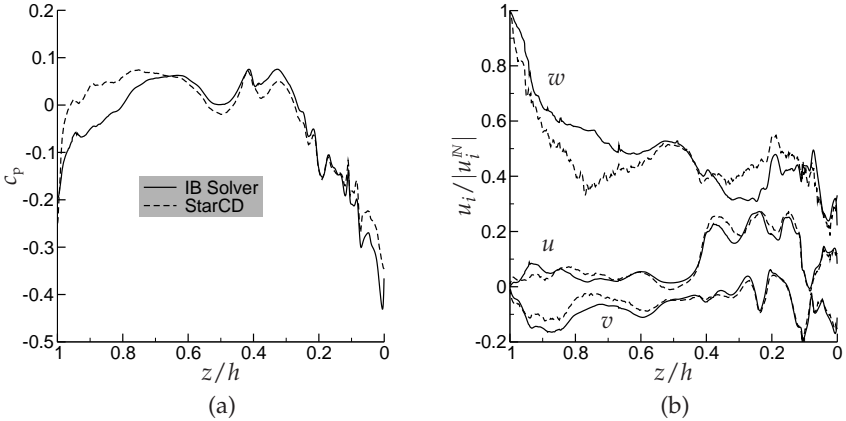
**Abb. 5.9.:** Konturplots der Absolutgeschwindigkeit  $|u_i|$  (links). Sekundäre Strömungseffekte: Absolutgeschwindigkeit  $|u_i^*|$  innerhalb der Schnittebenen (mitte); Geschwindigkeitsprofile der Schnittebenen (rechts).



**Abb. 5.10.:** Druckbeiwert  $c_p$  (a) und Geschwindigkeitskomponenten (b) entlang einer Stromlinie durch das Weibel-Modell.

## Ergebnisse MENSCH

Im Rahmen einiger Voruntersuchungen [35] wurde die stationäre inspiratorische Strömung im menschlichen Bronchialbaum mit der kommerziellen CFD Software StarCD simuliert. Die Diskretisierung erfolgte hierbei unter Verwendung unstrukturierter Tetraederelemente. In Abbildung 5.11 sind diese Ergebnisse mit denen des IB Strömungslöser gegenübergestellt. Gezeigt ist der Verlauf des Druckbeiwertes (Abbildung 5.11a) sowie die einzelnen Geschwindigkeitskomponenten (Abbildung 5.11b) entlang der vertikalen Koordinate einer einzelnen Stromlinie, die zwischen dem oberen Einlass ( $z/h = 1$ ) und dem untersten Auslass ( $z/h = 0$ ) verläuft. Der Druckverlust in der Trachea fällt wesentlich geringer aus, als in den Bereichen höherer Verzweigung, was durch die sinkenden Durchmesser und die damit verbundenen höheren Reibungsverluste zu begründen ist. Der anfänglich hohe Druckverlust von  $c_p \approx -0.2$  im Bereich  $z/h = 0.9$  bis  $1.0$  wird durch einen an dieser Position vorhandenen Knick in der Trachea hervorgerufen. Etwa in diesem Abschnitt ( $z/h = 0.7$  bis  $1.0$ ) finden sich auch die größten Abweichungen zwischen den beiden eingesetzten Verfahren. Durch die Ausrichtung der Geometrie zum Rechengitter dominieren in der oberen Hälfte die Geschwindigkeiten in  $z$ -Richtung, die jedoch geometriebedingt (die Querschnittsfläche der Trachea nimmt zunächst ab) abfallen. Angesichts der Abzweigungen, die entlang der Stromlinie gelegen sind, wird die Hauptströmung durch Geschwindigkeiten ( $u$  und  $v$ ) in den übrigen Koordinatenrichtungen beeinflusst. Hier ist die Übereinstimmung zwischen beiden Simulationen am größten. Durch die Kopplung zwischen Druck und Geschwindigkeiten finden sich die maximalen Abweichungen der Geschwindigkeiten an der Position der größten Druckabweichungen. Trotz der genannten Differenzen zeigt sich insgesamt

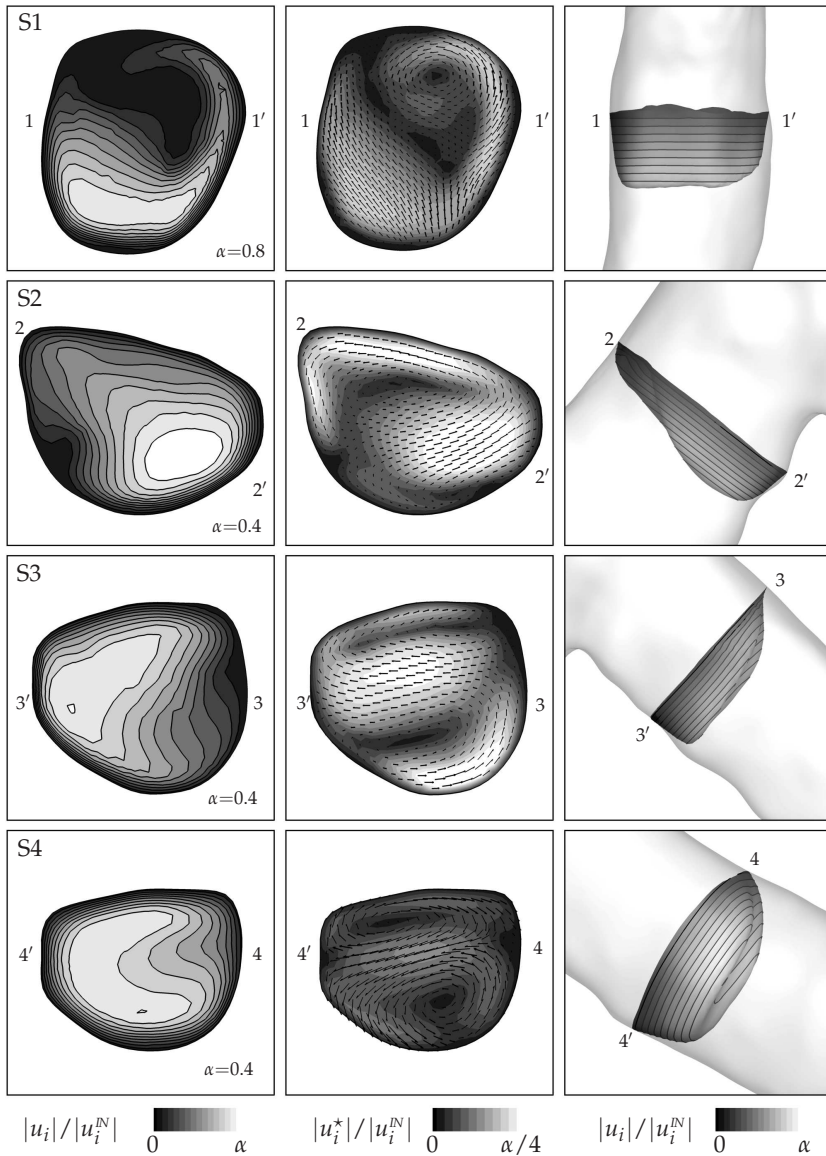


**Abb. 5.11.:** Druckbeiwert  $c_p$  (a) und Geschwindigkeitskomponenten (b) entlang einer Stromlinie durch den menschlichen Trachealbaum. Vergleich zwischen IB Strömungslöser und StarCD. Nach FREDERICH et al. [35]

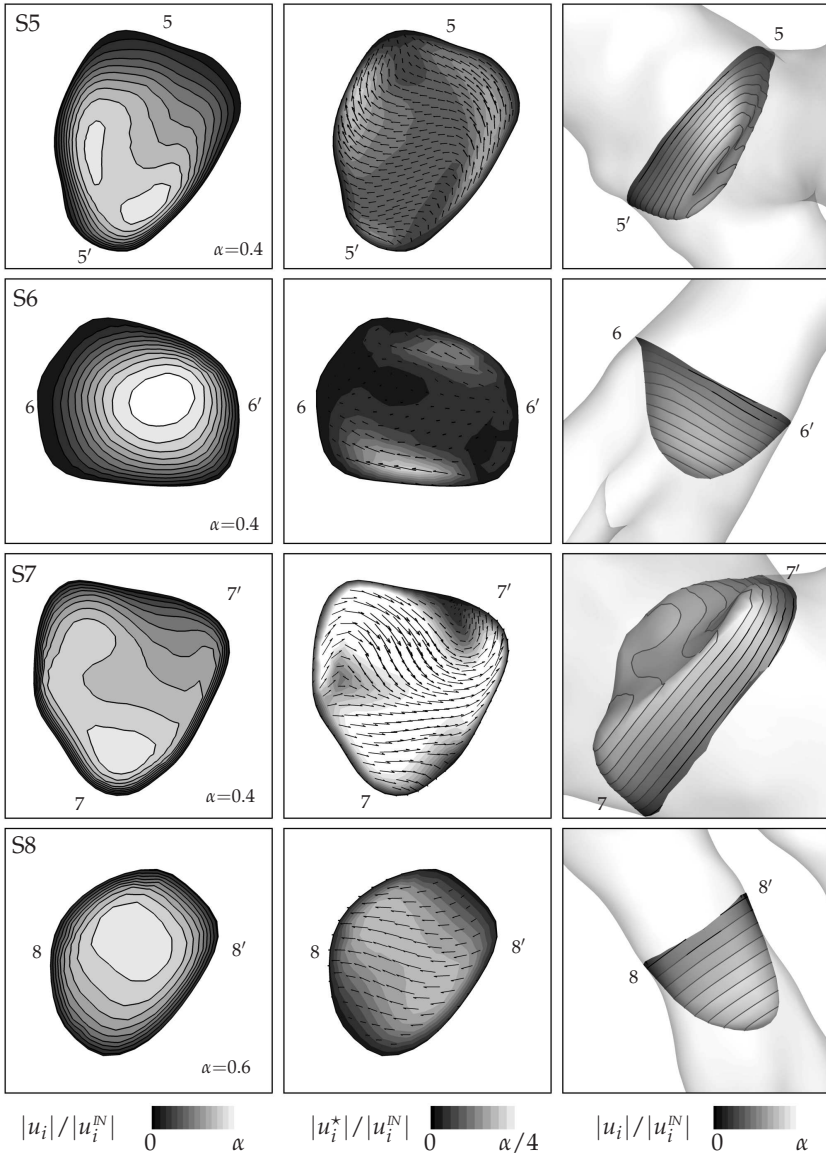
eine gute Übereinstimmung beider Ergebnisse. Die genauen Ursachen für die Unterschiede lassen sich nicht konkret ausmachen.

Die folgenden Abbildungen 5.12 und 5.13 geben einen Überblick über die Geschwindigkeitsprofile und die Fluidbewegung innerhalb der Schnittebenen, die in Abbildung 5.3a definiert sind. Mit steigender Verzweigungsanzahl vergrößert sich die gesamte Querschnittsfläche und dadurch sinken die maximal auftretenden Geschwindigkeiten. Um die Geschwindigkeitsprofile angemessen darzustellen, sind diese mit einem Faktor  $\alpha$  individuell skaliert; der Wert für  $\alpha$  ist jeweils im ersten Bild angegeben. Im obersten Schnitt (S1) ist die Strömung bereits stark durch die Geometrie der Trachea bestimmt und der Charakter des vorgegebenen Blockprofils ist kaum mehr vorhanden. Bereits hier zeigen sich rotierende Bereiche, welche die Hauptströmung überlagern. Mit der Verzweigung und der damit verbundenen Aufteilung des Fluids auf beide Hauptbronchien sinken die maximal auftretenden Geschwindigkeiten (S2 bzw. S3). Jeweils im Innenbereich (2' bzw. 3') treten die Maximalwerte der Geschwindigkeiten auf (vergleiche auch Anhang B.3). Die Geschwindigkeitsprofile fallen jedoch bedingt durch die Form des Querschnitts völlig unterschiedlich aus.

In beiden Hauptbronchien wird die Hauptströmung durch gegensinnig rotierende Fluidbewegungen überlagert. Die typische Form der Deanwirbel zeigt sich hier jedoch erst im Schnitt S4, in dem die Intensität der Querbewegung im Vergleich zum vorherigen Schnitt (S3) bereits deutlich abgenommen hat. Die Schnitte S3, S4 und S5 liegen der Reihe nach im rechten Hauptbronchus. In der ersten Ebene (S3) nach der Verzweigung weist das Geschwindigkeitsprofil ein Maximum auf. Dieses geht über zu einem hufeisenförmigen Plateau (S4) und schließlich zu einem Profil, welches zwei lokale Maxima (S5) besitzt. Diese tendieren bereits in die Richtung der



**Abb. 5.12.:** Konturplots der Absolutgeschwindigkeit  $|u_i|$  (links). Sekundäre Strömungseffekte: Absolutgeschwindigkeit  $|u_i^*|$  innerhalb der Schnittebenen (mitte); Geschwindigkeitsprofile der Schnittebenen (rechts).



**Abb. 5.13.:** Konturplots der Absolutgeschwindigkeit  $|u_i|$  (links). Sekundäre Strömungseffekte: Absolutgeschwindigkeit  $|u_i^*|$  innerhalb der Schnittebenen (mitte); Geschwindigkeitsprofile der Schnittebenen (rechts).



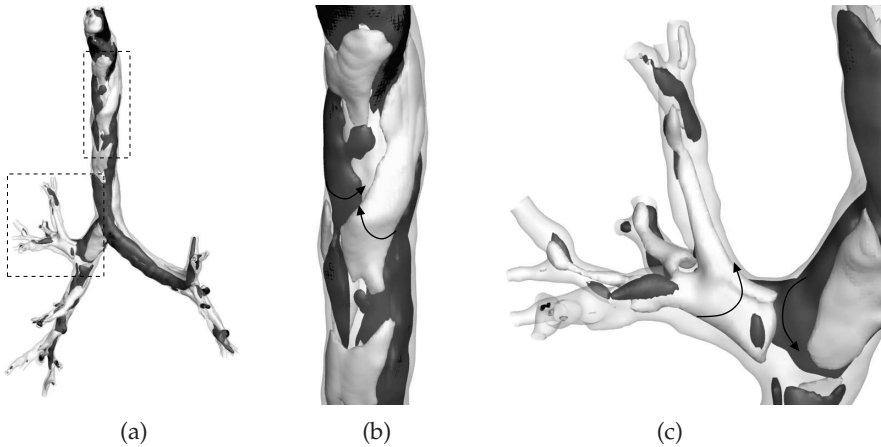
nächsten Verzweigungen. Bevor sich ein vollständig entwickeltes Laminarprofil ausbilden kann, folgt die nächste Verzweigung. Für die vollständige Ausbildung eines Laminarprofils ist nach GROSSE et al. [45] die Lauflänge (in Bezug auf die lokale Reynolds-Zahl) zu gering. Die auffällig großen Querbewegungsanteile des Fluids in den Schnitten S5 und insbesondere S7 sind allein durch die Lage der Schnitte zu erklären. Diese liegen nah im Bereich einer Verzweigung, an der das Fluid umgelenkt wird. Es kann also hier nicht allein von Sekundärströmungen gesprochen werden. In den unteren Regionen (S6 bzw. S8) ähneln die Geschwindigkeitsprofile mehr dem typischen Laminarprofil und erscheinen weniger plateauartig, wie in den Bronchien größeren Querschnitts.

Im Vergleich zum generischen Fall der WEIBEL Geometrie treten die sekundären Strömungseffekte in der Trachea vom MENSCH bereits in der Trachea auf. Durch die Komplexität dieser natürlichen Atemwegsgeometrie herrschen hier keinerlei Symmetrien in Bezug auf die Strömungsprofile. Ähnlichkeiten gibt es in der Hinsicht, dass die Geschwindigkeitsverteilungen der Schnittebenen in der Mitte der Geometrie eher plateauartig ausfallen, während sie in den unteren Abschnitten eine parabolische Form besitzen. Mit Hilfe der *Helizität*, die sich für das gesamte Strömungsfeld berechnen lässt, wird eine besonders anschauliche Darstellung rotierender Sekundärströmungseffekte ermöglicht. Die Helizität wird aus dem Skalarprodukt der Geschwindigkeiten  $u_i$  mit der Wirbelstärke  $\omega_i$  gebildet.

$$H = u_i \omega_i = u_i \varepsilon_{ijk} \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \quad (5.11)$$

Während der Wirbelstärkevektor  $\omega_i$  die Rotation um die drei Koordinatenrichtungen  $i$  beschreibt, ist diese bei der Helizität auf die Hauptströmungsrichtung ( $u_i$ ) bezogen. Durch das Vorzeichen der Helizität ist der Drehsinn der Sekundärströmung gegeben. Abbildung 5.14 zeigt Isoflächen positiver wie negativer Helizität gleicher Intensität innerhalb des menschlichen Bronchialbaums. Es zeigt sich eine Verteilung gegenseitig rotierender Wirbelbereiche über die gesamte Geometrie des Bronchialbaums (Abbildung 5.14a). Lediglich in den kleineren Nebenbronchien nehmen die Absolutwerte der Helizität bedingt durch die sinkende Absolutgeschwindigkeit ab (Abbildung 5.14c). Hinter der ersten Verzweigung sind die Wirbelwalzen durch die starke Umlenkung des Fluids am ausgeprägtesten. Diese verlaufen gleichmäßig und windungsfrei bis zur nächsten Verzweigung. Im Gegensatz dazu fallen die in der Trachea existierenden Wirbelwalzen sehr viel kleinerer aus. Des Weiteren wechseln sich links und rechts drehende Bereiche räumlich hintereinander ab und erscheinen in Form verwobener Strukturen (Abbildung 5.14b). Die Ergebnisse stimmen weiterhin sehr gut mit denen überein, die mit dem kommerziellen Strömungslöser StarCD in der selbigen Geometrie berechnet wurden [34]. Während die Sekundärströmungseffekte in den unteren Bereichen der Atemwege durch die Krümmungen bzw. die Verzweigungen hervorgerufen werden, sind es in der Trachea die Unebenheiten der Geometrie, die für die überlagerte Fluidbewegung sorgen. Ob und in wie weit diese Eigenschaft der Strömung einen besonderen physiologischen Nutzen hat, ist nicht eindeutig zu sagen. Auch in der einschlägigen Literatur finden





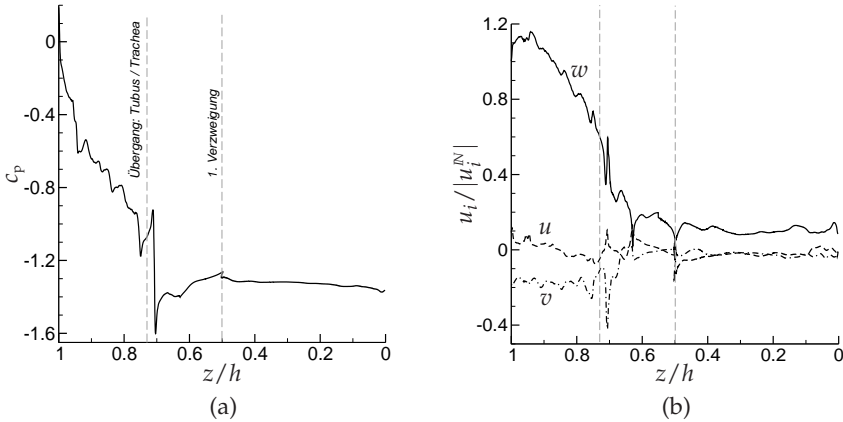
**Abb. 5.14.:** Isoflächen positiver (hell) und negativer (dunkel) Helizität  $H$  verdeutlichen die Rotation des Fluids in Bezug auf die lokal vorherrschende Strömungsrichtung. Gesamtansicht (a), Trachea (b), obere Nebenbronchien (c).

sich unterschiedliche Angaben. Es ist jedoch denkbar, dass es durch die gegensinnig rotierenden Wirbelbereiche zu einer Art eigenständiger Reinigung der Atemwege kommt. So könnten z. B. an der Wand abgelagerte Partikel gelöst und anschließend mit der Hauptströmung aus den Atemwegen transportiert werden. Auch ist vermutlich eine verstärkte Durchmischung des in den Atemwegen befindlichen Gases mit frischer Atemluft die Folge der rotierenden Bereiche.

### Ergebnisse SCHWEIN

Für den Trachealbaum des Anwendungsfalls SCHWEIN ist zusätzlich zu den Untersuchungen der anderen Atemwegsgeometrien auch eine zeitliche Beschreibung der Dynamik verfügbar. Den instationären Simulationen unter Berücksichtigung der Dynamik und der Strömungsumkehr sollen jedoch einige stationäre Ergebnisse vorangehen. Um die Vergleichbarkeit zu den Anwendungsfällen MENSCH bzw. WEIBEL sicherzustellen, wird die Phase maximaler Inspiration betrachtet.

In Abbildung 5.15a/b sind der Druckbeiwert ( $c_p$ ) sowie normierte Geschwindigkeitskomponenten ( $u$ ,  $v$ ,  $w$ ) entlang der vertikalen Koordinate einer Stromlinie aufgetragen. Diese Stromlinie verläuft vom oberen Einlass am Tubus ( $z/h = 1$ ) bis zum untersten Auslass der Geometrie ( $z/h = 0$ ). Vergleiche hierzu Abbildung 5.4. Im Verlauf des Druckbeiwertes ist im Bereich  $z/h \approx 0.75$  bis 1 ein starker Abfall erkennbar. Dieser wird verursacht durch die hohen Reibungsverluste innerhalb des schmalen Endotrachealtubus, über den das Atemgas in die Trachea gelangt. Bedingt



**Abb. 5.15.:** Druckbeiwert  $c_p$  (a) und Geschwindigkeitskomponenten (b) entlang einer Stromlinie durch Trachealbaum des Schweins.

durch die VCT Aufnahme und die anschließende Segmentierung ist die Oberfläche des Tubus weder exakt gerade noch glatt. Dieses hat entsprechende Schwankungen sowohl im Druckbeiwert als auch in den Geschwindigkeiten zur Folge. Die Stromlinie wurde ausgehend vom untersten Ausströmrand stromauf integriert, daher ergibt es sich, dass diese nicht im Zentrum des Tubus sondern zum Teil in Wandnähe verläuft. Damit erklären sich die Schwankungen der Geschwindigkeiten. Die Strömung innerhalb der Trachea befindet sich unter dem Einfluss mehrerer Rezirkulationsgebiete, die sich durch z. T. abrupte Geschwindigkeitsänderungen bemerkbar machen. Stromab der ersten Verzweigung verläuft die Stromlinie entlang des rechten Bronchus und bleibt weitgehend unverändert von den folgenden Abzweigungen. Vielmehr bleiben die Geschwindigkeiten auf einem nahezu konstanten Niveau.

Das beschriebene Strömungsverhalten bleibt für einen Bereich von Reynolds-Zahlen zwischen  $Re = 1500$  und  $2300$  qualitativ unverändert, wie in HYLLE et al. [54] gezeigt werden konnte. Auch andere Arbeiten [14, 45] berichten davon, dass eine moderate Variation der Reynolds-Zahl keinen qualitativen Einfluss auf die Strömung in Atemwegsgeometrien nimmt.

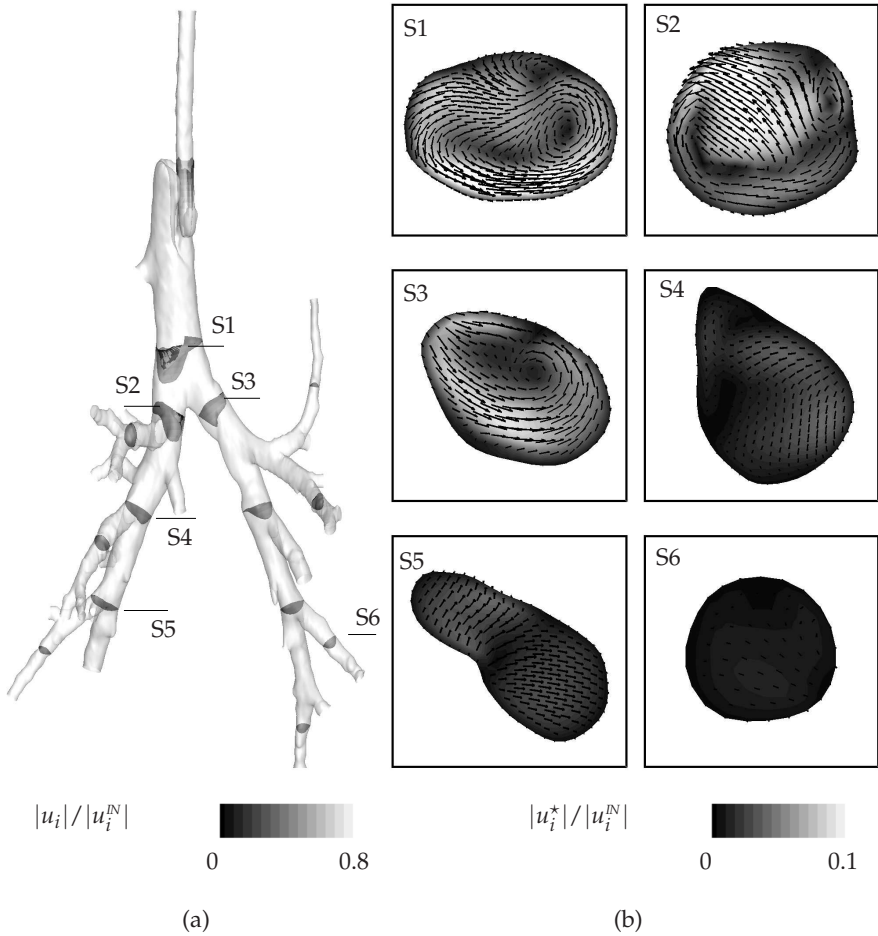
In Abbildung 5.16 sind die auftretenden Geschwindigkeitsprofile für verschiedene Schnittpositionen dargestellt. Für eine Auswahl von sechs Schnittebenen sind nebenstehend die Geschwindigkeiten innerhalb der Ebene visualisiert. Am Ende des Tubus vor dem Übergang in die Trachea treten die größten Geschwindigkeiten auf, wodurch eine Art Freistrahle innerhalb der Trachea erzeugt wird. Dies beeinflusst die Strömungsprofile im Bereich der Trachea und der ersten Verzweigung maßgeblich. Im Schnitt S1 ist die inhomogene Geschwindigkeitsverteilung mit den größten Absolutwerten im hinteren Abschnitt zu erkennen. Zwei gegensinnig rotieren-

de Wirbelwalzen und große Anteile sekundärer Fluidbewegungen sind ebenfalls deutlich erkennbar. Die Schnitte S1 und S2 zeugen zudem von der Existenz lokaler Rückstromgebiete (hinten rechts bzw. hinten links), die in Abbildung 5.17 noch anschaulicher dargestellt werden. Durch die unterschiedliche Geometrie der beiden Hauptbronchien und insbesondere durch die inhomogene Anströmung, unterscheidet sich das Verhalten in den Schnitten S2 und S3 deutlich. In beiden Schnitten konzentriert sich das Fluid jedoch in Richtung der Innenseite der Gabelung, wodurch u. a. rotierende Wirbelgebiete entstehen. Der effektive Gesamtquerschnitt des Bronchialbaums nimmt mit steigender Generationstiefe zu. Infolge dessen sinken die maximal auftretenden Geschwindigkeiten und damit auch die Intensität der sekundären Fluidbewegung. Die Profile in den Ebenen S4 bis S6 fallen im Vergleich zu den übrigen wesentlich homogener und glatter aus und ähneln mehr den typischen Laminarprofilen. Dies macht die Aussage nachvollziehbar, dass im Fall einer turbulenten Anströmung in den ersten Generationen eine Relaminarisierung stattfindet [6]. Insbesondere in den unteren Regionen liegen die erzeugten Schnittebenen nicht immer senkrecht zur Hauptströmung, so dass in der Darstellung nicht mehr allein von sekundären Effekten gesprochen werden kann.

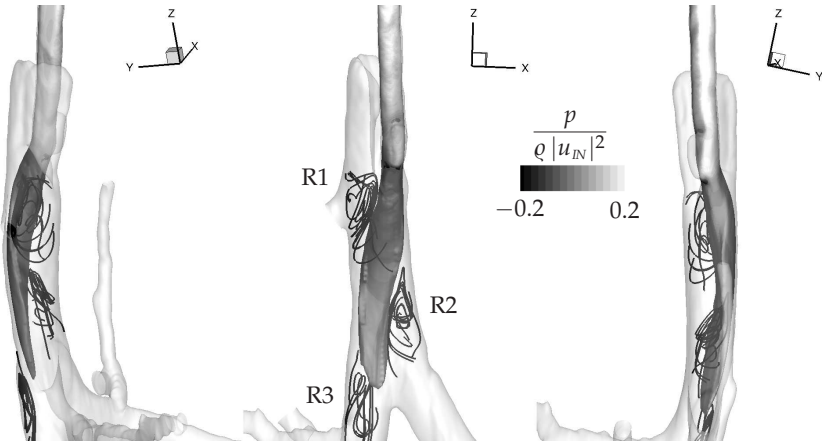
In Abbildung 5.17 ist die Situation am Übergang zwischen dem Endotrachealtubus und der Trachea detailliert dargestellt. Der vom Tubus erzeugte Strahl, verdeutlicht durch eine Isofläche der Absolutgeschwindigkeit, verläuft entlang der Hinterseite der Trachea. Das anfänglich nahezu parabolische Profil wird stromab verzögert und verbreitert sich. Außerdem tendiert der Strahl leicht in Richtung des linken Hauptbronchus. Durch die starke Scherung am Rande des Freistrahls kommt es zu drei deutlich ausgeprägten Wirbelgebieten, die durch Stromlinien hervorgehoben werden und mit R1, R2 und R3 gekennzeichnet sind. Die Situation, dass das Atemgas der Trachea über einen Tubus zu- und abgeführt wird, findet sich nur im Fall einer künstlichen Beatmung. Unter normalen Bedingungen existiert allerdings ein ähnlicher Effekt, welcher durch den Kehlkopf verursacht wird. CHOI et al. [14] berichten von Wirbelbereichen im oberen Abschnitt der Trachea, die von der strahlartigen Anströmung durch die Kehlkopfverengung hervorgerufen wird.

Im Fall der dynamischen Simulationen werden die Deformationen eines vollständigen Atemzyklus durch zehn Momentaufnahmen der Geometrie repräsentiert (siehe Abschnitt 5.1.2 sowie Anhang B.1.3).

Um zunächst einen Eindruck allein vom Einfluss der bewegten Wand zu erhalten, wird folgendes unternommen: Es wird die quasi stationäre Inspirationsströmung in der dynamischen Geometrie des Tracheobronchialbaums simuliert. Zum Zeitpunkt  $t/T = 1/6$  (siehe Abbildung 5.5) befindet sich die Geometrie in der Konfiguration maximaler Inspiration, so dass ein direkter Vergleich mit dem statischen Fall stattfinden kann. In Abbildung 5.18 sind die Geschwindigkeitsprofile an der ersten Verzweigung gegenübergestellt. Die Unterschiede zwischen beiden Bildern zeigen, dass die Dynamik der Geometrie einen signifikanten Einfluss auf das Strömungsfeld hat. Das Rezirkulationsgebiet R2 im statischen Fall ist im dynamischen kaum mehr vorhanden und auch die mit R3 gekennzeichnete Rückströmung verschwindet gänzlich. Der Großteil des Fluids strömt weiterhin im hinteren Abschnitt der Tra-



**Abb. 5.16.:** Geschwindigkeitsprofile, eingefärbt mit der Absolutgeschwindigkeit  $|u_i|$  (a) und Visualisierung sekundärer Strömungseffekte durch die Absolutgeschwindigkeit  $|u_i^*|$  innerhalb der Schnittebenen (b) für den stationär durchströmten Trachealbaum des Schweins.

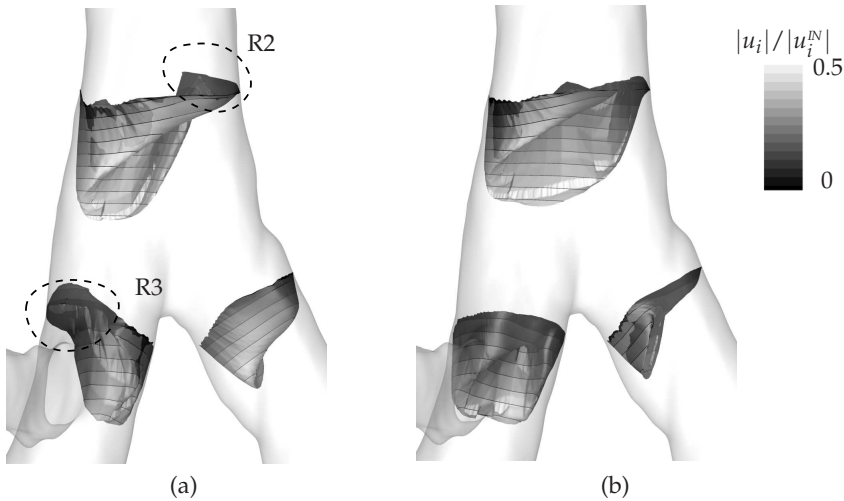


**Abb. 5.17.:** Isofläche der Absolutgeschwindigkeit von  $|u_i|/|u_i^N| = 0.4$  eingefärbt mit dem Druck  $p$ .

chea, wobei hier eine Umverteilung in die Breite stattfindet. Am Beginn des linken Hauptbronchus verschiebt sich das Geschwindigkeitsprofil von der Verzweigungsinnenseite in den hinteren Abschnitt. Im rechten Hauptbronchus drängt das Fluid von der Vorderseite (statischer Fall) nahezu vollständig zur Innenseite der Verzweigung (dynamische Fall). Trotz des unphysiologischen Charakters dieses Vergleichs wird ersichtlich, dass die Bewegung der Wand einen erheblichen Einfluss auf das resultierende Strömungsfeld hat. Dieser Einfluss der Bewegung findet Beachtung bei der folgenden Simulation.

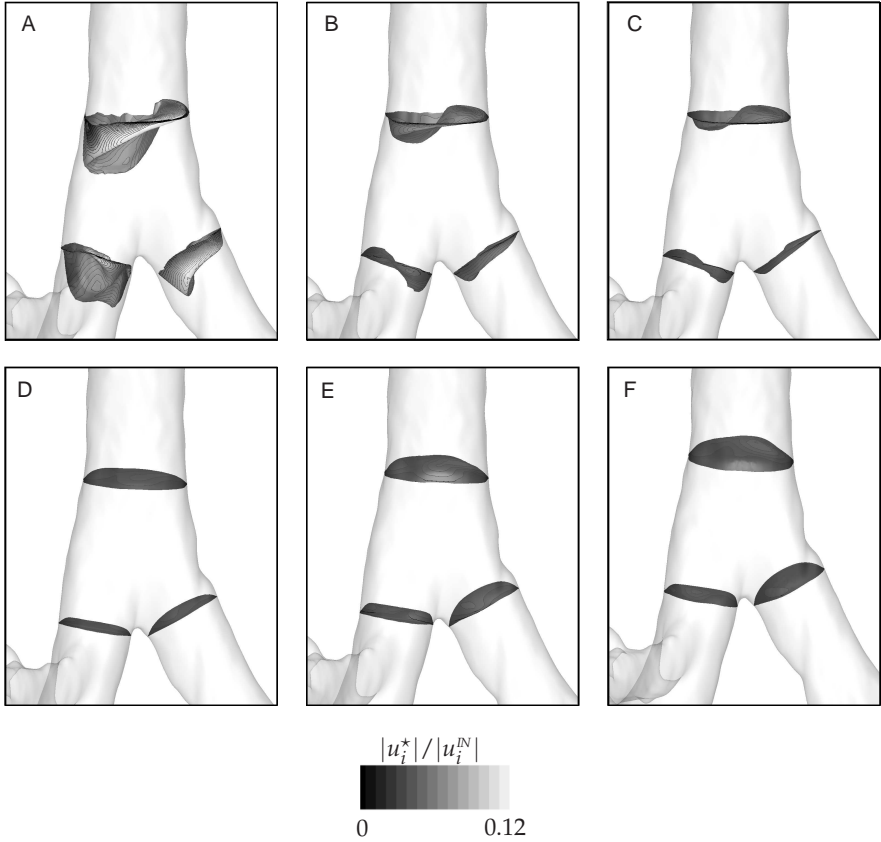
Anfängliche Untersuchungen [53] basierten auf einer rein sinusförmigen Funktion zur Beschreibung des respiratorischen Diagramms. Dabei sind die Phasen der Inspiration und der Expiration gleich lang. Um dem medizinischen Experiment mit seinem inspiratorischen zu expiratorischen Verhältnis von 1:2 gerecht zu werden, wird eine generische Atemzugkurve verwendet (siehe Abbildung 5.6). Der Atemzyklus wird mit 320 Zeitschritten diskretisiert, nachdem sich die zuvor verwendete Auflösung (160 Zeitschritte pro Zyklus) als unzureichend herausstellte [53]. Ausgehend von der stationären Lösung (zum Zeitpunkt maximaler Inspiration) als Initialisierung werden drei vollständige Atemzyklen simuliert. Bereits nach dem ersten Durchlauf ist die Lösung zeitlich konvergiert, so dass sich die Ergebnisse des zweiten und der dritten Zyklus nicht voneinander unterscheiden.

Die Darstellungen in Abbildung 5.19 beziehen sich auf die entsprechenden Zeitpunkte A bis F der Atemzugkurve (siehe Abbildung 5.6). Die an den Rändern maximal aufgeprägten Geschwindigkeiten fallen während der Inspiration doppelt so hoch aus wie zum Zeitpunkt maximaler Expiration. Dieses spiegelt sich konsequent im Strömungsfeld des gesamten Trachealbaums wider. Zum Zeitpunkt maxi-



**Abb. 5.18.:** Darstellung der Geschwindigkeitsprofile (eingefärbt mit der Absolutgeschwindigkeit) im Bereich der ersten Verzweigung bei maximaler Inspiration. Statistische Geometrie (a), dynamische Geometrie (b); nach HYLLA et al. [54].

malen Inspiration (A) sind die Geschwindigkeitsverteilungen sehr inhomogen und unter dem starken Einfluss der vom Tubus erzeugten Strahlströmung. Der Umstand, dass sich außerhalb dieser Phase keinerlei Rückstromgebiete finden, deckt sich mit experimentellen Ergebnissen von GROSSE et al. [45], an einem realistischen Lungenmodell. Mit abnehmender Zuströmgeschwindigkeit (B) sinken die Absolutgeschwindigkeiten, aber auch die Form der Profile ändert sich. Im Umkehrpunkt (C) sind die gesetzten Geschwindigkeiten an den Ein- und Ausströmrändern null. Die über die Querschnitte gemittelten Massenflüsse verschwinden zwar, dennoch ruht das Fluid nicht in jedem Punkt. Im Verlaufe der Expiration (D, E, F) steigen die maximal auftretenden Geschwindigkeiten bei ähnlich bleibender räumlicher Verteilung sukzessive an. In der Darstellung (F) kurz vor Ende der Expirationsphase scheinen die Absolutgeschwindigkeiten größer zu sein, als zum Zeitpunkt maximaler Expiration (E). Diese Erscheinung ist jedoch rein darstellungsbedingt, da sich die Schnittebenen zwischen diesen Zeitpunkten in Richtung des Betrachters neigen. ZHANG und KLEINSTREUER [134] berichten von einem quasi stationären Charakter während der Phase der Expiration. Diese Aussage trifft auch auf den vorliegenden Fall zu. ZHANG und KLEINSTREUER [134] sehen die Ursache darin, dass vor jeder Verzweigung unabhängig von der Generation ähnliche Anströmungsbedingungen herrschen, nämlich ein mehr oder weniger entwickeltes Laminarprofil. Die in Bezug auf die Schnittebenen definierten sekundären Strömungsbewegungen sind dementsprechend bei der Expiration geringer. Dies liegt jedoch nicht allein an der niedrigen



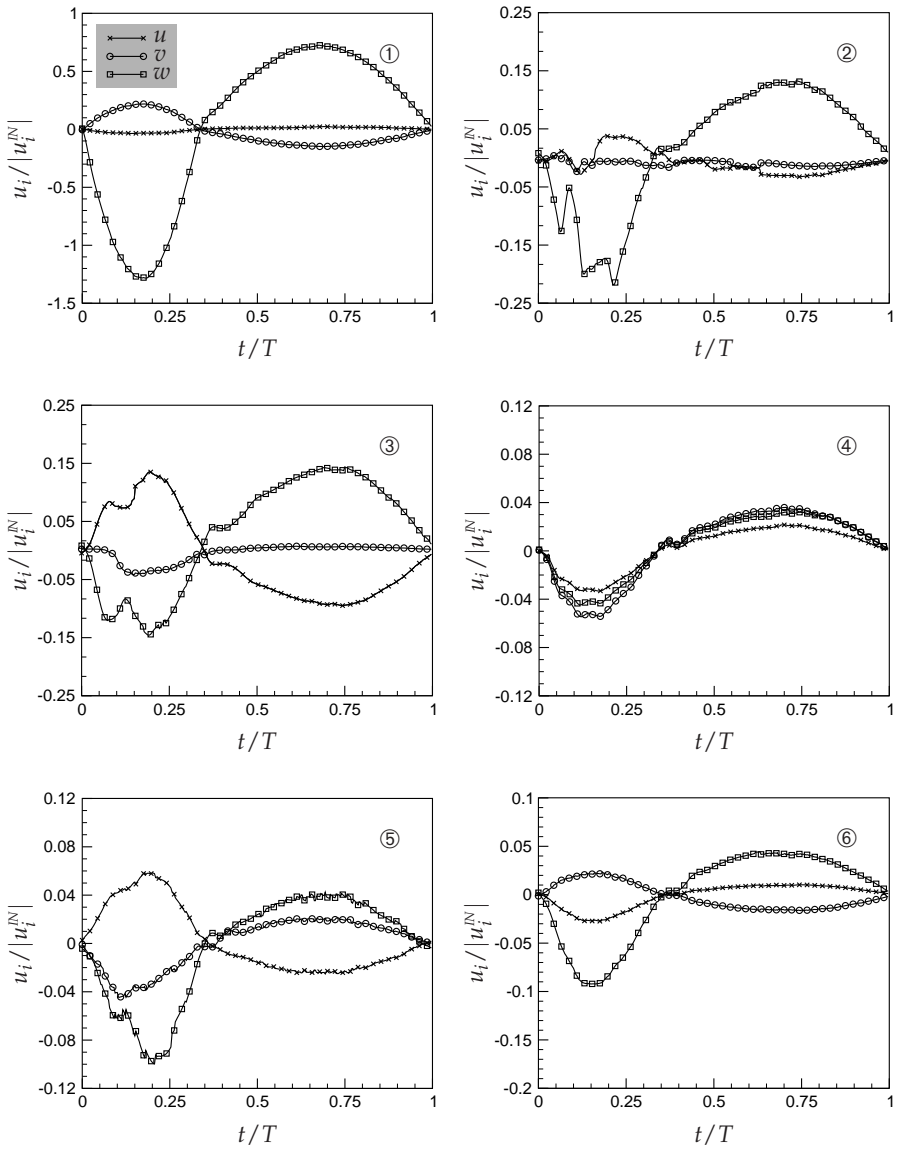
**Abb. 5.19.:** Zeitlicher Verlauf der Geschwindigkeitsprofile im dynamischen Trachealbaum des Schweins. Die Konturdarstellung zeigt die Absolutgeschwindigkeit sekundärer Strömungsbewegungen ( $|u_i^*|$ ) innerhalb der Schnittebenen.

gen Geschwindigkeit der Hauptströmung, denn auch bei Untersuchungen mit einer sinusförmigen Atemzugkurve fallen die Sekundärströmungen während der Expiration kleiner aus [53]. Dies kann wie folgt erklärt werden: Bei zusammenfließenden Massenströmen an einer Verzweigung (Expiration) vereinigen sich die Grenzschichten durch den Wegfall der Wand an der Innenseite der Verzweigung. Die hierbei in Querbewegung umgesetzte Energie fällt wesentlich geringer aus, als im umgekehrten Fall (Inspiration). Hier trifft das voll entwickelte Profil auf die Wand der Verzweigungsinnenseite, an der das Fluid stark verzögert und in Folge des Druckanstiegs umgelenkt wird. Der Sachverhalt, dass die sekundären Strukturen während der Expiration deutlich kleiner ausfallen, deckt sich u. a. mit Ergebnissen von CHOI et al. [14] und EITEL et al. [31].

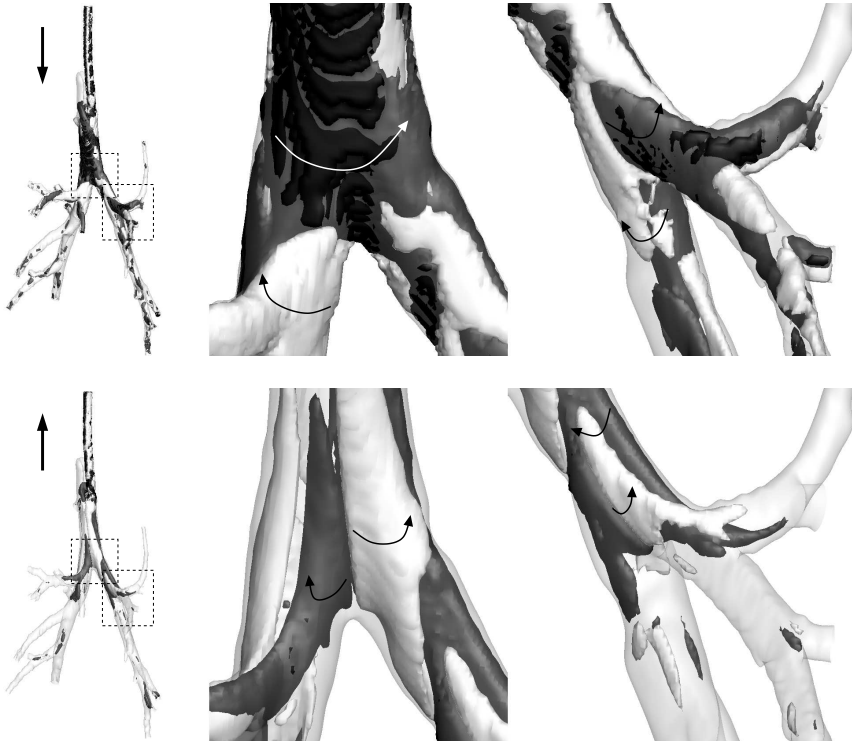
Die Diagramme in Abbildung 5.20 zeigen den zeitlichen Verlauf normierter Geschwindigkeitskomponenten für einzelne Beobachtungspunkt innerhalb der dynamischen Geometrie des Trachealbaums. Die Positionen der Punkte ① bis ⑥ sind in Abbildung 5.4a verzeichnet. Die momentane Lage der Beobachtungspunkte ist in Bezug auf das Oberflächengitter definiert und folgt somit dessen Bewegung. Weitere Informationen zur Ermittlung der Punktlage findet sich im Anhang unter B.4. Aus Gründen der besseren Darstellung ist nur jeder sechste Zeitschritt in den Diagrammen eingezeichnet. Zur besseren Lesbarkeit sind die Achsen, welche die Geschwindigkeiten darstellen, individuell skaliert.

Punkt ① befindet sich etwa vier Tubusdurchmesser stromab des oberen Einlasses. Durch die Ausrichtung der Geometrie dominieren hier die Geschwindigkeiten in  $z$ -Richtung. Da der Punkt ① nahe am Einströmrand gelegen ist, entspricht das aufgezeichnete Signal hier qualitativ der Amplitudenfunktion  $\gamma(t)$ , welche zur Modulation der Atemzugkurve genutzt wird (vergleiche Abbildung 5.6). In den übrigen Punkten nehmen je nach Orientierung der jeweiligen Bronchien auch andere Geschwindigkeitskomponenten Einfluss. Im Umkehrpunkt zwischen Inspiration und Expiration ( $t/T = 1/3$ ) verschwinden die Absolutgeschwindigkeiten in den betrachteten Punkten vollständig bzw. nahezu vollständig. Für die übrigen Beobachtungspositionen fernab der Ein- und Ausströmrandbedingungen zeigen sich zeitliche Verläufe, die von denen an den Rändern aufgeprägten Geschwindigkeiten abweichen. Dazu tragen unterschiedliche Faktoren bei. Zum einen ist dies die Folge der an den Verzweigungen hervorgerufenen Sekundärbewegungen. Andererseits zeigt sich auch hier die Wirkung der beweglichen Wand, die keine zeitlich stetige Geschwindigkeit aufweist. Um die sekundären Strömungsbewegungen zu visualisieren wird auch an diese Stelle die Helizität  $H$  (siehe Gleichung (5.11)) bestimmt. In Abbildung 5.21 sind die um die Hauptströmung rotierenden Wirbelbereiche durch zwei Isoflächen positiver wie negativer Helizität (gleicher Intensität) dargestellt. Der obere Abschnitt veranschaulicht die Situation bei maximaler Inspiration, der untere den maximaler Expiration. Ein positiver Wert der Helizität kennzeichnet einen Wirbel, der im mathematisch positiven Sinn um die lokale Hauptströmungsrichtung  $u_z$  dreht. Bereiche negativer Helizität drehen in die entgegengesetzte Richtung. Während des gesamten Atemzyklus existieren sekundäre Wirbelstrukturen innerhalb des Trachealbaums. Diese treten wie auch im Anwendungsfall MENSCH



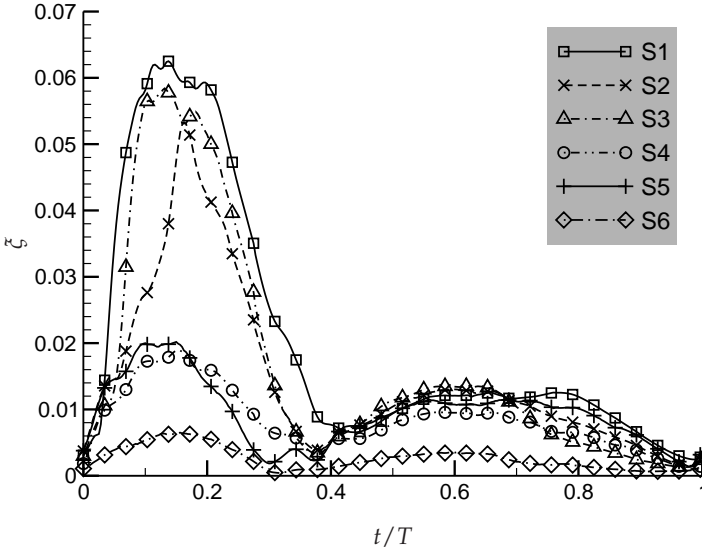


**Abb. 5.20.:** Zeitlicher Verlauf der Geschwindigkeitskomponenten für ausgewählte Positionen (siehe Abbildung 5.4) innerhalb der dynamischen Geometrie.



**Abb. 5.21.:** Vergleich der Intensität sekundärer Strömungsstrukturen während maximaler Inspiration (*oben*) und Expiration (*unten*) dargestellt durch Isoflächen positiver (hell) wie negativer (dunkel) Helizität  $H$ .

als Paare gegenseitig rotierender Walzen auf. Bei maximaler Inspiration ist dessen Intensität jedoch wesentlich größer, als während der Expiration. In der Darstellung 5.21 *mitte* und *rechts* sind die Drehrichtungen einzelner Wirbelpaare durch Pfeile angegeben. Während des Übergangs von der inspiratorischen (5.21 *oben*) zur expiratorischen Phase (5.21 *unten*) ändert sich der Drehsinn der Wirbel nicht. Die Erhaltung des Drehsinns über den gesamten Atemzyklus findet sich in allen Abschnitten wieder und kann ebenfalls im menschlichen Bronchialbaum beobachtet werden [34]. Bei der Expiration bilden sich stromab jeder Verzweigung zwei Wirbelpaare, die sich jeweils stromauf in den Ästen bilden. Dies ist beispielsweise in der selben Abbildung *unten, mitte* zu sehen. Das Diagramm in Darstellung 5.22 zeigt das



**Abb. 5.22.:** Zeitlicher Verlauf der flächengemittelten Intensität sekundärer Strömungsstrukturen für ausgewählte Schnittebenen.

zeitliche Verhalten der mittleren Intensität sekundärer Strömungsstrukturen in den Schnittebenen S1 bis S6 (vergleiche Abbildung ??). Die über die Querschnittsfläche  $A$  gemittelten Intensitäten können wie folgt bestimmt werden:

$$\bar{\xi} = \frac{1}{A} \int_A |u_i^*| / |u_i^N| \, dA. \quad (5.12)$$

Der Verlauf zeigt, dass eine Korrelation zwischen der Intensität der sekundären Strömungsstrukturen und der Amplitudenfunktion ( $\gamma(t)$ ) der Atemzugkurve besteht. Allerdings fällt die Intensität der Sekundärströmungseffekte während der Expiration um den Faktor 3 bis 4 geringer aus als zur Phase der Inspiration. Der Grund hierfür liegt in der Richtung, in der die Strömung die Verzweigungen passiert. Während

der Inspiration bewirken die Verzweigungen eine Aufteilung der Massenströme, was für einen größeren Anteil an Querbewegung sorgt, als die Vereinigung der Massenflüsse zum Zeitpunkt der Expiration. Die zur inspiratorischen Phase doppelt so hohen mittleren Absolutgeschwindigkeiten begünstigen das höhere Aufkommen der sekundären Strömungseffekte ebenso wie die vom Tubus induzierte Freistrahlsströmung.

Den hier aufgezeigten rotierenden Strukturen kann durchaus bedeutende Relevanz für das System Atmung zugesprochen werden. Die für den Gasaustausch verantwortlichen alveolären Strukturen treten erst etwa mit der 17. Verzweigungsgeneration auf. Damit ist ein Großteil des eingeatmeten Volumens nicht direkt am Gasaustausch beteiligt (*Totraum*). Der Totraum beträgt bis zu einem Drittel des gesamten Lungenvolumens und ist u. a. verantwortlich für die Erwärmung, Anfeuchtung sowie für die Säuberung des frischen Atemgases. Die sekundären Strömungsstrukturen spielen hier eine wesentliche Rolle bei der *Durchmischung* des im Totraum befindlichen Atemgases. Zum Ende der Expirationsphase ist der Totraum mit dem sauerstoffarmen Gas der Alveolen gefüllt. Durch die rotierenden Querbewegungen insbesondere während Einatmung findet hier eine Vermischung mit dem frischen Atemgas statt. Neben dem Aspekt einer geförderten Durchmischung wird außerdem vermutet [34, 45], dass die sekundären Strömungsstrukturen einen Effekt der natürlichen Reinigung zur Folge haben könnten. ZHANG und KLEINSTREUER [134] untersuchten den Einfluss der rotierenden Wirbel auf im Fluid befindlicher Partikel. Je nach Intensität und Richtung der Hauptströmung können die Wirbel zu Bereichen erhöhter wie verringerter Partikelkonzentration führen.

### 5.1.5. Diskussion

Die zuvor beschriebenen Abschnitte demonstrieren die Anwendung des entwickelten Immersed Boundary CFD Verfahrens auf Strömungen im Bereich der zentralen Atemwege. Neben einem generischen Lungenmodell nach WEIBEL [127] wurde ein menschlicher Bronchialbaum und der eines Schweins untersucht. Bei den ersten beiden Fällen zeigen die Ergebnisse gute Übereinstimmung mit anderen numerischen Experimenten in den identischen Geometrien. Auf der Basis dessen wurde die oszillatorische Strömung im Tracheobronchialbaum des Schweins unter Berücksichtigung realer Deformationen durchgeführt. Nach aktuellem Kenntnisstand existieren bisher keine weiteren numerischen Untersuchungen in einer realen Geometrie eines Trachealbaums, der sich in physiologischer Weise verformt.

Die Ergebnisse, die sich z. T. sehr gut mit den Untersuchungen anderer Forschungsgruppen decken, erlauben einen tiefgehenden Einblick in die Strömungsphysik der zentralen Atemwege. Neben den Charakteristiken der Hauptströmung in der Trachea, den Haupt- und Nebenbronchien sind vor allem die sekundären Strömungsbewegungen von besonderer Bedeutung. Rezirkulationsgebiete, gegensinnig rotierende Wirbelpaare und signifikante Strömungsprofile im Bereich der Verzweigungen zeugen von der Vielfältigkeit der auftretenden Strömungsphänomene. Bei der Beurteilung und Interpretation der Ergebnisse sind stets die getätigten Annahmen

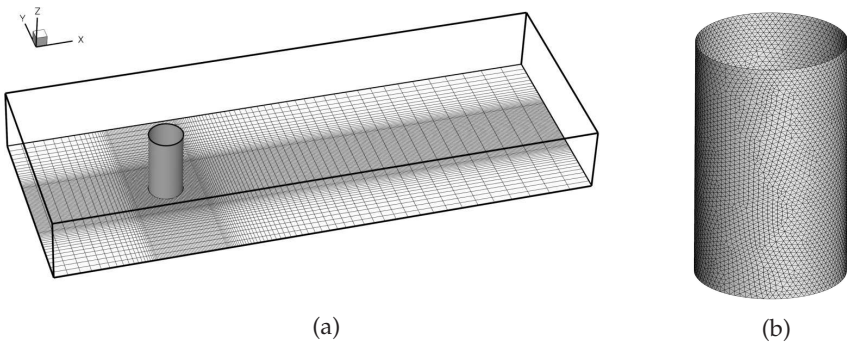
und Vereinfachungen zu bedenken, die z. T. getroffen werden müssen, um die Simulationen überhaupt erst zu ermöglichen. Die explizite Vorgabe der Massenflüsse an den beschnittenen Enden der Nebenbronchien sowie an der Trachea bzw. am Endotrachealtubus ist hier als wesentlicher Kritikpunkt zu nennen. Durch diese Randbedingung in Verbindung mit der inkompressiblen Behandlung des Fluids sind die Massenflüsse für sämtliche Bronchien und Nebenbronchien vorgeschrieben. Damit werden beispielsweise s. g. *Pendellufteffekte*, bei denen Fluid während der Expiration von einem Zweig in einen untergeordneten Zweig zurück strömt, unterdrückt. Geeigneter wäre hier die Verwendung von Druckrandbedingungen, was jedoch auf ein ähnliches Problem zurückführt, nämlich die Vorgabe des Drucks an den Auslassenden. Ein Ansatz, um auch die Bereiche der Lunge zu berücksichtigen, die nicht räumlich aufgelöst oder in der Bildgebung erfasst werden können, ist die Kopplung der 3D Simulation mit einem 1D Modell. Solche *Impedanzmodelle* beschreiben die höheren Generationen der Atemwege und liefern –gekoppelt an die Ausströmränder– einen Druckwert, der für die Strömungssimulation verwendet wird. Ein derartiges Verfahren wurde erstmals für Blutströmungen entwickelt [91] und später auf die Untersuchungen der Atemwege adaptiert [18]. Erweiterungen des eigenen Verfahrens in diese Richtung sind bereits angedacht. Ein weiterer Kritikpunkt betrifft die lineare Interpolation der Deformationsfelder (siehe Anhang B.1.3). Hierdurch ergeben sich ein unstetiger Bewegungsverlauf der Atemwege und damit stückweise konstante Wandgeschwindigkeiten. Die Problematik bei Anwendung höherwertiger Interpolationen besteht darin, dass Oszillationen auftreten können bzw. dass es in Grenzfällen zu einer Selbstdurchdringung einzelner Dreieckselemente kommen kann. Als Ausweg kommen s. g. *Shape-Preserving Splines* in Frage, deren Umsetzung jedoch mit erheblichem Aufwand verbunden sein dürfte. Zusätzliche Einblicke hinsichtlich Verteilung, Anhäufung und Ablagerung eingeatmeter Partikel würde eine Erweiterung des Verfahrens um einen Algorithmus zur Partikelverfolgung [68, 134] ermöglichen.

## 5.2. Strömung um einen elastischen Zylinder

Als Anwendungsfall aus dem Bereich der Fluid-Struktur-Interaktion wird die Strömung um einen dünnwandigen, elastischen Zylinder simuliert. Die Berechnung des Strömungsfelds wird durch das umgesetzte Immersed Boundary Verfahren vorgenommen, wobei die variable Geometrie als Oberflächengitter ausgeführt ist. Die Deformationen des eingetauchten Körpers werden von dem implementierten FEM Programm zur Simulation mechanischer Strukturen bestimmt. Die Kopplung zwischen beiden Verfahren ist über den im Abschnitt 4.6.4 vorgestellten Algorithmus realisiert.

### 5.2.1. Konfiguration

Das Strömungsfeld um den Zylinder wird durch ein Rechengitter (Abbildung 5.23) diskretisiert, dessen Koordinatenursprung im Zentrum des Zylinders gelegen ist. Das Gebiet weist die folgenden Abmaße ( $-4d \leq x \leq 12d$ ,  $-3d \leq y \leq 3d$ ,  $0 \leq z \leq h$ ) auf. Die spannweite Richtung des Zylinders wird durch das Rechengitter mit 49, der Durchmesser mit 25 Zellen aufgelöst. Weitere Details zum numerischen Setup finden sich in Tabelle 5.5. Die Reynolds-Zahl ist mit  $Re_d = 20$  so gewählt, dass sich ein stationäres Rezirkulationsgebiet im Nachlauf des Zylinders ausbildet. Der



**Abb. 5.23.:** Konfiguration der Zylinderumströmung: Rechengitter (a) und Triangulierung der Zylinderoberfläche (b).

Zylinder ist an den Stirnflächen ( $z = -h/2$  bzw.  $z = h/2$ ) fest eingespannt, so dass dort sämtliche Verschiebungen sowie die Verdrehungen unterbunden werden. Im Vorfeld werden die mechanischen Eigenschaften der Schalelemente ( $t_s, E, \nu_s$ ) im Verhältnis zu denen des Fluids ( $\rho, \nu, u_i^{(N)}$ ) derart gewählt, dass sich die Zylinderhülle unter den auftretenden Kräften mäßig, aber dennoch deutlich erkennbar verformt. Um Locking Effekte (siehe Abschnitt 4.6.3) zu vermeiden, ist die Elementdicke mit  $t_s = 0.1 d$  (diese findet sich nur in der Steifigkeitsbeziehung, nicht aber in der eigent-

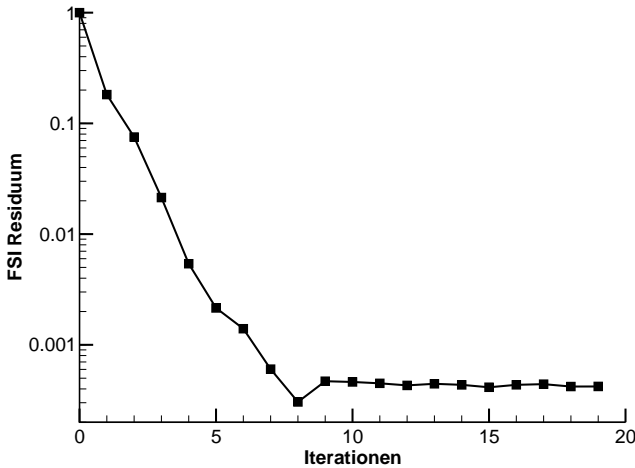
Bezeichnung	Größe
Reynolds-Zahl	$Re_d = 20$
Durchmesser	$d$
Höhe	$h = 2d$
Anzahl Dreieckselemente	$N^\Delta \approx 9\,500$
Anzahl kart. Rechenzellen	$N^C \approx 500\,000$

**Tab. 5.5.:** Simulationsparameter: Strömung um einen elastischen Zylinder.

lichen Ausdehnung der Dreieckselemente wieder) gewollt groß gewählt. Die daraus resultierende hohe mechanische Steifigkeit wird mit einem entsprechend niedrigen Elastizitätsmodul  $E$  ausgeglichen. Aus Gründen der numerischen Stabilität wird das Upwind Konvektionsschema verwendet. Als Referenz wird bei gleicher Reynolds-Zahl die Strömung um den starren Zylinder berechnet. Dieses quasi 2D Strömungsfeld dient zudem als Startlösung für die FSI Simulation. Die gesamte Anwendung wird auf einer einzelnen CPU (AMD Opteron, 1.0 GHz) simuliert, wodurch eine Rechenzeit von etwa 5 Tagen zustande kommt.

### 5.2.2. Ergebnisse

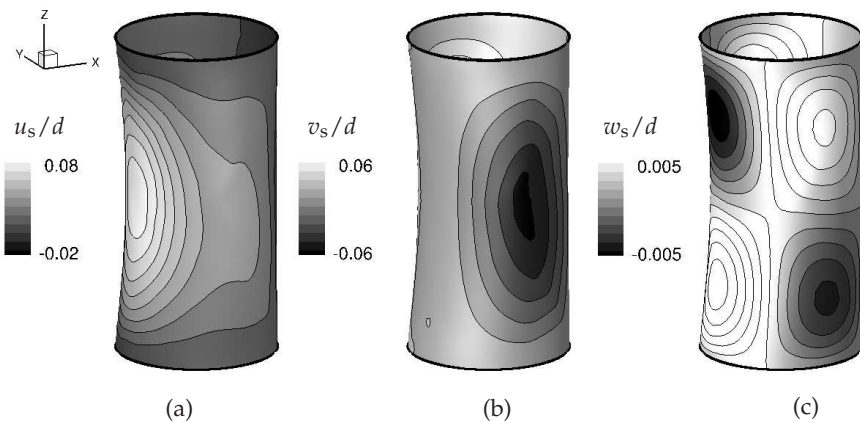
Abbildung 5.24 zeigt das Konvergenzverhalten der gekoppelten Problemstellung. Das normierte FSI Residuum fällt zunächst monoton, bis nach etwa 10 FSI Iterationen ein konstantes Niveau von  $\mathcal{R}_{FSI} \approx 4.0 \cdot 10^{-4}$  erreicht ist. Das gute Konvergenz-



**Abb. 5.24.:** Das FSI Residuum  $\mathcal{R}_{FSI}$  für den umströmten elastischen Zylinder.

verhalten ist offensichtlich auf die Einfachheit des Testfalls sowie auf die schwache Kopplung beider Problemstellungen zurückzuführen.

Die Abbildungen 5.25a/b/c zeigen die unter Einfluss der Strömung<sup>4</sup> deformierte Zylinderhülle. Die größten Verschiebungen treten, hervorgerufen durch den Druckanstieg an der Zylinderfront, in  $x$ -Richtung auf. Durch die starre Lagerung an den Enden des Zylinders finden sich die maximalen Deformationen in der Mitte bei  $z = 0$ . Im Bereich des Staupunkts ( $x = -d/2$ ,  $y = 0$ ) flacht der Zylinder stark ab und verbreitert sich in Folge dessen in positiver wie negativer  $y$ -Richtung. Trotz des leichten Unterdrucks auf der stromab gewandten Seite des Zylinders ( $x = d/2$ ,  $y = 0$ ) zeigen sich negative Verschiebungen  $u_s$  in Richtung des Zentrums des Zylinders (vergleiche Abbildung 5.26 links). Dies ist als Reaktion der Struktur auf die starken Verformungen an den Seiten ( $y > d/2$ ,  $y < -d/2$ ) zu verstehen. Aus Sicht der Hauptströmungsrichtung wird der Zylinder deutlich breiter, wodurch der Strömungswiderstand und der Druckanstieg vor dem Zylinder weiter zunimmt. Der deformierte Zylinder ist symmetrisch bezüglich des Koordinatenursprungs. Abbildung 5.26

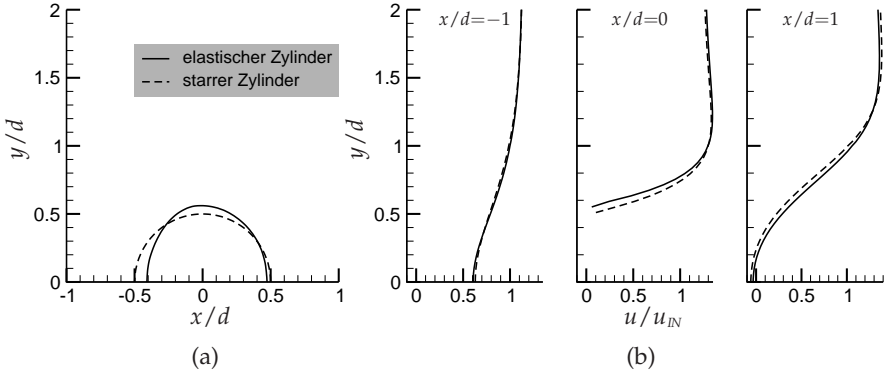


**Abb. 5.25.:** Darstellung der Verschiebungen  $u_s$  (a),  $v_s$  (b) und  $w_s$  (c), die sich für den Zylinder während der Interaktion mit dem umgebenen Strömungsfeld einstellen.

vergleicht die ursprüngliche, mit der deformierten Geometrie (links) und zeigt Unterschiede in den Geschwindigkeiten  $u$  für drei Schnittebenen bei  $z = 0$  (rechts). Durch die Verformungen, welche in Längsrichtung des Zylinders variieren, erhält die Strömung nun einen dreidimensionalen Charakter: Die maximale Verformung des Körpers bei  $z = 0$  zwingt das Fluid in Richtung der Stirnflächen des Zylinders auszuweichen. In Abbildung 5.27 sind die Druckfelder des elastischen und des starren Zylinders gegenübergestellt. Es zeigt sich beim elastischen Fall ein geringfügig höheres Druckniveau in Folge der Abflachung und Verbreiterung der Geometrie.

<sup>4</sup>Hierbei dominieren die Druckkräfte deutlich gegenüber den durch Reibung hervorgerufenen Kräften.





**Abb. 5.26.:** Vergleich des Zylinders mit der deformierten Geometrie bei  $z = 0$  (a); Unterschiede in den Geschwindigkeiten  $u$  für drei Schnittebenen (b).

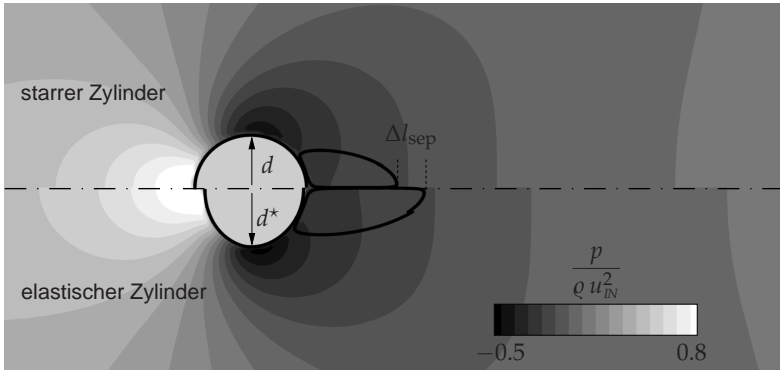
Eine deutliche Veränderung ist in der Länge des Ablösegebiets  $l_{\text{sep}}$  zu beobachten. Diese steigt für den deformierten Zylinder um  $\Delta l_{\text{sep}} \approx 0.31 d$  an. Die maximale Ausdehnung des deformierten Zylinders senkrecht zur Strömungsrichtung beträgt  $d^* \approx 1.122 d$ . Die Reynolds-Zahl in Bezug auf den Ersatzdurchmesser  $d^*$  beträgt  $\text{Re}_{d^*} = 22.44$ . Für die Ablöselänge eines stationär umströmten Zylinders gilt nach ZDRAVKOVICH [133] folgender empirischer Zusammenhang:

$$l_{\text{sep}}^{\text{emp.}} \approx 0.05 \cdot \text{Re}_d \cdot d \quad \text{für } 4.4 < \text{Re}_d < 40 \quad (5.13)$$

Für den starren und den elastischen Zylinder ergeben sich während der Simulation folgende Ablöselängen, die den empirischen Werten gegenübergestellt werden:

$$\begin{array}{lll} \text{statisch :} & l_{\text{sep}}^{\text{cfd}} \approx 0.81 d & l_{\text{sep}}^{\text{emp.}} \approx 1.0 d & l_{\text{sep}}^{\text{cfd}}/l_{\text{sep}}^{\text{emp.}} \approx 0.81 \\ \text{elastisch :} & l_{\text{sep}}^{\text{cfd}} \approx 1.0 d^* & l_{\text{sep}}^{\text{emp.}} \approx 1.122 d^* & l_{\text{sep}}^{\text{cfd}}/l_{\text{sep}}^{\text{emp.}} \approx 0.89 \end{array} \quad (5.14)$$

Die Abweichungen zwischen den theoretischen Werten nach (5.13) und den Ablöselängen der Simulation sind bedingt durch die relative grobe räumliche Diskretisierung sowie das numerisch diffusive Upwind Konvektionsschema. Das Verhältnis zwischen der in der Simulation errechneten Ablöselänge und dem empirischem Wert ist für den elastischen Fall etwa 10% größer als für den statischen. Die Ablöselänge des deformierten Körpers stimmt also näherungsweise mit der eines Zylinders überein, welcher einen Ersatzdurchmesser von  $d^*$  besitzt. Dabei ist jedoch zu beachten, dass die deformierte Geometrie deutlich von der eines Kreiszylinders abweicht. Es kann folglich nicht erwartet werden, dass sich das Strömungsfeld durch einen einfacheren Körper mittels eines Ersatzdurchmesser exakt reproduzieren lässt.



**Abb. 5.27.:** Vergleich des Druckfelds für die Umströmung des elastischen und des starren Zylinders bei  $z = 0.0$ .

### 5.2.3. Diskussion

Abschließend verbleiben einige Punkte bzgl. des verwendeten Verfahrens und der erzielten Ergebnisse zu diskutieren. Die sich rasch einstellende Konvergenz des FSI Residuums folgt aus der Tatsache, dass sich eine stationäre Lösung für das schwach gekoppelte Problem einstellt. Hierfür ist die iterative Kopplung zwischen beiden Simulationsverfahren gut geeignet [120]. Dennoch fällt das FSI Residuum nur auf ein moderates Maß herab. Dass dieses nicht weiter sinkt, liegt an der relativ groben Auflösung des Strömungsgebiets durch das Rechengitter. Zum einen werden weitere Änderungen der Struktur nicht mehr direkt durch das Rechengitter sondern nur noch durch das Interpolationsverfahren erfasst werden, welches abhängig von der tatsächlichen Lage der Schnittpunkte ist (vergleiche Abschnitt 4.5.3). Zum anderen existieren einzelne Zellen, die für weitere FSI Iterationen abwechselnd zum Strömungsgebiet hinzu kommen und dieses wieder verlassen. Diese vereinzelter Bereiche halten das FSI Residuum schließlich auf seinem Niveau.

Das Verfahren, welches die mechanischen Verformungen simuliert, ist anhand einfacher Testfälle verifiziert worden [55]. Die in der gezeigten Anwendung auftretenden Verformungen sind in Bezug auf die Außenmaße der Zylindergeometrie relativ groß. Der den Strukturelementen zugrunde liegende Ansatz basiert jedoch auf der linearen Theorie und ist somit auf kleine Deformationen beschränkt. Demnach müsste für die hier auftretenden Verformungen ein nicht-linearer FE Ansatz gewählt werden, der jedoch in seiner Umsetzung wesentlich komplexer ist.

Durch die beschriebenen Einschränkungen ist das hier implementierte Verfahren zur Struktursimulation nur eingeschränkt praxistauglich. Eine Möglichkeit, den im Vordergrund dieser Arbeit stehenden Strömungslöser zur Simulation praxisrelevanter FSI Fragestellungen zu verwenden, wäre die Nutzung in Verbindung mit bester leistungsfähiger FEM Software.

## 6. Zusammenfassung und Ausblick

Der Einsatz numerischer Methoden zur Strömungssimulation jenseits klassischer Ingenieursdisziplinen wie beispielsweise der Biofluidmechanik stellt eine besondere Herausforderung an die verwendeten Verfahren dar. Hierbei treten auf natürliche Weise entstandene Geometrien auf, die zudem häufig großen Auslenkungen oder Deformationen unterliegen.

Um u. a. die Strömungssimulation in unterschiedlichen Atemwegsgeometrien zu realisieren, wurde ein kartesischer Finite-Volumen Strömungslöser umgesetzt, der in der Lage ist, Randbedingungen an eingetauchten Oberflächengittern zu erfüllen. Ein solcher Immersed Boundary Ansatz ist exzeptionell für derartige Einsatzgebiete geeignet. Als Ausgangspunkt diente ein strukturierter Finite-Volumen Löser [129], welcher sich über Jahre bewährt hat.

### Umsetzung des Verfahrens

Um die Nachteile kartesischer Rechengitter auszugleichen, wurden dynamisch adaptive Gittertechniken implementiert. Diese erlauben auch während der Simulation eine gezielte Verfeinerung (und Vergröberung) des Rechengitters. Die Entscheidung darüber, welche Regionen verfeinert oder vergrößert werden, wird auf der Basis unterschiedlicher Adaptionssensoren getroffen.

Um das Strömungsgebiet vom nicht-Strömungsgebiet unterscheiden zu können, ist eine Identifizierung der vom Oberflächengitter angeschnittenen Gitterzellen erforderlich. Hierzu wurde eine auf einem Binärbaum beruhende geometrische Suche entwickelt, die sowohl robust als auch effizient arbeitet.

Die Randbedingungen am Oberflächengitter werden durch einen s. g. Ghost-Cell Ansatz realisiert, der außerhalb des Strömungsgebiets liegende Zellen gezielt zur Erfüllung der geforderten Bedingung nutzt. Dies erfordert nicht nur Interpolationen der zu setzenden Geschwindigkeiten, sondern auch Anpassungen in der Bestimmung der Gradienten sowie in der Berechnung der Druckkorrektur. Allein auf diesem Wege kann die Massenerhaltung an der Wand, die bei Ghost-Cell Verfahren ein bekanntes Problem darstellt, zufriedenstellend erfüllt werden. Bei bewegten Oberflächengittern wird die Geschwindigkeit der Oberfläche selbst bei der Interpolation berücksichtigt.

Wesentlich umfangreicher gestaltet sich zudem die Ermittlung der vom Fluid hervorgerufenen Kräfte, die im Gegensatz zur Strömungssimulation nicht auf dem Rechen- sondern auf dem Oberflächengitter bestimmt werden.

Die bis hier hin geschaffenen Möglichkeiten gaben Anstoß, das CFD Verfahren mit einem Programm zu Simulation struktureller Deformationen zu koppeln. Es wurde dazu ein FEM Programm auf der Grundlage linearer Schalenelementen

implementiert, welches die Dreieckselemente des Oberflächengitters direkt weiter verwendet.

Alle Implementierungen des Strömungs- und des Strukturverfahrens wurden anhand geeigneter Testfälle eingehend validiert und verifiziert.

### **Anwendung des umgesetzten Verfahrens**

Die zentrale Anwendung der realisierten Methoden findet sich im Bereich der Atemwegsströmungen wieder. Hier kommen die Vorteile des kartesischen Immersed Boundary Verfahrens gegenüber herkömmlichen strukturierten Ansätzen zum Vorschein. Durch den hohen Grad an Automatisierung bezüglich der Gittergenerierung kann bereits kurze Zeit nach der Bereitstellung des Oberflächengitters mit der eigentlichen Simulation begonnen werden.

Die Ergebnisse liefern weitreichende Einblicke in die Strömungsvorgänge unterschiedlicher Atemwegsgeometrien. Neben den Charakteristiken der Hauptströmung in der Trachea, den Haupt- und Nebenbronchien sind es vor allem die sekundären Strömungsbewegungen, die von auffallender Bedeutung sind. Rezirkulationsgebiete während der Inspirationsphase, gegensinnig rotierende Wirbelpaare und signifikant ausgeprägte Strömungsprofile an den Verzweigungen zeugen von der Komplexität der Strömung.

Als Anwendungsfall für die Kopplung mit strukturmechanischen Schalenelementen wurde die quasi stationäre Strömung um eine elastische Zylinderhülle simuliert. Es zeigt sich trotz des einfachen Kopplungsmechanismus eine rasche Konvergenz und damit das Einstellen eines Gleichgewichts zwischen der Strömung und der darauf reagierenden elastischen Struktur.

### **Vor und Nachteile des umgesetzten Verfahrens**

Im Rahmen dieser Arbeit haben sich folgende Vorteile des entwickelten Verfahrens herauskristallisiert:

- Eignung für beliebig geartete Geometrien
- Oberflächengeometrien dürfen starken zeitlichen Änderungen unterliegen
- Robustes Lösungsverhalten (für geringe Reynolds-Zahlen)
- Wegfall manueller Gittergenerierung
- Hohe Effizienz durch die Diskretisierung auf kartesischen Gittern
- Anwendbarkeit zur Kopplung mit Methoden zur Strukturberechnung (FSI)

Durch die genannten Vorteile ist die implementierte Immersed Boundary Methode bestens für die präsentierten Anwendungen aus der Biofluidmechanik und der FSI geeignet. Die überaus facettenreichen und in einzelnen Abschnitten mit scharfen Kanten, Knicken und Hinterschneidungen versehenen Oberflächen der Atemwegsgeometrien lassen eine strukturierte Vernetzung an dieser Stelle ausscheiden. Andererseits sind die in den gezeigten Anwendungen herrschenden Reynolds-Zahlen im Vergleich zu typischen Ingenieurfragestellungen sehr gering ( $Re \approx 2000$ ), was dem Aspekt der Stabilität zu Gute kommt.

Direkt hieran schließen sich die Nachteile der umgesetzten Methode an. Einige da-

---

von sind bekanntermaßen Defizite des IB Ansatzes an sich, andere wiederum sind allein auf die individuelle Umsetzung im Rahmen dieser Arbeit zurückzuführen. Dazu zählen im Wesentlichen:

- Adäquate Wandauflösung trotz Gitteradaption problematisch
- Mitunter schlechtes Konvergenzverhalten
- Stabilitätsprobleme bei großen Reynolds-Zahlen
- Mehraufwand in der Randbehandlung durch: Interpolationen, Korrekturen, Suche geometrischer Zugehörigkeiten und Beachtung diverser Sonderfälle

Bisweilen zeigt sich ein schlechtes Konvergenzverhalten, das insbesondere von der betreffenden Reynolds-Zahl abhängt. Für hohe Reynolds-Zahlen kann z.T. keine Konvergenz erreicht werden und das Verfahren zeigt sich instabil. Dies ist ein bekanntes Problem IB basierter Strömungslöser; jedoch existieren auch Implementierungen, die derlei Probleme nicht aufweisen [7]. Die Vorteile durch den Wegfall krummliniger Anteile in der Diskretisierung auf kartesischen Gittern werden durch den Mehraufwand in der wesentlich komplizierteren Behandlung der Randbedingungen kompensiert.

### **Fazit**

Zusammenfassend lässt sich folgendes festhalten: Es wurde im Rahmen dieser Arbeit ein numerisches Verfahren auf der Basis einer Ghost-Cell Immersed Boundary Methode zur Simulation von Strömungen umgesetzt, verifiziert und validiert. Die anschließende erfolgreiche Anwendung u. a. im Bereich der Atemwegsströmungen zeugt von dem hohen Nutzen und den Vorteilen einer solchen Methode, insbesondere bei der Aufgabe komplexe und bewegte Geometrien zu berücksichtigen. Die unübersehbaren Nachteile sind größtenteils bedingt durch die individuelle Umsetzung und können als Motivation für zukünftige Verbesserungen betrachtet werden.

### **Ausblick**

Hinsichtlich des Verfahrens sind neben der Realisation momentan nicht existierender Funktionalitäten insbesondere Verbesserungen bestehender Komponenten denkbar. Folgende Punkte wären erforderlich, um das Verfahren vielseitiger einsetzen zu können:

- IB Druckrandbedingung
- Periodische Randbedingung am Rechengitter
- Anpassung der IB Randbedingungen für Wilcox  $k-\omega$  Turbulenzmodell
- Erweiterungen zur Grobstruktursimulation (LES)
- Vollständige Parallelisierung der Gitteradaption und dynamische Lastverteilung beispielsweise mittels ParMETIS [62]

Es besteht die Vermutung, dass eine optimierte IB Wandrandbedingung unter Verwendung einer höherwertigen bzw. andersartig strukturierten Interpolation der Geschwindigkeiten [79, 94] Probleme hinsichtlich der Konvergenz, der Stabilität und der Einschränkung auf kleine Reynolds-Zahlen beheben könnte.

Eine Reduktion des zu lösenden linearen Gleichungssystems um die Zellen des nicht-Strömungsgebiets würde mit einer erheblichen Effizienzsteigerung einhergehen, insbesondere wenn der Anteil an Zellen des nicht-Strömungsgebiets groß ist. Vom Aspekt der Anwendung wären im Bereich der Atemwegsstörungen geeigneterer Randbedingungen für die Ein- und insbesondere Auslässe wünschenswert. Hier sollte eine Umstellung auf Druckrandbedingungen mit optionaler Impedanzmodellierung [18] präferiert werden. Um technisch relevante Fragestellungen der Fluid-Struktur-Interaktion zu simulieren, wäre eine Kopplung mit einer kommerziellen oder frei verfügbaren Software zur Struktursimulation denkbar.

## A. Anhänge zur Theorie und zur Umsetzung

### A.1. BiCGSTAB

Der nebenstehende Algorithmus 1 veranschaulicht das BiCGSTAB Verfahren nach VAN DER VORST [123]. Dabei ist  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$  das iterativ zu lösende Gleichungssystem. Die Größen  $\mathbf{x}_0$  und  $\mathbf{r}_0$  stellen den initialen Lösungsvektor bzw. das anfängliche Residuum dar. Unter  $\|\mathbf{r}_m\|_2$  ist die Euklidische Norm des momentanen Residuenvektors  $\mathbf{r}_m$  zu verstehen,  $\epsilon$  definiert die untere Schranke des Residuums und  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  steht für das Skalarprodukt zweier Vektoren.

---

**Algorithmus 1:** BiCGSTAB( $\mathbf{A}, \mathbf{x}, \mathbf{b}$ ) nach MEISTER [81]

---

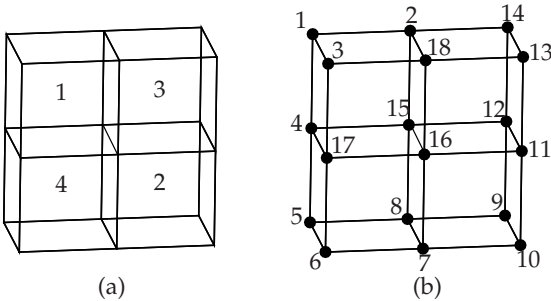
```
wähle  $\mathbf{x}_0, \epsilon$ 
 $\mathbf{r}_0 = \mathbf{p}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0, \rho_0 = \langle \mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0 \rangle, m = 0$ 
while  $\|\mathbf{r}_m\|_2 > \epsilon$  do
     $\mathbf{v}_m = \mathbf{A}\mathbf{p}_m, \alpha_m = \frac{\rho_m}{\langle \mathbf{v}_m, \mathbf{r}_0 \rangle}$ 
     $\mathbf{s}_m = \mathbf{r}_m - \alpha_m \mathbf{v}_m, \mathbf{t}_m = \mathbf{A}\mathbf{s}_m$ 
     $\omega_m = \frac{\langle \mathbf{t}_m, \mathbf{s}_m \rangle}{\langle \mathbf{t}_m, \mathbf{t}_m \rangle}$ 
     $\mathbf{x}_{m+1} = \mathbf{x}_m + \alpha_m \mathbf{p}_m + \omega_m \mathbf{s}_m$ 
     $\mathbf{r}_{m+1} = \mathbf{s}_m - \omega_m \mathbf{t}_m$ 
     $\rho_{m+1} \langle \mathbf{r}_{m+1}, \mathbf{r}_0 \rangle, \beta_m = \frac{\alpha_m \rho_{m+1}}{\omega_m \rho_m}$ 
     $\mathbf{p}_{m+1} = \mathbf{r}_{m+1} + \beta_m (\mathbf{p}_m - \omega_m \mathbf{v}_m)$ 
     $m = m + 1$ 
end
```

---

### A.2. Datenstruktur des Rechengitters

Die Volumenzellen  $C$  des kartesischen Rechengitters  $\Omega$  sind durch einen fortlaufenden Index nummeriert ( $C = 1 \dots N^C$ ). Da die Zellnummerierung die Bandbreite der Koeffizientenmatrix bestimmt, ist diese so zu wählen, dass die Zellindizes benachbarter Elemente möglichst eng zusammen liegen. Bei der Nummerierung der

Knotenpunkte ( $k = 1 \dots N^k$ ) gilt keine derartige Besonderheit. Die Zellen selbst sind über ihre acht Knotenpunkte definiert, die in einer Koinzidenztafel gespeichert werden. Die Tabelle A.1 zeigt die Koinzidenztafel sowie die Knotenliste für das in Abbildung A.1 dargestellte Beispiel.



**Abb. A.1.:** Unstrukturierte Datenhaltung des Rechengitters: Nummerierung der Zellen  $C$  (a) und Nummerierung der Knoten  $k$  (b).

$C$	$k_1$	$k_2$	$k_3$	$k_4$	$k_5$	$k_6$	$k_7$	$k_8$
1	4	15	2	1	17	16	18	3
2	8	9	12	15	7	10	11	16
3	15	12	14	2	16	11	13	18
4	5	8	15	4	6	7	16	17

(a)

$k$	$x$	$y$	$z$
1	0.0	2.0	0.0
2	1.0	2.0	0.0
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
18	1.0	2.0	1.0

(b)

**Tab. A.1.:** Koinzidenztafel der Volumenzellen  $C$  (a) und Koordinaten der Knoten  $k$  (b) des kartesischen Rechengitters aus Abbildung A.1.

A.3. Sparse Matrix Format (CRS)

Das s. g. *Compressed Row Storage* (CRS) Format ist eine gängige Methode, beliebig dünn besetzte Matrizen in Form dreier Vektoren kompakt zu speichern. Für eine exemplarische Matrix  $\mathbf{A}$  soll dies verdeutlicht werden.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & a_{13} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} & 0 \\ a_{41} & 0 & 0 & a_{44} & a_{45} \\ 0 & 0 & a_{53} & 0 & a_{55} \end{pmatrix}$$



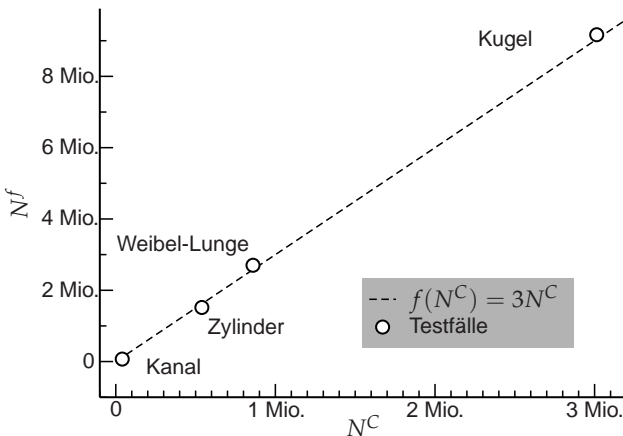
Der Vektor **val** beinhaltet die Werte der zu speichernden Matrix, während ein wei-

Vektor	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
<b>val</b>	$a_{11}$	$a_{13}$	$a_{21}$	$a_{22}$	$a_{32}$	$a_{33}$	$a_{34}$	$a_{41}$	$a_{44}$	$a_{45}$	$a_{53}$	$a_{55}$
<b>col</b>	1	3	1	2	2	3	4	1	4	5	3	5
<b>row</b>	1	3	5	8	1	13						

**Tab. A.2.:** Vektoren des CRS Formats für die beispielhafte Matrix **A**.

terer Vektor (**col**) angibt, in welcher Spalte der Matrix diese stehen. Die Einträge des dritten Vektors (**row**) verweisen jeweils auf das erste Element der neuen Zeile von Matrix **A** und können somit als *Zeiger* zu den Einträgen von **val** bzw. **col** verstanden werden. Der letzte Eintrag von **row** zeigt auf einen schon nicht mehr vorhandenen Eintrag. Die Tabelle A.2 zeigt die drei Vektoren für die beispielhafte Matrix **A**. Anleitungen zur Überführung dicht besetzter Matrizen in das CRS Format bzw. die grundlegenden Rechenoperationen im CRS Format (Matrix-Vektor, Matrix-Matrix) werden ausführlich in SAAD [101] vorgestellt.

#### A.4. Quantitativer Zusammenhang: Zell- und Flächenelemente

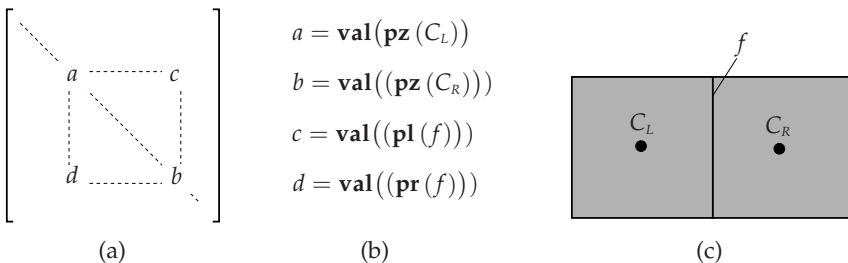


**Abb. A.2.:** Zusammenhang zwischen der Anzahl der Kontrollvolumen ( $N^C$ ) und der zugehörigen Flächenelemente ( $N^f$ ) für beispielhafte Testfälle.

## A.5. Gitter Präprozess

Im Präprozessor wird das Rechengitter für die Simulation aufbereitet. Dieser Arbeitsschritt umfasst neben der Bestimmung geometrischer Eigenschaften auch das Definieren der Randbedingungen, die Aufteilung des Rechengitters für Parallelrechnungen sowie das Bereitstellen der erforderlichen Kommunikationsinfrastruktur. Die Ausgabe des aufbereiteten Rechengitters erfolgt im CGNS Datenformat [100]. Die Schritte des Präprozessors sind in folgender Box zusammengefasst.

1. Einlesen des Gitters (Knotenkoordinaten und Koinzidenztafel)
2. Einlesen der Randflächen
3. Zerlegung des Rechengitters durch METIS [62]
4. Generierung fehlender Flächenelemente (innere Flächen, Kommunikationsflächen)
5. Ermittlung der an die Flächen grenzenden Kontrollvolumen ( $C_{R,L}$ )
6. Aufbau der Koeffizientenmatrix im CRS Format (vergleiche Abschnitt A.3)
  - CRS Datenfelder der Koeffizientenmatrix: **val**, **col**, **row**
  - Zeiger **pz** zu den Einträgen der zentralen Koeffizienten in **val**
  - Zeiger **pl**, **pr** zu den Einträgen der Nachbarkoeffizienten in **val** (siehe Abbildung A.3 zur Veranschaulichung der Zeiger)
7. Schreiben der Ausgabedateien



**Abb. A.3.:** Koeffizientenmatrix (a); Zeiger, die zu Einträgen im Wertevektor **val** der Koeffizientenmatrix zeigen (b) und zugehörige Notation am Rechengitter (c).

## A.6. Zuordnungsumkehr

Für jedes Kontrollvolumen sind die acht definierenden Knotenpunkte bekannt. Die Umkehr davon, also die Information, welche Kontrollvolumen von einem bestimmten Knoten abhängen, ist jedoch nicht gegeben. Ebenso verhält es sich bei den Flächenelementen. Zu jeder Fläche werden die links und rechts angrenzenden Kontrollvolumen  $C_{L,R}$  gespeichert. Die umgekehrte Auskunft, welche Flächen an ein bestimmtes Volumen grenzen, ist nicht existent. Für einige Vorgänge ist aber gerade diese umgekehrte Zuordnung von großer Bedeutung, wenn z. B. alle (auch die über die Ecken angrenzenden) Nachbarzellen eines Kontrollvolumens betrachtet werden sollen. Die Generierung einer solchen *Zuordnungsumkehr* wird hier am Beispiel der Knoten–Volumen Zuordnung in Algorithmus ?? gezeigt. Nach dem Ausführen

---

### Algorithmus 2: ConnectivityReversal

---

**Input :**  $N^k$ ,  $N^C$ ,  $C$ ,  $k$ .

**Output :**  $R$ .

$R(1:8, 1:N^k) = 0$  *maximal 8 anhängende Kontrollvolumen je Knoten*

**for**  $i = 1, N^C$  **do** *für alle Volumen*

$C = C(i)$  *Zell-ID*

**for**  $j = 1, 8$  **do** *für alle Knotenpunkte des Volumens*

$k = k(C, j)$  *Knoten-ID*

$R(1, k) = C$  *speichere an die erste Position im Feld*

*CircularShift*( $R(:, k)$ ) *zirkulare Verschiebung der Elemente im Feld*

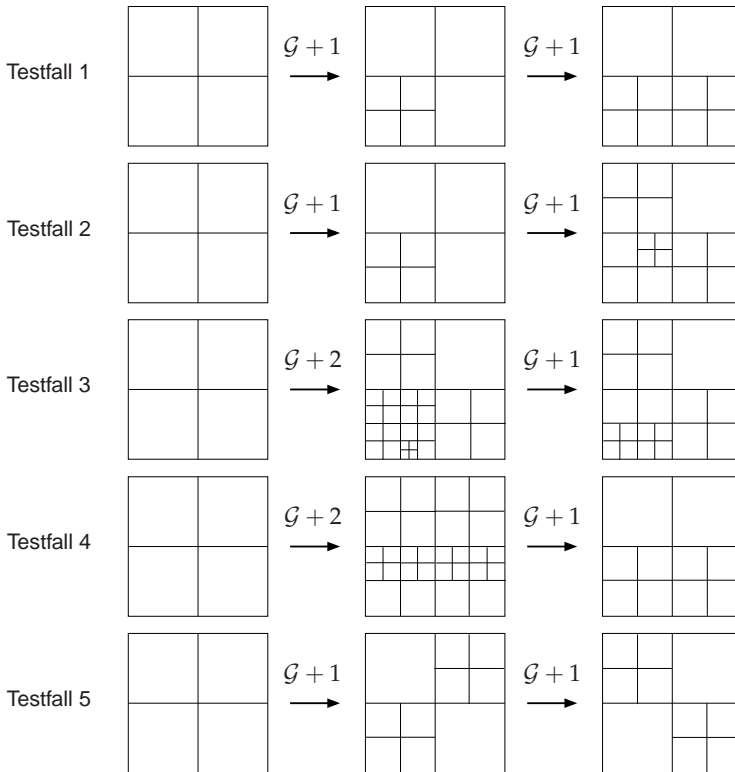
**end**

**end**

---

enthält die Liste  $R$  für jeden Knoten  $k$  des Gitters alle vom Knoten abhängenden Kontrollvolumen. Kernfunktion dieser effizienten Umsetzung ist die zirkulare Verschiebung (*CircularShift*), die alle Elemente eines Felds um einen Index verrückt, wobei das letzte Element an die erste Stelle gelangt. Der numerische Aufwand verhält sich linear bezüglich der Anzahl der Volumenzellen.

## A.7. Testfälle der Gitteradaption



**Abb. A.4.:** Einige Testfälle (2D Darstellung) zur Verifikation der Gitteradaption.

## A.8. Datenstruktur des Oberflächengitters

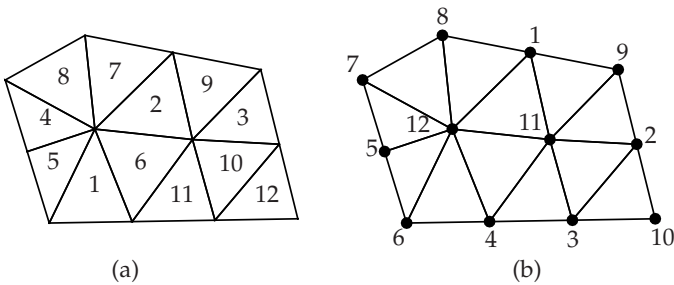
Die Oberflächendiskretisierung besteht aus Dreieckselementen, die unstrukturiert in Form einer ASCII Datei gespeichert werden. Je Gitterdatei kann eine Randbedingung vergeben werden. Über eine Steuerdatei (siehe graue Box) sind die Gitterdateien mit den Randbedingungen verknüpft. Nach dem Namen der Gitterdatei folgt der Randbedingungstyp (1=Einströmrund, 2=Ausströmrund, 3=Symmetrieland, 5=Wandrand). Vor der Nummer der Randbedingung ist die Anzahl der Dreiecke ( $N^\Delta$ ) und die Knoten ( $N^k$ ) vermerkt. Im Fall eines Einstromrandes folgen in den nächsten zwei Zeilen die vorzugebenden Randwerte.

```

inlet.ascii 823 1142 1
# UIN      VIN      WIN      TIN      PIN      KIN      EPSIN
1.0 0.0 0.0 273.15
outlet.ascii 912 1231 2
symet.ascii 1409 1983 3
wall.ascii 1409 1983 5

```

Über die Knotenpunkte (Abbildung A.5b) sind die Dreiecke (Abbildung A.5a) definiert. Die zugehörige Koinzidenztafel und die Knotenliste des gezeigten Beispiels sind in Tabelle A.3 angegeben. Unabhängig von der Anzahl unterschiedlicher Gitter-



**Abb. A.5.:** Datenstruktur des Oberflächengitters, bestehend aus  $N^\Delta = 12$  Dreieckselementen und  $N^p = 12$  Knoten. Nummerierung der Dreiecke  $\Delta$  (a) und Nummerierung der Knoten  $p$  (b).

dateien existiert nach dem Einlesen nur eine Koinzidenztafel und eine Knotenliste, in der sukzessive alle Elemente gespeichert werden. Je Dreieck kann ein Randbedingungstyp vergeben werden.

$\Delta$	$p_1$	$p_2$	$p_3$
1	6	4	12
2	12	11	1
3	11	2	9
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
12	3	10	2

(a)

$p$	$x$	$y$	$z$
1	-0.2859	0.1401	0.0000
2	-0.1233	0.0000	0.0000
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
12	-0.40517	0.0231	0.0000

(b)

**Tab. A.3.:** Koinzidenztafel der Dreieckselemente  $\Delta$  (a) und Koordinaten der Knoten  $k$  (b) des Oberflächengitters aus Abbildung A.5.

## A.9. Algorithmus zur Suche von Objekten in einem Binärbaum

---

### Algorithmus 3: TreeSearch ( $\mathcal{N}$ , $G$ )

---

**Input** : Wurzelknoten  $\mathcal{N}$  und zu identifizierendes Objekt  $G$ .

**Output** : Blattknoten  $\mathcal{B}$ , welcher das Objekt  $G$  enthält.

**begin**

```
  if ( $\mathcal{L}(\mathcal{N}) == \mathcal{L}_{\max}$ ) then  Blattebene erreicht
    |  $\mathcal{B} = \mathcal{N}$   Objekt liegt in diesem Blattknoten
    | return
  end
   $\mathcal{K}_1 \leftarrow \text{Child}(\mathcal{N}, 1)$   identifiziere 1. Kindknoten
   $\mathcal{K}_2 \leftarrow \text{Child}(\mathcal{N}, 2)$   identifiziere 2. Kindknoten
  if ( $G \in \mathcal{K}_1$ ) then  Objekt liegt im 1. Kindknoten
    | call TreeSearch( $\mathcal{K}_1, G$ )  erneuter Aufruf der Funktion
  else if ( $G \in \mathcal{K}_2$ ) then  Objekt liegt im 2. Kindknoten
    | call TreeSearch( $\mathcal{K}_2, G$ )  erneuter Aufruf der Funktion
  end
```

**end**

---

## A.10. Algorithmus zur Markierung des Strömungsgebiets

---

### Algorithmus 4: Marking

---

**Input** : Innere Flächen  $f$  und getroffene Flächen  $f^{\text{IB}}$ .

**Output** : Markierungsvariable  $\chi$ .

**begin**

```
   $\chi(\cdot) = 0$   Initialisierung
   $\chi(1) = 1$   Markierungsvariable für eine Zelle
  repeat
    for  $f = 1, N^f$  do
       $C_L, C_R$   angrenzende KV
      if ( $f \in f^{\text{IB}}$ ) then  $s = -1$   Fläche getroffen
      if ( $f \notin f^{\text{IB}}$ ) then  $s = +1$   Fläche nicht getroffen
      if ( $\chi(C_L) \neq 0$ ) then  $\chi(C_R) = s \cdot \chi(C_L)$   markiere Nachbarzelle
      if ( $\chi(C_R) \neq 0$ ) then  $\chi(C_L) = s \cdot \chi(C_R)$   markiere Nachbarzelle
    end
  until alle Zellen markiert ( $\chi \neq 0$ )
```

**end**

---

## B. Anhänge zur Anwendung des Verfahrens

### B.1. Arbeitsablauf: vom VCT Scan zur CFD Simulation

Der Arbeitsablauf zwischen den unterschiedlichen Arbeitsgruppen (Medizin, Medizin-Informatik und Strömungsmechanik) ist in Abbildung B.1 dargestellt. In einem medizinischen Experiment werden mit Hilfe radiologischer Untersuchungen (4D VCT) räumlich wie zeitlich aufgelöste Bilddaten der Atemwege gewonnen. In dem darauf folgenden Schritt wird durch eine s. g. *Segmentierung* die Oberflächenbeschreibung der Atemwege für jeden Zeitschritt gewonnen. Durch einen *Registrierungsalgorithmus*, der eine räumliche Zuordnung zwischen verschiedenen Konfigurationen herstellt, lassen sich schließlich die zu den gewonnenen Oberflächen gehörigen Deformationsfelder ermitteln. Vor der Simulation ist ein Beschnitt der Geometrie, und eine Interpolation zur Erhöhung der zeitlichen Auflösung (vergleiche Abschnitt B.1.3) sowie ggf. eine Glättung der Oberfläche erforderlich. Eine detaillierte Beschreibung des Ablaufs findet sich u. a. in der Arbeit von FREDERICH et al. [35].

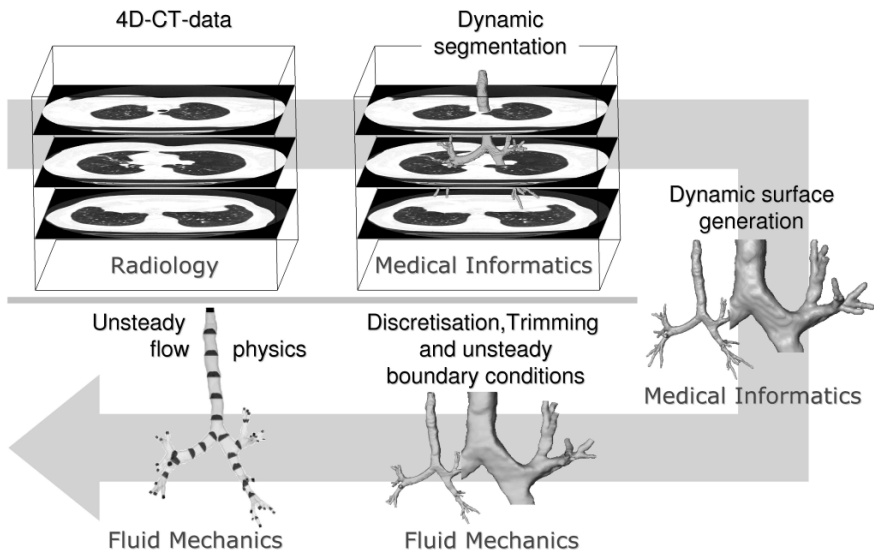
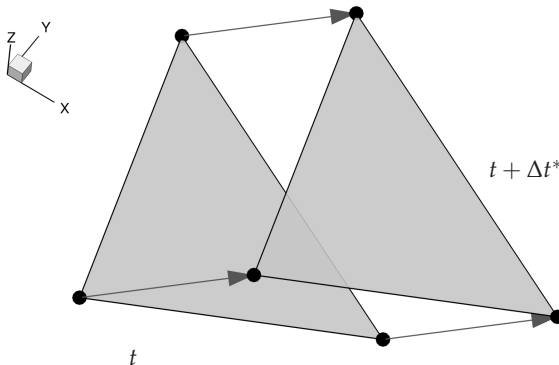


Abb. B.1.: Darstellung des interdisziplinären Arbeitsablaufs zur nach [34].

### B.1.1. Bestimmung der Deformationsfelder

Im Fall zeitlich aufgelöster VCT Experimente liegen nach einer zeitlichen Synchronisation mittels eines Gating-Signals [53] die Oberflächendaten aller Zeitpunkte mit einem konstanten Zeitabstand von  $\Delta t^*$  vor. Um eine räumliche Zuordnung zwischen den unterschiedlichen Oberflächen herzustellen, wird folgender Weg beschritten: Die erste Oberfläche wird als Ausgangskonfiguration betrachtet, welche über entsprechende Transformationsschritte in die übrigen Konfigurationen überführt wird. Bei dieser (räumlich) globalen Transformation werden je Zeitschritt neun Freiheitsgrade berücksichtigt (Rotation, Translation und Skalierung bezüglich der drei Raumrichtungen). Die Bestimmung der Freiheitsgrade beruht auf der Tatsache, dass die transformierte Geometrie die entsprechende reale Oberfläche möglichst gut wiedergeben soll. Durch dieses Vorgehen bleibt die Struktur des Oberflächengitters erhalten und nur die Koordinaten der Knotenpunkte variieren, was einen deutlichen Vorteil bezüglich des weiteren Vorgehens darstellt. Als Nachteil einer solchen s. g. *rigiden Registrierung* ist zu sehen, dass durch die globale Transformation kleinere, lokale Veränderungen zwischen zwei Zeitpunkten unberücksichtigt bleiben. Die resultierenden Deformationsfelder bestehen aus Vektoren, die den Knotenpunkten  $p$  des Oberflächengitters zugeordnet sind (siehe Abbildung B.2). Durch ein sukzessives Addieren der Verschiebungsvektoren zu den Knotenkoordinaten werden ausgehend von der ersten Oberflächengometrie die Konfigurationen ( $M_1 \dots M_n$ ) aller folgenden Zeitpunkte erreicht. Zur Erhöhung der zeitlichen Auflösung findet eine Interpolation zwischen den gegebenen Konfigurationen statt (vergleiche Abschnitt B.1.3).

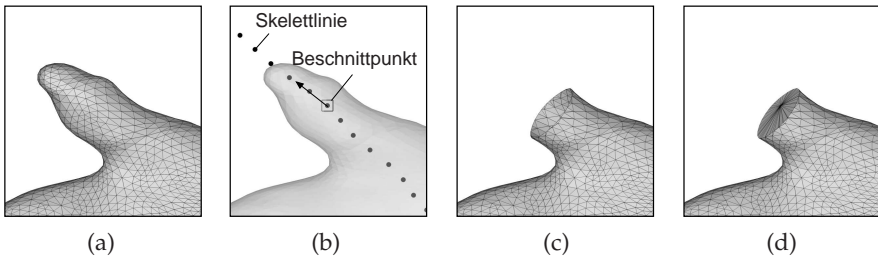


**Abb. B.2.:** Verschiebungsfelder für die Knotenelemente des Oberflächengitters.



### B.1.2. Beschnitt des Oberflächengitters

Der Segmentierungsprozess liefert eine oder mehrere geschlossene Oberflächen der Atemwegsgeometrie. In Bereichen, in denen der Segmentierungsalgorithmus endet, muss das Oberflächennetz beschnitten werden. Des Weiteren ist das Erzeugen definierter Ebenen erforderlich, an denen später die Ein- und Ausströmrandbedingungen erfüllt werden. Zur Umgehung einer zeitaufwändigen manuellen Korrektur des Oberflächengitters wird ein halb-automatisierter Prozess zum Oberflächenbeschnitt verwendet. Abbildung B.3a zeigt das Ende eines segmentierten Nebenbronchus direkt nach der Segmentierung. Auf der Skelettlinie, die ebenfalls dem Segmentierungsprozess entstammt, wird ein Schnittpunkt ausgewählt. Durch den gewählten Punkt und die lokale Richtung der Skelettlinie (B.3b) wird eine Beschnittebene definiert. Elemente jenseits dieser Ebene<sup>1</sup> werden entfernt und angeschnittene Dreiecke derart modifiziert, dass ihre neuen Knotenpunkte innerhalb der Beschnittebene liegen (B.3c). Abschließend wird die Ebene des frei geschnittenen Bereichs



**Abb. B.3.:** Teilschritte des automatisierten Beschnitts einer Lungengeometrie.

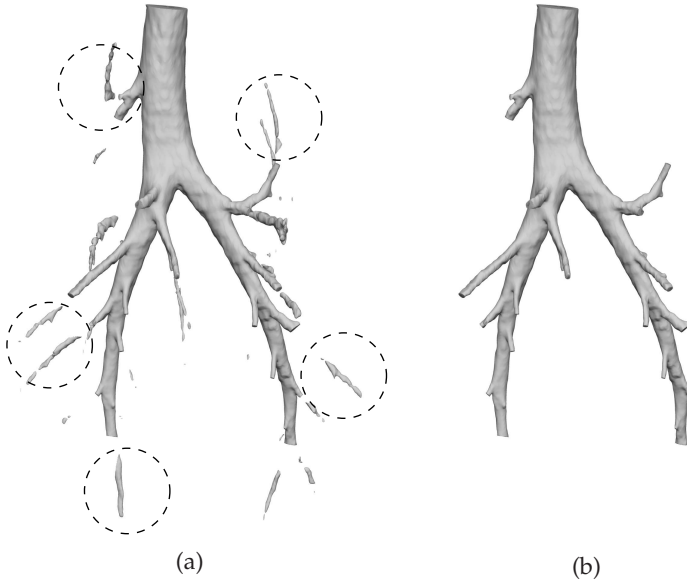
mit neuen Elementen vernetzt (B.3d). Diese werden aus den Knotenpunkten der umlaufenden Schnittkante und einem in dieser Ebene liegenden Zentrumsknoten gebildet. Die Herangehensweise hat zwar Elemente mit stark ungleichen Seitenlängen zur Folge, ist aber dafür deutlich einfacher in der Umsetzung, als beispielsweise eine Delauny-Triangulierung [44].

#### Automatische Bereinigung

Beim Beschnitt des Oberflächengitters werden diejenigen Elemente entfernt, die sich jenseits der Beschnittebene und zusätzlich innerhalb eines festgelegten Bereiches befinden. Nur so kann verhindert werden, dass Elemente anderer Zweige irrtümlich gelöscht werden. Die Überreste längerer Verzweigungen, die jenseits des Beschnittbereichs liegen (siehe Abbildung B.4a), müssen separat entfernt werden. Ausgehend von einem Dreieckselement, welches definitiv der Hauptgeometrie zugehört, werden nacheinander alle direkt anhängenden Elemente markiert (hierzu wird eine Zuordnungsumkehr bezüglich der Dreieckselemente genutzt; siehe Abschnitt A.6).

<sup>1</sup>Der Beschnitt wird auf der Seite der Ebene durchgeführt, die dem Schwerpunkt der gesamten Oberflächengeometrie abgewandt ist.

Die Elemente, die von dem Algorithmus nicht markiert werden, da sie keine direkte Verbindung zur Hauptgeometrie aufweisen, werden verworfen. Die nach dem Beschnitt bereinigte Geometrie ist in Abbildung B.4b zu sehen.

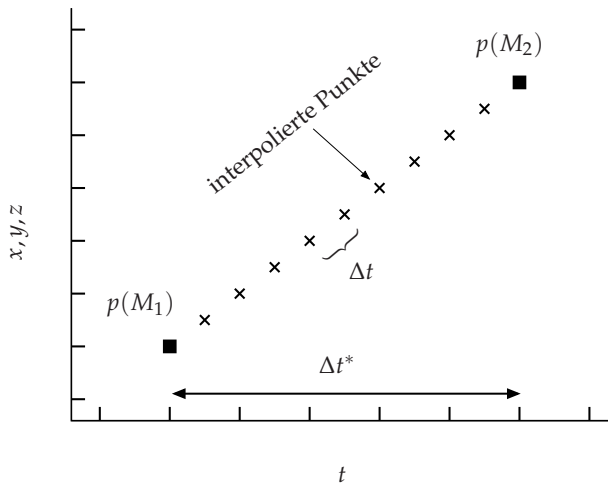


**Abb. B.4.:** Beschnittene Geometrie vor (a) und nach (b) der automatischen Bereinigung.

### B.1.3. Interpolation der Deformationsfelder

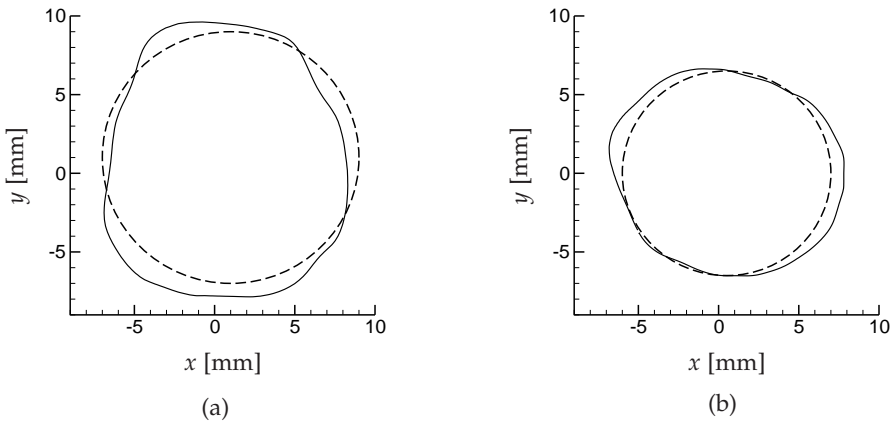
Die Deformationsfelder, welche die Dynamik des Trachealbaums beschreiben, liegen in Form von Verschiebungsvektoren für jeden einzelnen Knotenpunkt vor (vergleiche Abbildung B.2). Nach einem Beschnitt der Geometrie (siehe Abschnitt B.1.2) werden für die neu entstandenen Knotenpunkte (in der Beschnittebene) die Verschiebungen durch eine Mittelung angrenzender Knotenpunkte bestimmt.

Die Dynamik der Oberfläche im Anwendungsfall SCHWEIN wird durch 10 Momentaufnahmen je Atemzyklus repräsentiert. Um eine höhere zeitliche Auflösung zu erlangen, werden weitere Zwischenschritte durch eine lineare Interpolation erzeugt. Abbildung B.5 zeigt schematisch die durch eine Interpolation generierten Zwischenstufen für einen einzelnen Knotenpunkt  $p$  zweier aufeinander folgenden Momentaufnahmen.



**Abb. B.5.:** Interpolation der Koordinaten eines Knotenpunkts  $p$  zwischen zwei zeitlichen Momentaufnahmen  $M_1$ , bzw.  $M_2$  mit einem Zeitabstand von  $\Delta t^*$ . Die zeitliche Auflösung während der Simulation erfolgt mit  $\Delta t$ .

## B.2. Ersatzdurchmesser



**Abb. B.6.:** Ersatzdurchmesser (gestrichelt dargestellt) für die Trachea der Anwendungsfälle MENSCH (a) und SCHWEIN (b).

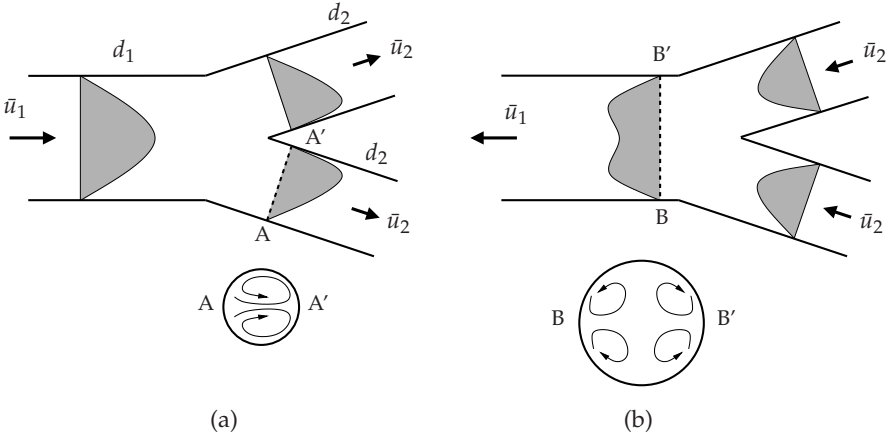
## B.3. Strömung in einer Verzweigung

Abbildung B.7 zeigt schematisch die Strömungsprofile in einer Rohrverzweigung. Der Hauptast (Durchmesser  $d_1$ ) teilt sich symmetrisch in zwei Nebenäste (Durchmesser  $d_2$ ) auf, die entsprechend die Hälfte des im Hauptast vorhandenen Massenstroms aufweisen. Bedingt durch die Strömungsrichtung wird im ersten Fall (Abbildung B.7a) der Massenstrom aufgeteilt; im zweiten Fall (Abbildung B.7b) werden die Massenflüsse vereinigt. Vor der Verzweigung herrscht in beiden Fällen ein ausgebildetes Laminarprofil.

In der ersten Variante (Abbildung B.7a) trifft der Bereich der höchsten Geschwindigkeiten auf die innere Wand der Verzweigung, wo sich in Folge der dort auftretenden Wandhaftung neue Grenzschichten ausbilden. Die parabolische Geschwindigkeitsverteilung vor der Verzweigung führt bereits zu einer ungleichförmigen Verteilung innerhalb der Nebenäste. Ein weiterer Grund für die Asymmetrie des Profils ist durch die Umlenkung des Fluids und die damit verbundenen Zentrifugalkräfte, die das Fluid in Richtung Verzweigungsinnenseite drängen (Krümmungsströmung), gegeben. Diese Querbewegung führt dazu, dass die Strömung stromab der Verzweigung über zwei gegensinnig rotierende Wirbel (Deanwirbel) verfügt. Mit steigender Lauflänge klingen diese sekundären Bewegungen des Fluids jedoch wieder ab.

Im umgekehrten Fall (Abbildung B.7b) werden zwei voll entwickelten Strömungsprofile zusammengeführt. Durch den Wegfall der Wand im Inneren vereinigen sich

die Grenzschichten der beiden Zuströme, die zunächst geringere Geschwindigkeiten aufweisen. Daraus resultiert ein Profil mit einem lokalen Minimum im Zentrum der Rohrlängsachse. Wie im ersten Fall sorgt die Umlenkung an der Verzweigung für gegensinnig rotierende Bereiche, die sich im Hauptast zu nunmehr vier Wirbeln vereinigen. Wie stark die beschriebenen Phänomene ausgeprägt sind, hängt maßgeblich von der Geometrie der Verzweigung und der Reynolds-Zahl ab. Die entstehenden Wirbel beziehen ihre Energie aus der Hauptströmung, die sich dementsprechend geringfügig verzögert [135]. Das Verhältnis der Durchmesser  $d_1/d_2$  ist eine



**Abb. B.7.:** Schematische Darstellung der Geschwindigkeitsprofile in einer Rohrverzweigung für beide Strömungsrichtungen.

wichtige geometrische Eigenschaft für die Strömung in einer Verzweigung. Mit Hilfe der mittleren Geschwindigkeiten  $\bar{u}_1$  bzw.  $\bar{u}_2$  lässt sich für jede der Verzweigungsgenerationen eine *lokale Reynolds-Zahl* ermitteln:

$$\text{Re}_1 = \frac{\bar{u}_1 \cdot d_1}{\nu} \quad \text{und} \quad \text{Re}_2 = \frac{\bar{u}_2 \cdot d_2}{\nu} \quad (\text{B.1})$$

Da die Massen- und damit die Volumenströme innerhalb des Systems erhalten bleiben ( $\dot{V}_1 = 2\dot{V}_2$ ), hängen die mittleren Geschwindigkeiten allein vom Kreisquerschnitt und damit vom Durchmesser ab:

$$\bar{u}_2 = \bar{u}_1 \cdot \frac{d_1^2}{2d_2^2} \quad (\text{B.2})$$

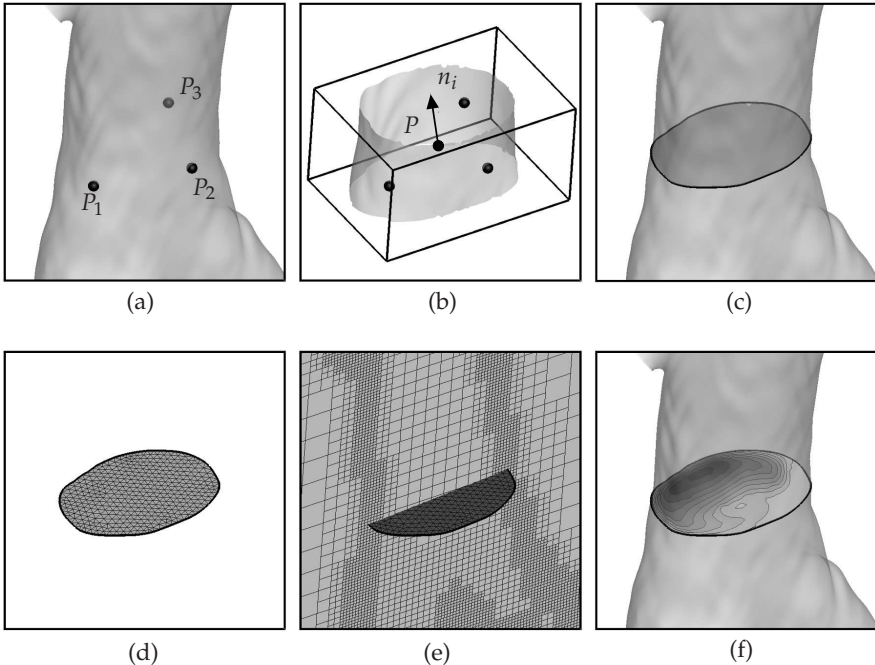
Einsetzen von (B.2) in (B.1) liefert die lokale Reynolds-Zahl der nächsthöheren Verzweigungsgeneration in Abhängigkeit des Durchmessers  $d_2$ :

$$\text{Re}_2 = \text{Re}_1 \cdot \frac{d_1}{2d_2} \quad (\text{B.3})$$

#### B.4. Visualisierung in dynamischen Atemwegsgeometrien

Zur Visualisierung der Strömungsdaten werden u. a. Schnittebenen und einzelne Beobachtungspunkte verwendet. Ist die Geometrie der Innenströmung zeitlich veränderlich, so wird ein entsprechendes *Mitbewegen* der Schnittebenen bzw. der Beobachtungspunkte erforderlich. Im Folgenden wird dieses Vorgehen kurz skizziert.

**Ablauf bei der Visualisierung mitbewegter Schnittebenen:**



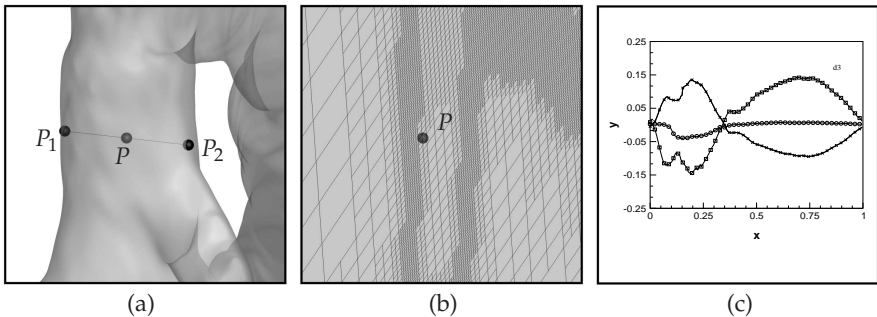
**Abb. B.8.:** Schematischer Ablauf zur Visualisierung dynamischer Schnittebenen in einer zeitlich veränderlichen Atemwegsgeometrie.

- (a) Jeder darzustellende Schnitt wird einmalig über drei Punkte ( $P_1$ ,  $P_2$ ,  $P_3$ ) des Oberflächengitters definiert. Bei der dynamischen Geometrie ist so die Lage des Schnittes für jeden Zeitpunkt eindeutig definiert.
- (b) Aus den momentanen Koordinaten der drei Definitionspunkte wird ein Zentrumspunkt  $P$  und der Flächennormalenvektor  $n_i$  ermittelt. Außerdem wird basierend auf dem Kreis, der durch die drei Punkte definiert ist, eine Begrenzungsbox erzeugt.
- (c) Mit Hilfe von Tecplot wird innerhalb der Begrenzungsbox ein Schnitt zwischen der zuvor definierten Schnittebene ( $P$ ,  $n_i$ ) und dem Oberflächengitter  $\Gamma_b$  er-

zeugt.

- (d) Die Fläche, die von der Schnittkontur umrandet ist, wird mittels einer Delauny-Triangulierung [44] automatisch vernetzt.
- (e) Es folgt eine Interpolation der Strömungslösung mittels Tecplot vom kartesischen Rechengitter auf die Knotenpunkte der vernetzten Schnittebene.
- (f) Abschließend erfolgt die Darstellung der gewünschten Strömungsdaten innerhalb der extrahierten Schnittebene.

**Ablauf bei der Visualisierung mitbewegter Beobachtungspunkte:**



**Abb. B.9.:** Schematischer Ablauf zur Visualisierung dynamischer Beobachtungspunkte in einer zeitlich veränderlichen Atemwegsgeometrie.

- (a) Der Beobachtungspunkt  $P$  liegt auf dem Streckenmittelpunkt zwischen den dafür ausgewählten Knoten  $P_1$ ,  $P_2$  des Oberflächengitters. Damit ist der Beobachtungspunkt für jeden Zeitpunkt eindeutig definiert.
- (b) Die Daten der Strömungssimulation werden räumlich auf den Beobachtungspunkt  $P$  interpoliert.
- (c) Abschließend folgt die Darstellung der aufgezeichneten Daten in zeitlicher Abhängigkeit.





## Literaturverzeichnis

- [1] ADLER, K.; BRÜCKER, C.: Dynamic flow in a realistic model of the upper human lung airways. *Experiments in Fluids*, 43(2-3), 411–423, 2007.
- [2] AFTOSMIS, M. J.: *Solution Adaptive Cartesian Grid Methods for Aerodynamic Flows with Complex Geometries*. von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1997.
- [3] AFTOSMIS, M. J.; BERGER, M. J.: Multilevel error estimation and adaptive h-refinement for cartesian meshes with embedded boundaries. *AIAA paper*, 863, 2002.
- [4] AFTOSMIS, M. J.; BERGER, M. J.; ADOMAVICIUS, G.: A parallel multilevel method for adaptively refined Cartesian grids with embedded boundaries. *AIAA paper*, Bd. 808, 2000.
- [5] ANDERSON, D. M.; MCFADDEN, G. B.; WHEELER, A. A.: Diffuse-Interface Methods In Fluid Mechanics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30, 139–165, 1998.
- [6] BALL, C. G.; UDDIN, M.; POLLARD, A.: High resolution turbulence modelling of airflow in an idealised human extra-thoracic airway. *Computers & Fluids*, 37, 943–964, 2008.
- [7] BANDRINGA, H.: Immersed boundary methods. Diplomarbeit, Universität Groningen, 2010.
- [8] BARRETT, R.; BERRY, M.; CHAN, T. F.; DEMMEL, J.; DONATO, J.; DONGARRA, J.; EIJKHOUT, V.; POZO, R.; ROMINE, C.; DER VORST, H. Van: *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods, 2nd Edition*. SIAM, Philadelphia, 1994.
- [9] BEYER, R. P.; LEVEQUE, R. J.: Analysis of a one-dimensional model for the immersed boundary method. *SIAM Journal of Numerical Analysis*, 29, 332–364, 1992.
- [10] BONET, J.; PERAIRE, J.: An alternating digital tree (ADT) algorithm for 3D geometric searching and intersection problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 31, 1–17, 1991.
- [11] CALAY, R. K.; KURUJAREON, J.; HOLDØ, A. E.: Numerical simulation of respiratory flow patterns within human lung. *Respiratory Physiology & Neurobiology*, 130(2), 201–221, 2002.

- [12] CHEN, K.: *Matrix Preconditioning Techniques and Applications*. Cambridge University Press, 2005.
- [13] CHEN, S.; DOOLEN, G. D.: Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30(1), 329–364, 1998.
- [14] CHOI, J.; TAWHAI, M. H.; HOFFMAN, E. A.; LIN, C.-L.: On intra- and intersubject variabilities of airflow in the human lungs. *Physics of Fluids*, 21, 101901, 2009.
- [15] CLARKE, D. K.; SALAS, M. D.; HASSAN, H. A.: Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation. *AIAA Journal*, 24(3), 353–358, 1983.
- [16] COIRIER, W. J.: An Adaptively-Refined, Cartesian, Cell-Based Scheme for the Euler and Navier-Stokes Equations. Dissertation, Universität Michigan, 1994.
- [17] COLLINS, T. P.; TABOR, G. R.; YOUNG, P. G.: A computational fluid dynamics study of inspiratory flow in orotracheal geometries. *Medical and Biological Engineering and Computing*, 45(9), 829–836, 2007.
- [18] COMERFORD, A.; FÖRSTER, C.; WALL, W. A.: Structured Tree Impedance Out-flow Boundary Conditions for 3D Lung Simulations. *Journal of Biomechanical Engineering*, 132(8), 081002+, 2010.
- [19] CORPORATION, Ansys: *ANSYS ICEM CFD 11.0 Mesh Generation Tool*. [www.ansys.com](http://www.ansys.com), 2006.
- [20] COUTANCEAU, M.; BOUARD, R.: Experimental determination of the main features of the viscous flow in the wake of a circular cylinder in uniform translation. Part 1. Steady flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 79, 231–256, 1977.
- [21] CUTHILL, E.; MCKEE, J.: Reducing the bandwidth of sparse symmetric matrices. *Proceedings of the 1969 24th national conference*, 157–172, ACM, 1969.
- [22] DADONE, A.; GROSSMAN, B.: Ghost-Cell Method with far-field coarsening and mesh adaptation for Cartesian grids. *Computers and Fluids*, 35(7), 1513–1527, 2006.
- [23] DANKERT, J.; DANKERT, H.: *Technische Mechanik: Statik, Festigkeitslehre, Kinetik/Kinetik*. Vieweg + Teubner, 2009.
- [24] DE PALMA, P.; DE TULLIO, M. D.; PASCAZIO, G.; NAPOLITANO, M.: An immersed-boundary method for compressible viscous flows. *Computers and Fluids*, 35, 693–702, 2006.

- [25] DE TULLIO, M. D.: Development of an Immersed Boundary method for the solution of the preconditioned Navier-Stokes equations. Dissertation, Polytechnische Universität von Bari, 2006.
- [26] DE TULLIO, M. D.; DE PALMA, P.; IACCARINO, G.; PASCAZIO, G.; NAPOLITANO, M.: An immersed boundary method for compressible flows using local grid refinement. *Journal of Computational Physics*, 225, 2098–2117, 2007.
- [27] DE TULLIO, M. D.; IACCARINO, G.: Immersed boundary technique for compressible flow simulations on semi-structured meshes. *Center of Turbulence Research, Stanford University, Annual Research Briefs*, 71–83, 2005.
- [28] DEAN, W. R.: Note on the motion of fluid in a curved pipe. *Philosophical Magazine Series 7*, 4, 208–223, 1927.
- [29] DEMIRDŽIĆ, I.; MUZAFERIJA, S.: Numerical method for coupled fluid flow, heat transfer and stress analysis using unstructured moving meshes with cells of arbitrary topology. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 125, 235–255, 1995.
- [30] DEMIRDŽIĆ, I.; PERIĆ, M.: Space conservation law in finite volume calculations of fluid flow. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 8(9), 1037–1050, 1988.
- [31] EITEL, G.; SCHRÖDER, W.; MEINKE, M.: Numerical investigation of the flow field in the upper human airways. *Modelling In Medicine And Biology VIII*, 13, 103–114, 2009.
- [32] FADLUN, E. A.; VERZICCO, R.; ORLANDI, P.; MOHD-YUSOF, J.: Combined Immersed-Boundary Finite-Difference Methods for Three-Dimensional Complex Flow Simulations. *Journal of Computational Physics*, 161(1), 35–60, 2000.
- [33] FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M.: *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag, Berlin, 2002.
- [34] FREDERICH, O.; AMTSFELD, P.; HYLLA, E.; THIELE, F.; PUDERBACH, M.; KAUCZOR, H.-U.; WEGNER, I.; MEINZER, H.-P.: Towards numerical simulation and analysis of the flow in central airways. *New Results in Numerical and Experimental Fluid Mechanics VII, Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design*, Bd. 112, 497–504, Springer-Verlag, Berlin, 2010.
- [35] FREDERICH, O.; HYLLA, E.; AMTSFELD, P.; THIELE, F.; WANG, X.; WEGNER, I.; MEINZER, H.-P.; PUDERBACH, M.: Numerically predicted flow in central airways: modelling, simulation and analysis. *Proceedings of the 6th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP-6)*, 1129–1134, 2009.

- [36] FREY, P. J.; GEORGE, P.-L.: *Mesh Generation: Application to Finite Elements*. ISTE, 2007.
- [37] GATTO, L. A.; FLUCK, R. R.; NIEMAN, G. F.: Alveolar Mechanics in the Acutely Injured Lung: Role of Alveolar Instability in the Pathogenesis of Ventilator-Induced Lung Injury. *Respiratory Care*, 49(9), 1045–1055, 2004.
- [38] GEMCI, T.; PONYAVIN, V.; CHEN, Y.; CHEN, H.; COLLINS, R.: Computational model of airflow in upper 17 generations of human respiratory tract. *Journal of Biomechanics*, 41(9), 2047–2054, 2008.
- [39] GHIAS, R.; KHONDGE, A.: Implementation of Immersed Boundary Method for Rapid and Reliable External Flow Simulations in Automotive. *SAE International Journal of Passenger Cars – Mechanical Systems*, 2(1), 495–515, 2009.
- [40] GHIAS, R.; MITTAL, R.; DONG, H.: A sharp interface immersed boundary method for compressible viscous flows. *Journal of Computational Physics*, 225, 528–553, 2007.
- [41] GILMANOV, A.; SOTIROPOULOS, F.: A hybrid Cartesian/immersed boundary method for simulating flows with 3D, geometrically complex, moving bodies. *Journal of Computational Physics*, 207, 457–492, 2005.
- [42] GLOWINSKI, R.; PAN, T.-W.; PERIAUX, J.: A fictitious domain method for Dirichlet problem and applications. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 111, 283–303, 1994.
- [43] GOLDSTEIN, D.; HANDLER, R.; SIROVICH, L.: Modeling a No-Slip Flow Boundary with an External Force Field. *Journal of Computational Physics*, 105, 354–366, 1993.
- [44] GOODMAN, J. E.; O’ROURKE, J. (Hg.): *Handbook of discrete and computational geometry*. CRC Press, Inc., 1997.
- [45] GROSSE, S.; SCHRÖDER, W.; KLAAS, M.; KLÖCKNER, A.; ROGGENKAMP, J.: Time resolved analysis of steady and oscillating flow in the upper human airways. *Experiments in Fluids*, 42(6), 955–970, 2007.
- [46] GUILMINEAU, E.; QUEUTEY, P.: A Numerical Simulation of Vortex Shedding from an Oscillating Circular Cylinder. *Journal of Fluids and Structures*, 16(6), 773–794, 2002.
- [47] GÜNTHER, C.; HARTMANN, D.; MEINKE, M.; SCHRÖDER, W.: A Level-Set Based Cut-Cell Method for Flows with Complex Moving Boundaries. *Proceedings of the Fifth European Conference on Computational Fluid Dynamics CFD 2010, EC-COMAS CFD*, 2010.

- [48] HAINES, E.: Point in polygon strategies. *Graphics Gems IV*, 24–46, Academic Press Professional, Inc., 1994.
- [49] HARTMANN, D.; MEINKE, M.; SCHRÖDER, W.: An adaptive multilevel multigrid formulation for Cartesian hierarchical grid methods. *Computers and Fluids*, 37, 1103–1125, 2008.
- [50] HU, X. Y.; KHOO, B. C.; ADAMS, N. A.; HUANG, F. L.: A conservative interface method for compressible flows. *Journal of Computational Physics*, 219, 553–578, 2006.
- [51] HYLLA, E.: Validierung und Erweiterung eines numerischen Verfahrens zur Simulation von inkompressiblen Strömungen mittels der Immersed Boundary Methode. Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2008.
- [52] HYLLA, E.; FREDERICH, O.; THIELE, F.: Application of the immersed boundary method for the simulation of incompressible flows in complex and moving geometries. *New Results in Numerical and Experimental Fluid Mechanics VII, Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design*, Bd. 112, 135–142, Springer-Verlag, Berlin, 2010.
- [53] HYLLA, E.; FREDERICH, O.; THIELE, F.; PUDERBACH, M.; LEY-ZAPOROZHAN, J.; KAUCZOR, H.-U.; WANG, X.; MEINZER, H.-P.; WEGNER, I.: Analysis of the flow in dynamically changing central airways. *Fundamental Medical and Engineering Investigations on Protective Artificial Respiration, Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design*, Bd. 116, 33–48, Springer-Verlag, Berlin, 2011.
- [54] HYLLA, E.; FREDERICH, O.; THIELE, F.; WANG, X.; WEGNER, I.; MEINZER, H.-P.; PUDERBACH, M.: Flow in naturally changing central airways. *Proceedings of the Fifth European Conference on Computational Fluid Dynamics CFD 2010, ECCOMAS CFD*, 2010.
- [55] HYLLA, E.; THIELE, F.: Fluid-Structure-Interaction applying a Ghost-Cell Immersed Boundary Method. *New Results in Numerical and Experimental Fluid Mechanics VIII, Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design*, Bd. XXX, XXX–XXX, Springer-Verlag, Berlin, im Review.
- [56] HÖRSCHLER, I.; BRÜCKER, Ch.; SCHRÖDER, W.; MEINKE, M.: Investigation of the impact of the geometry on the nose flow. *European Journal of Mechanics - B/Fluids*, 25(4), 471–490, 2006.
- [57] IKENO, T.; KAJISHIMA, T.: Finite-difference immersed boundary method consistent with wall conditions for incompressible turbulent flow simulations. *Journal of Computational Physics*, 226(2), 1485–1508, 2007.

- [58] JAN, D. L.; SHAPIRO, A. H.; KAMM, R. D.: Some features of oscillatory flow in a model bifurcation. *Journal of Physiology*, 67(1), 147–59, 1989.
- [59] KABILAN, S.; LIN, C.-L.; HOFFMAN, E. A.: Characteristics of airflow in a CT-based ovine lung: a numerical study. *Journal of Applied Physiology*, 102(4), 1469–82, 2007.
- [60] KALITZIN, G.; IACCARINO, G.: Towards immersed boundary simulation of high Reynolds number flows. *Center of Turbulence Research, Stanford University, Annual Research Briefs*, 369–378, 2003.
- [61] KANG, S.; IACCARINO, G.; HAM, F.; MOIN, P.: Prediction of wall-pressure fluctuation in turbulent flows with an immersed boundary method. *Journal of Computational Physics*, 228, 6753–6772, 2009.
- [62] KARYPIS, G.; KUMAR, V.: A Fast and Highly Quality Multilevel Scheme for Partitioning Irregular Graphs. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 20(1), 359–392, 1999.
- [63] KHATTRI, S. K.; AAVATSMARK, I.: Numerical convergence on adaptive grids for control volume methods. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 24(2), 465–475, 2008.
- [64] KHOSLA, P. K.; RUBIN, S. G.: A diagonally dominant second-order accurate implicit scheme. *Computers and Fluids*, 2, 207–209, 1974.
- [65] KIM, J.; KIM, D.; CHOI, H.: An immersed-boundary finite-volume method for simulations of flow in complex geometries. *Journal of Computational Physics*, 171(1), 132–150, 2001.
- [66] KIM, Y.; PESKIN, C. S.: Penalty immersed boundary method for an elastic boundary with mass. *Physics of Fluids*, 19(5), 2007.
- [67] KIM, Y.; PESKIN, C. S.: 3-D Parachute simulation by the immersed boundary method. *Computers and Fluids*, 38(6), 1080–1090, 2009.
- [68] KLEINSTREUER, C.; ZHANG, Z.: Airflow and Particle Transport in the Human Respiratory System. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 42(1), 301–334, 2010.
- [69] KNACKE, T.: Modifizierte Rhie und Chow Interpolation. Institutsbericht, ISTA, Technische Universität Berlin, 2008.
- [70] KNUTH, D. E.: *The art of computer programming, volume 1 (3rd ed.): Fundamental Algorithms*. Addison-Wesley Longman, 1997.
- [71] LAI, M. C.; PESKIN, C. S.: An Immersed Boundary Method with Formal Second-Order Accuracy and Reduced Numerical Viscosity. *Journal of Computational Physics*, 160, 705–719, .

- [72] LANG, F.; LANG, P.: *Basiswissen Physiologie, 2. Auflage*. Springer-Verlag, Berlin, 2008.
- [73] LEVEQUE, R. J.: Cartesian grid methods for flow in irregular regions. MORTON, K. W.; BAINES, M. J. (Hg.) *Numerical Methods in Fluid Dynamics III*, 375–382, Clarendon Press, 1988.
- [74] LEY-ZAPOROZHAN, J.; LEY, S.; UNTERHINNINGHOFEN, R.; WEINHEIMER, O.; SAITO, Y.; KAUCZOR, H.-U.; SZABO, G.: Quantification of lung volume at different tidal volumes and positive end-expiratory pressures in a porcine model by using retrospective respiratory gated 4D-computed tomography. *Investigative Radiology*, 43(6), 461–9, 2008.
- [75] LIAO, C.-C.; CHANG, Y.-W.; LIN, C.-A.; McDONOUGH, J. M.: Simulating flows with moving rigid boundary using immersed-boundary method. *Computers and Fluids*, 39, 152–167, 2010.
- [76] LIEN, F. S.; LESCHZINER, M. A.: General non-orthogonal collocated finite volume algorithm for turbulent flow at all speeds incorporating second-moment turbulence-transport closure. Part 1: Computational implementation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 114(1-2), 123–148, 1992.
- [77] LIU, J.; ZHAO, N.; HU, O.: The Ghost Cell Method and its Applications for Inviscid Compressible Flow on Adaptive Tree Cartesian Grids. *Advances in Applied Mathematics and Mechanics*, 1(5), 664–682, 2009.
- [78] MAJUMDAR, S.; IACCARINO, G.; DURBIN, P.: RANS solvers with adaptive structured boundary non-conforming grids. Annual Research Briefs, Center for Turbulence Research, 2001.
- [79] MARK, A.: The Mirroring Immersed Boundary Method - Modeling Fluids with Moving and Interacting Bodies. Dissertation, Technische Hochschule Chalmers, Göteborg, 2008.
- [80] MEISTER, A.: Comparison of Different Krylov Subspace Methods Embedded in an Implicit Finite Volume Scheme for the Computation of Viscous and Inviscid Flow Fields on Unstructured Grids. *Journal of Computational Physics*, 140(2), 311–345, 1998.
- [81] MEISTER, A.: *Numerik linearer Gleichungssysteme*. Vieweg Verlag, 2008.
- [82] MEISTER, A.: Persönliche Kommunikation, 2012.
- [83] MITCHELL, W. F.: Parallel adaptive multilevel methods with full domain partitions. *Applied Numerical Analysis & Computational Mathematics*, 1(1), 36–48, 2004.

- [84] MITTAL, R.; IACCARINO, G.: Immersed boundary methods. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 37, 239–261, 2005.
- [85] MOHD-YUSOF, J.: Combined Immersed Boundaries/B-Splines Methods for Simulations of Flows in Complex Geometries. Annual Research Briefs, Center of Turbulence Research, Stanford University, 1997.
- [86] MONAGHAN, J. J.: Smoothed Particle Hydrodynamics and Its Diverse Applications. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 44(1), 323–346, 2012.
- [87] NGUYEN, D. T.: *Finite Element Methods: Parallel-Sparse Statics and Eigen-Solutions*. Springer-Verlag, Berlin, 2006.
- [88] NORDSLETTEN, D. A.; HUNTER, P. J.; SMITH, N. P.: Conservative and non-conservative arbitrary Lagrangian-Eulerian forms for ventricular flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 56(8), 1457–1463, 2008.
- [89] NOWAK, N.; KAKADE, P. P.; ANNAPRAGADA, A. V.: Computational fluid dynamics simulation of airflow and aerosol deposition in human lungs. *Annals of Biomedical Engineering*, 31(4), 374–90, 2003.
- [90] OLIKER, L.; BISWAS, R.: Efficient Load Balancing and Data Remapping for Adaptive Grid Calculations. *9th ACM Symposium on Parallel Algorithms and Architectures*, 33–42, ACM, 1997.
- [91] OLUFSEN, M. S.; PESKIN, C. S.; KIM, W. Y.; PEDERSEN, E. M.; NADIM, A.; LARSEN, J.: Numerical simulation and experimental validation of blood flow in arteries with structured-tree outflow conditions. *Annals of Biomedical Engineering*, 28, 1281–1299, 2000.
- [92] PATANKAR, S. V.: *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. McGraw-Hill, New York, 1980.
- [93] PATANKAR, S. V.; SPALDING, D. B.: A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15(10), 1787–1806, 1972.
- [94] PELLER, N.: Numerische Simulation turbulenter Strömungen mit Immersed Boundaries. Dissertation, Technische Universität München, 2010.
- [95] PESKIN, C. S.: Flow patterns around heart valves: a numerical method. *Journal of Computational Physics*, 10, 252–271, 1972.
- [96] PESKIN, C. S.: The immersed boundary method. *Acta Numerica*, 479–512, 2002.
- [97] PHAM, A.-H.; LEE, C.-Y.; SEO, J.-H.; CHUN, H.-H.; KIM, H.-J.; YOON, H.-S.; KIM, J.-H.; PARK, D.-W.; PARK, I.-R.: Laminar flow past an oscillating circular cylinder in cross flow. *Journal of Marine Science and Technology*, 18(3), 361–368, 2010.



- [98] RHIE, C. M.; CHOW, W. L.: Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation. *AIAA Journal*, 21(11), 1525–1532, 1983.
- [99] ROMA, A. M.; PESKIN, C. S.; BERGER, J. M.: An adaptive version of the immersed boundary method. *Journal of Computational Physics*, 153, 509–534, 1999.
- [100] RUMSEY, C.; POIRIER, D.; BUSH, R.; TOWNE, C.: *CFD General Notation System. A User's Guide to CGNS*. NASA Langley Technical Report Server, 2001.
- [101] SAAD, Y.: *Iterative Methods for Sparse Linear Systems, 2nd edition*. SIAM, Philadelphia, 2003.
- [102] SAIKI, E. M.; BIRINGEN, S.: Numerical simulation of a cylinder in uniform flow: application of a virtual boundary method. *Journal of Computational Physics*, 123, 450–465, 1996.
- [103] SCHADE, H.; KUNZ, E.: *Strömungslehre*. Gruyter - de Gruyter Lehrbücher, 2007.
- [104] SCHATZ, M.; YAN, J.: Konvektionsschemata in FAN/ELAN2/ELAN3. Institutsbericht, Hermann-Föttinger-Institut, Technische Universität Berlin, 2003.
- [105] SEO, J. H.; MITTAL, R.: A sharp-interface immersed boundary method with improved mass conservation and reduced spurious pressure oscillations. *Journal of Computational Physics*, 230(19), 7347–7363, 2011.
- [106] SHIRLEY, P.; MORLEY, R. K.: *Realistic Ray Tracing, 2nd edition*. A. K. Peters, Ltd., 2003.
- [107] SHYY, W.; FRANCOIS, M.; N'DRI, N.; TRAN-SON-TAY, R.: Moving boundaries in micro-scale biofluid dynamics. *Applied Mechanics Review*, 54(5), 405–452, 2001.
- [108] SOHANKAR, A.; NORBERG, C.; DAVIDSON, L.: Low-Reynolds-number flow around a square cylinder at incidence: study of blockage, onset of vortex shedding and outlet boundary condition. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 26(1), 39–56, 1998.
- [109] SONI, B.; LINDLEY, C.; THOMPSON, D.: The combined effects of non-planarity and asymmetry on primary and secondary flows in the small bronchial tubes. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 59, 117–146, 2009.
- [110] SPECHT, B.: Modified shape functions for the three node plate bending element passing the patch test. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 26, 705–715, 1988.
- [111] STARK, P.: *Festigkeitslehre: Aufgaben und Lösungen*. Springer-Verlag, Wien, 2006.

- [112] STEINKE, P.: *Finite-Elemente-Methode: Rechnergestützte Einführung*. Springer-Verlag, Berlin, 2010.
- [113] STONE, H. L.: Iterative Solution of Implicit Approximations of Multidimensional Partial Differential Equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 5(3), 530–558, 1968.
- [114] TAIRA, K.; COLONIUS, T.: The immersed boundary method: A projection approach. *Journal of Computational Physics*, 225, 2118–2137, 2007.
- [115] TAYLLAMIN, B.; MENDEZ, S.; MORENO, R.; CHAU, M.; NICLOUD, F.: Comparison of Body-Fitted and Immersed Boundary Methods for Biomechanical Applications. *Proceedings of the Fifth European Conference on Computational Fluid Dynamics CFD 2010, ECCOMAS CFD*, 2010.
- [116] TIMOSHENKO, S. P.: *Theory of plates and shells*. McGraw-Hill, London, 1959.
- [117] TREMBLAY, F.; FRIEDERICH, R.: An algorithm to Treat Flows Bounded by Arbitrarily Shaped Surfaces with Cartesian Meshes. *Notes on Numerical Fluid Mechanics*, 77, 289–296, 2002.
- [118] TROTTEMBERG, U.; OOSTERLEE, C. W.: *Multigrid: Basics, Parallelism and Adaptivity*. Academic Press, Inc., 2000.
- [119] TSENG, Y.; FERZIGER, J. H.: A ghost-cell immersed boundary method for flow in complex geometry. *Journal of Computational Physics*, 192(2), 593–623, 2003.
- [120] TUREK, S.; HRON, J.; RAZZAQ, M.; WOBKER, H.; SCHÄFER, M.: Numerical Benchmarking of Fluid–Structure Interaction: A comparison of different discretization and solution approaches. *Institutsbericht, Fakultät für Mathematik, TU Dortmund*, 2010.
- [121] UHLMANN, M.: An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows. *Journal of Computational Physics*, 209, 448–476, 2005.
- [122] UZGOREN, E.; SIM, J.; SHYY, W.: Marker-Based, 3-D Adaptive Cartesian Grid Method for Multiphase Flow around Irregular Geometries. *Journal of Computational Physics*, 5(1), 1–41, 2009.
- [123] VAN DER VORST, H. A.: Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 13(2), 631–644, 1992.
- [124] VERZICCO, R.; MOHD-YUSOF, P.; ORLANDI, P.; HAWORTH, D.: LES in complex geometries using boundary body forces. *Annual Research Briefs, Center of Turbulence Research, Stanford University*, 1998.

- [125] WALL, W. A.; RABCZUK, T.: Fluid-structure interaction in lower airways of CT-based lung geometries. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 57(5), 653–675, 2008.
- [126] WALSHAW, C.; CROSS, M.; EVERETT, M. G.: Parallel Dynamic Graph Partitioning for Adaptive Unstructured Meshes. *Journal of Parallel and Distributed Computing*, 47(2), 102–108, 1997.
- [127] WEIBEL, E.: Morphometry of the Human Lung, 1963.
- [128] WOMERSLEY, J. R.: Method for the calculation of velocity, rate of flow and viscous drag in arteries when the pressure gradient is known. *Journal of Physiology*, 127(3), 553–563, 1955.
- [129] XUE, L.: Entwicklung eines effizienten parallelen Lösungsalgorithmus zur dreidimensionalen Simulation komplexer turbulenter Strömungen. Dissertation, Technische Universität Berlin, 1998.
- [130] YE, T.; MITTAL, R.; UDAYKUMAR, H. S.; SHYY, W.: An accurate Cartesian grid method for viscous incompressible flows with complex immersed boundaries. *Journal of Computational Physics*, 156, 209–240, 1999.
- [131] YIGIT, S.; HECK, M.; STERNEL, D.C.; SCHÄFER, M.: Efficiency of Fluid-Structure Interaction Simulations with Adaptive Underrelaxation and Multi-grid Acceleration. *International Journal of Multiphysics*, 1(1), 85–98, 2007.
- [132] YU, Z.; SHAO, X.: A direct-forcing fictitious domain method for particulate flows. *Journal of Computational Physics*, 227, 292–314, 2007.
- [133] ZDRAVKOVICH, M. M.: *Flow Around Circular Cylinders Vol. 1: Fundamentals*. Oxford Science Publications, 1997.
- [134] ZHANG, Z.; KLEINSTREUER, C.: Transient airflow structures and particle transport in a sequentially branching lung airway model. *Physics of Fluids*, 14(2), 862–880, 2002.
- [135] ZHANG, Z.; LIU, Y.; SO, R. M. C.; PHAN-THIEN, N.: The influence of inlet velocity profile on three-dimensional three-generation bifurcating flows. *Computational Mechanics*, (29), 422–429, 2002.
- [136] ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L.: *The Finite Element Method For Solid and Structural Mechanics*. Butterworth-Heinemann, 2005.