

DISS. ETH NO. 24123

***ENTROPIC LATTICE BOLTZMANN MODELS  
FOR THERMAL AND COMPRESSIBLE FLOWS***

A thesis submitted to attain the degree of  
DOCTOR OF SCIENCES of ETH ZURICH  
(Dr. sc. ETH Zurich)

presented by

NICOLÒ FRAPOLLI

Master of Science in Mechanical Engineering, ETH Zürich

born on 12.09.1989

citizen of Bellinzona, Switzerland

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. I. V. Karlin, examiner

Prof. Dr. J. Carmeliet, co-examiner

Dr. S. S. Chikatamarla, co-examiner

Prof. Dr. S. Succi, co-examiner

2017

# Abstract

The lattice Boltzmann method (LBM) is an ever growing, powerful approach to computational fluid dynamics, based on a discrete velocity formulation of the Boltzmann equation. While success of LBM has expanded greatly over the past two decades to turbulence, multiphase flows, and thermal incompressible flows, all these applications are confined to the low Mach number domain of fluid dynamics. The situation is drastically different for compressible flows, where numerous attempts to derive a genuine lattice Boltzmann model for high Mach number flows have not achieved a comparable outcome. In this context, the main objective of this thesis is to develop a lattice Boltzmann model for simulation of compressible flows in the subsonic, transonic and supersonic regimes, for laminar and turbulent flows. Along this line, further models are developed for the simulation of thermal flows in the low Mach number regime and for conjugate heat transfer.

The compressible model is realized through three fundamental changes to the standard lattice Boltzmann scheme, namely the employment of admissible higher-order lattices, computation of exact entropic equilibrium, and use of the entropic over-relaxation scheme to improve numerical stability. In contrast to state-of-the-art fluid solvers, the algorithm employs Cartesian meshes, without any turbulence models, tuning parameters, or tracking of the shock front. However, the employment of higher-order lattices with large number of discrete velocities, especially in three dimensions, leads to, for some cases, a dramatic increase of computational cost when compared to the incompressible LBM. To this end, novel optimization strategies are also proposed, including the development of shifted lattices, and pruned lattices together with the accurate entropic guided equilibrium. In order to validate the compressible model, a number of two- and three-dimensional simulations of sub-, trans- and supersonic flows is presented, including shock dynamics, transonic and supersonic aerodynamics, turbulent flows and turbulence shock interaction.

Numerous heat transfer applications, however, do not involve high Mach number flows, thus allowing to neglect the compressibility effects and develop simplified models. To this end, two thermal lattice Boltzmann models are proposed in this thesis. The first is derived directly from the compressible model, simplifying both the lattice and the equilibrium distribution, and avoiding the employment of the second set of populations used to change the adiabatic exponent. Although this model is a simplified and lighter version of the compressible model, the computational cost may still be considerable. Hence, a second two-population model is also presented, and it is extended to the simulation of conjugate heat transfer problems. Also for these thermal models a thorough validation is exposed, for both two- and three-dimensional applications; this includes, among others, the thermal Couette flow, the simulation of convection around heated bodies and the simulation of the rotating and non-rotating turbulent Rayleigh-Bénard convection.

All models presented here are complemented with appropriate wall boundary conditions that are capable of handling arbitrary solid geometries and arbitrary lattice choices.

To conclude, by strongly incorporating the first and second laws of thermodynamics into the lattice Boltzmann method, this thesis presents one single algorithm capable of efficiently simulating a broad range of flow situations, starting from low Mach number flows and extending all the way to supersonic flows and conjugate heat transfer problems.

# Zusammenfassung

Die Lattice-Boltzmann-Methode (LBM) ist eine leistungsstarker Ansatz zur numerischen Strömungssimulation, welcher auf einer diskreten Geschwindigkeitsformulierung der Boltzmann-Gleichung beruht. Während sich der Erfolg der LBM in den letzten zwei Jahrzehnten auf die Gebiete von porösen Medien, Mehrphasenströme und thermisch, inkompressible Strömungen ausgeweitet hat, beschränkten sich alle diese Anwendungen auf Strömungen im Regime niedriger Machzahlen. Zahlreiche Versuche ein Modell für kompressible Strömungen herzuleiten hatten keinen Bestand. Das Ziel dieser Arbeit ist es, ein lattice Boltzmann Modell für die Simulation von Unter-, Trans- und Überschallströmungen im laminaren sowie turbulenten Regime zu entwickeln. Im Zuge dessen, sind weitere neue Modelle zur Simulation von thermischen Unterschallströmungen entwickelt worden.

Das kompressibel Modell basiert auf drei fundamentalen Änderungen des Standard Lattice-Boltzmann Schemas, nämlich die Verwendung von zulässigen Gittern höherer Ordnung, des exakten entropischen Gleichgewichts sowie die entropische Relaxation. Im Gegensatz zu modernsten Strömungslösern beruht der Algorithmus auf kartesischen Gittern, ohne explizites Turbulenzmodell, empirischen Parametern oder die Bestimmung der Schockfront. Da die Verwendung von Gittern höherer Ordnung für die Simulation von sehr hohe Machzahlen zu einem untragbaren Rechenaufwand führt, werden Optimierungsstrategien wie beispielsweise die Verwendung von versetzten und reduzierten Gittern mit geführtem entropischen Gleichgewicht präsentiert. Für die Validierung des kompressiblen Modells wurden eine Reihe von zwei- und dreidimensionalen Simulationen im Unter-, Trans- und Überschallbereich durchgeführt, einschliesslich Schockdynamik, überschall-aerodynamik, turbulente Strömungen sowie Turbulenz-Schock Interaktion.

Zusätzlich zum kompressiblen Strömungsmodell werden thermische Strömungsmodelle im Bereich niedriger Machzahl vorgestellt. Das erste Modell

wird direkt von dem kompressiblen Modell abgeleitet wobei Gitter und Gleichgewichtsverteilung simplifiziert werden und von der Verwendung eines zweiten Gitters zur Änderung des adiabatischen Exponenten abgesehen wird. Obwohl dieses Vorgehen eine Vereinfachung zum kompressiblen Modell darstellt, kann der Rechenaufwand beträchtlich sein. Aus diesem Grund wird ein Zwei-Populationen Modell entwickelt und zur Simulation von Wärmeübertragungsproblemen erweitert. Alle Modelle werden sowohl für simple zweidimensionale Probleme sowie für dreidimensionale turbulente Strömungen validiert. Ein besonderer Augenmerk wird auf die rotierende und nicht-rotierende Rayleigh-Bénard-Konvektion gelegt.

Diese Arbeit bietet, im Rahmen der Lattice-Boltzmann-Methode, eine vollständige Methodik zur Simulation von Problemen in der Strömungsmechanik, bei denen Energieerhaltung berücksichtigt werden muss.