



**ZÁPADOČESKÁ
UNIVERZITA
V PLZNI**

Západočeská univerzita v Plzni
Fakulta aplikovaných věd
Katedra matematiky

Bc. Alexandra Lochová

Diplomová práce

**Kinetická schémata pro řešení
parciálních diferenciálních rovnic
hyperbolického typu**

Vedoucí práce: Doc. Ing. Marek Brandner, Ph.D.

Obor: Učitelství matematiky pro SŠ

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vytvořila samostatně s použitím literatury, kterou uvádím v seznamu.

V Hostonicích pod Brdy dne 11.10.2014

podpis

Děkuji panu Doc. Ing. Marku Brandnerovi, Ph.D. za obětavé vedení diplomové práce a poskytnutou literaturu, dále za možnost konzultací a osobních setkání za účelem diskuze o řešeném problému. Ráda bych také poděkovala své rodině, všem blízkým a přátelům, kteří mě při vytváření této práce podpořili a bez jejich pomoci by nebylo možné práci dokončit.

Obsah

1	Parciální diferenciální rovnice	6
1.1	Lineární a nelineární soustavy parciálních diferenciálních rovnic	7
1.2	Okrajové a počáteční podmínky pro soustavy parciálních diferenciálních rovnic	8
1.2.1	Klasické řešení počátečně - okrajové úlohy	9
1.2.2	Slabé řešení počátečně - okrajové úlohy	11
1.2.3	Zákony zachování a entropie	12
2	Kinetická schémata pro simulace nestacionárního stlačitelného proudění	13
2.1	Distribuční funkce kinetické teorie plynů	15
2.2	Popis tekutin z hlediska statistické fyziky	17
2.3	Maxwellova - Boltzmannova funkce	18
2.4	Distribuční funkce v případě 1-D	19
2.5	Boltzmannova rovnice	20
3	Vybrané numerické metody	22
3.1	Metoda typu upwind	22
3.2	Laxova-Friedrichsova metoda	23
3.3	Laxova-Wendroffova metoda	24
3.4	Metoda typu flux-limiter	24
4	Metoda BGK	26
4.1	Metoda BGK pro Burgersovou rovnici	26
4.2	Konstrukce tokových funkcí	29
4.3	Aplikace metody BGK pro Burgersovu rovnici	33
4.4	Metoda BGK pro lineární rovnici	43
4.5	Kinetické schéma	51

Název práce: Kinetická schémata pro řešení parciálních diferenciálních rovnic hyperbolického typu

Autor: Bc. Alexandra Lochová

Katedra: Katedra matematiky

Vedoucí diplomové práce: Doc. Ing. Marek Brandner, Ph.D.

Abstrakt: Diplomová práce se zabývá několika kinetickými schémata založenými na Boltzmannově rovnici. Především je zaměřena na kinetické schéma typu BGK a to jak pro nelineární případ – Burgersovu rovnici, tak i na lineární případ zařazený z důvodu analýzy stability. Výhodou těchto schémat je to, že konvergují k limitním vazkým řešením i ve více dimenzích. Práce je doplněna řadou numerických experimentů. V budoucnu by bylo vhodné provést další experimenty pro numerická řešení právě ve více prostorových dimenzích.

Klíčová slova: parciální diferenciální rovnice, hyperbolické systémy, entropie, zákony zachování, Maxwellova - Boltzmannova rovnice, Metoda BGK

Title: Kinetic schemes for solving hyperbolic partial differential equations

Author: Bc. Alexandra Lochová

Department: Department of Mathematics

Supervisor: Doc. Ing. Marek Brandner, Ph.D.

Abstract: This thesis deals with some kinetic schemes based on the Boltzmann equation. The thesis focuses mainly on the kinetic scheme of BGK type, both for the non-linear case (Burgers equation) and the linear advection case (for the purpose of stability analysis). An advantage of these schemes is their convergence to limit viscosity solutions in the multidimensional case. The thesis is completed with the series of numerical experiments. In the future, it would be also appropriate and recommended to make numerical experiments in the multidimensional case.

Keywords: partial differential equations, hyperbolic systems, entropy, conservation laws, Maxwell - Boltzmann equation, BGK method

Úvod

Cílem této diplomové práce je analyzovat a prozkoumat jednu vybranou skupinu numerických metod pro parciální diferenciální rovnice hyperbolického typu a následně srovnat přesnost numerického řešení s jinými metodami. Konkrétně se budeme zabývat metodou Bhatnagar - Gross - Crook (BGK). V první kapitole pojednáme obecně o problematice parciálních diferenciálních rovnic, jejich rozdělení a přiblížíme parciální diferenciální rovnice hyperbolického typu. Obecně se zmíníme o klasickém a entropickém řešení těchto rovnic. Druhá kapitola popisuje distribuční funkci kinetické teorie plynu a popisuje chování tekutin z hlediska statistické fyziky. Jsou zde popsány pojmy jako je Maxwellova - Boltzmannova rovnice a její souvislost s metodou BGK. Ve třetí kapitole si připomeneme další vybrané numerické metody jakou jsou metoda typu upwind, Laxova-Friedrichsova metoda, Laxova-Wendroffova metoda a metoda typu flux-limiter, kterými jsme se zabývali již dříve v bakalářské práci. V návaznosti na to pak čtvrtá kapitola podrobně popisuje konstrukci metody BGK s konkrétními praktickými aplikacemi. Numerické experimenty budeme provádět jak pro Burgersovu rovnici tak i ověříme metodu BGK pro lineární případ a srovnáme její použitelnost s jiným vybraným kinetickým schématem. Budeme zde využívat nabídky systému *Matlab*, což je systém zahrnující nástroje pro převážně numerické výpočty. Na závěr provedeme vyhodnocení jednotlivých experimentů.

Kapitola 1

Parciální diferenciální rovnice

Mnoho fyzikálních problémů se dá popsat pomocí parciálních diferenciálních rovnic. Rovnice lze dělit podle několik kritérií, například na eliptické, parabolické a hyperbolické, dále pak na stacionární (bezčasové) a evoluční (časové), lineární a nelineární atd. Je nemožné zavést jednotný a současně univerzální systém jejich klasifikace. Uvedme si zde několik vybraných příkladů:

1. difúzní rovnice a rovnice vedení tepla (rovnice parabolického typu)
2. Laplaceova rovnice (rovnice eliptického typu)
3. vlnová rovnice (rovnice hyperbolického typu)
4. rovnice kontinuity

Obecně parciální diferenciální rovnici nazveme takovou rovnicí, ve které vystupují parciální derivace hledané funkce dvou nebo více proměnných. Obecný tvar parciální diferenciální rovnice má tvar

$$F(x_1, \dots, x_N, u, \frac{\partial u}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial u}{\partial x_N}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2}, \dots, \frac{\partial^k u}{\partial x_N^k}) = 0$$

kde $u = u(x_1, \dots, x_N)$ je hledaná funkce. Řádem PDR rozumíme řád nejvyšší parciální derivace, která v rovnici vystupuje. Řešením rovnice v nějaké oblasti rozumíme každou funkci $u(x_1, \dots, x_n)$ takovou, že po dosazení této funkce a jejích parciálních derivací do rovnice dostaneme identicky rovnost pro všechny body $[x_1, \dots, x_N]$. Rovnici považujeme za vyřešenou, známe-li všechna její řešení.

Jelikož se naše práce bude zabývat parciálními diferenciálními rovnicemi hyperbolického typu, zaměříme se v následujících odstavcích na jejich charakteristiku a vlastnosti.

1.1 Lineární a nelineární soustavy parciálních diferenciálních rovnic

V tomto odstavci popíšeme základní třídění rovnic a budeme definovat jejich řešení. Začneme příkladem skalární lineární rovnice, konkrétně jednoduchou advekční rovnicí ve tvaru

$$u_t + au_x = 0,$$

kde $u(x, t)$, $x \in \mathbb{R}$, $T \in (0, T)$, $u(x, t) : \mathbb{R} \times (0, T) \rightarrow \mathbb{R}^m$, reprezentuje například koncentraci a $a = konst.$ je rychlost. Další možností je skalární nelineární zákon zachování, který lze obecně zapsat ve tvaru

$$u_t + [f(u)]_x = 0, \tag{1.1}$$

popřípadě bilance

$$u_t + [f(u)]_x = \psi(u, x),$$

kde $f(u)$ je tzv. toková funkce a $\psi(u, x)$ zdrojový člen. Konkrétně může být toková funkce definována následovně

$$f(u) = \frac{1}{2}u^2,$$

kdy po dosazení do zákona zachování (1.1) získáme *Burgersovu rovnici*. Jiným příkladem diferenciální rovnice může být kinematická vlnová rovnice. Soustavy rovnic opět dělíme na lineární a nelineární. Obecnou lineární soustavu lze zapsat například následovně

$$\mathbf{u}_t + \mathbf{A}\mathbf{u}_x = \mathbf{0} \tag{1.2}$$

kde \mathbf{A} je čtvercová matice $m \times m$.

Příkladem lineární soustavy může být model používaný v akustice

$$\begin{bmatrix} p \\ u \end{bmatrix}_t + \begin{bmatrix} 0 & K_0 \\ \frac{1}{\rho_0} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p \\ u \end{bmatrix}_x = \mathbf{0}$$

kde p a u jsou perturbace tlaku a rychlosti v akustice. Parametr K_0 reprezentuje modul objemové pružnosti stlačitelnosti a ρ_0 je hustota. Nelineární soustavu lze obecně zapsat

$$\mathbf{u}_t + [\mathbf{f}(\mathbf{u})]_x = \mathbf{0} \quad (1.3)$$

Nelineární soustavy lze formálně přepsat do tzv. kvazilineárního tvaru, tj.

$$\mathbf{u}_t + \mathbf{f}'(\mathbf{u})\mathbf{u}_x = \mathbf{0} \quad (1.4)$$

Soustava nelineárních parciálních diferenciálních rovnic (1.4) se nazývá *slabě hyperbolická* pokud Jacobiho matice $\mathbf{f}'(\mathbf{u}_0)$ má reálná vlastní čísla pro jakýkoliv fyzikální relevantní stav $u_0 \in \mathbb{R}^m$. Soustava nelineárních parciálních diferenciálních rovnic se nazývá *silně hyperbolická*, pokud Jacobiho matice $\mathbf{f}'(\mathbf{u}_0)$ je diagonalizovatelná a má reálná vlastní čísla pro jakýkoliv fyzikální relevantní stav $u_0 \in \mathbb{R}^m$. Soustava nelineární parciálních diferenciálních rovnic se nazývá ryze (striktně) hyperbolická, pokud Jacobiho matice $\mathbf{f}'(\mathbf{u}_0)$ je diagonalizovatelná a má navzájem různá reálná vlastní čísla pro jakýkoliv fyzikální relevantní stav $u_0 \in \mathbb{R}^m$.

1.2 Okrajové a počáteční podmínky pro soustavy parciálních diferenciálních rovnic

Vztah (1.3) lze spolu s počátečními podmínkami, s nimiž tvoří jeden ze základních matematických modelů, formulovat jako počáteční úlohu

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_t + [\mathbf{f}(\mathbf{u})]_x &= \mathbf{0} & x \in \mathbb{R}, T \in (0, T) \\ \mathbf{u}(x, 0) &= \mathbf{u}_0(x) & x \in \mathbb{R} \end{aligned} \quad (1.5)$$

kde $\mathbf{u} = \mathbf{u}(x, t) : \mathbb{R} \times \langle 0, T \rangle \rightarrow \mathbb{R}^m$ je hledaná funkce a $\mathbf{u}_0 = \mathbf{u}_0(x) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^m, \mathbf{f} = \mathbf{f}(\mathbf{u}) : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ jsou dané funkce. Předpokládáme, že $\mathbf{f} = \mathbf{f}(\mathbf{u})$ je dostatečně hladká. V praxi nejsou modely proudění řešeny pro $x \in \mathbb{R}$, ale řešíme je na omezeném intervalu, například $0 \leq x \leq L$, kde L je délka například úseku řeky. Pro soustavu o m rovnicích je potřeba nejvýše $2m$ okrajových podmínek. Některé z těchto podmínek mohou být předepsány na levé hranici $x = 0$ a některé na pravé $x = L$. Tyto podmínky jsou obvykle specifikovány fyzikální situací, kterou chceme modelovat. Proto úlohu (1.5) přeformulujeme jako počátečně - okrajovou ve tvaru

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}_t + [\mathbf{f}(\mathbf{u})]_x &= \mathbf{0}, & x \in (0, L), t \in (0, T) \\
\mathbf{u}(x, 0) &= \mathbf{u}_0(x), & x \in (0, L) \\
u_k(0, t) &= g_k^0(t), & t \in (0, T), k = 1, \dots, n, \\
u_l(L, t) &= g_l^L(t), & t \in (0, T), l = 1, \dots, p,
\end{aligned} \tag{1.6}$$

kde $g_k^0(t)$ reprezentuje prvky n -dimenzionálního vektoru předepisující chování veličiny na levém okraji a $g_l^L(t)$ jsou prvky p -dimenzionálního vektoru popisující pravou okrajovou podmínku. Čísla n a p závisí na úloze a platí $n + p \leq 2m$.

1.2.1 Klasické řešení počátečně - okrajové úlohy

Klasickým řešením počátečně - okrajové úlohy (1.5) nazveme $\mathbf{u}(x, t)$ takové, že $\mathbf{u} \in [C^1(\mathbb{R} \times \langle 0, T \rangle)]^m$, má všechny derivace obsažené v rovnici (1.5) spojitě na $\mathbb{R} \times (0, T)$ a splňuje všechny rovnice (1.5) na $\mathbb{R} \times (0, T)$ a počáteční podmínku na \mathbb{R} . Analogicky lze definovat klasické řešení pro počátečně - okrajovou úlohu (1.6). K výše uvedeným podmínkám budeme navíc požadovat i splnění okrajových podmínek. Pokud funkce vyhovuje diferenciálnímu tvaru a okrajové podmínce (1.5), tj. jde o klasické řešení, potom pro ní platí i integrální rovnost

$$\int_{x_1}^{x_2} \mathbf{u}(x, t_2) dx - \int_{x_1}^{x_2} \mathbf{u}(x, t_1) dx = \int_{t_1}^{t_2} [\mathbf{f}(\mathbf{u}(x_1, t)) - \mathbf{f}(\mathbf{u}(x_2, t))] dt \tag{1.7}$$

kde $x_1, x_2 \in \mathbb{R}; t_1, t_2 \in (0, \infty)$. Původní úlohy ovšem vychází z integrálního tvaru, který je odvozen z fyzikálních zákonů a její řešení mohou být i nehladká a nespojitá. Právě pro tato řešení nejsou parciální diferenciální rovnice (1.3) definovány v klasickém smyslu.

Uvažujme nyní počáteční úlohu pro skalární nelineární rovnici

$$\begin{aligned}
u_t + [f(u)]_x &= 0, \\
u(x, 0) &= u_0(x),
\end{aligned} \tag{1.8}$$

pro $t > 0$ a $x \in \mathbb{R}$. Přepíšeme rovnici (1.8) do kvazilineárního tvaru

$$u_t + f'(u)u_x = 0 \tag{1.9}$$

což je advekční rovnice s rychlostí $f'(u)$. Zvolme křivku $(x(s), t(s))$ definovanou následujícími rovnostmi

$$\frac{dt(s)}{ds} = 1 \quad a \quad \frac{dx(s)}{ds} = f'(u) \quad (1.10)$$

Rovnost (1.9) lze interpretovat jako skalární součin

$$(1, f'(u)) \cdot (u_t, u_x) = 0$$

a tedy platí, že řešení podél této křivky - **charakteristiky** je konstantní

$$\frac{du(x(s), t(s))}{ds} = \frac{\partial u}{\partial t} \frac{dt}{ds} + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{dx}{ds} = u_t + f'(u)u_x = 0 \quad (1.11)$$

a také platí

$$u(x(s), t(s)) = u(x(0), t(0)) = u(x_0, 0) = u_0(x_0). \quad (1.12)$$

Ze vztahů (1.10) plyne

$$t = s \quad a \quad x = x_0 + sf'(u), \quad (1.13)$$

a tedy dosazením do (1.12) dostáváme řešení (dokud se charakteristiky neprotnou) ve tvaru

$$u(x, t) = u_0(x - tf'(u)). \quad (1.14)$$

Tento vztah zderivujeme podle časové, resp. prostorové proměnné a získáme

$$\begin{aligned} u_t &= u'_0(x - tf'(u))(-f'(u) - tf''(u)u_t), \\ u_x &= u'_0(x - tf'(u)) - tf''(u)u_x \end{aligned} \quad (1.15)$$

Z výše uvedených rovností určíme u_t a u_x

$$u_t = -\frac{u'_0(x - tf'(u))f'(u)}{1 + tf''(u)u'_0(x - tf'(u))} \quad (1.16)$$

$$u_x = \frac{u'_0(x - tf'(u))}{1 + tf''(u)u'_0(x - tf'(u))} \quad (1.17)$$

V případě, kdy například $u'_0 = -\delta_0 < 0$ a $f'' = \varphi_0$, potom pro $t = \frac{1}{\varphi_0\delta_0}$ bude jmenovatel u výše uvedených derivací následující

$$1 + tf''(u)u'_0(x - tf'(u)) = 1 + \frac{1}{\varphi_0\delta_0}\varphi_0(-\delta_0) = 0,$$

což je ve sporu s předpokladem hladkého řešení.

Hladké řešení $u(x, t)$ nelineárního zákona zachování (1.8) tedy může ztratit svou regularitu v kritických časech, ve kterých $u_x \rightarrow \infty$. Musíme tedy zavést tzv. *slabé řešení problému*.

1.2.2 Slabé řešení počátečně - okrajové úlohy

Zatímco výsledek o lokální existenci, jednoznačnosti a regularitě klasického řešení je k dispozici i v případě obecného systému rovnic ve více prostorových proměnných, nemusí mít systém (1.5) na daném časovém intervalu $\langle 0, T \rangle$ klasické řešení, a to ani v nejjednodušším případě, kdy jde o jednu rovnici v jedné prostorové proměnné ($n = m = 1$) a data úlohy, tedy funkce f a u_0 jsou nekonečně hladká. Ostatně fakt, že i poklidně proudící vzduch může časem dospět k rázové vlně, a tedy *nespojivosti* v popisovaných veličinách, je všeobecně znám. Tato skutečnost nás nutí přirozeně pracovat s pojmem slabého řešení.

Nechť $\mathbf{u}_0(x, t) \in [L_{loc}^\infty(\mathbb{R})]^m$, $\mathbf{f}(\mathbf{u}) \in [C^1(\mathbb{R})]^m$. Pak **slabým řešením** počátečně - okrajové úlohy (1.5) nazveme $\mathbf{u}(x, t)$ takové, že $\mathbf{u}(x, t) \in [L_{loc}^\infty(\mathbb{R} \times (0, \infty))]^m$, a pro libovolné $\varphi \in [C_0^\infty(\mathbb{R} \times (0, \infty))]^m$ platí následující integrální rovnost

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [\varphi_t \mathbf{u} + \varphi_x \mathbf{f}(\mathbf{u})] dx dt = - \int_{-\infty}^\infty \varphi(x, 0) \mathbf{u}_0(x) dx \quad (1.18)$$

Slabé řešení není jednoznačné a je potřeba vybrat jediné řešení, které je navíc "fyzikálně správné". K tomu slouží koncept *entropického řešení*. V následujícím odstavci si trochu přiblížíme pojem entropie a v souvislosti s tím zavedeme definici entropického řešení parciálních diferenciálních rovnic v návaznosti na předchozí vztahy.

1.2.3 Zákony zachování a entropie

Mnoho fyzikálních zákonů lze vyjádřit ve tvaru **zákonů zachování**, at již jde o zákon zachování hmoty, hybnosti a energie nebo jiné veličiny. Obecně lze takové zákony zachování zapsat jako systém m parciálních (obvykle nelineárních) diferenciálních rovnic v jedné časové a n prostorových proměnných:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \sum_{j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_j} = 0 \quad \text{v } \mathbb{R}^m \times (0, T) \quad (1.19)$$

Neznámou v tomto systému rovnic je hledaná (obecně vektorová) funkce $\mathbf{u} = \mathbf{u}(x, t) : \mathbb{R}^m \times (0, T) \rightarrow \mathbb{R}$, $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_m)$. Z matematického hlediska mají zákony zachování jednu důležitou vlastnost, a sice že systém rovnic (1.19) má hyperbolický charakter. O rozdělení hyperbolických systémů jsme se již zmínili v odstavci [1.1]. Pro objasnění entropického řešení zavedeme ještě další pojem - *limita vazkých řešení rovnic*

Definice 1.1.: Buď u slabým řešením rovnice (1.19). Funkci u nazveme *limitou vazkých řešení*, pokud existuje posloupnost hladkých řešení u_k^ε systému

$$\frac{\partial u^\varepsilon}{\partial t} + \sum_{j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_j} f_j(u^\varepsilon) = \varepsilon \Delta u^\varepsilon \quad \text{v } \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^+ \quad (1.20)$$

a platí $u = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} u$.

Člen na pravé straně rovnice (1.20) se většinou interpretuje jako vazkost, jejíž velikost je vyjádřena koeficientem $\varepsilon > 0$ resp. $\varepsilon = 0$ pro nevazký případ (1.19) Matematickou **entropií** pak nazýváme každou takovou funkci $U \in C^2(\mathbb{R}^m)$, pro kterou existují funkce $F_j : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$, zvané *toky entropie*, splňující tzv. rovnice kompatibility

$$\sum_{k=1}^m \frac{\partial U}{\partial u_k} \frac{\partial f_{j,k}}{\partial u_l} = \frac{\partial F_j}{\partial u_l}, \quad \forall j = 1, \dots, n \quad l = 1, \dots, m. \quad (1.21)$$

Slabé řešení $\mathbf{u}(x, t)$ úlohy (1.5) nazveme **entropické**, pokud pro libovolné $\varphi \in [C_0^1(\mathbb{R} \times (-\infty, T))]^m$, $\varphi \geq 0$ a pro každou konvexní a spojitou entropii E s entropickým tokem F , splňuje

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [\varphi_t E(\mathbf{u}) + \varphi_x F(\mathbf{u})] dx dt + \int_{-\infty}^\infty \varphi(x, 0) E(\mathbf{u}_0(x)) dx \geq 0. \quad (1.22)$$

V 1-D případě lze ukázat, že limitní a vazké řešení je shodné, zatímco ve více dimenzích toto řešení pravděpodobně neplatí.

Kapitola 2

Kinetická schémata pro simulace nestacionárního stlačitelného proudění

Vývoji kinetických schémat pro řešení úloh stlačitelného proudění je v posledních letech věnována stále větší pozornost. Tyto metody totiž poskytují přesné numerické řešení pro nestacionární proudění, ale také nový nástroj pro pochopení numerických modelů, simulujících proudění, jako je například metoda Flux-Vector Splitting (FVS), Flux Difference Splitting (FDS)[viz 9] nebo také centrální schémata [viz 8]. Existují tedy různé skupiny numerických metod – viz například rozdělení výše, kde tyto metody můžeme jedním označením nazvat metody konečných objemů, neboli metody Godunovova typu [viz 1]. Algoritmus metody konečných objemů (konkrétně přechod mezi dvěma časovými vrstvami) lze popsat následujícím způsobem:

1. **Rekonstrukce** – aproximace integrálních průměrů hledané funkce jsou použity pro konstrukci po částech polynomiální funkce (v daném bilančním sektoru je funkce vždy polynomem)
2. **Řešení Riemannova problému** (problém najít zobecněné úlohy se speciální počáteční podmínkou) - v časovém intervalu $\langle t_n, t_{n+1} \rangle$ jsou řešeny Riemannovy problémy dané rekonstrukcí v předchozím kroku [viz 10]
3. **Průměrování** – jsou stanoveny integrální průměry z řešení Riemannových problémů na časové vrstvě t_{n+1} přes jednotlivé bilanční sektory (případně je pro výpočet nových integrálních průměrů využita integrální formulace úlohy)

Techniky rekonstrukce Godunovovy metody lze popsat také tak, že jde o přístup, který využívá přesné (případně přibližné) řešení Riemannových problémů a rekonstrukci pomocí po částech konstantní (případně polynomiální) funkce. Přesto je potřeba zdůraznit, že i v případě, kdy řešíme Riemannův problém přesně, rekonstrukce je velmi disipativní (zvláště v případě po částech konstantní rekonstrukce). Průměrování je realizováno přesně (metoda je tedy konzervativní). V práci z roku 1983 zavádí A. Harten vlastnost metod zvanou TVD (total variation diminishing) a formuluje větu, která se dnes nazývá Hartenova věta, kde diskutuje problematiku soustav parciálních diferenciálních rovnic hyperbolického typu a otázky konvergence metod k entropickému řešení (které zavádíme, protože slabé řešení není jednoznačné). Jak jsme se již zmínili, součástí Godunovovy metody je přesné řešení Riemannových problémů. To je v případě soustav parciálních diferenciálních rovnic velice komplikovaná úloha a pouze v některých případech ji lze řešit analyticky. Z tohoto důvodu byla vyvinuta celá řada technik tzv. přibližných Riemannových řešičů. Použití slova přibližné není v tomto případě úplně vhodné: jde spíše o zjednodušené Riemannovy řešiče. Vzhledem k tomu, že se používá relativně jemná diskretizace, lze ve většině případů odděleně zachytit jednotlivé typy nespojitosti. Navíc pro výpočet v dalším časovém kroku jsou použity integrální průměry, nikoliv celá struktura řešení problému. Použití přesných řešení Riemannových problémů je vlastně nadbytečné. Existují případy ve více prostorových dimenzích, kdy obdržíme řešení, které není limitní vazké. A to i v případě použití Godunovovy metody konvergující k entropickému řešení. Je tedy třeba věnovat pozornost ryze vícedimenzionálním řešičům a postupům, založeným na aproximaci kinetické Boltzmannovy rovnice. Metody, které využívají právě zmíněných postupů, v obvyklých testech neselhávají (na rozdíl od Godunovovy metody). V této souvislosti je také důležité prověřit tzv. centrální metody konstruovaných bez Riemannových řešičů.

Tato diplomová práce se zabývá konkrétně metodou Bhatnagar - Gross - Krook (dále jenom BGK). Předpoklady a aproximace využití v rámci této metody lze velice snadno a správně fyzikálně zdůvodnit. Tato metoda je jednou z prvních metod, založených na kinetické Boltzmannově rovnici (poprvé byla použita například při modelování fyzikálních jevů v detonačních trubcích). Schémata BGK jsou tímto názvem označeny z důvodu odlišení od jiných schémat modelů systémů Boltzmannova typu na základě Boltzmannovy rovnice. V rámci schémat se bere v úvahu kolize částic v celém procesu časového vývoje plynu, z nichž v závislosti na čase jsou získávány výsledné numerické toky. Metoda BGK navíc poskytuje řešení Navierových - Stokesových rovnic přímo v bodech, kde je řešení hladké a v bodech, kde je řešení nespojité, poskytuje jemný mechanismus tak, aby popis rázové vlny byl sta-

bilní a zároveň přesný. Důležitou informací je, že metoda BGK splňuje mimo jiné také podmínky entropie.

Každé ze schémat, založené na metodě konečných objemů, obsahuje postup pro řešení počáteční úlohy na rozhraní buněk. Přesnost tohoto řešení pak závisí na tom, jak se přibližuje model fyzikální podstatě problému a realitě, zda modelové rovnice skutečně popisují všechny fyzikální situace a také s jakou přesností je vyřešena počáteční úloha. V každém problému pak musíme zohledňovat všechna tři hlediska a to ve správném pořadí. Jakýkoliv nevhodný či nesprávný přístup v jednom z výše uvedených hledisek může vést k selhání metody v určitém bodě či situaci. Například při stabilním modelování rázové vlny je třeba mít na zřeteli, že plyn, nacházející se uvnitř vrstvy rázové vlny je ve velmi nerovnovázném stavu. V této situaci je disipace velmi důležitým jevem pro popis přeměny kinetické energie na energii tepelnou.

Docela často jsou požadavky na přesnost numerického schématu v rozporu samy se sebou. Simulace vysoce stlačitelného proudění se silnými rázovými vlnami a silnými vlnami zředění vyžaduje takovou numerickou metodu, která dobře aproximuje oba dva zmíněné fyzikální jevy. BGK schéma může být použito k popisu Eulerových, Navierových - Stokesových rovnic stejně jako dalších transportních rovnic. Metoda BGK má mnohem širší pole použitelnosti než například metody upwind, je mnohem přesnější než metoda Godunovova typu a je jednoduchou alternativou Riemannova řešiče [viz 1]. Má tedy bohaté fyzikální uplatnění pro popis numerického řešení proudění tekutin. Je ale nutno si uvědomit, že se jedná pouze o přiblížení reality. Přesto je metoda BGK jedním ze schémat, které vykazují větší spolehlivost, co se týče numerického řešení rovnic pro tekutiny, poskytuje více možností v propojení fyzikálních zákonů s numerickými metodami a zároveň umožňuje prohloubení chápání numerických schémat.

2.1 Distribuční funkce kinetické teorie plynů

Existují dva způsoby, kterými je možné popsat proudění plynů. První z nich je založený na popisu pomocí makroskopických veličiny, jako je například hmotnost, hybnost či hustota energie, stejně jako fyzikální zákony, upravující tyto veličiny, jako jsou Eulerovy, Navierovy - Stokesovy rovnice nebo další stavové rovnice vyššího řádu. Druhý z nich sestává z mikroskopických úvah, tedy samotné *kinetické teorie plynů*. Základní veličinou pro popis v rámci této teorie je tzv. **distribuční funkce částic** $f(x_i, u_i, t)$, která udává počet molekul (hustotu částic) v šestirozměrném fázovém prostoru $(x_i, u_i) = (x, y, z, u, v, w)$. Evoluční rovnice pro distribuční funkci plynu je tzv. Boltzmannova rovnice. Z fyzikálního hlediska nám plynová rovnice

poskytuje více informací o proudění plynu a má širší použitelnost než její makroskopický protějšek.

Dříve, než dostaneme vztah mezi Boltzmannovou a hydrodynamickými rovnicemi, si představíme makroskopický popis proudění plynu. Hydrodynamické rovnice mohou být popsány jako rovnice kontinuity, hybnosti a energie pro konzervativní neznámé ve tvaru

$$\rho(x_j, t); \quad \rho(x_j, t)U_i(x_j, t); \quad \frac{\rho U^2}{2} + \rho\epsilon(x_j, t)$$

kde ϵ je vnitřní hustota energie, U_i je rychlost hydrodynamického proudění a $U^2 = U_1^2 + U_2^2 + U_3^2$ je čtverec makroskopické rychlosti.

Navierovy - Stokesovy rovnice představují zákony zachování hmoty, hybnosti a energie. Jejich součástí jsou konstitutivní vztahy a příslušné koeficienty. Pro výše uvedeny funkce mohou být zákony zachování popsány v následující podobě:

1. **Rovnice kontinuity** - $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_j}{\partial x_j} = 0$
2. **Rovnice hybnosti** - $\frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_j U_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho F_i$
3. **Rovnice energie** - $\frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\rho U^2}{2} + \rho\epsilon \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[U_i \left(\frac{\rho U^2}{2} + \rho\epsilon + p \right) \right] = \rho F_i U_i + \frac{\partial}{\partial x_i} (\sigma_{ij} U_j - q_i)$

Použitelnost těchto rovnic je založena na dvou základních předpokladech:

1. Existence lokální termodynamické rovnováhy - což nám umožňuje použít druhý termodynamický zákon, který platí pro kvazistatické procesy

$$Tds = d\epsilon + pd \left(\frac{1}{\rho} \right)$$

a empirická stavová rovnice ve tvaru

$$p = p(\rho, T); \quad \epsilon = \epsilon(\rho, T)$$

kde s a T jsou entropie teploty a hustoty.

2. Existence dvou lineárních disipativních vztahů - což je Newtonův vzorec pro platnost vnitřního tření a Fickův vzorec pro vektor tepelného toku q_i . Newtonův vzorec pro vazké napětí se používá v zobecněné formě ve tvaru tenzoru σ_{ij} . Tyto vztahy mají tvar

$$\sigma_{ij} = \eta \left[\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \right] + \zeta \delta_{ij} \frac{\partial U_k}{\partial x_k};$$

$$q_i = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_i}$$

První vztah představuje tenzor vazkého napětí s parciálními derivacemi rychlosti a druhý představuje vektor tepelného toku s gradientem teploty. V rámci fenomenologické teorie jsou vztahy mezi koeficienty viskozity η , ζ a součinitele tepelné vodivosti κ a hustotou ρ a termodynamickou teplotou T stanoveny experimentálně. V důsledku toho dostáváme uzavřenou soustavu rovnic pro hydrodynamické proměnné ρ , U_i a T . Pro vyjádření vztahu viskozity a vedení tepla bylo definováno tzv. Prandtlovo číslo

$$\text{Pr} = \frac{\eta C_p}{\kappa}$$

kde C_p je měrná tepelná kapacita při konstantním tlaku. Je to konstanta, které hodnota je například pro vzduch 0,72 při konstantní teplotě. Z teoretického hlediska, což je zdůvodněno výše, jsou tedy Navierovy - Stokesovy rovnice založeny na kinetické teorii plynů.

2.2 Popis tekutin z hlediska statistické fyziky

Z hlediska statistické fyziky je popis tekutiny a její chování založený na samotném pohybu částic, z kterých je tekutina složena. Například hustota tekutiny je definována pomocí souboru jednotlivých částic $\rho = \sum_i m n_i$, kde m je molekulová hmotnost a n_i je hustota počtu částic při určité rychlosti. Avšak vzhledem k velkému počtu částic v malém množství látky je za běžných reálných situací nemožné pozorovat každou částici jednotlivě. Z tohoto důvodu se zavádí spojitá distribuční funkce, sloužící k popisu pravděpodobnosti výskytu částic, které se nacházejí v určitém intervalu při určité rychlosti. Pro účely hydrodynamiky je n_i aproximací plynové distribuční funkce $f(x_i, t, u_i)$, kde (x_i, t) , je poloha libovolné částice v prostoru a čase a $u_i = (u, v, w)$ je rychlost částice o třech složkách x, y a z . Vztah mezi n_i a f je vyjádřen ve tvaru

$$m n_i = f(x_i, t, u_i)$$

Rovnice $\rho = \sum_i m n_i$ může být nahrazena integrálem

$$\rho = \iiint f \, du \, dv \, dw.$$

Pro posouzení vnitřního pohybu molekul, jako je vibrace či rotace, může být distribuční funkce f brána v úvahu i jako funkce dalších proměnných ξ_i . Označme počet stupňů volnosti N . Pak pro jednoatomový plyn je $N = 0$, pro dvouatomový plyn za normálního tlaku a teploty je $N = 2$, jsou tedy vytvořené dva nezávislé rotační stupně volnosti. Ekvipartiční princip ve statistické mechanice ukazuje, že na každý stupeň volnosti připadá stejné množství energie $\frac{1}{2}\kappa T$, kde κ je Boltzmannova konstanta a T je teplota. Měrné tepelné kapacity při konstantním objemu C_v a konstantním tlaku C_p pro plyny v rovnovážném stavu jsou dány vztahy

$$C_v = \frac{N + 3}{2}R \quad C_p = \frac{(N + 3) + 2}{2}R$$

kde $R = \frac{k}{m}$ je univerzální plynová konstanta, m představuje hmotnost molekuly a 3 představuje molekulární pohyb v x , y a z souřadnici. Z výše uvedených rovnic můžeme získat poměr hlavních měrných tepelných kapacit, který označujeme písmenem γ

$$\gamma = \frac{C_p}{C_v} = \frac{(N + 3) + 2}{N + 3} \quad (2.1)$$

Takže pro jednoatomový plyn je $\gamma = \frac{5}{3}$ při ($N = 0$) a pro dvouatomový pak $\gamma = \frac{7}{3}$ při ($N = 2$).

2.3 Maxwellova - Boltzmannova funkce

Termodynamický aspekt Navierových - Stokesových rovnic je založený na předpokladu, že odchylka plynu od rovnovážného stavu je dostatečně malá. Ačkoli neznáme distribuční funkci f reálného plynu přímo v reálném proudění, v klasické fyzice jsme schopni určit odpovídající lokální rovnovážný stav g na základě hmotnosti, hybnosti a hustoty energie. Abychom pochopili interní proměnné uvnitř distribuční funkce, nadefinujeme si nejdříve tzv. **Maxwellovou - Boltzmannovou funkci g** rovnovážného stavu

$$\begin{aligned} g &= \rho \left(\frac{\lambda}{\pi} \right)^{\frac{N+3}{2}} e^{-\lambda[(u_i - U_i)^2 + \xi_i^2]} \\ &= \rho \left(\frac{\lambda}{\pi} \right)^{\frac{N+3}{2}} e^{-\lambda[(u-U)^2 + (v-V)^2 + (w-W)^2 + \xi_1^2 + \dots + \xi_N^2]} \end{aligned}$$

kde $\xi_i = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)$ jsou složky vnitřní rychlosti v N - dimenzích, λ je funkcí teploty, molekulové hmotnosti a Boltzmannovy konstanty ve tvaru

$\lambda = m/2kT$, ρ je hustota, $U_i = (U, V, W)$ je odpovídající vektor rychlosti proudění ve třech dimenzích a (u, v, w) jsou tři komponenty mikroskopické rychlosti částice. Parametry λ, U_i a ρ popisují funkce g jednoznačně a jsou funkcemi času a prostoru. Vzhledem k rovnovážnému stavu funkce g lze získat v libovolném bodě prostoru a času odpovídající hmotnost, hybnost a hustotu energie. Makroskopické a mikroskopické vyjádření uvedených parametrů jsou propojeny vztahy

$$\begin{pmatrix} \rho \\ \rho U_i \\ \rho \epsilon \end{pmatrix} = \int g \begin{pmatrix} 1 \\ u_i \\ \frac{1}{2}(u_i^2 + \xi^2) \end{pmatrix} du dv dw d\xi,$$

z čehož lze celkovou hustotu energie vyjádřit ve tvaru

$$\rho \epsilon = \frac{1}{2} \rho \left(U^2 + V^2 + W^2 + \frac{N+3}{2\lambda} \right),$$

který zahrnuje jednak kinetické ale i tepelné součásti hustoty energie. Funkce g je distribuční funkcí plynu ve třech dimenzích pouze v případě, pokud budeme uvažovat γ ze vztahu (2.1) Pokud bychom chtěli definovat proměnnou ξ_i jako vektor v K - dimenzích, potom pro tři dimenze dostáváme tvar

$$K = N = \frac{-3\gamma + 5}{\gamma - 1}$$

2.4 Distribuční funkce v případě 1-D

Pro případ 1-D modelu distribuční funkce jsou y -ová a z -ová souřadnice makroskopické průměrné rychlosti rovny nule, tzn. $(V, W) = (0, 0)$. Náhodný pohyb částic ve směru osy y a z je součástí vnitřní proměnné ξ . Vnitřní stupeň volnosti přechází do stavu $N+2$, označujeme ho K a platí $K = N+2$. Distribuční funkce pro případ 1-D modelu pak nabývá tvaru

$$\begin{aligned} g &= \rho \left(\frac{\lambda}{\pi} \right)^{\frac{N+3}{2}} e^{-\lambda[(u-U)^2 + v^2 + w^2 + \xi_1^2 + \dots + \xi_N^2]} \\ &= \rho \left(\frac{\lambda}{\pi} \right)^{\frac{N+3}{2}} e^{-\lambda[(u-U)^2 + (v^2 + w^2 + \xi_1^2 + \dots + \xi_N^2)]} \\ &= \rho \left(\frac{\lambda}{\pi} \right)^{\frac{K+1}{2}} e^{-\lambda[(u-U)^2 + \xi^2]}, \end{aligned}$$

kde K je dimenze ξ . Zavedením substituce $N = K - 2$ a dosazením do vztahu (2.1) dostáváme vztah mezi K a γ v 1-D tvaru

$$K = \frac{3 - \gamma}{\gamma - 1}$$

Příslušný tlak je pro všechny případy ($1 - D$ až $3 - D$) vyjádřený na základě vztahu mezi ρ a λ ve tvaru

$$p = nkT = \frac{\rho}{m} k \frac{m}{2k\lambda} = \frac{\rho}{2\lambda}$$

kde n je hustota počtu částic v tekutině, k je Boltzmannova konstanta a m je molekulová hmotnost. Je patrné, že tlak nezávisí na vnitřním stupni volnosti N .

2.5 Boltzmannova rovnice

Na základě tvaru rovnovážné distribuční funkce g v klasické statistické fyzice je v každém bodě prostoru a času jednoznačná korespondence mezi funkcí a makroskopickými veličinami jako je hustota, hmotnost, hybnost a energie. Díky tomu máme možnost konstruovat v každém bodě prostoru a času jednoznačný rovnovážný stav makroskopických proměnných, popisujících proudění. V reálných fyzikálních stavech ale nemusí nutně plyn setrávat v lokální termodynamické rovnováze, například uvnitř silné rázové vlny. Zde neznáme explicitní formulaci distribuční funkce f , ale známe její časový vývoj, který nazýváme *Boltzmannova rovnice* ve tvaru

$$f_t + u_i f_{x_i} + a_i f_{u_i} = Q(f, f) \quad (2.2)$$

Zde f je distribuční funkce reálného plynu, a_i je vnější síla působící na částici proudící v i - *tém* směru a $Q(f, f)$ je kolizní srážkový operátor. Z fyzikálního hlediska z důvodu zákona zachování hmoty, hybnosti a energie musí být při srážkách (kolizích) splněna následující podmínka

$$\int \Psi_a Q(f, f) d\Xi = 0 \quad (2.3)$$

kde $d\Xi = dudvdwd\xi_1 d\xi_2 \dots \xi_K$ a $\Psi_a = (1, u, v, w, \frac{1}{2}(u^2 + v^2 + w^2 + \xi^2))^T$.

Kinetická teorie plynu naznačuje, že Navierovy - Stokesovy rovnice nabývají platnosti jenom pokud je míra změny toku Δ větší než střední volná dráha molekul \bar{l} , tedy

$$K_n = \frac{\bar{l}}{\Delta} \ll 1$$

kde K_n je tzv. podobnostní Knudsenovo číslo. Střední volnou dráhu částic lze aproximovat jako

$$\bar{l} = \frac{\nu}{c} \left(\frac{\pi\gamma}{2} \right)^{1/2} \quad (2.4)$$

kde c je rychlost zvuku. Podmínkou pro platnost Navierových - Stokesových rovnic je

$$K_n \sim \frac{M}{Re^{1/2}} \ll 1$$

kde $M = U/c$ je Machovo číslo a $Re = UL/\nu$ (L je obvyklá délka plochy a $\nu = \eta/\rho$ je koeficient kinematické viskozity) je Reynoldsovo číslo. Pro rázovou vlnu platí, že změna její tloušťky je

$$\Delta \sim L/Re$$

a podmínka pro platnost Navierových - Stokesových rovnic nabývá podoby

$$K_n \sim M \ll 1$$

To znamená, že tloušťka rázové vlny nemůže být extrémně velká.

Advektivní člen na levé straně Boltzmannovy rovnice (2.2) způsobuje, že funkce f se vzdaluje od stavu lokální distribuční rovnováhy, na druhou stranu kolizní člen na pravé straně $Q(f, f)$ směřuje funkci f zpátky do rovnovážného stavu. I když $Q(f, f)$ nezapříčiní změnu hmotnosti, hybnosti a energie, přesto dochází k distribuci částic ve fázovém prostoru (u_i, ξ) a následně ke změně transportních koeficientů systému částic, jako je například viskozita a tepelná vodivost. Reálný vývoj tekutiny se řídí a je podmíněný rovnováhou mezi konvekčními a kolizními podmínkami.

Realizace rovnovážných stavů uvnitř každé numerické buňky může být fyzikálně aproximována jako proces, který se řídí redukovanou Boltzmannovou rovnicí ve tvaru

$$f_t = Q(f, f) \quad (2.5)$$

kde jsou zachovány veličiny jako je hmotnost, hybnost a energie v důsledku kolizního procesu. Jinými slovy, kolizní podmínky neznamenají změnu energie jako celku, ale rozdělí jí mezi energii kinetickou a tepelnou.

Pro korektní popis každé metody, která zachycuje chování se kapaliny v určité numerické oblasti, je tato oblast rozdělena na několik bodů sítě a střední volná dráha "numerické tekutiny" v této oblasti je úměrná síle rázové vlny, v řádu velikosti buněk $\bar{l} \sim \Delta x$. Výsledkem je to, že se rázová vlna numericky zesiluje a rovnice (2.4) vyžaduje, aby byly vazké koeficienty řádově $\nu \sim \Delta x$.

Kapitola 3

Vybrané numerické metody

Ještě předtím, než začneme přímo konstruovat metodu typu BGK, si zde uvedeme pro srovnání několik vybraných numerických metod pro nelineární systémy a sice:

1. Metoda typu upwind
2. Laxova-Friedrichsova metoda
3. Laxova-Wendroffova metoda
4. Metoda typu flux-limiter

V této části si pouze stručně popíšeme princip jednotlivých numerických metod, podrobně jsou vysvětleny v bakalářské práci - viz [8].

3.1 Metoda typu upwind

Tato metoda je v podstatě jednou z nejjednodušších numerických metod. Budeme zde uvádět princip metody pouze pro nelineární případ, jelikož hlavním cílem této diplomové práce je numerické řešení nelineárních úloh hyperbolického typu. Tvar této numerické metody můžeme zapsat v následující podobě:

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{j+1/2}^n - F_{j-1/2}^n) \quad (3.1)$$

kde $F_{j+1/2}^n$ je numerický tok. Hodnotu směrnice charakteristiky procházející bodem $x_{j+1/2}^n$ aproximujeme výrazem

$$a_{j+1/2}^n = \frac{f(U_{j+1}^n) - f(U_j^n)}{U_{j+1}^n - U_j^n} \quad (3.2)$$

Na základě znaménka pak volíme numerické toky

$$F_{j+1/2}^n = \begin{cases} f(U_j^n), & \text{když } a_{j+1/2}^n \geq 0 \\ f(U_{j+1}^n), & \text{když } a_{j+1/2}^n < 0 \end{cases} \quad (3.3)$$

Takto zvolený numerický tok lze přepsat do následující podoby

$$F_{j+1/2}^n = \frac{1}{2} [f(U_j^n) + f(U_{j+1}^n)] - \frac{1}{2} |a_{j+1/2}^n| (U_{j+1}^n - U_j^n) \quad (3.4)$$

Dosazením těchto hodnot numerických toků do metody získáme metodu typu upwind pro nelineární skalární úlohy. K tomu, aby tato metoda byla stabilní je potřeba, aby byla splněna podmínka

$$\max |f'(u)| \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad (3.5)$$

3.2 Laxova-Friedrichsova metoda

Jedná se o tzv. centrální metodu. Již sám název napovídá, že se k aproximacím prostorových derivací využívají centrální diference. U této metody aproximujeme derivaci neznámé funkce v bodě x_j a v čase t_n výrazem

$$u_x(x_j, t_n) \approx \frac{1}{2\Delta x} (U_{j+1}^n - U_{j-1}^n) \quad (3.6)$$

Zároveň ve smyslu této aproximace nahrazujeme i hodnotu neznámé funkce v bodě x_j a v čase t_n výrazem

$$u(x_j, t_n) \approx \frac{1}{2} (U_{j-1}^n + U_{j+1}^n) \quad (3.7)$$

Těchto hodnot využijeme při stanovení aproximace časové derivace neznámé funkce a to ve tvaru

$$u_t(x_j, t_n) \approx \frac{1}{\Delta t} (u(x_j, t_{n+1}) - u(x_j, t_n)) \approx \frac{1}{\Delta t} \left(U_j^{n+1} - \frac{1}{2} (U_{j-1}^n + U_{j+1}^n) \right) \quad (3.8)$$

V případě *nelineární úlohy* je toková funkce ve tvaru

$$F_{j+1/2}^n = \frac{1}{2} [f(U_j^n) + f(U_{j+1}^n)] - \frac{\Delta x}{2\Delta t} (U_{j+1}^n - U_j^n) \quad (3.9)$$

3.3 Laxova-Wendroffova metoda

Tato metoda je metodou druhého řádu přesnosti v prostoru i čase. Při její konstrukci využijeme více členů Taylorova rozvoje než tomu bylo u Laxovy–Friedrichsovy metody a tím docílíme vyšší přesnosti aproximace. Budeme předpokládat, že existují veškeré derivace, se kterými pracujeme. Na základě Taylorova rozvoje aproximujeme hodnotu $u(x_j, t_{n+1})$ následujícím předpisem

$$u(x_j, t_{n+1}) \approx u(x_j, t_n) + \frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t_n)\Delta t + \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_j, t_n)\frac{\Delta t^2}{2} \quad (3.10)$$

V případě *nelineární úlohy* budeme aproximovat hodnotu $u(x_j, t_n)$ vztahem (3.9) a využitím aproximace neznámé funkce a její derivací získáme schéma Laxovy–Wendroffovy metody pro nelineární úlohu ve tvaru

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}(F_{j+1/2}^n - F_{j-1/2}^n) \quad (3.11)$$

kde

$$F_{j+1/2}^n = \frac{1}{2} [f(U_j^n) + f(U_{j+1}^n)] - (a_{j+1/2}^n)^2 \frac{\Delta x}{2\Delta t}(U_{j+1}^n - U_j^n) \quad (3.12)$$

přičemž

$$a_{j+1/2}^n = \begin{cases} \frac{f(U_{j+1}^n) - f(U_j^n)}{(U_{j+1}^n - U_j^n)}, & \text{když } U_j^n \neq U_{j+1}^n \\ f'(U_j^n), & \text{když } U_j^n = U_{j+1}^n \end{cases} \quad (3.13)$$

3.4 Metoda typu flux-limiter

Metoda typu flux–limiter patří k tzv. metodám s vysokým rozlišením. Jenom pro přiblížení: *metody s vysokým rozlišením* jsou metody, které splňují tyto základní vlastnosti:

1. v místech, kde je řešení hladké, je metoda řádu vyššího
2. tyto metody velmi dobře aproximují i nespojitosti přesného řešení
3. negenerují nežádoucí oscilace, které se u přesného řešení nevyskytují

Tato metoda je vlastně zobecněním a zpřesněním Laxovy–Wendroffovy metody a můžeme ji nazvat jinými slovy jako metoda omezeného toku. Pro

$a > 0$ vypadá schéma metody typu flux–limiter následovně:

$$U_j^{n+1} = U_j^n - a \frac{\Delta t}{\Delta x} (U_j^n - U_{j-1}^n) - \frac{1}{2} a \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(1 - a \frac{\Delta t}{\Delta x}\right) \left[\phi(\theta_{j+1/2}^n) (U_{j+1}^n - U_j^n) - \phi(\theta_{j-1/2}^n) (U_j^n - U_{j-1}^n) \right] \quad (3.14)$$

Z tohoto schématu je patrné, že tokové funkce vynásobíme vhodně zvoleným limiterem, což je vlastně funkce ve tvaru

$$\phi(\theta_{j+1/2}^n) = \frac{\theta_{j+1/2}^n + |\theta_{j+1/2}^n|}{1 + |\theta_{j+1/2}^n|} \quad (3.15)$$

kde pro $a > 0$ je

$$U_j^{n+1} = U_j^n - a \frac{\Delta t}{\Delta x} (U_{j+1}^n - U_j^n) + \frac{1}{2} a \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(1 + a \frac{\Delta t}{\Delta x}\right) \left[\phi(\theta_{j+1/2}^n) (U_{j+1}^n - U_j^n) - \phi(\theta_{j-1/2}^n) (U_j^n - U_{j-1}^n) \right] \quad (3.16)$$

a také diferenční podíl

$$\theta_{j+1/2}^n = \frac{U_{j+2}^n - U_{j+1}^n}{U_{j+1}^n - U_j^n} \quad (3.17)$$

Tento diferenční podíl můžeme obecně chápat i jako poměr plynulosti, nebo lokální hladkosti řešení v okolí bodu $x_{j+1/2}$. Volba limiteru může značně ovlivnit tvar metody. V případě, že $\phi(\theta_j^n) = 0 \quad \forall j$, se vynuluje celý korekční člen a z metody z vysokým rozlišením dostáváme metodu prvního řádu, konkrétně metodu typu upwind. Pokud $\phi(\theta_j^n) = 1 \quad \forall j$, z metody druhého řádu zbude pouze numerický tok a tím se z ní stává Laxova–Wendroffova metoda. Tyto informace jsou užitečné v mnoha aplikacích. Stačí totiž pouze implementovat metodu s limiterem a následně měnit pouze jeho tvar pomocí vhodně zvolených parametrů.

Kapitola 4

Metoda BGK

Jednou z hlavních funkcí kolize částic je směřovat distribuční funkci f zpátky do rovnovážného stavu g , který koresponduje s lokálními hodnotami proměnných ρ , ρU_i a $\rho \epsilon$. Teorie metody BGK předpokládá, že kolizí prochází zlomek $\frac{dt}{\tau}$ malého množství molekul v průběhu času dt , kde τ je časový interval mezi dvěma srážkami stejných částic. Kolizní člen v BGK modelu představuje změnu rychlosti distribuční funkce od f ke g . Je to tedy ekvivalent předpokladu, že míra změny $\frac{df}{dt}$ funkce f v důsledku kolize bude rovna

$$-\frac{(f - g)}{\tau} \quad (4.1)$$

což znamená, že Boltzmannova rovnice bez vnějšího působení nabývá tvaru

$$f_t + u f_x = -\frac{(f - g)}{\tau} \quad (4.2)$$

4.1 Metoda BGK pro Burgersovou rovnici

V této části budeme řešit tzv. pomocnou úlohu a sice konstruovat metodu BGK pro Burgersovou rovnici ve tvaru

$$U_t + UU_x = 0 \quad (4.3)$$

Naší úlohou je tedy naleznout vztah mezi (4.2) a (4.3). Rovnovážný stav g budeme definovat následujícím způsobem

$$g = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} U e^{-\lambda(u-U/2)^2} \quad (4.4)$$

kde podmínky kompatibility jsou ve tvaru

$$\int_{-\infty}^{\infty} (f - g) du = 0 \quad (4.5)$$

V prvním kroku zintegrujeme rovnici (4.2), takže dostáváme

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_t du + \int_{-\infty}^{\infty} u f_x du = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(f - g)}{\tau} du \quad (4.6)$$

Integrál na pravé straně rovnice je roven nule, což plyne z (4.5). Pak tedy dostáváme

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_t du + \int_{-\infty}^{\infty} u f_x du = 0 \quad (4.7)$$

Tento vztah můžeme přepsat do tvaru

$$\left[\int_{-\infty}^{\infty} f du \right]_t + \left[\int_{-\infty}^{\infty} u f du \right]_x = 0 \quad (4.8)$$

Nyní provedeme rozvoj funkce f kolem jejího rovnovážného stavu g . Použijeme takzvaný Chapmanův - Enskogův rozvoj, který je založený na principu perturbčních metod. Hledáme asymptotické řešení rovnice (4.8) jako odchylku od již známého řešení, v našem případě rovnovážného stavu. Vliv odchylek vyššího stupně je v násobném rozvoji funkce f snižován parametrem, který je často spojován s Knudsenovým číslem, které je za předpokladu kontinua velmi malé.

$$f = g + \tau v_1 + \tau^2 v_2 + \tau^3 v_3 + \dots \quad (4.9)$$

kde funkce v_i jsou funkce x a t ve tvaru $v_i = v_i(x, t)$. Vycházejíc ze vztahu (4.2) zderivujeme funkci f podle jednotlivých proměnných t a x a dostáváme

$$\begin{aligned} f_t &= g_t + \tau v_{1t} + \tau^2 v_{2t} + \tau^3 v_{3t} + \dots \\ f_x &= g_x + \tau v_{1x} + \tau^2 v_{2x} + \tau^3 v_{3x} + \dots \end{aligned} \quad (4.10)$$

Derivace dosadíme do rovnice (4.2) a dostáváme

$$\begin{aligned} g_t + \tau v_{1t} + \tau^2 v_{2t} + \tau^3 v_{3t} + \dots + u g_x + u \tau v_{1x} + u \tau^2 v_{2x} + u \tau^3 v_{3x} + \dots \\ = -v_1 - \tau v_2 - \tau^2 v_3 - \dots \end{aligned} \quad (4.11)$$

Z tohoto vztahu pak máme

$$\begin{aligned} g_t + u g_x &= -v_1 \\ v_{1t} + u v_{1x} &= -v_2 \\ v_{2t} + u v_{2x} &= -v_3 \\ &\vdots \end{aligned} \quad (4.12)$$

a tedy $f \approx g - \tau(g_t + ug_x)$

Na základě předpokladu rovnovážného stavu distribuční funkce dosadíme do rovnice (4.8) za f její rovnovážný stav g

$$\left[\int_{-\infty}^{\infty} g du \right]_t + \left[\int_{-\infty}^{\infty} ug du \right]_x = 0 \quad (4.13)$$

Nejdříve se budeme zabývat prvním člen na levé straně a sice

$$\left[\int_{-\infty}^{\infty} g du \right]_t \quad (4.14)$$

Dosazením do (4.14) za g ze vztahu (4.4) plyne

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} g du &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} U e^{-\lambda(u-U/2)^2} \right] du \\ &= \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} U \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda(u-U/2)^2} du \end{aligned} \quad (4.15)$$

Zavedeme substituci $t = \sqrt{\lambda}(u-U/2)$, pak $dt = \sqrt{\lambda} du$. Dosadíme t do vztahu (4.15) a dostáváme

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} U \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda(u-U/2)^2} du &= \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} U \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2} dt \\ &= \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} U \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2} dt \end{aligned} \quad (4.16)$$

kde

$$\begin{aligned} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2} dt &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left[\int_{-\infty}^0 e^{-t^2} dt + \int_0^{\infty} e^{-t^2} dt \right] \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{\sqrt{\pi}}{2} + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \right] = 2 \end{aligned} \quad (4.17)$$

je Gaussova chybová funkce. Dosazením předchozího výsledku do vztahu (4.16) a po úpravách dostáváme

$$\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} U \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda(u-U/2)^2} du = U_t \quad (4.18)$$

Analogicky se pokusíme stanovit druhý člen rovnice (4.8) na levé straně. Z předchozí substituce pro proměnnou t vyjádříme proměnnou u

$$\begin{aligned} t &= \sqrt{\lambda}(u - U/2) \\ \frac{t}{\sqrt{\lambda}} &= u - \frac{U}{2} \\ u &= \frac{t}{\sqrt{\lambda}} + \frac{U}{2} \end{aligned} \quad (4.19)$$

a dosadíme do integrálu

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} ugdu &= \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}U \int_{-\infty}^{\infty} ue^{-t^2} du = \\ &= \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}U \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{t}{\sqrt{\lambda}} + \frac{U}{2} \right) e^{-t^2} \frac{dt}{\sqrt{\lambda}} = \\ &= \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}U \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{t}{\sqrt{\lambda}} e^{-t^2} dt + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{U}{2} \frac{1}{\sqrt{\lambda}} e^{-t^2} dt \right] = \\ &= \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\pi}}U \left[\underbrace{\frac{1}{\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} te^{-t^2} dt}_0 + \frac{U}{2} \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2} dt}_{\sqrt{\pi}} \right] = \\ &= \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\pi}}U \frac{U}{2} \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \sqrt{\pi} = \frac{U^2}{2} = \frac{1}{2}U^2 \end{aligned} \quad (4.20)$$

Ukázali jsme tedy jak souvisí funkce f s řešením původní Burgersovy rovnice (4.3) a této myšlenky dále využijeme při konstrukci metody BGK. V případě, že bychom použili i druhý člen ze vztahu $f \approx g - \tau(g_t + ug_x)$ a sice $-\tau(g_t + ug_x)$, dostali bychom vztah

$$U_t + (U^2/2)_x = \nu U_{xx} \quad (4.21)$$

kde $\nu = \tau/2\lambda$.

4.2 Konstrukce tokových funkcí

Vraťme se k rovnici (4.2) a sice

$$f_t + uf_x = Q$$

kde $Q = -\frac{(f-g)}{\tau}$. Zintegrováním této rovnice dostáváme

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_t du + \int_{-\infty}^{\infty} u f_x du = - \int_{-\infty}^{\infty} Q du$$

Z podmínky (4.5) plyne, že integrál na pravé straně je roven nule a potom můžeme tuto rovnici přepsat do tvaru

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_t du + \int_{-\infty}^{\infty} u f_x du = 0$$

Obecně bychom mohli zapsat aproximaci tokové funkce pomocí diskretizace ve tvaru

$$F_j^{n+1}(u) = F_j^n(u) - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[u F_{j+1/2}^n(u) - u F_{j-1/2}^n(u) \right] \quad (4.22)$$

nebo jinými slovy

$$F_j^{n+1}(u) = F_j^n(u) - u \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[F_{j+1/2}^n(u) - F_{j-1/2}^n(u) \right] \quad (4.23)$$

kde

$$F_{j+1/2}^n(u) = \begin{cases} F_j^n(u) & \text{pro } u \geq 0, \\ F_{j+1}^n(u) & \text{pro } u < 0 \end{cases} \quad (4.24)$$

Všechny tyto kroky, které zde využíváme, jsou v zásadě prvky metody upwind. Zintegrujeme-li rovnici (4.22) podle u , získáme

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} F_j^{n+1}(u) &= \int_{-\infty}^{\infty} F_j^n(u) du - \\ &- \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\int_{-\infty}^{\infty} u F_{j+1/2}^n(u) du - \int_{-\infty}^{\infty} u F_{j-1/2}^n(u) du \right] \end{aligned} \quad (4.25)$$

a to můžeme přepsat do tvaru

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[H_{j+1/2}^n - H_{j-1/2}^n \right] \quad (4.26)$$

přičemž

$$H_{j+1/2}^n = \int_{-\infty}^{\infty} u F_{j+1/2}^n(u) du \quad (4.27)$$

Pro tokovou funkci $F_{j+1/2}^n(u)$ platí podmínky (4.23). Integrál na pravé straně rovnice (4.26) rozdělíme na dvě části a sice kladnou a zápornou a pak pro $H_{j+1/2}^n$ platí

$$H_{j+1/2}^n = \int_{-\infty}^0 uF_{j+1/2}^n(u)du + \int_0^{\infty} uF_{j+1/2}^n(u)du \quad (4.28)$$

Jelikož pro $u < 0$ z (4.24) plyne, že

$$F_{j+1/2}^n(u) = F_{j+1}^n(u) \Rightarrow \int_{-\infty}^0 uF_{j+1/2}^n(u)du = \int_{-\infty}^0 uF_{j+1}^n(u)du \quad (4.29)$$

Analogicky pro $u \geq 0$ platí $F_{j+1/2}^n(u) = F_j^n(u)$ a pak pro druhý člen pravé strany rovnice (4.27) platí

$$\int_0^{\infty} uF_{j+1/2}^n(u)du = \int_0^{\infty} uF_j^n(u)du \quad (4.30)$$

Takže pak rovnici (3.27) můžeme přepsat do tvaru

$$H_{j+1/2}^n = \int_{-\infty}^0 uF_{j+1}^n(u)du + \int_0^{\infty} uF_j^n(u)du \quad (4.31)$$

Jelikož funkce F je vlastně aproximací distribuční funkce f a tu jsme v předchozích vztazích nahradili rovnovážným stavem g distribuční funkce f - viz (4.4), pak těchto vztahů můžeme použít i při konstrukci tokových funkcí a dostáváme konečnou verzi numerické metody pro Burgersovou rovnici

$$\begin{aligned} H_{j+1/2}^n &= \int_{-\infty}^0 uF_{j+1}^n(u)du + \int_0^{\infty} uF_j^n(u)du \\ &= \int_{-\infty}^0 u \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\pi}} U_{j+1}^n e^{-\lambda(u-U_{j+1}^n/2)^2} du + \\ &+ \int_0^{\infty} u \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\pi}} U_j^n e^{-\lambda(u-U_j^n/2)^2} du \\ &= \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\pi}} U_{j+1}^n \int_{-\infty}^0 u e^{-\lambda(u-U_{j+1}^n/2)^2} du + \\ &+ \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\pi}} U_j^n \int_0^{\infty} u e^{-\lambda(u-U_j^n/2)^2} du \end{aligned} \quad (4.32)$$

Následně ještě potřebujeme stanovit jednotlivé integrály. Pro $u < 0$ platí

$$\begin{aligned}
\frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\pi}} U_{j+1}^n \int_{-\infty}^0 u e^{-\lambda(u-U_{j+1}^n/2)^2} du &= \left[\begin{array}{l} v = u - U_{j+1}^n/2 \\ u = v + U_{j+1}^n/2 \\ du = dv \end{array} \right] = \\
&= \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\pi}} U_{j+1}^n \int_{-\infty}^{-U_{j+1}^n/2} (v + U_{j+1}^n/2) e^{-\lambda v^2} dv = \\
&= \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\pi}} U_{j+1}^n \left[\int_{-\infty}^{-U_{j+1}^n/2} v e^{-\lambda v^2} dv + \int_{-\infty}^{-U_{j+1}^n/2} U_{j+1}^n/2 e^{-\lambda v^2} dv \right] = \\
&= \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\pi}} U_{j+1}^n \left[\int_{-\infty}^{-U_{j+1}^n/2} v e^{-\lambda v^2} dv + U_{j+1}^n/2 \int_{-\infty}^{-U_{j+1}^n/2} e^{-\lambda v^2} dv \right] \quad (4.33)
\end{aligned}$$

Pro první člen v závorce platí

$$\int_{-\infty}^{-U_{j+1}^n/2} v e^{-\lambda v^2} dv = -\frac{e^{-\lambda(U_{j+1}^n/2)^2}}{2\lambda} \quad (4.34)$$

Druhý člen v závorce je představitelem chybové funkce ve tvaru

$$\begin{aligned}
U_{j+1}^n/2 \int_{-\infty}^{-U_{j+1}^n/2} e^{-\lambda v^2} dv &= \frac{\sqrt{\pi}}{2} U_{j+1}^n/2 \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{-U_{j+1}^n/2} e^{-\lambda v^2} dv = \\
&= \left[\begin{array}{l} t = \sqrt{\lambda} v \\ dt = \sqrt{\lambda} dv \end{array} \right] = \\
&= \frac{\sqrt{\pi}}{2} U_{j+1}^n/2 \left[\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{-\sqrt{\lambda} U_{j+1}^n/2} e^{-t^2} \frac{dt}{\sqrt{\lambda}} \right] = \\
&= \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\lambda}} U_{j+1}^n/2 \left[\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{-\sqrt{\lambda} U_{j+1}^n/2} e^{-t^2} dt \right] = \\
&= \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\lambda}} U_{j+1}^n/2 \left(1 + \operatorname{erf}(-\sqrt{\lambda} U_{j+1}^n/2) \right) \quad (4.35)
\end{aligned}$$

Dosazením jednotlivých členů do vztahu 4.33 dostáváme

$$\begin{aligned}
&\frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\pi}} U_{j+1}^n \left[-\frac{e^{-\lambda(U_{j+1}^n/2)^2}}{2\lambda} + \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\lambda}} U_{j+1}^n/2 \left(1 + \operatorname{erf}(-\sqrt{\lambda} U_{j+1}^n/2) \right) \right] = \\
&= -U_{j+1}^n \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\pi}} \frac{e^{-\lambda(U_{j+1}^n/2)^2}}{2\lambda} + \frac{1}{2} U_{j+1}^n U_{j+1}^n/2 \left(1 + \operatorname{erf}(-\sqrt{\lambda} U_{j+1}^n/2) \right) = \\
&= -U_{j+1}^n \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\pi}} \frac{e^{-\lambda(U_{j+1}^n/2)^2}}{2\lambda} + \frac{1}{2} U_{j+1}^n U_{j+1}^n/2 \left(1 + \operatorname{erf}(-\sqrt{\lambda} U_{j+1}^n/2) \right) \quad (4.36)
\end{aligned}$$

Podobně vyjádříme druhý člen ve vztahu 4.32 pro $u \geq 0$

$$\begin{aligned}
\frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\pi}} U_j^n \int_0^\infty u e^{-\lambda(u-U_j^n/2)^2} du &= \begin{bmatrix} v & = & u - U_j^n/2 \\ u & = & v + U_j^n/2 \\ du & = & dv \end{bmatrix} = \\
&= \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\pi}} U_j^n \left[\int_{-U_j^n/2}^\infty (v + U_j^n/2) e^{-\lambda v^2} dv \right] = \\
&= \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\pi}} U_j^n \left[\int_{-U_j^n/2}^\infty v e^{-\lambda v^2} dv + \int_{-U_j^n/2}^\infty U_j^n/2 e^{-\lambda v^2} dv \right] = \\
&= \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\pi}} U_j^n \left[\frac{e^{-\lambda(U_j^n/2)^2}}{2\lambda} + \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\lambda}} U_j^n/2 (1 + \operatorname{erf}(-\sqrt{\lambda}U_j^n/2)) \right] = \\
&= \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\pi}} U_j^n \frac{e^{-\lambda(U_j^n/2)^2}}{2\lambda} + \frac{1}{2} U_j^n U_j^n/2 (1 + \operatorname{erf}(-\sqrt{\lambda}U_j^n/2)) \quad (4.37)
\end{aligned}$$

Dosazením členů ze vztahů 4.36 a 4.37 do vztahu 4.32 dostáváme vyjádření pro tokovou funkci ve tvaru

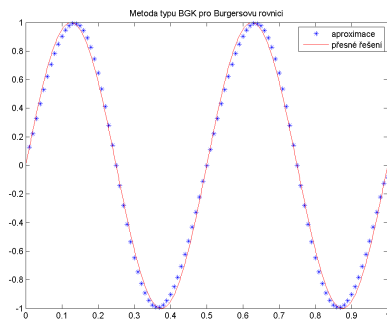
$$\begin{aligned}
H_{j+1/2}^n &= -U_{j+1}^n \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\pi}} \frac{e^{-\lambda(U_{j+1}^n/2)^2}}{2\lambda} + \frac{1}{2} U_{j+1}^n U_{j+1}^n/2 (1 + \operatorname{erf}(-\sqrt{\lambda}U_{j+1}^n/2)) + \\
&\quad + U_j^n \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\pi}} \frac{e^{-\lambda(U_j^n/2)^2}}{2\lambda} + \frac{1}{2} U_j^n U_j^n/2 (1 + \operatorname{erf}(-\sqrt{\lambda}U_j^n/2)) = \\
&\quad = \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\pi}} \left[U_j^n \frac{e^{-\lambda(U_j^n/2)^2}}{2\lambda} - U_{j+1}^n \frac{e^{-\lambda(U_{j+1}^n/2)^2}}{2\lambda} \right] + \\
&\quad + \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} (U_{j+1}^n)^2 (1 + \operatorname{erf}(-\sqrt{\lambda}U_{j+1}^n/2)) + \frac{1}{2} (U_j^n)^2 (1 + \operatorname{erf}(-\sqrt{\lambda}U_j^n/2)) \right] \quad (4.38)
\end{aligned}$$

4.3 Aplikace metody BGK pro Burgersovu rovnici

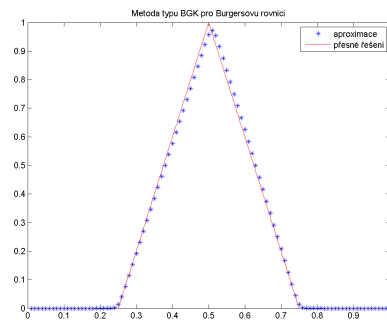
Nyní si ukážeme několik numerických experimentů, v rámci kterých budeme metodu BGK aplikovat na Burgersovu rovnici. Zvolili jsme několik hladkých i nehladkých počátečních podmínek a provedeme jejich aproximace pomocí metody BGK. Volitelným parametrem je funkce teploty λ , kde změna hodnoty tohoto parametru způsobuje rázovou vlnu a ovlivňuje celkovou přesnost aproximace. Použité parametry:

1. $M = 1000$ (počet prostorových kroků)
2. $N = 100$ (počet časových kroků)
3. $\lambda =$ (funkce teploty - parametr metody)
4. $\Delta x = 0,001$
5. $\Delta t = 0,0001$

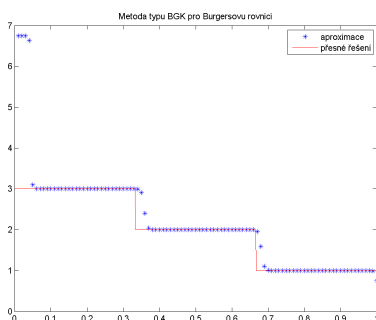
Hodnoty časové a prostorové proměnné a rovněž jejich změny jsme stanovili jako konstanty, měnit budeme pouze parametr λ a to konkrétně tuto hodnotu budeme postupně zvyšovat.



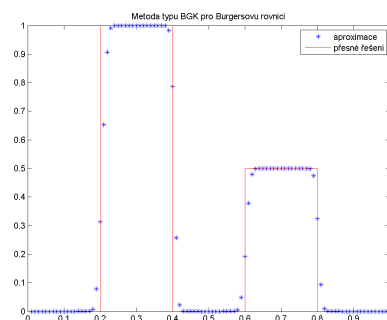
Obrázek 4.1: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/200$



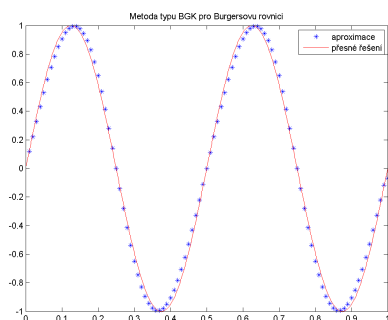
Obrázek 4.2: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/200$



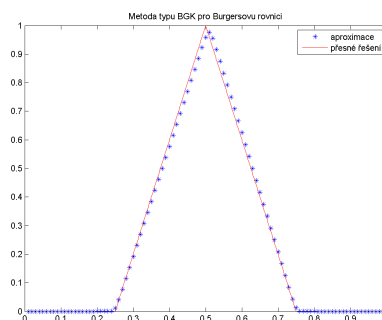
Obrázek 4.3: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/200$



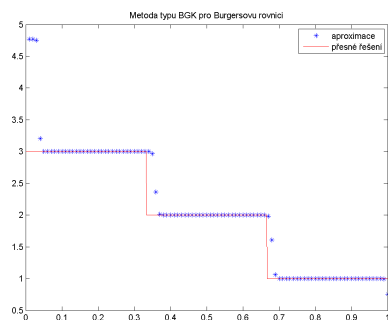
Obrázek 4.4: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/200$



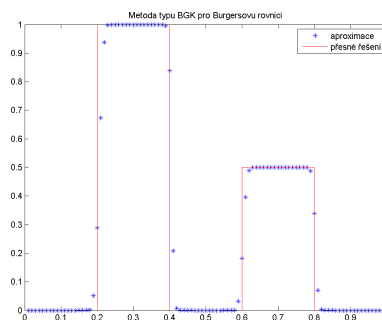
Obrázek 4.5: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/100$



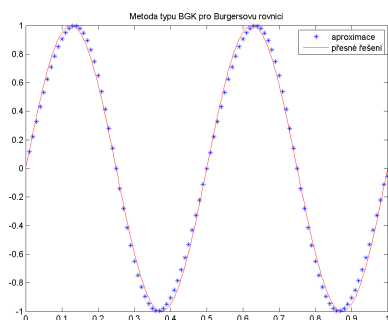
Obrázek 4.6: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/100$



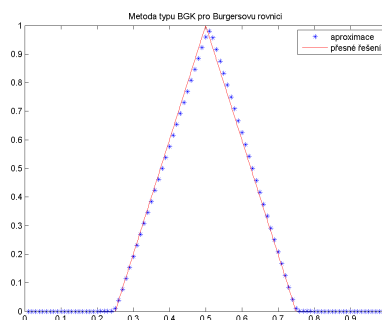
Obrázek 4.7: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/100$



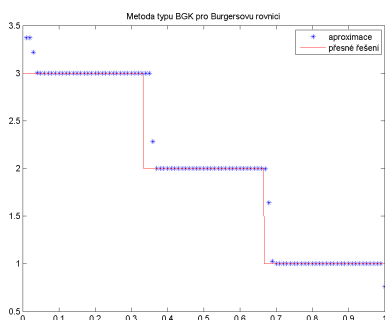
Obrázek 4.8: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/100$



Obrázek 4.9: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/50$



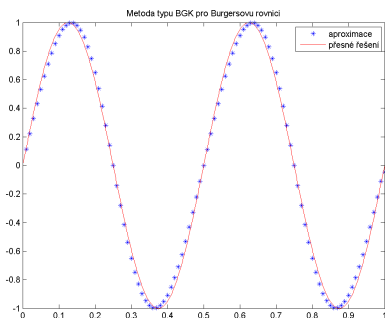
Obrázek 4.10: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/50$



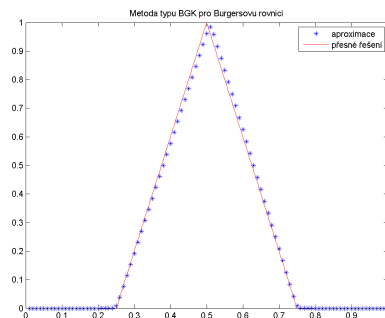
Obrázek 4.11: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/50$



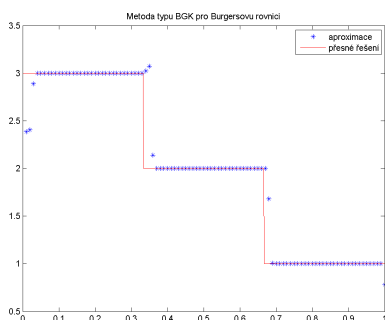
Obrázek 4.12: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/50$



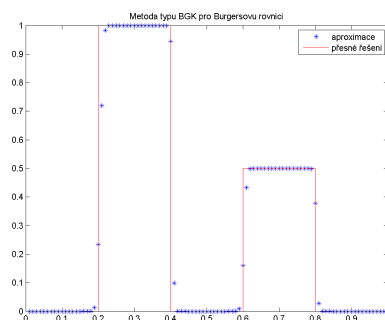
Obrázek 4.13: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/25$



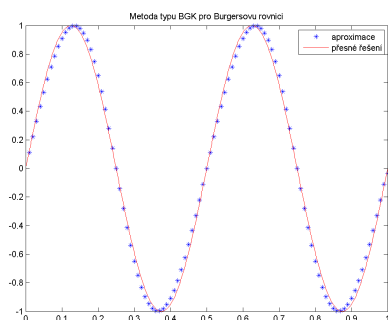
Obrázek 4.14: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/25$



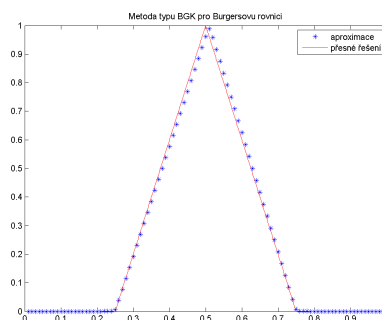
Obrázek 4.15: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/25$



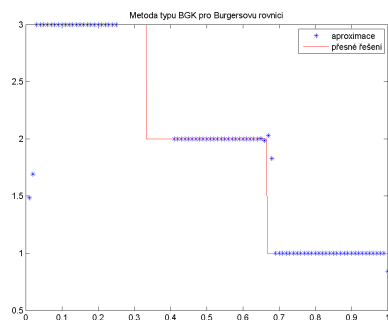
Obrázek 4.16: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/25$



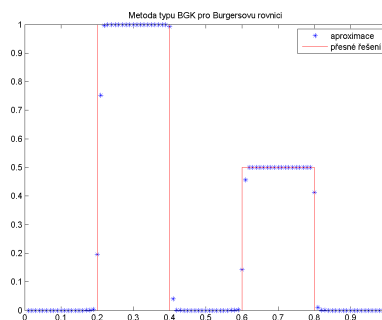
Obrázek 4.17: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/10$



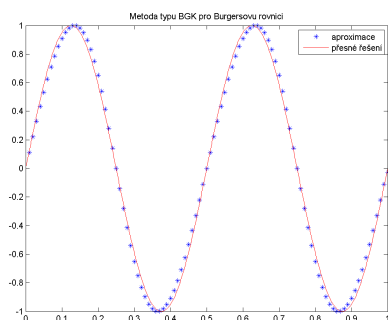
Obrázek 4.18: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/10$



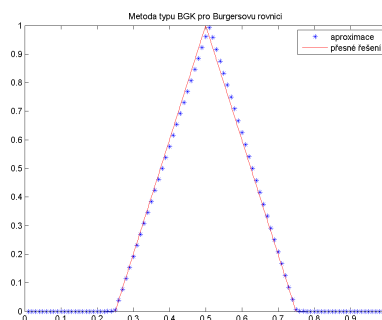
Obrázek 4.19: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/10$



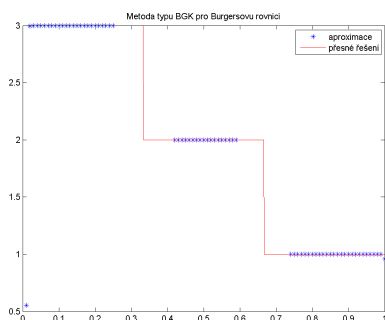
Obrázek 4.20: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/10$



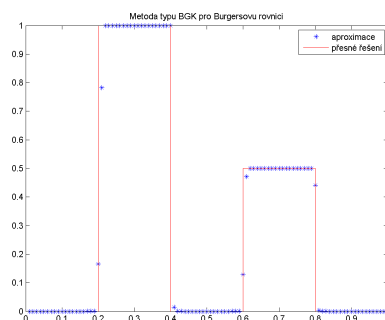
Obrázek 4.21: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/5$



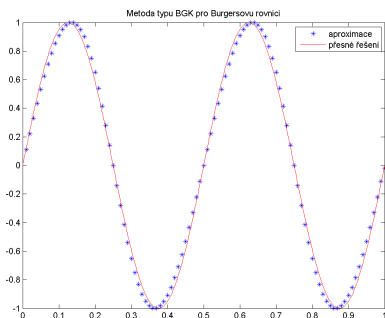
Obrázek 4.22: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/5$



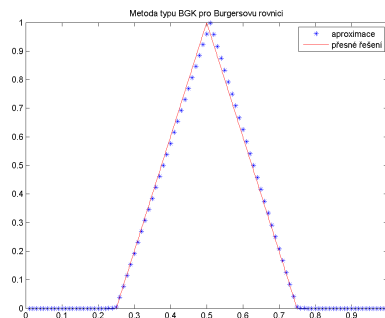
Obrázek 4.23: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/5$



Obrázek 4.24: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/5$



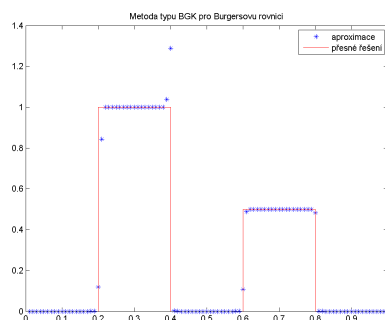
Obrázek 4.25: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/2$



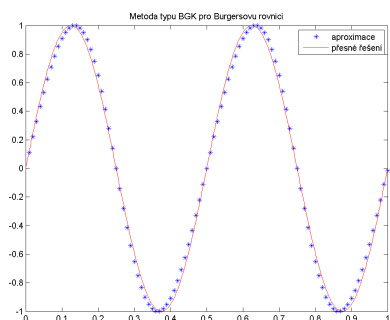
Obrázek 4.26: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/2$



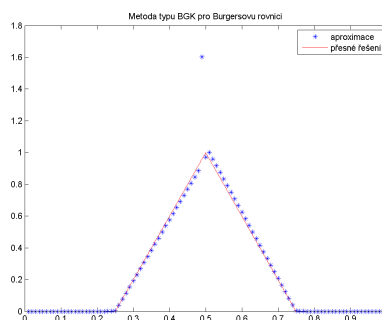
Obrázek 4.27: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/2$



Obrázek 4.28: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/2$



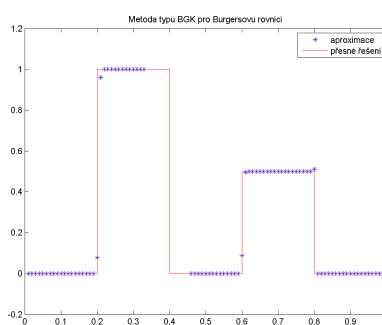
Obrázek 4.29: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1$



Obrázek 4.30: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1$

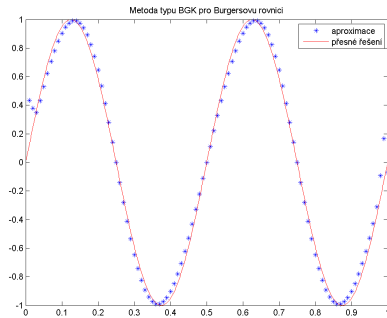


Obrázek 4.31: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1$

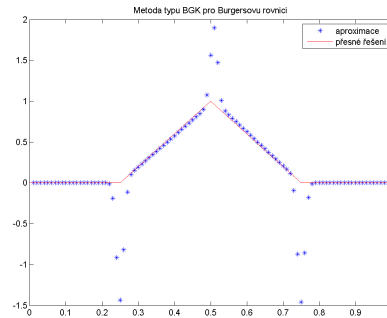


Obrázek 4.32: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1$

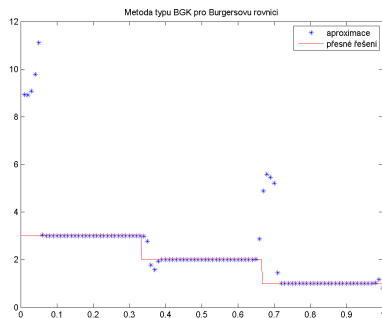
Nyní se pokusíme hodnotu parametru λ snížit. Můžeme pozorovat značnou kolizi aproximace. Výsledky jsou následující:



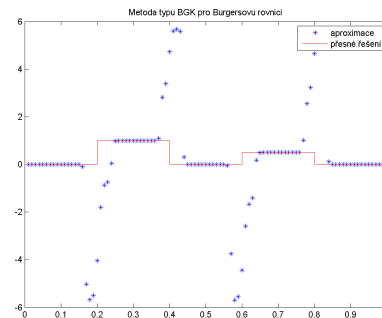
Obrázek 4.33: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/350$



Obrázek 4.34: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/350$



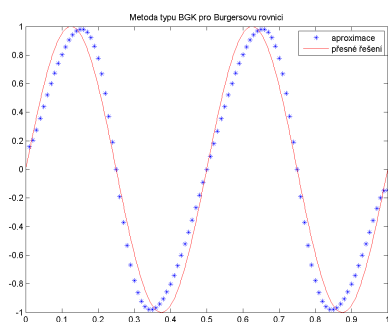
Obrázek 4.35: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/350$



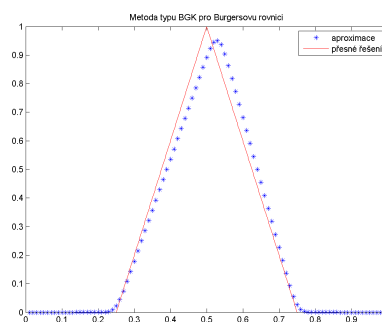
Obrázek 4.36: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $\lambda = 1/350$

Cílem testu bylo ověřit chování se metody v závislosti na parametru λ . Je zřejmé, že pro vysoké hodnoty parametru λ blíží se k jedné se zvyšuje přesnost aproximace, naopak pro hodnoty $\lambda \rightarrow 0$ se přesnost aproximace snižuje.

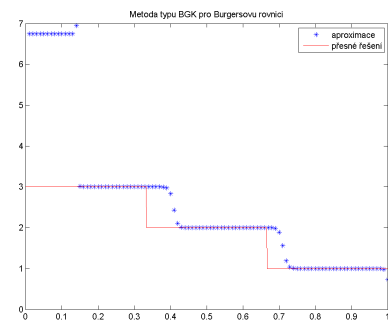
Nyní ještě provedeme několik experimentů tím, že budeme zvyšovat počet časových kroků N , parametr λ nastavíme jako konstantu na hodnotu $1/200$. Můžeme pozorovat vznik rázové vlny.



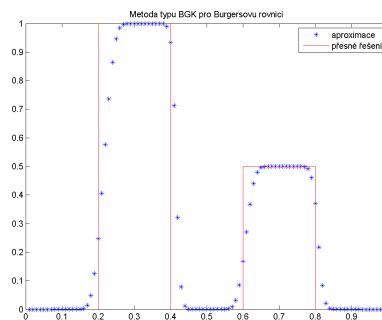
Obrázek 4.37: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $N = 300$



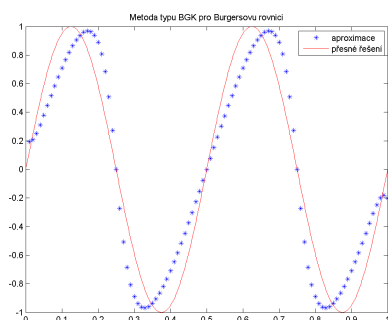
Obrázek 4.38: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $N = 300$



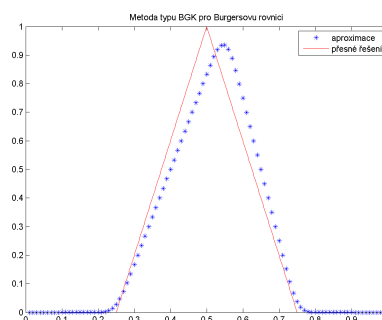
Obrázek 4.39: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $N = 300$



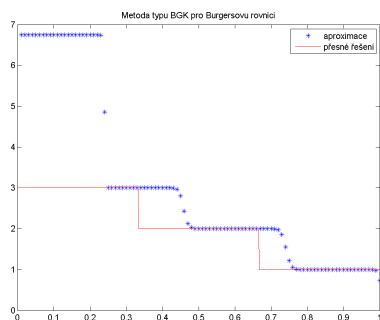
Obrázek 4.40: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $N = 300$



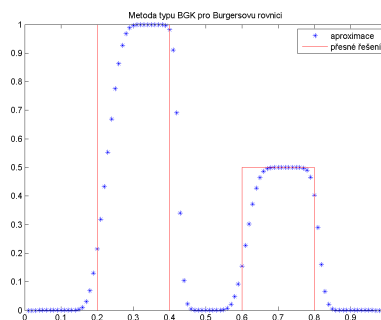
Obrázek 4.41: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $N = 500$



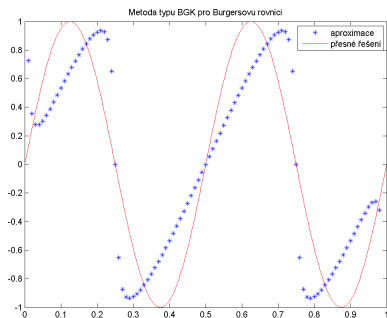
Obrázek 4.42: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $N = 500$



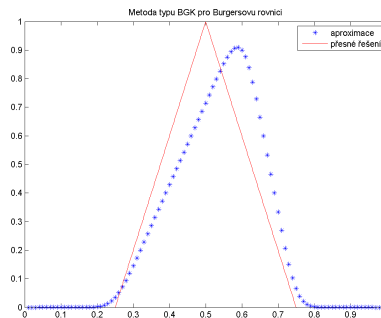
Obrázek 4.43: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $N = 500$



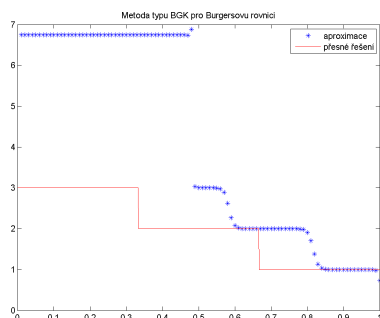
Obrázek 4.44: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $N = 500$



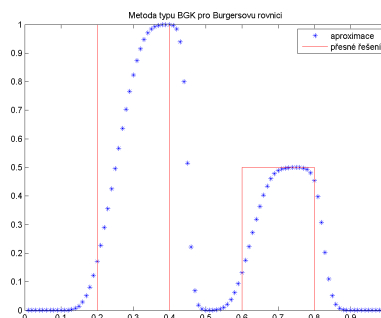
Obrázek 4.45: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $N = 1000$



Obrázek 4.46: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $N = 1000$



Obrázek 4.47: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $N = 1000$



Obrázek 4.48: Aproximace přesného řešení Burgersovy rovnice metodou BGK pro $N = 1000$

4.4 Metoda BGK pro lineární rovnici

Metodu BGK můžeme uplatnit také při aproximaci lineární kinetické rovnice ve tvaru

$$U_t + cUx = 0 \quad (4.39)$$

Hledáme tedy aproximaci výše uvedené rovnice pomocí tokových funkcí a sice

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [F_{j+1/2}^n - F_{j-1/2}^n] \quad (4.40)$$

kde toková funkce $F_{j+1/2}^n$ je ve tvaru

$$F_{j+1/2}^n = \frac{(cU_j^n + cU_{j+1}^n)}{2} + d_{j+1/2}^n \quad (4.41)$$

a

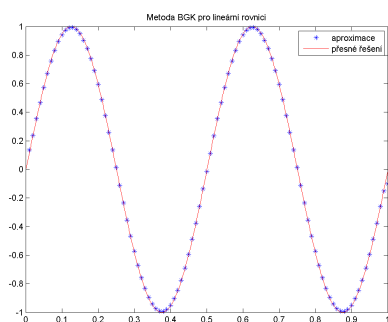
$$d_{j+1/2}^n = \left[\frac{1}{2}c \left(\operatorname{erf} \sqrt{\lambda \cdot c} \right) + \frac{e^{-\lambda \cdot c^2}}{2\sqrt{\lambda \cdot \pi}} \right] (U_j^n - U_{j+1}^n) \quad (4.42)$$

Je nutno zdůraznit, že pro tento případ se nám liší funkce rovnovážného stavu g s funkcí pro nelineární případ - viz 4.4. Ta nyní nabývá tvaru

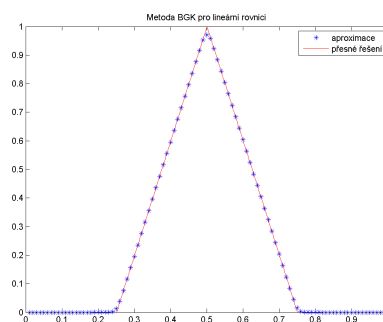
$$g = \sqrt{(\lambda/\pi)^{3/2}} U e^{-\lambda(u-c)^2} \quad (4.43)$$

Provedeme několik experimentů, kde budeme zkoumat přesnost aproximace v závislosti na parametru c . Použité parametry:

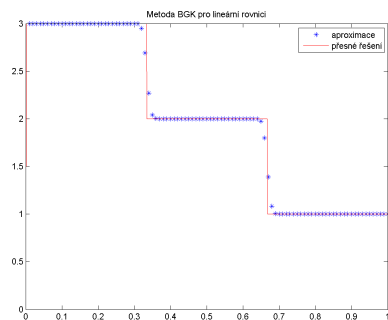
1. c - parametr úlohy
2. $\lambda = 1/200$ (funkce teploty - pro náš případ konstanta)
3. $M = 1000$ (počet prostorových kroků)
4. $N = 100$ (počet časových kroků)
5. $\Delta x = 0,001$
6. $\Delta t = 0,0001$



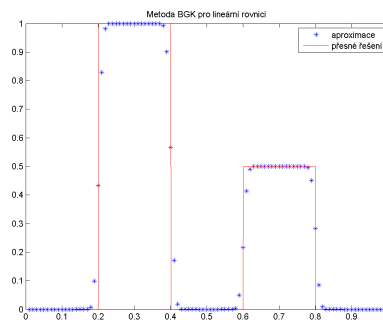
Obrázek 4.49: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 0, 1$



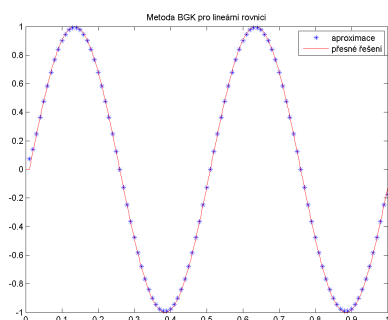
Obrázek 4.50: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 0, 1$



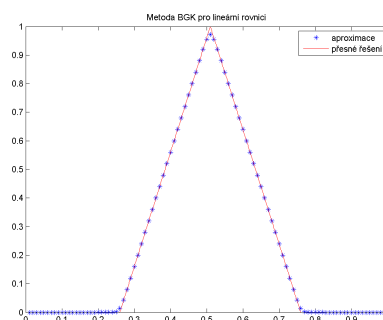
Obrázek 4.51: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 0, 1$



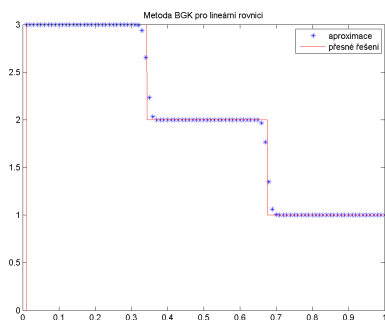
Obrázek 4.52: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 0, 1$



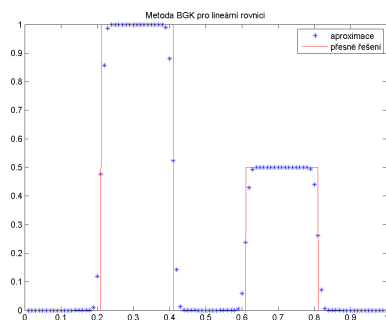
Obrázek 4.53: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 1$



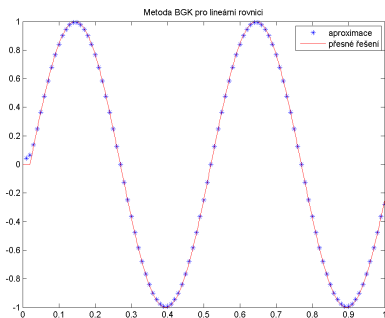
Obrázek 4.54: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 1$



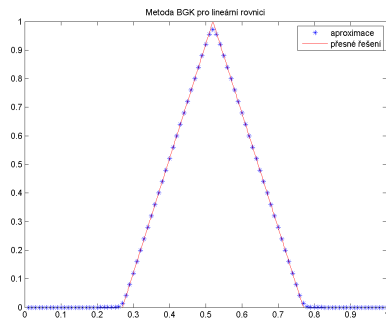
Obrázek 4.55: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 1$



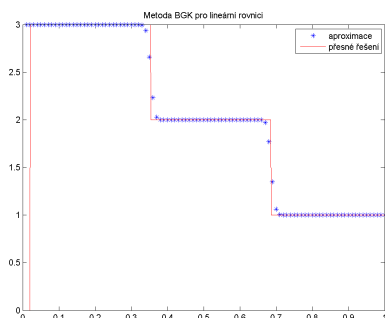
Obrázek 4.56: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 1$



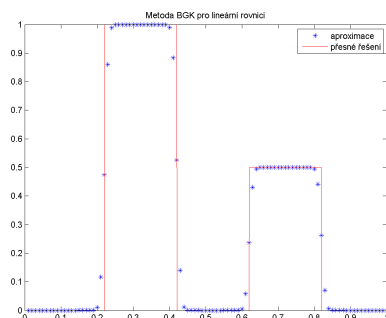
Obrázek 4.57: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2$



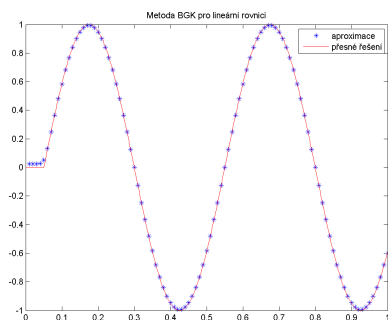
Obrázek 4.58: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2$



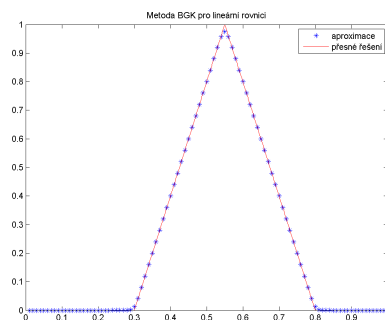
Obrázek 4.59: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2$



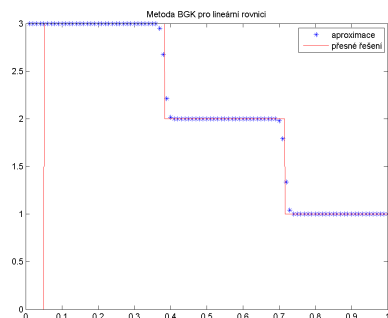
Obrázek 4.60: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2$



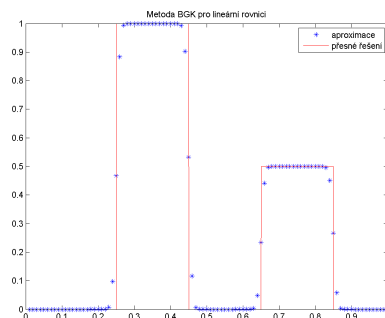
Obrázek 4.61: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 5$



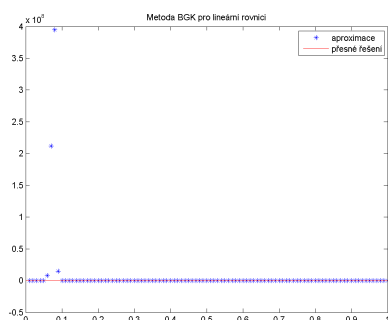
Obrázek 4.62: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 5$



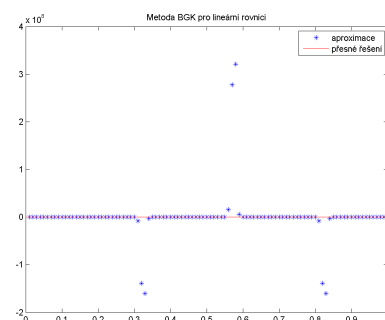
Obrázek 4.63: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 5$



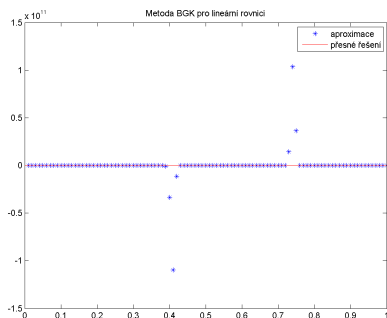
Obrázek 4.64: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 5$



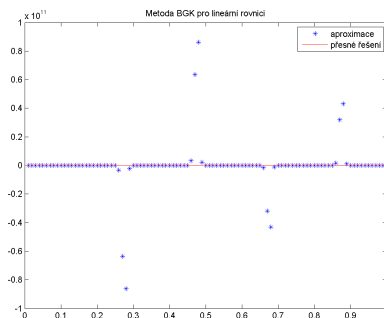
Obrázek 4.65: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 10$



Obrázek 4.66: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 10$

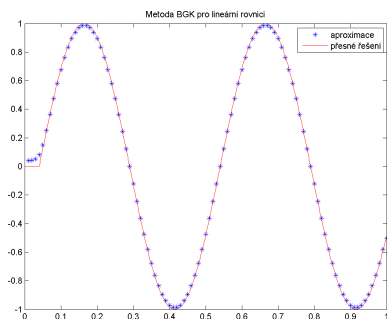


Obrázek 4.67: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 10$

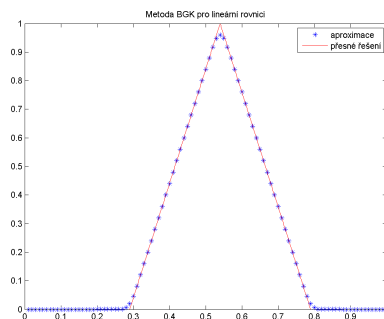


Obrázek 4.68: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 10$

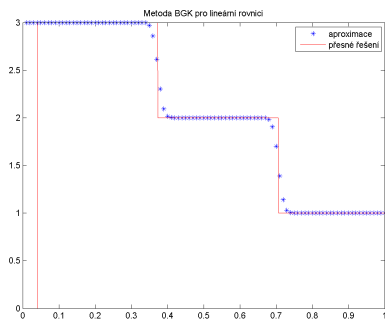
V okolí hodnoty $c = 10$ již vidíme značnou nepřesnost aproximace. Stejným způsobem nyní zkusíme otestovat metodu pro konstantní $c = 2$ a pro změnu počtu časových kroků. Následně bychom testování mohli kombinovat i se změnou parametru λ v závislosti na počtu časových kroků, eventuálně na parametru c .



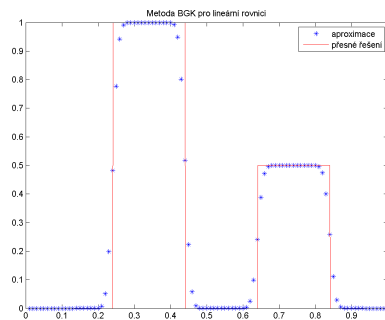
Obrázek 4.69: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2, N = 200$



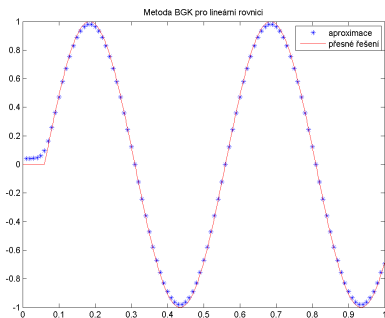
Obrázek 4.70: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2, N = 200$



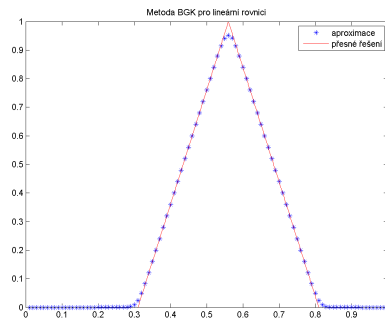
Obrázek 4.71: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2$, $N = 200$



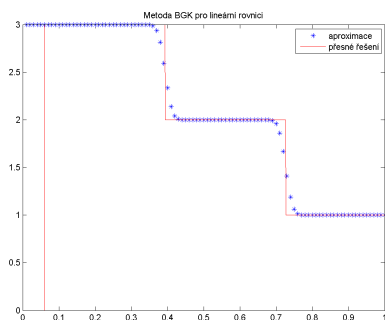
Obrázek 4.72: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2$, $N = 200$



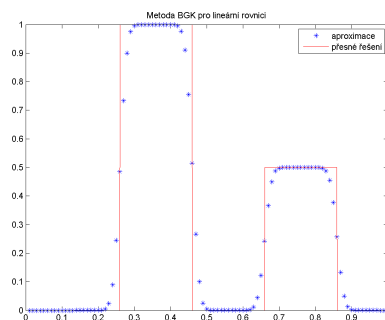
Obrázek 4.73: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2$, $N = 300$



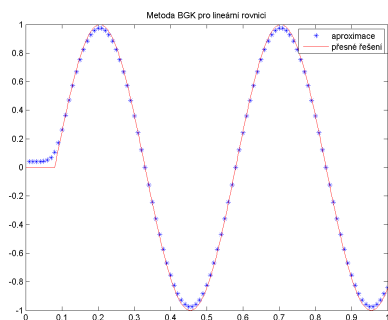
Obrázek 4.74: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2$, $N = 300$



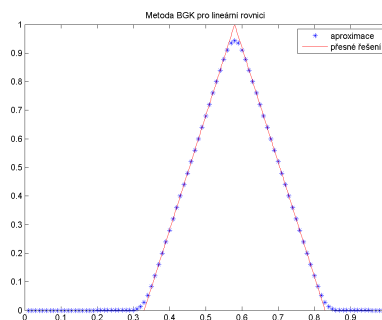
Obrázek 4.75: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2$, $N = 300$



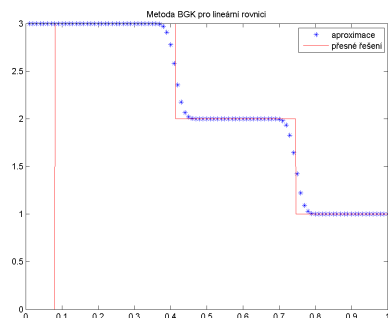
Obrázek 4.76: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2$, $N = 300$



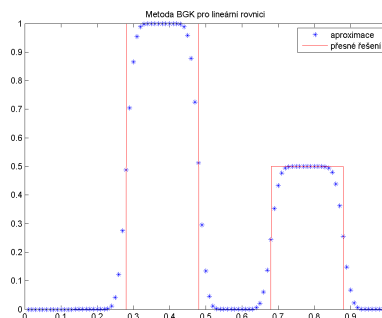
Obrázek 4.77: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2$, $N = 400$



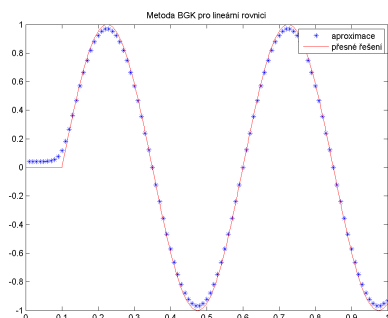
Obrázek 4.78: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2$, $N = 400$



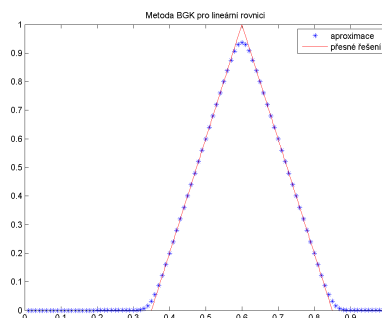
Obrázek 4.79: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2$, $N = 400$



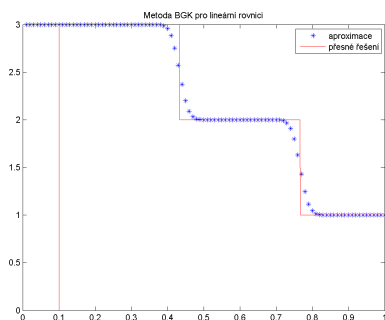
Obrázek 4.80: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2$, $N = 400$



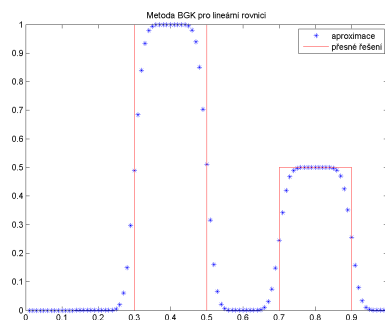
Obrázek 4.81: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2$, $N = 500$



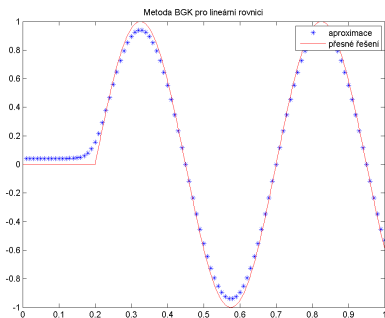
Obrázek 4.82: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2$, $N = 500$



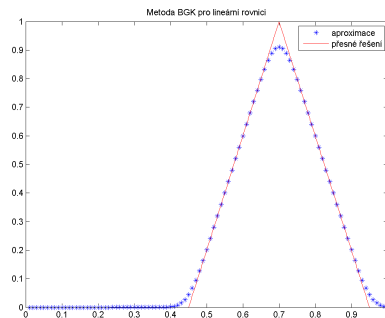
Obrázek 4.83: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2$, $N = 500$



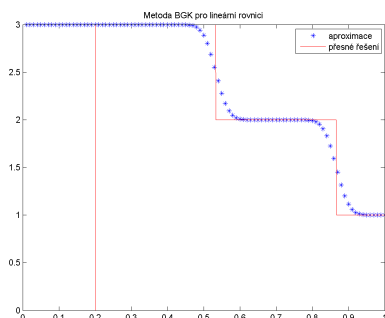
Obrázek 4.84: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2$, $N = 500$



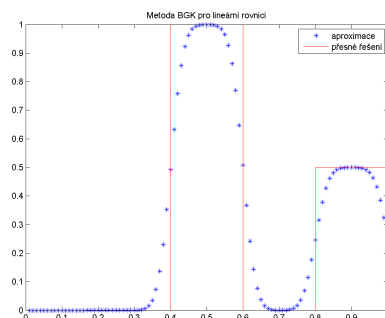
Obrázek 4.85: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2$, $N = 1000$



Obrázek 4.86: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2$, $N = 1000$



Obrázek 4.87: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2$, $N = 1000$



Obrázek 4.88: Aproximace přesného řešení lineární rovnice metodou BGK pro $c = 2$, $N = 1000$

4.5 Kinetické schéma

V této části uvedeme konstrukci jednoduchého kinetického schématu podle T. Goudona z důvodu srovnání s naší BGK metodou. Toto schéma můžeme získat tím, že budeme uvažovat Burgersovou rovnici v diferenciálním tvaru

$$u_t + F(u)_x = 0 \quad (4.44)$$

kde $F(u) = \frac{u^2}{2}$, jako limitu následující kinetické rovnice, kde $\tau \rightarrow 0$:

$$f_t + a(\nu)f_x = \frac{1}{\tau}(g(\nu) - f) \quad (4.45)$$

kde $a(\nu) = F'(\nu)$. Funkce $g(\nu)$ je definována jako

$$g(\nu) = \begin{cases} 1 & \text{je-li } 0 < \nu < u, \\ -1 & \text{je-li } u < \nu < 0, \\ 0 & \text{jinak,} \end{cases} \quad (4.46)$$

a funkce z (4.44) a (4.45) jsou ve vzájemném vztahu ve tvaru:

$$u(x, t) = \int_R f(x, \nu, t) d\nu. \quad (4.47)$$

K nalezení řešení rovnice (4.45) využijeme následující kroky:

Krok 1: Lineární transportní krok

$$f_t + a(\nu)f_x = 0. \quad (4.48)$$

kde budeme uvažovat schéma typu upwind ve tvaru

$$f_j^{n+1/2}(\nu) = f_j^n(\nu) - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[a^+(\nu) (f_j^n(\nu) - f_{j-1}^n(\nu)) - a^-(\nu) (f_{j+1}^n(\nu) - f_j^n(\nu)) \right] \quad (4.49)$$

kde $a^+(\nu) = \max(a(\nu), 0)$ a $a^-(\nu) = \max(-a(\nu), 0)$.

Krok 2: Kolizní krok

$$f_t = \frac{1}{\tau}(g(\nu) - f) \quad (4.50)$$

Pro $\tau \rightarrow 0$ se v tomto kroku redukuje $f = g$ a tím vlastně druhý krok schématu spočívá v řešení rovnice

$$f_j^{n+1}(\nu) = g_{u_j^{n+1/2}}(\nu), \quad (4.51)$$

kde $u_j^{n+1/2} = \int_R f_j^{n+1/2}(\nu) d\nu$. Jelikož $u_j^{n+1} = \int_R f_j^{n+1}(\nu) d\nu = \int_R g_{u_j^{n+1/2}}(\nu) d\nu = u_j^{n+1/2}$, můžeme bez újmy na obecnosti soustředit náš zájem zpátky k proměnné u_j^n . Integrací rovnice (4.49) podle $\nu \in R$ dostáváme vztah

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \frac{F_{j+1/2}^n - F_{j-1/2}^n}{\Delta x} = 0 \quad (4.52)$$

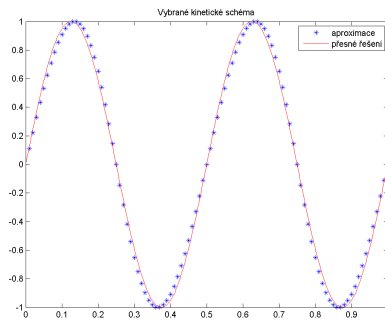
kde toková funkce $F_{j+1/2}^n$ je definována jako

$$F_{j+1/2}^n = \int_R a^+(\nu) g_{u_j^n} - a^-(\nu) g_{u_{j+1}^n} d\nu = \frac{1}{2} (U_j^{n+})^2 + \frac{1}{2} (U_{j+1}^{n-})^2 \quad (4.53)$$

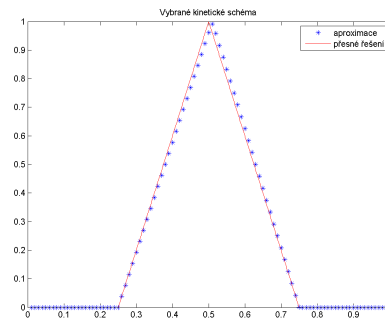
Ukážeme si, jak můžeme tuto metodu aplikovat v praxi a můžeme provést srovnání s metodou BGK. Použité parametry:

1. $M = 1000$ (počet prostorových kroků)
2. N (počet časových kroků) - parametr metody
3. $\Delta x = 0,001$
4. $\Delta t = 0,0001$

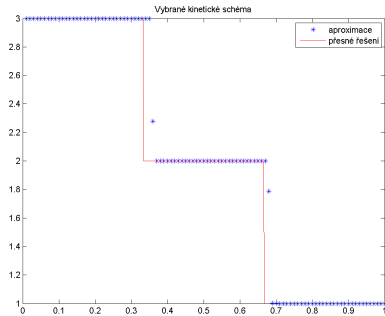
Měnit budeme parametr N - počet časových kroků a budeme zkoumat změny v přesnosti aproximace a její závislost na hodnotě tohoto parametru.



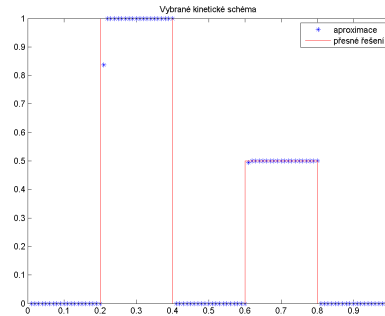
Obrázek 4.89: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 100$



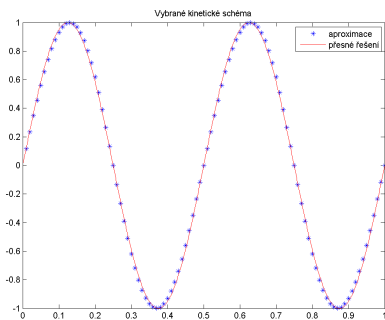
Obrázek 4.90: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 100$



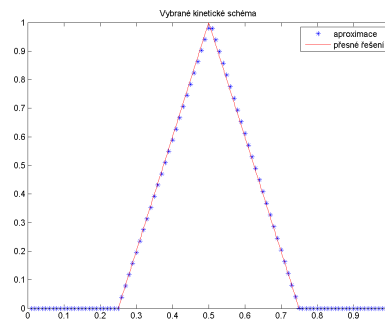
Obrázek 4.91: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 100$



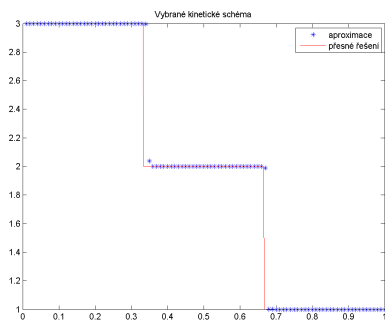
Obrázek 4.92: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 100$



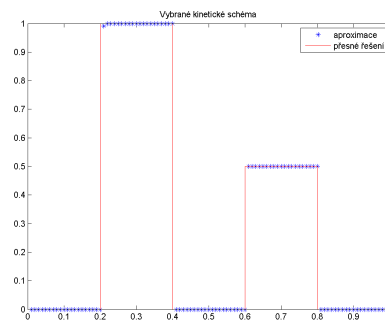
Obrázek 4.93: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 50$



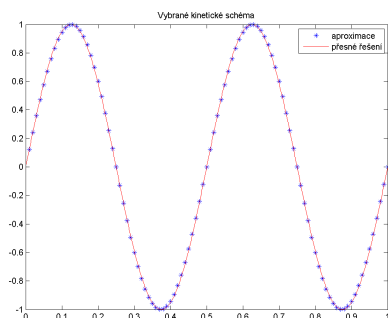
Obrázek 4.94: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 50$



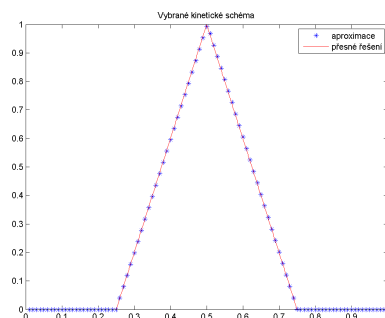
Obrázek 4.95: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 50$



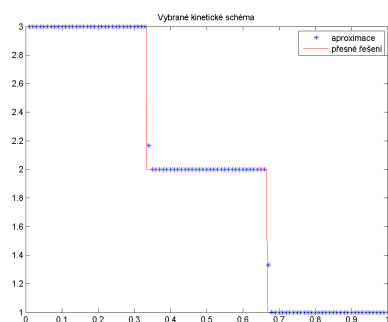
Obrázek 4.96: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 50$



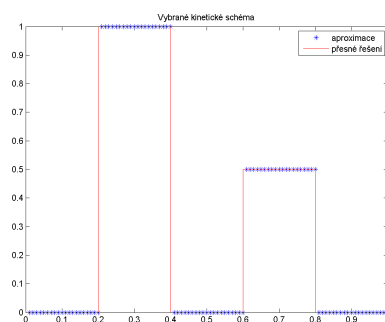
Obrázek 4.97: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 20$



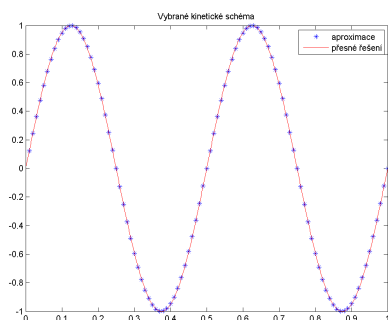
Obrázek 4.98: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 20$



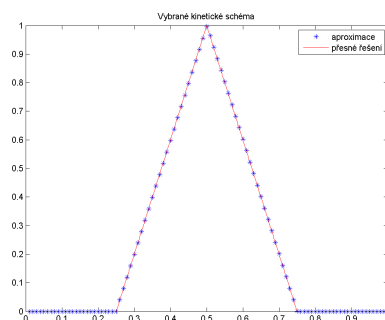
Obrázek 4.99: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 20$



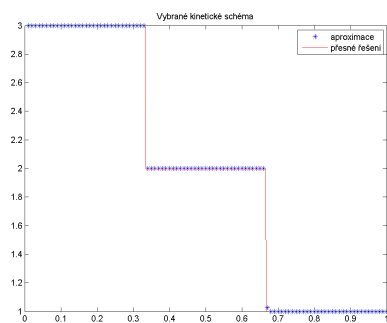
Obrázek 4.100: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 20$



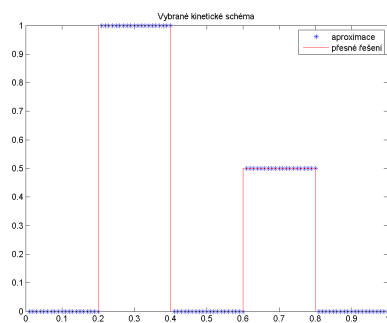
Obrázek 4.101: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 10$



Obrázek 4.102: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 10$

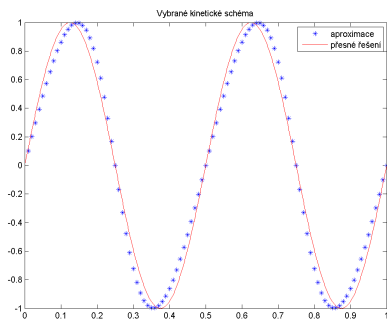


Obrázek 4.103: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 10$

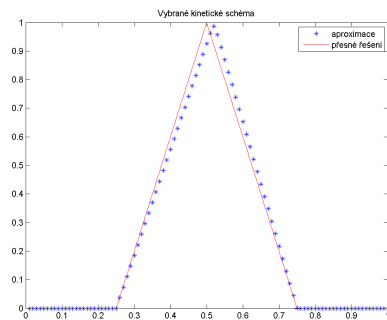


Obrázek 4.104: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 10$

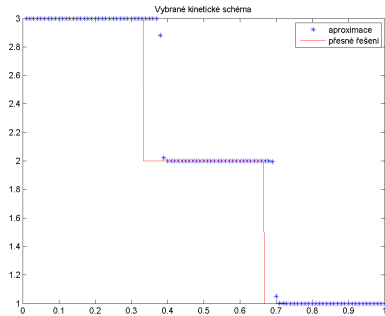
Vidíme, že se snižující se hodnotou parametru N se přesnost aproximace zvyšuje. Pokusíme se nyní parametr zvýšit.



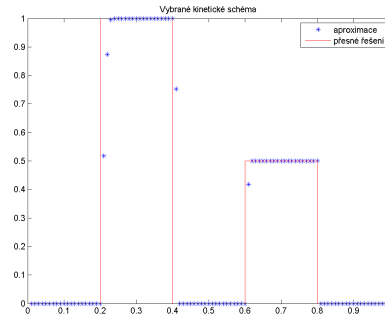
Obrázek 4.105: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 200$



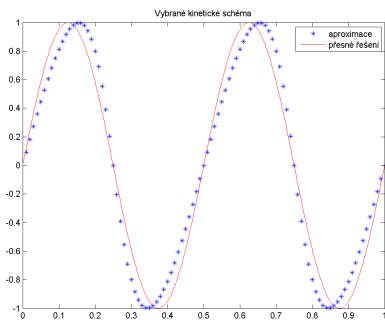
Obrázek 4.106: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 200$



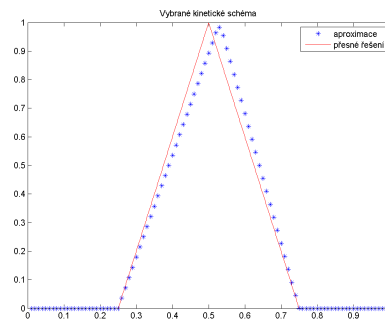
Obrázek 4.107: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 200$



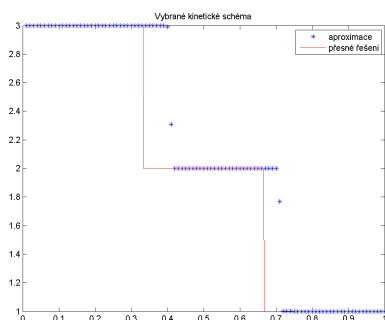
Obrázek 4.108: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 200$



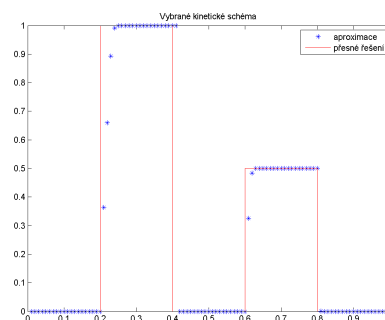
Obrázek 4.109: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 300$



Obrázek 4.110: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 300$



Obrázek 4.111: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 300$



Obrázek 4.112: Kinetické schéma pro Burgersovu rovnici $N = 300$

Je patrné, že se zvyšující se hodnotou parametru N se přesnost aproximace postupně snižuje, můžeme pozorovat vznik rázové vlny.

Závěr

Diplomová práce je zaměřena na kinetická schémata pro řešení parciálních diferenciálních rovnic hyperbolického typu. Z tohoto důvodu bylo potřeba si v první kapitole nejdříve připomenout důležité pojmy a vztahy z oblasti parciálních diferenciálních rovnic a jejich soustav a jejich využití jak v oblasti matematiky tak i fyziky při modelování různých fyzikálních jevů a reálných problémů. Konkrétně jsme se zaměřili na parciální diferenciální rovnice hyperbolického typu, ke kterým patří například advekční rovnice, kinematická vlnová rovnice a řada dalších. Z nich nejdůležitější pro naši práci byla Burgersova rovnice, pro kterou jsme realizovali různé numerické experimenty. Stručně jsme se zmínili o klasickém a slabém řešení počátečně – okrajové úlohy a o podmínkách stability. Další kapitola již blíže popisuje přímo kinetická schémata pro simulace nestacionárního stlačitelného proudění, kde víceméně srovnáváme metodu BGK, jejíž zkoumání je jádrem této diplomové práce, s některými dalšími numerickými metodami pro rovnice hyperbolického typu. Tato metoda je založena na evoluční rovnici, která se nazývá Boltzmannova rovnice a která nám z fyzikálního hlediska poskytuje mnohem více informací a má mnohem širší použitelnost, než její makroskopický protějšek. Důležitou součástí metody BGK je zavedení Maxwellovy – Boltzmannovy funkce rovnovážného stavu, která svazuje původní Boltzmannovu funkci s makroskopickým modelem. Jenom pro srovnání před samotnou konstrukcí tokových funkcí pro metodu BGK jsme si připomněli některé vybrané numerické metody jako např. metoda typu upwind, Laxova-Friedrichsova metoda, Laxova-Wendroffova metoda atd., kterým jsme se věnovali v bakalářské práci podrobněji. Následně jsme provedli samotnou konstrukci metody BKG a provedli několik numerických experimentů jak pro Burgersovu rovnici, tak i pro lineární případ z důvodu srovnání její komplexní použitelnosti a závislosti na parametrech, které v ní vystupují. Vlastnosti metody BGK zaručují splnění základních zákonů zachování, jako jsou zákon zachování hmoty, energie a hybnosti a současně zaručují také splnění entropických podmínek. Znamená to tedy, že nedílnou součástí metody BGK je vývoj fyzikálního systému k rovnováze. Tato metoda tedy umožňuje simulaci proudění tekutin na zá-

kladě mikroskopických modelů. Je v řadě ohledů účinnější a přesnější než jiná integrační schémata se standardními diferenciálními rovnicemi. Můžeme ji úspěšně použít k simulaci nelineárních systémů a difúzně reakčních systémů. Současně tato metoda poskytuje širší teoretický rámec, než máme k dispozici u standardních metod štěpení diferencí (flux difference splitting) vycházejících z řešení Riemannova problému (v jehož případě mají např. rázové vlny nulovou šířku).

Literatura

- [1] Randall J. Leveque, *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge University Press, Cambridge.: 2004
- [2] Josef Horalek, *Hyperbolické parciální diferenciální rovnice, vlnová rovnice*. Hradec Králové.: Univerzita Hradec Králové, 2006-2007
- [3] M.Brandner,J.Egermaier, H.Kopincová *Numerické modelování v hydrologii*. Vysoká škola báňská, Technická univerzita Ostrava - Západočeská univerzita:2011
- [4] M. Rokyta, *Hyperbolické systémy, entropie a metoda konečných objemů*. Institut matematiky AV ČR.: Jednota českých matematiků a fyziků, 2002
- [5] Kun Xu, *Gas-Kinetic Schemes for Unsteady Compressible Flow Simulations*. The Hong Kong University of Science and Technology, Clear Water Bay, Kowloon, Hong Kong.: 1998
- [6] Yeefeng Ruan, Antony Jameson, *Gas-Kinetic BGK Method For Three-Dimensional Compressible Flows*. Stanford University, CA: 94303
- [7] Kun Xu, Luigi Martinelli, Antony Jameson, *Gas-Kinetic Finite Volume Methods, Flux-Vector Splitting and Artificial Diffusion*. Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Princeton University, Princeton, New Jersey.: 1994
- [8] Bc. Alexandra Lochová, *Analýza numerických modelů transportních procesů*. Bakalářská práce, Západočeská univerzita, Plzeň: 2012
- [9] Eleuterio F. Toro, *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamic*. A practical Introduction, University of Trento, Italy, Springer: 2009

- [10] James J. Quirk, *A Contribution to the Great Riemann Solver Debate*.
Institute for Computer Applications in Science and Engineering, NASA
Langley Research Center, Hampton, VA 23681, USA: 1992