

Západočeská univerzita v Plzni
Fakulta aplikovaných věd
Katedra mechaniky

DIPLOMOVÁ PRÁCE

Vybrané aplikace problémů proudění tekutin
řešené pomocí lattice Boltzmannovy metody

Plzeň 2020

Bc. Aleš Halama

ZÁPADOČESKÁ UNIVERZITA V PLZNI

Fakulta aplikovaných věd
Akademický rok: 2019/2020

ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE (projektu, uměleckého díla, uměleckého výkonu)

Jméno a příjmení: **Bc. Aleš HALAMA**
Osobní číslo: **A18N0109P**
Studijní program: **N3955 Počítačové modelování v inženýrství**
Studijní obor: **Dynamika konstrukcí a mechatronika**
Téma práce: **Vybrané aplikace problémů proudění tekutin řešené pomocí lattice Boltzmannovy metody**
Zadávací katedra: **Katedra mechaniky**

Zásady pro vypracování

1. Provedení rešerše týkající se přístupů vhodných pro modelování proudění s volnou hladinou a pro modelování mikroproudění.
2. Formulace a popis odpovídajících matematických modelů včetně okrajových podmínek.
3. Vývoj příslušných algoritmů pro implementaci lattice Boltzmannovy metody za účelem simulace proudění s volnou hladinou a mikroproudění.
4. Numerické řešení vybraných problémů.
5. Vyhodnocení a diskuse dosažených numerických výsledků, formulace závěrů.

Rozsah diplomové práce: **40 – 60 stran A4 včetně příloh**
Rozsah grafických prací:
Forma zpracování diplomové práce: **tištěná**

Seznam doporučené literatury:

1. Y.H. Zhang, R.S. Qin, Y.H. Sun, R.W. Barber, D.R. Emerson: Gas Flow in Microchannels – A Lattice Boltzmann Method Approach. Journal of Statistical Physics 121 (1-2): 257-267, 2005.
2. Z. Guo, Ch. Shu: Lattice Boltzmann Method and its Applications in Engineering. Advances in Computational Fluid Dynamics, vol. 3. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2013.
3. M.C. Sukop, D.T. Thorne, Jr.: Lattice Boltzmann Modeling – An introduction for Geoscientists and Engineers. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007.
4. S. Succi: The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond. Numerical Mathematics and Scientific Computation. Oxford University Press, 2001.
5. N. Thürey: Physically based animation of free surface flows with the lattice Boltzmann method. Doctoral Thesis, Friedrich-Alexander University Erlangen-Nürnberg, 2007.
6. J.O. Contreras: Efficient algorithms for the realistic simulation of fluids. Doctoral Thesis, The Polytechnic University of Catalonia, Barcelona, 2013.
7. G.H. Tang, W.Q. Tao, Y.L. He: Lattice Boltzmann method for simulating gas flow in microchannels. International Journal of Modern Physics C 15 (2): 335-347, 2004.
8. G. Karniadakis, A. Beskok, N. Aluru: Microflows and Nanoflows: Fundamentals and Simulation. Springer, New York, 2005.

Vedoucí diplomové práce: **Doc. Ing. Jan Vimmr, Ph.D.**
Katedra mechaniky

Datum zadání diplomové práce: **1. října 2019**
Termín odevzdání diplomové práce: **29. května 2020**

Radová

Doc. Dr. Ing. Vlasta Radová
děkanka



Jan Vimmr

Doc. Ing. Jan Vimmr, Ph.D.
vedoucí katedry

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci na téma Vybrané aplikace problémů proudění tekutin řešené pomocí lattice Boltzmannovy metody vypracoval samostatně s použitím uvedené literatury.

V Plzni dne 29. června 2020

.....
podpis

Rád bych poděkoval doc. Ing. Janu Vimmrovi, Ph.D. za cenné rady, věcné připomínky a vstřícnost při konzultacích diplomové práce. Děkuji svým prarodičům za dodávání motivace a dobré nálady během psaní této diplomové práce. V poslední řadě děkuji svým rodičům za bezmeznou starostlivost a péči, poskytnuté zázemí a psychickou podporu, bez které by tato práce nevznikla.

Abstrakt

V této diplomové práci jsou představeny základní principy a modifikace lattice Boltzmannovy metody (LBM) a jejich následná počítačová implementace pro numerické řešení komplexnějších typů proudění tekutin. Prvním zvoleným testovacím případem je numerická simulace nestlačitelného proudění s volnou hladinou, konkrétně se jedná o náhlé protržení vodní hráze. V této práci je dokázáno, že tento typ proudění, který je charakteristický rychle se měnícím proudovým polem, lze efektivně numericky simulovat pomocí přístupu „volume of fluid (VOF)“ v kombinaci s jednoduchým modelem LBM. Druhým testovacím případem je numerická simulace mikroproudění, konkrétně se jedná o proudění plynu uvnitř mikrokanálu. Pro tento typ proudění, který je charakterizován hodnotou Knudsenova čísla $Kn = (0.1; 10)$, stlačitelností proudícího média a nelineárním průběhem tlaku podél mikrokanálu, lze opět s výhodou použít numerické řešení LBM. Výstupem této práce jsou vyvinuté vlastní algoritmy a programové moduly implementované ve výpočtovém prostředí MATLAB pro oba uvažované typy proudění tekutin.

Klíčová slova: lattice Boltzmannova metoda, proudění s volnou hladinou, mikroproudění, Knudsenovo číslo, okrajové podmínky se skluzem, numerická simulace

Abstract

In this diploma thesis the basic principles and modifications of the lattice Boltzmann method (LBM) and their computer implementation for the numerical solution of complex fluid flows are presented. As the first test case for a numerical simulation an incompressible free surface flow of dam break is chosen. In this thesis it is shown that this type of flow which is characterized by a rapidly changing flow field can be effectively numerically simulated using a method "volume of fluid (VOF)" in a combination with a simple LBM model. As the second test case a numerical simulation of gas microflow through microchannel is chosen. For this type of flow which is characterized by the value of Knudsen number $Kn = (0, 1; 10)$, compressibility of flowing medium and the nonlinear pressure gradient along the microchannel an LBM approach is used. Outputs of this thesis are algorithms and scripted modules implemented in the MATLAB environment for both considered types of fluid flow.

Key words: lattice Boltzmannova method, free surface flow, microflow, Knudsen number, slip boundary condition, numerical simulation

Obsah

Úvod	1
1 Výchozí rovnice dynamiky tekutin a kinetické teorie plynů	2
1.1 Reynoldsův transportní teorém	2
1.2 Zákon zachování hmotnosti	4
1.3 Zákon zachování hybnosti	5
1.4 Zákon zachování celkové energie systému	5
1.5 Systém Navierových - Stokesových rovnic	6
1.6 Stavová rovnice	7
1.6.1 Rychlost zvuku	8
1.7 Popis proudění tekutin v odlišných měřítkách	9
1.8 Kinetická teorie plynů	10
1.8.1 Distribuční funkce a její momenty	11
1.8.2 Boltzmannova rovnice	12
1.8.3 Rovnovážná distribuční funkce	13
2 Lattice Boltzmannova metoda	15
2.1 Diskretizace v čase	15
2.2 Aproximace rovnovážné distribuční funkce	16
2.3 Diskretizace ve fázovém prostoru	17
2.4 Chapmanovo - Enskogovo rozšíření	21
2.5 Kolizní operátor	24
2.5.1 SRT - single relaxation time	25
2.5.2 MRT - multiple relaxation time	25
2.6 Počáteční a okrajové podmínky	27
2.6.1 Počáteční podmínky	27
2.6.2 Okrajové podmínky typu bounceback	28
2.6.3 Okrajové podmínky periodicity	28
2.6.4 Okrajové podmínky typu tlak nebo rychlost	29
2.7 Podobnostní modelování	32
2.8 Algoritmus LBM	34
3 Protržení hráze vodní nádrže	37
3.1 Volba LBM modelu	38
3.2 Algoritmus LBM VOF	39
3.3 Numerické výsledky	43
4 Proudění v mikrokanálu	49
4.1 Volba LBM modelu	52
4.2 Algoritmus LBM pro případ mikroproudění	52
4.3 Numerické výsledky	58
Závěr	64

Úvod

Lattice Boltzmannova metoda (LBM) je v současné době poměrně rozšířenou a často používanou numerickou metodou pro řešení problémů proudění tekutin. Většina komerčních softwarů z oblasti výpočtové dynamiky tekutin (**C**omputational **F**luid **D**ynamics - CFD) je založena na numerických metodách pro řešení nelineárního systému Navierových Stokesových rovnic (NS). V 80. letech 20. století byla vedle konvenčních metod představena nová alternativní metoda založená na principu buněčných automatů (LGA). Principem metody buněčných automatů je pohyb částic tekutiny po přesně daných trajektoriích, který je následován kolizemi pohybujících se částic [8]. Metoda buněčných automatů splňuje rovnici kontinuity, která je součástí nelineárního systému NS rovnic. Poznamenejme ale, že metoda buněčných automatů je výpočetně příliš náročná, citlivá na šum a pro komplexní výpočtové oblasti obtížně použitelná. K překonání těchto nedostatků byla vyvinuta LBM založená na numerickém řešení tzv. Boltzmannovy rovnice. Nespornou výhodou LBM je zejména její snadný způsob implementace a jednoduchá realizace okrajových podmínek na různých typech hranice výpočtové oblasti zcela obecného tvaru. Další výhodou LBM je její snadná paralelizace vedoucí k časově efektivním numerickým simulacím.

Cíl a struktura diplomové práce

Cílem předkládané diplomové práce je:

- popsat základní principy a modifikace lattice Boltzmannovy metody pro modelování vybraných komplexních problémů proudění tekutin ve 2D a pro tyto případy počítačově implementovat vlastní navržené algoritmy metody ve výpočtovém prostředí MATLAB,
- vyvinuté programové skripty založené na lattice Boltzmannově metodě následně aplikovat pro numerické řešení dvou zvolených testovacích problémů ve 2D, a to konkrétně pro úlohu proudění s volnou hladinou (náhlé protržení vodní hráze) a pro úlohu mikroproudění (proudění plynu uvnitř mikrokanálu).

Tato diplomová práce je rozdělena do čtyř kapitol. V první kapitole jsou uvedeny výchozí rovnice dynamiky tekutin, je vysvětlen popis proudění tekutin na různých měřítkách a jsou uvedeny fundamentální principy kinetické teorie plynů uplatněné v LBM.

Ve druhé kapitole je formulována řídicí rovnice LBM a způsob jejího odvození, dále jsou představeny používané kolizní operátory, formulovány počáteční a okrajové podmínky a je uveden obecný algoritmus LBM.

Ve třetí a čtvrté kapitole jsou detailně popsány konkrétní algoritmy LBM včetně implementace příslušných okrajových podmínek a zásad pro numerickou simulaci výše zmíněných vybraných problémů proudění tekutin ve 2D. Následně jsou získané numerické výsledky prezentovány a porovnány s výsledky publikovanými v literatuře z důvodu validace vyvinutých algoritmů. V závěru třetí a čtvrté kapitoly je provedena analýza a diskuze dosažených numerických výsledků.

1 Výchozí rovnice dynamiky tekutin a kinetické teorie plynů

Lattice Boltzmannova metoda (LBM) je numerickou výpočetní metodou v odvětvích jako je kvantová mechanika nebo např. elektorinženýrství. Z jejího historického hlediska je v současné době používána pro numerické výpočty v odvětví dynamiky tekutin (CFD). LBM má původ v kinetické teorii plynů, proto je důležité nejprve popsat výchozí rovnice dynamiky tekutin a kinetickou teorii plynů pro lepší porozumění této metodě. V následujících odstavcích je popsán Reynoldsův transportní teorém, zákon zachování hmotnosti, zákon zachování hybnosti, zákon zachování celkové energie systému, systém Navierových - Stokesových (NS) rovnic a stavová rovnice pro ideální plyn. Nelineární systém NS rovnic doplněný o stavovou rovnici popisuje proudění tekutin na úrovni kontinua. Tedy nezohledňuje se skutečnost, že tekutina je ve své podstatě tvořena z molekul. LBM popisuje proudění tekutin na detailnější úrovni než je kontinuum, a proto jsou v odstavci 1.7 diskutovány odlišné varianty přístupu k popisu proudění tekutin. V odstavci 1.8 je popsán základ kinetické teorie plynů a způsob reprezentace tekutiny v diskretizovaném fázovém prostoru a čase.

1.1 Reynoldsův transportní teorém

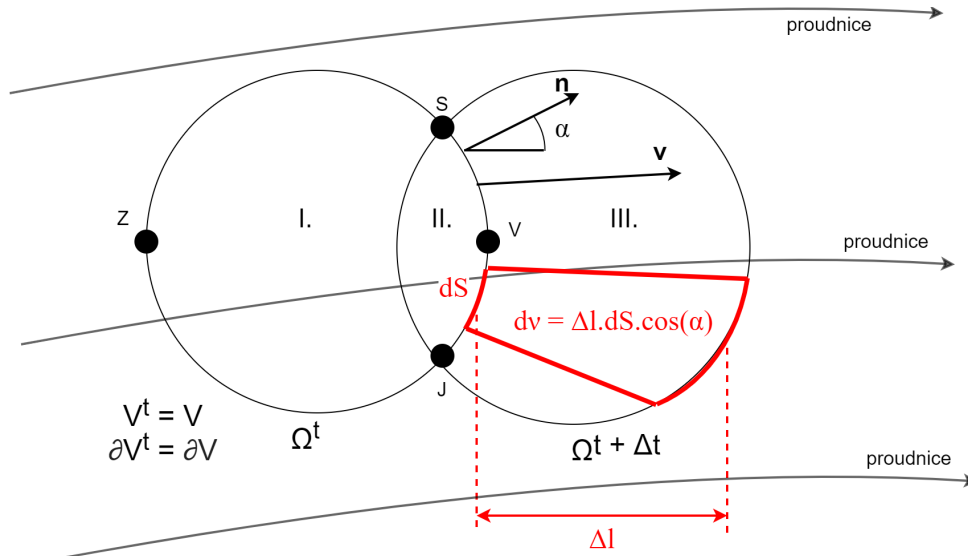
Výchozí rovnice dynamiky tekutin vychází ze zákonů zachování hmotnosti, hybnosti a celkové energie systému, které v této práci formulujeme s využitím Reynoldsova transportního teorému.

Mějme omezenou oblast $\Omega^t \subset \mathbf{R}^3$ o objemu V^t ohraničenou jednoduše souvislou plochou ∂V^t v Eulerově popisu. Tato oblast se nedeformuje v čase. Stav uvnitř této oblasti je popsán extenzivní fyzikální veličinou $\Phi(\mathbf{x}, t)$, pro jejíž celkové množství platí

$$\Phi(\mathbf{x}, t) = \iiint_{V^t} \rho(\mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}, t) dV^t, \quad (1.1.1)$$

kde $\mathbf{x} \in V^t$, $\rho(\mathbf{x}, t)$ je hustota extenzivní veličiny a $\phi(\mathbf{x}, t)$ je měrná hodnota extenzivní veličiny $\Phi(\mathbf{x}, t)$.

Dále definujeme důležitý pojem materiálová derivace $\frac{D\Phi}{Dt}$, která reprezentuje změnu extenzivní fyzikální veličiny v čase. Uvažujme proudové pole definované vektorem relativní rychlosti $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ a termodynamický systém reprezentovaný kontrolním objemem V , který je unášen v tomto proudovém poli. V čase t splývá kontrolní objem V ohraničený plochou ∂V s oblastí Ω^t o objemu V^t s hraniční plochou ∂V^t t.j. I + II, viz obr. 1. Tentýž systém zaujímá v čase $t + \Delta t$ oblast $\Omega^{t+\Delta t}$ o objemu $V^{t+\Delta t}$ t.j. II + III. Částice tekutiny volně vstupují a vystupují z kontrolního objemu V .



Obr. 1: Změna oblasti Ω^t za čas Δt

Otázkou zůstává, jakým způsobem se změní extenzivní veličina uvnitř oblasti za čas Δt . Omezíme-li se pouze na časovou změnu extenzivní veličiny, můžeme psát

$$\Delta\Phi = \Phi(t + \Delta t) - \Phi(t). \quad (1.1.2)$$

Z obr. 1 je patrné, že tuto změnu v čase lze formálně vyjádřit jako

$$\begin{aligned} \Delta\Phi &= (\Phi_{II} + \Phi_{III})_{t+\Delta t} - (\Phi_I + \Phi_{II})_t + (\Phi_I)_{t+\Delta t} - (\Phi_I)_{t+\Delta t} = \\ &= \underbrace{(\Phi_I + \Phi_{II})_{t+\Delta t}}_{\Phi_V(t+\Delta t)} - \underbrace{(\Phi_I + \Phi_{II})_t}_{\Phi_V(t)} + (\Phi_{III})_{t+\Delta t} - (\Phi_I)_{t+\Delta t}. \end{aligned} \quad (1.1.3)$$

Vyjádríme-li tuto změnu v čase limitním přechodem pro $\Delta t \rightarrow 0$, získáme

$$\frac{D\Phi}{Dt} = \underbrace{\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Phi_V(t + \Delta t) - \Phi_V(t)}{\Delta t}}_A + \underbrace{\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{(\Phi_{III})_{t+\Delta t}}{\Delta t}}_B - \underbrace{\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{(\Phi_I)_{t+\Delta t}}{\Delta t}}_C, \quad (1.1.4)$$

kde jsou jednotlivé členy účelně označeny písmeny A, B, C .

Zaměříme se na člen A , který je mírou změny extenzivní veličiny uvnitř zvoleného kontrolního objemu V . Lze tedy psát

$$A = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Phi_V(t + \Delta t) - \Phi_V(t)}{\Delta t} = \frac{\partial\Phi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho\phi dV. \quad (1.1.5)$$

Veličiny v integrálu jsou nyní psány bez závislých proměnných pro lepší přehled. K odvození hodnoty členu B je potřeba provést následující úvahu. Uvažujme částici tekutiny na elementární ploše dS části kontrolní plochy S, V, J . Za čas Δt se tento element systému přemístí objemem III o vzdálenost $\Delta l = v\Delta t$. Platí tedy

$$(\Phi_{III})_{t+\Delta t} = \int_{III} \rho\phi dV = \int_{SVJ} \rho\phi(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dS \Delta t, \quad (1.1.6)$$

kde $d\nu = \Delta l dS \cos(\alpha) = v \Delta t dS \cos(\alpha) = (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dS \Delta t$, viz obr. 1. Veličina $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ je vektor relativní rychlosti tekutiny a \mathbf{n} je jednotkový vektor vnější normály hranice kontrolní plochy ∂V . Jedná se tedy o elementární objem obsahující tekutinu, která odteče z kontrolního objemu V za čas Δt . Limita členu B je rovna

$$B = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{(\Phi_{III})_{t+\Delta t}}{\Delta t} = \int_{SVJ} \rho \phi (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dS. \quad (1.1.7)$$

Zbývá určit člen C , pro který provedeme obdobnou úvahu jako v případě členu B . Člen C odkazuje na množství extenzivní veličiny obsažené v objemu I v čase $t + \Delta t$. Do tohoto objemu vstupuje z vnějšku tekutina skrze hranici označenou body S, Z, J . Uvažujme element systému na ploše dS části kontrolní plochy S, Z, J . Za čas Δt se tento element tekutiny přemístí objemem I o vzdálenost $\Delta l = v \Delta t$, definující elementární objem $d\nu$ se záporným znaménkem. Lze psát

$$(\Phi_I)_{t+\Delta t} = \int_I \rho \phi d\nu = - \int_{SZJ} \rho \phi (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dS \Delta t, \quad (1.1.8)$$

kde $d\nu = -\Delta l dS \cos(\alpha) = -(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dS \Delta t$. Jedná se tedy o kladný elementární objem obsahující tekutinu, která přiteče do kontrolního objemu V za čas Δt . Pro limitní přechod členu C platí

$$C = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{(\Phi_I)_{t+\Delta t}}{\Delta t} = - \int_{SZJ} \rho \phi (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dS. \quad (1.1.9)$$

Dosadíme-li odvozené členy A, B, C do rovnice (1.1.4), získáme vztah pro materiálovou derivaci

$$\begin{aligned} \frac{D\Phi}{Dt} &= \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \phi dV + \int_{SVJ} \rho \phi (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dS + \int_{SZJ} \rho \phi (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dS = \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \phi dV + \oint_{\partial V} \rho \phi (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dS. \end{aligned} \quad (1.1.10)$$

Tedy časová změna extenzivní veličiny Φ je způsobena vznikem nebo zánikem veličiny uvnitř kontrolního objemu V a přítokem nebo odtokem veličiny přes hranici ∂V . Materiálová derivace v kartézském souřadnicovém systému zapsaná pomocí indexů j označujících směrové vektory má tvar

$$\frac{D\Phi}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \phi dV + \oint_{\partial V} \rho \phi v_j dS_j. \quad j = 1, 2, 3 \quad (1.1.11)$$

1.2 Zákon zachování hmotnosti

Při proudění tekutiny musí být splněn obecně platný zákon zachování hmotnosti. Podle znění tohoto zákona nemůže hmota uvnitř kontrolního objemu vznikat ani zanikat. Tento zákon lze vyjádřit pomocí materiálové derivace odvozené v předchozím odstavci. Pro fyzikální extenzivní veličinu platí $\Phi = m$, jejíž měrná hodnota je $\phi = 1$. Zákon zachování v integrálním tvaru v Eulerově popisu má tvar

$$\frac{Dm}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV + \oint_{\partial V} \rho v_j dS_j = 0. \quad j = 1, 2, 3 \quad (1.2.1)$$

1.3 Zákon zachování hybnosti

Obdobně, jako v případě zákona zachování hmotnosti, označme extenzivní fyzikální veličinu $\Phi = mv_i = H_i$ a její měrnou hodnotu $\phi_i = v_i$. Index i značí i -tou složku vektoru hybnosti. Odvození zákona zachování hybnosti je založeno na druhém Newtonově pohybovém zákoně, který zní: změna hybnosti libovolného kontrolního objemu tekutiny se rovná součtu objemových a plošných sil na tento objem působících. Matematicky lze znění tohoto zákona vyjádřit jako

$$\frac{DH_i}{Dt} = \sum_i F_i = \underbrace{\oint_{\partial V} \Theta_{ij} dS_j}_{\text{povrchové síly}} + \underbrace{\int_V \rho f_i dV}_{\text{objemové síly}}, \quad (1.3.1)$$

kde Θ_{ij} je symetrický Cauchyův tenzor napětí, pro který platí

$$\Theta_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij}, \quad (1.3.2)$$

kde τ_{ij} je symetrický tenzor vazkých napětí a $-p\delta_{ij}$ jsou normálová napětí odpovídající statickému tlaku v tekutině. Vyjádříme-li levou stranu rovnice (1.3.1) pomocí Reynoldsova transportního teorému, získáme integrální formu zákona zachování hybnosti v Eulerově popisu

$$\int_V \frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} dV + \oint_{\partial V} \rho v_i v_j dS_j + \oint_{\partial V} p\delta_{ij} dS_j = \oint_{\partial V} \tau_{ij} dS_j + \int_V \rho f_i dV, \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (1.3.3)$$

kde i je volný index a j je sčítací index.

1.4 Zákon zachování celkové energie systému

Pro odvození zákona zachování celkové energie zavedme hodnotu celkové energie vztaženou na jednotku objemu systému, definovanou integrálem $E = \int_V \rho e dV$, kde $\phi = e$ je měrná celková energie vztažená na jednotku hmotnosti. Měrnou celkovou energii lze také definovat jako součet měrné vnitřní energie ϵ a měrné kinetické energie

$$e = \epsilon + \frac{1}{2} v_i v_i. \quad (1.4.1)$$

Nyní využijme první termodynamický zákon, jež zní: změna kinetické a vnitřní energie nějakého termodynamického systému na jistém časové intervalu je rovna práci vykonané vnějšími objemovými silami a povrchovými silami a přivedenému nebo odvedenému teplu z okolí za jistý časový okamžik. Matematicky tento zákon zapíšeme

$$\frac{DE}{Dt} = \frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial t}, \quad (1.4.2)$$

kde $\frac{\partial W}{\partial t}$ je výkon vnějších sil, který lze s využitím Reynoldsova transportního teorému napsat

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \int_V \rho f_i v_i dV + \oint_{\partial V} \Theta_{ij} v_i dS_j. \quad (1.4.3)$$

Objemový integrál označuje výkon objemových sil a křivkový integrál výkon povrchových sil.

Časová změna tepla $\frac{\partial Q}{\partial t}$ obsaženého v kontrolní oblasti V termodynamického systému je dána tepelným tokem q_j přes její hranici ∂V . Tepelný tok q_j vyjadřuje množství tepla, které projde hranicí kontrolního objemu za 1s. Tedy platí

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = - \oint_{\partial V} q_j dS_j. \quad (1.4.4)$$

Podle Fourierova zákona platí

$$q_j = -k \frac{\partial T}{\partial x_j}. \quad (1.4.5)$$

Fourierův zákon obecně definuje, že j -tá složka vektoru hustoty tepelného toku q_j je přímo úměrná gradientu teploty $\frac{\partial T}{\partial x_j}$ a má opačný směr. Konstanta k ve Fourierově zákoně označuje tzv. součinitel tepelné vodivosti a stanovuje míru schopnosti dané tekutiny vést teplo.

Využitím Reynoldsova transportního teorému v rovnici (1.4.2) získáme integrální formu zákona zachování celkové energie v Eulerově popisu

$$\begin{aligned} \int_V \frac{\partial \rho e}{\partial t} dV + \oint_{\partial V} \rho e v_j dS_j = & - \oint_{\partial V} p \delta_{ij} v_i dS_j + \oint_{\partial V} \tau_{ij} v_i dS_j + \\ & + \oint_{\partial V} k \frac{\partial T}{\partial x_j} dS_j + \int_V \rho f_i v_i dV, \quad i, j = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (1.4.6)$$

kde i je volný index a j je sčítací index.

1.5 Systém Navierových - Stokesových rovnic

Odvozené zákony zachování hmotnosti, hybnosti a celkové energie tvoří systém Navierových - Stokesových rovnic popisujících proudění skutečné tekutiny. Pro jednoduchost zanedbejme v odvozených zákonech vnější objemové síly.

Zákon zachování hmotnosti je popsán jednou rovnicí

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV + \oint_{\partial V} \rho v_j dS_j = 0. \quad (1.5.1)$$

Zákon zachování hybnosti je popsán třemi rovnicemi

$$\int_V \frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} dV + \oint_{\partial V} \rho v_i v_j dS_j + \oint_{\partial V} p \delta_{ij} dS_j = \oint_{\partial V} \tau_{ij} dS_j. \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (1.5.2)$$

Zákon zachování celkové energie je popsán jednou rovnicí

$$\begin{aligned} \int_V \frac{\partial \rho e}{\partial t} dV + \oint_{\partial V} \rho e v_j dS_j + \oint_{\partial V} p v_j dS_j = & \oint_{\partial V} \tau_{ij} v_i dS_j + \\ & + \oint_{\partial V} k \frac{\partial T}{\partial x_j} dS_j. \quad i, j = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (1.5.3)$$

Pro lepší přehled lze tuto soustavu napsat v kompaktním tvaru

$$\int_V \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} dV + \oint_{\partial V} \mathbf{F}_j^I(\mathbf{w}) dS_j = \oint_{\partial V} \mathbf{F}_j^V(\mathbf{w}) dS_j, \quad (1.5.4)$$

kde \mathbf{w} je vektor konzervativních proměnných, \mathbf{F}_j^I je j -tá složka vektoru nevazkého toku a \mathbf{F}_j^V je j -tá složka vektoru vazkého toku. Plošné integrály v rovnici (1.5.4) lze převést na objemové integrály pomocí Gaussovy - Ostrogradského věty. Rovnice (1.5.4) se pak změří

$$\int_V \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} dV + \int_V \frac{\partial \mathbf{F}_j^I(\mathbf{w})}{\partial x_j} dV = \int_V \frac{\partial \mathbf{F}_j^V(\mathbf{w})}{\partial x_j} dV. \quad (1.5.5)$$

Tato rovnice platí pro libovolný objem V , čili lze vynechat integrály v rovnici (1.5.5) a zapsat ji v diferenciálním tvaru

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_j^I(\mathbf{w})}{\partial x_j} = \frac{\partial \mathbf{F}_j^V(\mathbf{w})}{\partial x_j}, \quad (1.5.6)$$

kde členy závislé na vektoru konzervativních proměnných mají tvar

$$\mathbf{w} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho v_1 \\ \rho v_2 \\ \rho v_3 \\ \rho e \end{pmatrix}, \mathbf{F}_j^I(\mathbf{w}) = \begin{pmatrix} \rho v_j \\ \rho v_1 v_j + p \delta_{1j} \\ \rho v_2 v_j + p \delta_{2j} \\ \rho v_3 v_j + p \delta_{3j} \\ (\rho e + p) v_j \end{pmatrix}, \mathbf{F}_j^V(\mathbf{w}) = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{1j} \\ \tau_{2j} \\ \tau_{3j} \\ \sum_{i=1}^3 \tau_{ij} v_i + k \frac{\partial T}{\partial x_j} \end{pmatrix}. \quad (1.5.7)$$

Dosud nebyla stanovena hodnota symetrického tenzoru vazkých napětí τ_{ij} . Při vzájemném pohybu částic vznikají ve skutečné tekutině tečná napětí, která způsobují úhlovou deformaci částic

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) + \mu_k \delta_{ij} \frac{1}{3} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \delta_{ij} \left(\frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right), \quad (1.5.8)$$

kde μ je dynamické viskozita a μ_k je tzv. druhý koeficient viskozity. Kombinace μ a μ_k v následující rovnici je známa pod termínem objemová viskozita [18]

$$\zeta = \mu_k + \frac{2}{3} \mu. \quad (1.5.9)$$

Je-li tekutina newtonská, je objemová viskozita rovna nule a rovnice se zjednoduší na

$$\mu_k = -\frac{2}{3} \mu. \quad (1.5.10)$$

Pro úplnost ještě dodejme, že se zavádí tzv. kinematická vazkost tekutiny ν vztahem $\nu = \frac{\mu}{\rho}$.

Systém NS rovnic (1.5.6) tvoří matematický model laminárního proudění stlačitelné newtonské kapaliny.

1.6 Stavová rovnice

Doposud bylo odvozeno pět rovnic, které popisují proudění skutečné tekutiny. Rovnice kontinuity (1.5.1), vyjadřující zákon zachování hmotnosti, tři rovnice vyjadřující zákon zachování hybnosti (1.5.2) a rovnice vyjadřující zákon zachování celkové energie systému (1.5.3). Avšak tento systém rovnic není úplný, protože je neznámo šest veličin charakterizujících proudové pole a sice hustota ρ , tři složky vektoru rychlosti v_1, v_2, v_3 , tlak p

a termodynamická teplota T . V důsledku toho je tento systém rovnic neřešitelný pokud nepřipustíme některá zjednodušení, jako např. konstantní hustotu $\rho = konst.$ Tímto jsme počet neznámých snížili na pět. Avšak často nelze taková zjednodušení učinit, a proto musíme systém NS rovnic doplnit o další rovnici. Protože proudění stlačitelné tekutiny je vždy provázeno termodynamickými změnami proudícího média, doplníme tento systém NS rovnic o tzv. termickou stavovou rovnici $p = p(\rho, T)$ definující termodynamické vlastnosti uvažované tekutiny. V případě ideálního plynu lze stavovou rovnici vyjádřit jako [27]

$$p = \rho RT, \quad (1.6.1)$$

kde R je měrná plynová konstanta a T je termodynamická teplota.

Alternativní tvar stavové rovnice pro ideální plyn udává vztah mezi tlakem, hustotou a entropií [20]

$$\frac{p}{p_0} = \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma e^{(s-s_0)/c_v}. \quad (1.6.2)$$

Konstanty p_0 , ρ_0 a s_0 označují referenční nebo také stagnační veličiny a Poissonova konstanta γ je poměr měrné tepelné kapacity při konstantním tlaku a objemu $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$. Protože tento tvar stavové rovnice je složitý, zavádí se často jeho různé aproximativní alternativy. Z akustiky je známo, že šíření zvuku je provázeno podélným vlněním např. vzdušiny. Je to postupné zhušťování a zředňování prostředí, které se šíří z místa zdroje v kulových vlnoplochách. Šíření zvuku v ideálním plynu považujeme za děj izoentropický, tj. bez výměny tepla s okolím [33]. Lze proto uvažovat, že entropie s je přibližně konstantní, což významně zjednoduší rovnici (1.6.2)

$$p = p_0 \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma. \quad (1.6.3)$$

Touto rovnicí lze doplnit počet rovnic k počtu neznámým v nelineárním systému NS rovnic.

1.6.1 Rychlost zvuku

Pro malé odchylky tlaku od referenčního stavu, může být nelineární rovnice (1.6.3) aproximována linearizací. Například použitím totálního diferenciálu získáme rovnici pro tlak

$$p' = p_0 + dp \approx p_0 + \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s d\rho + \left(\frac{\partial p}{\partial s} \right)_\rho ds, \quad (1.6.4)$$

která platí pro malé odchylky od referenčního stavu p_0 . V případě izoentropického děje neprobíhá výměna tepla s okolím, tudíž je tato linearizace dále zjednodušena

$$p' \approx p_0 + c_s^2 d\rho, \quad (1.6.5)$$

kde c_s je rychlost zvuku, pro kterou platí

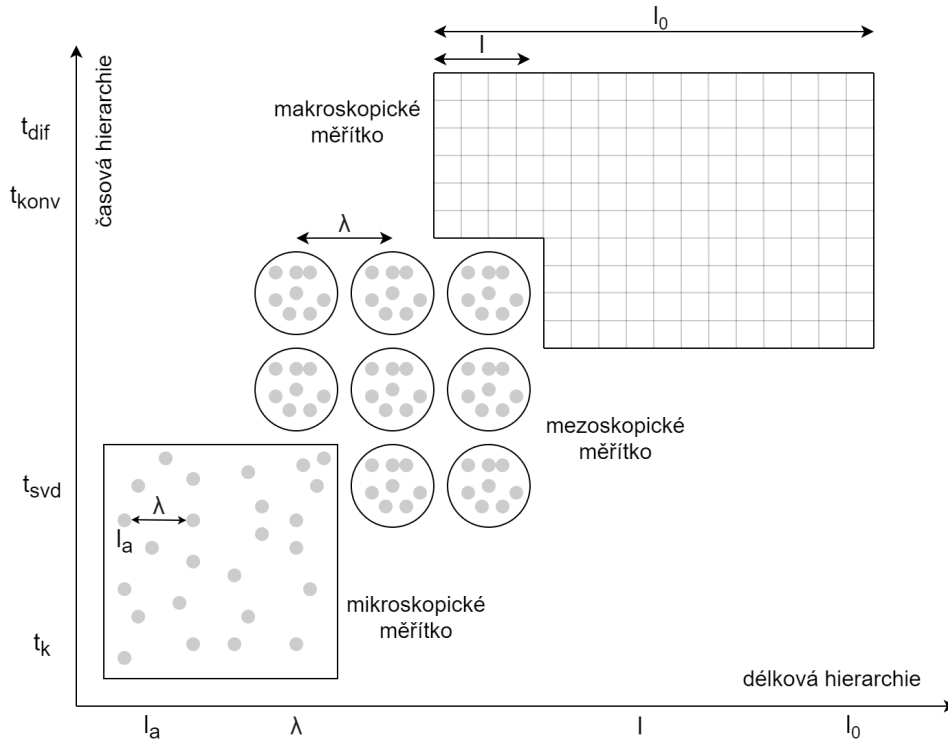
$$c_s^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s = \gamma RT. \quad (1.6.6)$$

Pro izotermický děj, což je speciální případ izoentropického děje kdy $\gamma = 1$, lze stavovou rovnici (1.6.1) napsat ve tvaru

$$p = \rho c_s^2. \quad (1.6.7)$$

1.7 Popis proudění tekutin v odlišných měřítkách

V předchozích odstavcích je matematicky popsáno proudění tekutin na úrovni popisu kontinua, tzn. není uvažována skutečnost, že tekutina je složena z jednotlivých částic. Proudění tekutin bývá často popsáno v mnohem detailnějších měřítkách než je měřítko kontinua. Zavedme proto hierarchii délek od nejmenších po největší. Označme l_a jako velikost molekuly, λ jako střední volnou dráhu molekul (vzdálenost za kterou dojde ke kolizi dvou molekul) a l jako úsek z celkové výpočtové oblasti o délce l_0 . Pro tyto délky platí nerovnost $l_a \ll \lambda \ll l \leq l_0$ viz vodorovná osa na obr. 2. Podle této délkové hierarchie se odlišují přístupy k numerickým výpočtům. Pro popis proudění tekutin na úrovních délek l nebo l_0 se používá kontinuální (makroskopický) popis, tedy popis pomocí rovnic uvedených v předchozích odstavcích. Pro popis proudění tekutin na úrovni molekul (mikroskopické) l_a se používají metody sledování částic (molekul nebo atomů), kde pohyb každé částice je popsán Newtonovými zákony. Tento popis je vhodný k porozumění základních mikroskopických jevů, ale je výpočtově náročný z důvodu velkého počtu částic.



Obr. 2: Zavedená časová a délková hierarchie

Spojovacím článkem mezi makroskopickým a mikroskopickým měřítkem je tzv. mezoskopické měřítko. Tekutiny na úrovni tohoto popisu jsou reprezentovány distribučními funkcemi, které si lze představit jako shluky molekul nebo atomů tekutiny. Proudění tekutin v mezoskopickém měřítku je matematicky popsáno kinetickou teorií plynů, která je základem pro lattice Boltzmannovu metodu a je popsána v následujících odstavcích.

Paralelně k délkové hierarchii zavedme časovou hierarchii, viz svíslá osa na obr. 2. V mikroskopickém měřítku můžeme definovat čas, po jehož dobu probíhá kolize jako $t_k = l_a/v_k$, kde v_k je střední kvadratická rychlost molekul. V případě mezoskopického měřítko je kolizní čas uvažován nulový $t_k \rightarrow 0$, tedy doba, po kterou probíhá kolize

je nekonečně malá. Zde je nutno poznamenat, že makroskopická rychlost je odlišná od střední kvadratické rychlosti $u \ll v_k$. Dále definujme střední čas mezi kolizemi $t_{svd} = \lambda/v_k$. Tento čas udává za jakou dobu dojde ke kolizi mezi dvěma molekulami. V případě makroskopického měřítka, kdy jsou časové a délkové rozměry delší, zavedme konvektivní $t_{konv} = l/u$ a difuzivní $t_{dif} = l^2/\nu$ čas. Poměr těchto časů je znám jako Reynoldsovo číslo a definuje jaký charakter (laminární nebo turbulentní) má proudící tekutina

$$Re = \frac{t_{dif}}{t_{konv}} = \frac{ul}{\nu}. \quad (1.7.1)$$

Další důležitým makroskopickým časem v akustice je čas, který udává jak rychle se šíří akustická vlna tekutinou. Tento čas je definován jako $t_s = l/c_s$, kde c_s je rychlost zvuku v dané tekutině. Jestliže platí $t_s < t_{konv}$, pak má tekutina vlastnosti nestlačitelné tekutiny. Poměr těchto časů je nazýváme Machovým číslem

$$Ma = \frac{t_s}{t_{konv}} = \frac{u}{c_s}. \quad (1.7.2)$$

Při numerických výpočtech pro nestlačitelnou tekutinu se často uvažuje $Ma < 0.3$ [26], aby byla zachována nestlačitelnost tekutiny.

Výše uvedené řazení délek $l_a \ll \lambda \ll l \leq l_o$ nemusí být v některých případech splněno. V případech proudění tekutin v zařízeních o velikosti mikrometrů až nanometrů je velikost celkové výpočetní oblasti téměř totožná s délkou střední volné dráhy $l_o \sim \lambda$. Tento jev charakterizuje Knudsenovo číslo

$$Kn = \frac{\lambda}{l}. \quad (1.7.3)$$

Pomocí tohoto čísla lze určit, jaký přístup zvolit pro numerický výpočet daného problému proudění. Například pro $Kn < 0.1$ je vhodný kontinuální(makroskopický) popis a pro $Kn > 1$ mezoskopický nebo mikroskopický popis.

Bezrozměrné Reynoldsovo, Machovo a Knudsenovo číslo lze nalézt ve všech literaturách týkajících se proudění tekutin. V numerických výpočtech se využívá jejich důležité vlastnosti plynoucí ze zákona podobnosti. Podle tohoto zákona platí, mají-li dvě výpočtové oblasti (představme si např. dvě potrubí) stejná bezrozměrná čísla, ale jiné délkové rozměry, sledované fyzikální veličiny budou v obou případech shodné.

Zde poznamenejme, že ne všechna bezrozměrná čísla musejí být identická při porovnávání menších měřítek s většími. Jestliže je Reynoldsovo číslo stejné, nemusí to platit pro Machovo nebo Knudsenovo číslo. V případě proudění, kdy je Knudsenovo nebo Machovo číslo malé, jej lze zanedbat a rozhodující je tedy Reynoldsovo číslo.

1.8 Kinetická teorie plynů

Jak již bylo zmíněno, kinetická teorie plynů popisuje proudění tekutin mezi mikroskopickou a makroskopickou úrovní popisu. Popisuje tok jednotlivých částic tekutiny v okolí časového úseku t_{svd} . Zaměříme se především na řídké jednoatomové plyny, pro které z důvodu delších vzdáleností mezi molekulami platí $t_k \ll t_{svd}$. Předpokladem kinetické teorie takovýchto plynů je, že částice mají pouze tři stupně volnosti (translační). Rotaci lze z důvodu sférického tvaru atomu zanedbat. Naopak, je-li částice tvořena více atomy, může navíc rotovat kolem tří souřadnicových os a má tedy šest stupňů volnosti. Rotační stupně

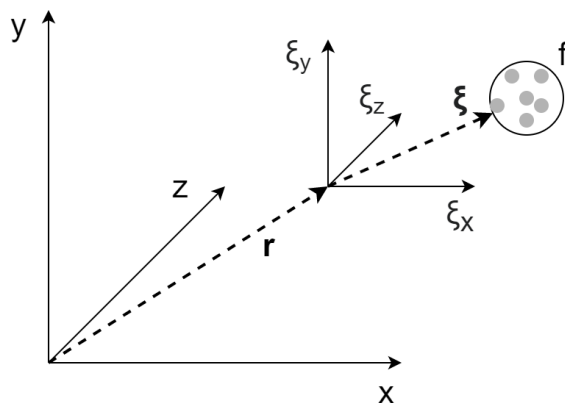
volnosti jsou důležité pro modelování teplotních efektů, které nejsou zahrnuty v této práci. Omezíme se proto na jednoatomové plyny se třemi translačními stupni volnosti.

Hlavní proměnnou kinetické teorie plynů je pravděpodobnostní distribuční funkce $f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t)$, kterou si lze obecně představit jako shluk nebo hustotu částic (atomů nebo molekul) s danou rychlostí v daném prostoru a čase. Tyto shluky se pohybují v prostoru a srážejí se s jinými shluky. Předpokládáme, že srážka (kolize) se uskutečňuje pouze mezi dvěma shluky nebo s fyzickou překážkou dokud nenastane lokální rovnovážný stav. Takto si lze zjednodušeně představit princip kinetické teorie plynů. Matematický popis distribuční funkce je uveden v následujících odstavcích.

Historickým vývojem se pro mezoskopický popis vytvořili dvě skupiny modelů. První skupina sestává z modelů založených na numerickém řešení rovnic popisujících proudění tekutin pomocí nejrůznějších aproximací (distribučních funkcí viz následující odstavce). Z nich vytkneme lattice Boltzmannovu metodu (LBM), již se zabývá tato práce. Druhá skupina sestává z modelů simulujících proudění jednotlivých částic. Mezi nejznámější metody této skupiny patří přímá simulace Monte Carlo (DSMC), která je vhodná i pro simulaci nanoproudění, nebo metody založené na buněčných automatech (LGA).

1.8.1 Distribuční funkce a její momenty

Tekutina na mezoskopické úrovni popisu je reprezentována distribučními funkcemi $f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t)$, které si lze představit jako shluky částic. Polohu těchto shluků ve fyzikálním prostoru lze charakterizovat polohovým vektorem \mathbf{r} , jehož složky tvoří souřadnicový systém x , y a z . Mikroskopická rychlost shluku $\boldsymbol{\xi}$ je bod v rychlostním prostoru, jehož souřadnicový systém je tvořen složkami ξ_x , ξ_y a ξ_z viz obr. 3.



Obr. 3: Znázornění fyzikálního a rychlostního prostoru

Fyzikální a rychlostní prostor společně tvoří šestidimenzionální prostor, který se nazývá fázový prostor. Vizuální představa takového prostoru je velice náročná, a proto pro lepší představu rozepíšeme v jakých jednotkách je definována distribuční funkce $f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t)$ náležící tomuto prostoru. Ve fyzikálním prostoru reprezentuje $\rho(\mathbf{r}, t)$ hustotu tekutiny v jednotkách kg/m^3 . Totéž reprezentuje distribuční funkce $f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t)$ ve fyzikálním ale i rychlostním prostoru. Pro její jednotky tedy platí [20]

$$f = kg \times \frac{1}{m^3} \times \frac{1}{(m/s)^3} = \frac{kg s^3}{m^6}. \quad (1.8.1)$$

Ze statistického hlediska lze poté označit distribuční funkci $f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t)$ jako pravděpodobnostní funkci výskytu shluku ve fázovém prostoru na pozici \mathbf{r} s mikroskopickou rychlostí $\boldsymbol{\xi}$ v určitém čase t .

Distribuční funkce jsou spjaty s makroskopickými veličinami jako např. zmíněná hustota tekutiny ρ nebo rychlost tekutiny \mathbf{u} prostřednictvím tzv. momentů. Jestliže víme, že distribuční funkce ve fázovém prostoru jsou analogií hustoty ve fyzikálním prostoru, pak formálním součtem všech distribučních funkcí fázového prostoru v místě \mathbf{r} s mikroskopickou rychlostí $\boldsymbol{\xi}$ a v čase t získáme hustotu fyzikálního prostoru v místě \mathbf{r} a čase t . Nahradíme-li formální součet spojitým integrálem, lze pro moment hustoty psát

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t) d^3\xi, \quad (1.8.2)$$

kde $d^3\xi$ značí trojitý integrál. Jestliže moment pro hustotu vynásobíme rychlostí, získáme moment hustoty hybnosti

$$\rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \int \boldsymbol{\xi} f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t) d^3\xi. \quad (1.8.3)$$

Obdobně můžeme definovat také moment pro hustotu celkové energie

$$\rho(\mathbf{r}, t)E(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \int |\boldsymbol{\xi}|^2 f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t) d^3\xi, \quad (1.8.4)$$

která obsahuje dva typy energie. Vnitřní energii způsobenou tepelným pohybem částic a energii způsobenou viskózním třením. Pro moment hustoty vnitřní energie platí

$$\rho(\mathbf{r}, t)e(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \int |\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)|^2 f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t) d^3\xi, \quad (1.8.5)$$

kde $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \boldsymbol{\xi}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ je relativní rychlost, kterou si lze představit jako odchylku mikroskopické rychlosti částice $\boldsymbol{\xi}$ od makroskopické rychlosti \mathbf{u} . Pro tuto práci jsou důležité pouze první dva ze zmíněných momentů.

1.8.2 Boltzmannova rovnice

Z předchozího odstavce je patrné, že znalost distribučních funkcí umožňuje získání hledaných makroskopických veličin. Stále však nebylo definováno jakým způsobem lze distribuční funkce matematicky popsat a jakým způsobem se distribuční funkce vyvíjejí v čase. Matematický popis distribuční funkce je přiblížen v odstavci 1.8.3, zatímco v tomto odstavci je popsána rovnice, podle níž se distribuční funkce vyvíjejí v čase.

Distribuční funkce jsou závislé na poloze \mathbf{r} , makroskopické rychlosti $\boldsymbol{\xi}$ a čase t (pro lepší přehled jsou distribuční funkce psány bez závislých proměnných). Pro totální diferenciál funkce f vzhledem k času t můžeme psát [32]

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \right) \frac{d\mathbf{r}}{dt} + \left(\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\xi}} \right) \frac{d\boldsymbol{\xi}}{dt} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) \frac{dt}{dt}, \quad (1.8.6)$$

kde $d\mathbf{r}/dt$ je mikroskopická rychlost $\boldsymbol{\xi}$ a $d\boldsymbol{\xi}/dt$ je mikroskopické zrychlení, které lze podle druhého Newtonova zákona vyjádřit jako \mathbf{F}/ρ . Rovnici (1.8.6) lze poté psát

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \right) + \frac{\mathbf{F}}{\rho} \left(\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\xi}} \right) = \frac{df}{dt}. \quad (1.8.7)$$

Tato rovnice je nazývána Boltzmannovou rovnicí, kterou definoval Ludwig Boltzmann v devatenáctém století.

Jestliže je pravá strana této rovnice rovna nule, tato rovnice popisuje transport distribučních funkcí, který není ovlivněn vzájemnými kolizemi distribučních funkcí f . Obecně jsou pak distribuční funkce transportovány mikroskopickou rychlostí ξ a jsou ovlivněny pouze vnější silou \mathbf{F} .

Na pravé straně této rovnice je zdrojový člen, který představuje míru změn distribučních funkcí způsobených jejich vzájemnými kolizemi. Proces kolize se může uskutečnit pouze mezi distribučními funkcemi nacházejícími se ve stejném místě \mathbf{r} a v čase t .

Tvar kolizního operátoru lze definovat mnoha způsoby, avšak musím být splněny určité předpoklady. Jedním z předpokladů je platnost zákonů zachování hmotnosti, hybnosti a energie. Označíme-li pravou stranu Boltzmannovy rovnice $\Omega(f)$, pak pro zmíněné zákony zachování platí

$$\int \Omega(f) d\xi = 0, \quad (1.8.8)$$

$$\int \xi \Omega(f) d\xi = 0, \quad (1.8.9)$$

$$\int |\mathbf{v}|^2 \Omega(f) d\xi = 0, \quad (1.8.10)$$

což je analogie rovnic (1.8.2) až (1.8.5). Dalším předpokladem pro kolizní operátor je konvergence distribučních funkcí k rovnovážnému stavu reprezentovanému rovnovážnými distribučními funkcemi, což je podrobněji uvedeno v následujícím odstavci.

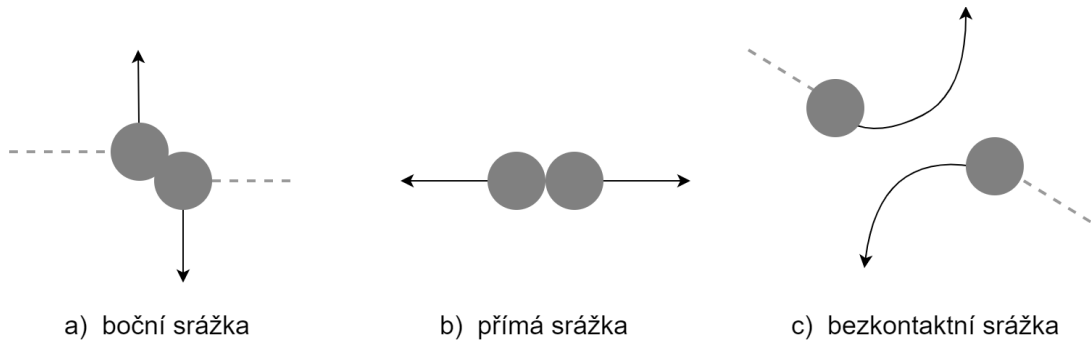
Kolizní operátor navržený Boltzmannem v devatenáctém století má složitý tvar dvojitého integrálu přes rychlostní prostor. Boltzmannův operátor navíc popisuje kolizi dvou distribučních funkcí ovlivněnou intermolekulárními silami, což jej činí komplikovaným. Jednodušší alternativou k Boltzmannovu koliznímu operátoru je tzv. BGK kolizní operátor, který navrhli autoři Bhatnagar, Gross a Krook v roce 1954. Tento kolizní operátor splňuje výše uvedené podmínky a má tvar

$$\Omega(f) = -\frac{1}{\tau}(f - f^{eq}), \quad (1.8.11)$$

kde f^{eq} je rovnovážná distribuční funkce a τ je relaxační čas. Detailnější popis rovnovážné distribuční funkce je uveden v následujícím odstavci a popis relaxačního času je uveden v odstavci 2.5.

1.8.3 Rovnovážná distribuční funkce

Kolizi dvou distribučních funkcí si lze obecně představit jako srážku dvou sfér. Tyto sféry se pohybují ve fázovém prostoru a vzájemně do sebe narážejí. Výsledný směr a rotace vzájemně odražených sfér závisí na směru, kterým se sféry pohybovaly před srážkou viz obr. 4. Tato zjednodušená představa neplatí pouze pro srážku dvou sfér v podobě přímého kontaktu viz obr. 4a a 4b, ale i pro sféry, které mezi sebou interagují například elektromagnetickou silou viz obr. 4c.



Obr. 4: Znázornění typů srážek sfér

Prostřednictvím vzájemných srážek sfér dochází k termodynamickým změnám stavu tekutiny z nerovnovážného stavu do rovnovážného stavu. Anž bychom uvažovali směry pohybu a rotace jednotlivých sfér nebo intermolekulární síly, lze tento jev generalizovat pomocí určitých statistických aproximací. Uvedme si příklad pro plyn. Jestliže je plyn delší dobu v klidu, lze předpokládat, že termodynamický stav tohoto plynu odpovídá rovnovážnému stavu, tzn. distribuční funkce f v libovolném místě plynu je přibližně rovna rovnovážné distribuční funkci f^{eq} . Tento stav je charakterizován tzv. Maxwellovou - Boltzmannovou distribuční funkcí pro plyny, která má tvar [14]

$$f^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{\frac{D+K}{2}}} \cdot e^{-\frac{(\xi-\mathbf{u})^2}{2RT}}, \quad (1.8.12)$$

kde ρ je hustota, T je termodynamická teplota, \mathbf{u} je makroskopická rychlost a R je plynová konstanta. Mocnitélé D a K označují počet stupňů volnosti v translačním a rotačním směru, přičemž v úvodním odstavci kinetické teorie plynů 1.8. jsou předpokládány pouze translační stupně volnosti, tzn. $K = 0$. Maxwellova - Boltzmannova distribuční funkce je tedy ve tvaru

$$f^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{\frac{D}{2}}} \cdot e^{-\frac{(\xi-\mathbf{u})^2}{2RT}}. \quad (1.8.13)$$

Pro rovnovážné distribuční funkce musí platit stejné momenty jako pro obyčejné distribuční funkce

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \int f^{eq}(\mathbf{r}, \xi, t) d^3\xi, \quad (1.8.14)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \int \xi f^{eq}(\mathbf{r}, \xi, t) d^3\xi, \quad (1.8.15)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t)E(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \int |\xi|^2 f^{eq}(\mathbf{r}, \xi, t) d^3\xi, \quad (1.8.16)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t)e(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \int |\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)|^2 f^{eq}(\mathbf{r}, \xi, t) d^3\xi. \quad (1.8.17)$$

2 Lattice Boltzmannova metoda

V následujících odstavcích je popsán způsob, jakým lze odvodit řídicí rovnici lattice Boltzmannovy metody pomocí diskretizace v čase a ve fázovém prostoru. Odvození řídicí LBM rovnice je v této práci založeno na publikaci autorů He a Luo [15]. Ačkoli původní LBM vznikla z metody buněčných automatů, autoři He a Luo představili způsob diskretizace vycházející ze spojité Boltzmannovy rovnice (1.8.7).

V tomto odstavci je nejprve uvedena zjednodušená spojitá Boltzmannova rovnice, pro kterou je následně v odstavci 2.1 provedena diskretizace v čase. Následuje odvození aproximace rovnovážné distribuční funkce. Jelikož jsou v této práci numericky řešeny případy proudění pomocí LBM ve 2D, je v odstavci 2.3 provedena diskretizace pro případ D2Q9 fázového prostoru. Význam termínu D2Q9 je objasněn ve stejném odstavci jako diskretizace ve fázovém prostoru.

Nyní uvažujme spojitou Boltzmannovu rovnici (1.8.7) s BGK kolizním operátorem, u které je zanedbán vliv vnější síly \mathbf{F} . V případě časové diskretizace se omezme pouze na závislou proměnnou t . Zaveďme proto zjednodušující označení distribučních funkcí $f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t) = f(t)$ a $f(\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi}\delta t, \boldsymbol{\xi}, t + \delta t) = f(t + \delta t)$, které jsou použity v následujícím odstavci. Funkcí $g(t)$ označme rovnovážnou distribuční funkci $f^{eq}(\mathbf{r}, t)$. Upravená spojitá Boltzmannova rovnice má tvar

$$\frac{\partial f(t)}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}\nabla f(t) = -\frac{1}{\tau}(f(t) - g(t)), \quad (2.0.1)$$

kde $\nabla = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$ a τ je relaxační čas. Takto přeznačenou rovnici lze diskretizovat v čase následujícím postupem.

2.1 Diskretizace v čase

Rovnici (2.0.1) lze upravit na nehomogenní obyčejnou diferenciální rovnici (ODE) prvního řádu

$$\frac{Df(t)}{Dt} + \frac{1}{\tau}f(t) = \frac{1}{\tau}g(t), \quad (2.1.1)$$

kde člen

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}\nabla \quad (2.1.2)$$

je časová derivace podél charakteristiky mikroskopické rychlosti $\boldsymbol{\xi}$. Použitím standardního postupu při řešení nehomogenních ODE, např. metodou variace konstant, lze získat řešení rovnice (2.1.1) ve tvaru

$$f(t + \delta t) = f(t)e^{-\frac{\delta t}{\tau}} + \frac{1}{\tau}e^{-\frac{\delta t}{\tau}} \int_0^{\delta t} e^{\frac{t'}{\tau}} g(t + t') dt'. \quad (2.1.3)$$

Předpokládáme-li velmi malý časový krok δt a dostatečně hladkou funkci g , pak pro čas $0 \leq t' \leq \delta t$ lze funkci $g(t + t')$ lineárně interpolovat funkcí

$$g(t + t') = \left(1 - \frac{t'}{\delta t}\right)g(t) + \frac{t'}{\delta t}g(t + \delta t) + O(\delta t^2), \quad (2.1.4)$$

kterou lze použít k nalezení řešení komplementárního integrálu v rovnici (2.1.3). Dosažením funkce $g(t+t')$ do členu s komplementárním integrálem v rovnici (2.1.3) získáme

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\tau} e^{-\frac{\delta t}{\tau}} \int_0^{\delta t} e^{\frac{t'}{\tau}} g(t+t') dt' = \\
& = \frac{1}{\tau} e^{-\frac{\delta t}{\tau}} \int_0^{\delta t} e^{\frac{t'}{\tau}} \left(1 - \frac{t'}{\delta t}\right) g(t) + \frac{t'}{\delta t} g(t+\delta t) dt' = \\
& = \frac{1}{\tau} e^{-\frac{\delta t}{\tau}} \left[e^{-\frac{t'}{\tau}} \tau g(t) - e^{-\frac{t'}{\tau}} \frac{\frac{1}{\tau} t' - 1}{(\frac{\tau}{\delta t})^2} \frac{g(t)}{\delta t} + e^{-\frac{t'}{\tau}} \frac{\frac{1}{\tau} t' - 1}{(\frac{\tau}{\delta t})^2} \frac{g(t+\delta t)}{\delta t} \right]_0^{\delta t} = \\
& = \frac{1}{\tau} e^{-\frac{\delta t}{\tau}} g(t) \left[\tau e^{\frac{\delta t}{\tau}} - \left(\tau - \frac{(\tau)^2}{\delta t}\right) e^{\frac{\delta t}{\tau}} - \tau - \frac{(\tau)^2}{\delta t - t} \right] + g(t+\delta t) \left[\left(\tau - \frac{(\tau)^2}{\delta t}\right) e^{\frac{\delta t}{\tau}} + \frac{(\tau)^2}{\delta t - t} \right] = \\
& = g(t) - e^{-\frac{\delta t}{\tau}} g(t) + \left[1 + \frac{\tau}{\delta t} (e^{-\frac{\delta t}{\tau}} - 1)\right] (g(t+\delta t) - g(t)).
\end{aligned} \tag{2.1.5}$$

Tento upravený člen s komplementárním integrálem dosadíme zpět do rovnice (2.1.3)

$$f(t+\delta t) - f(t) = \left(e^{-\frac{\delta t}{\tau}} - 1\right) (f(t) - g(t)) + \left(1 + \frac{\tau}{\delta t} (e^{-\frac{\delta t}{\tau}} - 1)\right) (g(t+\delta t) - g(t)). \tag{2.1.6}$$

Pro konečnou úpravu je potřeba rozvinout člen $e^{-\frac{\delta t}{\tau}}$ do Taylorovy řady v okolí δt

$$e^{-\frac{\delta t}{\tau}} = e^{-\frac{0+\delta t}{\tau}} = 1 + \delta t \left(\frac{1}{\tau} e^0\right) + O(\delta t^2) \approx 1 - \frac{\delta t}{\tau}, \tag{2.1.7}$$

který dosadíme do rovnice (2.1.6)

$$f(t+\delta t) - f(t) = \left(1 - \frac{\delta t}{\tau} - 1\right) (f(t) - g(t)) + \left(1 + \frac{\tau}{\delta t} \left(1 - \frac{\delta t}{\tau} - 1\right)\right) (g(t+\delta t) - g(t)). \tag{2.1.8}$$

Konečný tvar časově diskretizované Boltzmannovy rovnice má tvar

$$f(t+\delta t) - f(t) = -\frac{\delta t}{\tau} (f(t) - g(t)), \tag{2.1.9}$$

kde člen $\frac{\delta t}{\tau}$ je bezrozměrný relaxační čas. Ačkoli je g označena jako funkce závislá na čase, její hodnota závisí převážně na hydrodynamických veličinách viz odstavec 1.8.3. V následujícím odstavci je odvozena distribuční funkce g resp. f^{eq} .

2.2 Aproximace rovnovážné distribuční funkce

V LBM je použita Maxwellova - Boltzmannova rovnovážná distribuční funkce, která je popsána v odstavci 1.8.3. Předpokládáme-li prostor dimenze D (s D translačními stupni volnosti), Maxwellovu - Boltzmannovu funkci (1.8.13) lze napsat ve tvaru

$$f^{eq} = g(\mathbf{u}) = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{\frac{D}{2}}} e^{-\frac{(\xi-\mathbf{u})^2}{2RT}}. \tag{2.2.1}$$

Tuto funkci lze pro rychlost \mathbf{u} rozepsat do Taylorovy řady, jejíž aproximace je dostatečně přesná pro malé rychlosti ($Ma < 0.3$). Úpravou kvadratické formy v exponentu e a jejím

rozšířením v Taylorovu řadu získáme

$$\begin{aligned}
g(0 + \mathbf{u}) &= \frac{\rho}{(2\pi RT)^{\frac{D}{2}}} e^{-\frac{\xi^2}{2RT} + \frac{\xi\mathbf{u}}{RT} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT}} = \beta e^{\frac{\xi\mathbf{u}}{RT} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT}} = \\
&= g(0) + \mathbf{u}g'(0) + \frac{\mathbf{u}^2}{2}g''(0) + O(\mathbf{u}^3) = \\
&= \beta \left(1 + \mathbf{u} \left[\beta \frac{1}{RT} e^{\frac{\xi\mathbf{u}}{RT} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT}} (\xi - \mathbf{u}) \right] + \right. \\
&\quad \left. + \frac{\mathbf{u}^2}{2} \beta \left[\frac{1}{(RT)^2} e^{\frac{\xi\mathbf{u}}{RT} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT}} (\xi - \mathbf{u})^2 + \frac{1}{RT} (-1) \right] \right) + O(\mathbf{u}^3) = \\
&= \beta \left(1 + \frac{\xi\mathbf{u}}{RT} + \frac{(\xi\mathbf{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} \right),
\end{aligned} \tag{2.2.2}$$

kde konstantou $\beta = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{\frac{D}{2}}} e^{-\frac{\xi^2}{2RT}}$ je označen člen před závorkou pro lepší přehlednost. Výsledná aproximace rovnovážné distribuční funkce má tvar

$$f^{eq} = \beta \left(1 + \frac{\xi\mathbf{u}}{RT} + \frac{(\xi\mathbf{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} \right). \tag{2.2.3}$$

Tato distribuční funkce popisuje rovnovážný stav s přesností $O(\mathbf{u}^2)$. V případě potřeby větší přesnosti rychlosti, lze rovnovážnou distribuční funkci analogicky odvodit podle předchozího postupu. Takto definovaná rovnovážná distribuční funkce společně s rovnicí (2.1.9) zatím není diskretizována ve fázovém prostoru. Způsob jejich diskretizace je uveden v následujícím odstavci.

2.3 Diskretizace ve fázovém prostoru

Boltzmannova rovnice (1.8.7) popisuje pohyb molekul s mikroskopickou rychlostí ξ v nekonečném počtu směrů fázového prostoru. Aby bylo možné implementovat lattice Boltzmannovu metodu, je potřeba diskretizovat fázový prostor. Pro případy rovinného proudění tekutin se nejčastěji používá diskretizace s označením D2Q9, kde D2 označuje dimenzi prostoru a Q9 počet rychlostních směrů, podél kterých se mohou distribuční funkce pohybovat. Pro případ prostorového proudění se často používá diskretizace D3Q27, avšak v této práci nebude tato diskretizace hlouběji popsána z důvodu řešení rovinných případů proudění.

Při diskretizaci je potřeba zajistit dva předpoklady. Prvním předpokladem je shoda dimenze a počtu rychlostních směrů odvozeného diskretizovaného fázového prostoru se zvoleným prostorem D2Q9. Dalším předpokladem je nezávislost výsledných hodnot makroskopických veličin (1.8.2) až (1.8.5) na úhlu natočení zvoleného prostoru D2Q9.

Momenty rovnovážných distribučních funkcí (1.8.15) až (1.8.16) ve 2D lze alternativně zapsat ve tvaru

$$I = \int \psi(\xi) f^{eq} d\xi. \tag{2.3.1}$$

Integrály hydrodynamických momentů (1.8.15) až (1.8.16) jsou tedy ekvivalentní k řešení

integrálu

$$I = \int \psi(\boldsymbol{\xi}) f^{eq} d\boldsymbol{\xi} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{\frac{D}{2}}} \int \psi(\boldsymbol{\xi}) e^{-\frac{(\boldsymbol{\xi})^2}{2RT}} \left(1 + \frac{\boldsymbol{\xi}\mathbf{u}}{RT} + \frac{(\boldsymbol{\xi}\mathbf{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} \right) d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.3.2)$$

kde ψ je funkce obsahující složky mikroskopické rychlosti $\boldsymbol{\xi}$

$$\psi(\boldsymbol{\xi}) = \xi_x^m \xi_y^n. \quad (2.3.3)$$

Složky ξ_x^m, ξ_y^n je nutné označit indexy m a n , aby nedocházelo ke kolizím označení s mikroskopickou rychlostí $\boldsymbol{\xi}$ v závorce rovnice (2.3.2). Rovnici (2.3.2) lze jednoduchými algebraickými úpravami přepsat do tvaru

$$\begin{aligned} I &= \frac{\rho}{(2\pi RT)^{\frac{D}{2}}} \int \psi(\boldsymbol{\xi}) e^{-\frac{(\boldsymbol{\xi})^2}{2RT}} \left(1 + \frac{\boldsymbol{\xi}\mathbf{u}}{RT} + \frac{(\boldsymbol{\xi}\mathbf{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} \right) d\boldsymbol{\xi} = \\ &= \frac{\rho}{\pi} (\sqrt{2RT})^{-2} \int \xi_x^m \xi_y^n e^{-\frac{(\boldsymbol{\xi})^2}{(\sqrt{2RT})^2}} \left(1 - \frac{\boldsymbol{\xi}\mathbf{u}}{RT} + \frac{(\boldsymbol{\xi}\mathbf{u})^2}{2(RT)^2} + \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} \right) d\boldsymbol{\xi} = \\ &= \frac{\rho}{\pi} (\sqrt{2RT})^{-2} \left(\int \xi_x^m \xi_y^n e^{-\frac{(\xi_x^2 + \xi_y^2)}{(\sqrt{2RT})^2}} d\boldsymbol{\xi} - \right. \\ &\quad - \int \xi_x^m \xi_y^n e^{-\frac{(\xi_x^2 + \xi_y^2)}{(\sqrt{2RT})^2}} \left(\frac{u_x^2 + u_y^2}{2RT} \right) d\boldsymbol{\xi} + \\ &\quad + \int \xi_x^m \xi_y^n e^{-\frac{(\xi_x^2 + \xi_y^2)}{(\sqrt{2RT})^2}} \left(\frac{2(\xi_x u_x + \xi_y u_y)}{2RT} \right) d\boldsymbol{\xi} + \\ &\quad \left. + \int \xi_x^m \xi_y^n e^{-\frac{(\xi_x^2 + \xi_y^2)}{(\sqrt{2RT})^2}} \left(\frac{2(\xi_x^2 u_x^2 + 2\xi_x u_x \xi_y u_y + \xi_y^2 u_y^2)}{(\sqrt{2RT})^4} \right) d\boldsymbol{\xi} \right). \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

Následující algebraickou úpravu je nutno provést pro všechny čtyři integrály v rovnici (2.3.4), avšak pro identické provedení a složitost je znázorněna pouze pro první integrál

$$\begin{aligned} &\frac{\rho}{\pi} (\sqrt{2RT})^{-2} \int \xi_x^m \xi_y^n e^{-\frac{(\xi_x^2 + \xi_y^2)}{(\sqrt{2RT})^2}} d\boldsymbol{\xi} = \\ &= \frac{\rho}{\pi} (\sqrt{2RT})^{-2} \left(\int \int e^{-\frac{(\xi_x^2)}{(\sqrt{2RT})^2}} \xi_x^m e^{-\frac{(\xi_y^2)}{(\sqrt{2RT})^2}} \xi_y^n d\xi_x d\xi_y \right) = \\ &= \frac{\rho}{\pi} (\sqrt{2RT})^{-2} \left(\int e^{-\frac{(\xi_x^2)}{(\sqrt{2RT})^2}} \xi_x^m d\xi_x \int e^{-\frac{(\xi_y^2)}{(\sqrt{2RT})^2}} \xi_y^n d\xi_y \right) = \\ &= \frac{\rho}{\pi} (\sqrt{2RT})^{-2} \left((\sqrt{2RT})^m \int e^{-\frac{(\xi_x^2)}{(\sqrt{2RT})^2}} \left(\frac{\xi_x}{\sqrt{2RT}} \right)^m d \frac{\xi_x}{\sqrt{2RT}} \right. \\ &\quad \left. (\sqrt{2RT})^n \int e^{-\frac{(\xi_y^2)}{(\sqrt{2RT})^2}} \left(\frac{\xi_y}{\sqrt{2RT}} \right)^n d \frac{\xi_y}{\sqrt{2RT}} \right) = \end{aligned} \quad (2.3.5)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\rho}{\pi} (\sqrt{2RT})^{m+n-2} \left(\int e^{\frac{-(\xi_x^2)}{(\sqrt{2RT})^2}} \left(\frac{\xi_x}{\sqrt{2RT}} \right)^m d\frac{\xi_x}{\sqrt{2RT}} \right. \\
&\quad \left. \int e^{\frac{-(\xi_y^2)}{(\sqrt{2RT})^2}} \left(\frac{\xi_y}{\sqrt{2RT}} \right)^n d\frac{\xi_y}{\sqrt{2RT}} \right) = \\
&= \frac{\rho}{\pi} (\sqrt{2RT})^{m+n-2} \left(\int e^{-\zeta_x^2} \zeta_x^m d\zeta_x \int e^{-\zeta_y^2} \zeta_y^n d\zeta_y \right) = \\
&= \frac{\rho}{\pi} (\sqrt{2RT})^{m+n-2} I_x^m I_y^n.
\end{aligned} \tag{2.3.6}$$

V této rovnici je člen I_i^m označen jako moment m -tého řádu funkce $e^{-\zeta^2}$. Pomocí těchto momentů lze rovnici (2.3.4) upravit do tvaru

$$\begin{aligned}
I &= \frac{\rho}{\pi} (\sqrt{2RT})^{m+n+2} \left(\left(1 - \frac{\mathbf{u}}{2RT} \right) I_x^m I_y^n + \right. \\
&\quad + \frac{2(u_x I_x^{m+1} I_y^n + u_y I_x^m I_y^{n+1})}{\sqrt{2RT}} + \\
&\quad \left. + \frac{\mathbf{u}_x^2 I_x^{m+2} I_y^n + 2\mathbf{u}_x \mathbf{u}_y I_x^{m+1} I_y^{n+1} + \mathbf{u}_y^2 I_x^m I_y^{n+2}}{RT} \right).
\end{aligned} \tag{2.3.7}$$

Rozhodujícím krokem diskretizace fázového prostoru je správná volba Gaussovy kvadrurní formule, jejíž pomocí lze numericky integrovat momenty I_i^m . Obecný předpis Gaussovy kvadrurní formule má tvar

$$\int W(x) f(x) dx \approx \sum_{j=1}^N w_j f(x_j), \tag{2.3.8}$$

kde $W(x)$ je váhová funkce (v tomto případě $e^{-\zeta^2}$) a $f(x)$ je hladký polynom závislý na x (v tomto případě $f(\zeta_x) = \zeta_x^m$). Integrál součinu těchto dvou funkcí lze aproximovat sumou ze součinů funkčních hodnot $f(x_j)$ v bodě x_j a váhových koeficientů w_j . Celkově se v rovnici (2.3.8) vyskytuje N integračních bodů x_j a váhových koeficientů. Pro funkci $e^{-\zeta^2}$ lze použít aproximaci tzv. Gauss - Hermitovou kvadrurní formulí, jejíž použití dosahuje vysoké přesnosti pro všechny polynomy do řádu $(2N - 1)$ za podmínky zvolení N integračních bodů. Počet těchto bodů se určí podle řádu polynomu ψ , který v rovnici (2.3.7) nabývá čtvrtého řádu. Proto je potřeba $N = 3$ integračních bodů pro přesnou aproximaci Gaussovou - Hermitovou kvadrurní formulí ve tvaru

$$I_i^m = \sum_{j=1}^3 w_j (\zeta_j)^m. \tag{2.3.9}$$

Pro takto zvolený počet integračních bodů lze v literatuře nalézt odpovídající váhové funkce a hodnoty integračních bodů

$$\zeta_1 = -\sqrt{\frac{3}{2}}, \quad \zeta_2 = 0, \quad \zeta_3 = +\sqrt{\frac{3}{2}}, \tag{2.3.10}$$

$$w_1 = \frac{\sqrt{\pi}}{6}, \quad w_2 = \frac{2\sqrt{\pi}}{3}, \quad w_3 = \frac{\sqrt{\pi}}{6}. \quad (2.3.11)$$

Dosazením vztahu (2.3.9) za příslušné momenty v rovnici (2.3.7) získáme jednodušší tvar

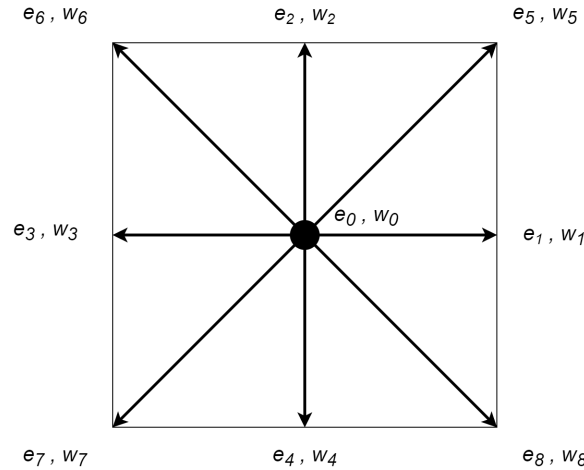
$$I = \frac{\rho}{\pi} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 w_i w_j \psi(\zeta_{i,j}) \left(1 + \frac{\boldsymbol{\xi} \mathbf{u}}{RT} + \frac{(\boldsymbol{\xi} \mathbf{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} \right), \quad (2.3.12)$$

kde $\zeta_{i,j}$ je vektor daný kvadraturní formulí $\zeta_{i,j} = (\sqrt{2RT})(\zeta_i, \zeta_j)^T$. V rovnici (2.3.12) se vykytují dvě sumy z nichž každá má index od 1 do 3. Existuje tedy 9 pravděpodobných hodnot $\zeta_{i,j}$ a $w_i w_j$. Jelikož uvažujeme izotermický model, teplota T ztrácí na významu a lze pro ni zavést konstantu $c = \|\sqrt{2RT}\zeta_1\| = \sqrt{2RT}\sqrt{3/2} = \sqrt{3RT}$. Porovnáme-li rovnice (1.6.7) a (1.6.1), získáme vztah pro rychlost zvuku $c_s^2 = RT = c^2/3$. Pro váhy vydělené konstantou π platí

$$\begin{aligned} w_0 &= w_2 w_2 = 4/9, \\ w_{1\dots 4} &= w_1 w_2, w_2 w_1, w_3 w_2, w_2 w_3 = 1/9, \\ w_{5\dots 8} &= w_1 w_3, w_3 w_1, w_1 w_1, w_3 w_3 = 1/36. \end{aligned} \quad (2.3.13)$$

Obdobně jako váhové koeficienty lze odvodit diskretizované rychlostní směry

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_0 &= \zeta_{2,2} = (0, 0)^T, \\ \mathbf{e}_{1\dots 4} &= \zeta_{1,2}, \zeta_{2,1}, \zeta_{3,2}, \zeta_{2,3} = (\pm 1, 0)^T c, (0, \pm 1)^T c, \\ \mathbf{e}_{5\dots 8} &= \zeta_{1,3}, \zeta_{3,1}, \zeta_{1,1}, \zeta_{3,3} = (\pm 1, \pm 1)^T c. \end{aligned} \quad (2.3.14)$$



Obr. 5: Rychlostní směry a příslušné váhové koeficienty

Se znalostí váhových koeficientů a rychlostních směrů lze rovnici (2.3.12) zapsat ve tvaru

$$I = \sum_{\alpha=0}^8 W_\alpha \psi(\mathbf{e}_\alpha) f_\alpha^{eq}, \quad (2.3.15)$$

kde W_α je roven $W_\alpha = 2\pi RT e^{\frac{\xi^2}{2RT}}$ a pro rovnovážnou distribuční funkci f_α^{eq} platí

$$f_\alpha^{eq} = w_\alpha \rho \left(1 + \frac{3\mathbf{e}_\alpha \mathbf{u}}{c^2} + \frac{9(\mathbf{e}_\alpha \mathbf{u})^2}{2c^4} - \frac{3\mathbf{u}^2}{2c^2} \right). \quad (2.3.16)$$

Připomeňme znovu, že odvozené rychlostní směry a hodnoty vah závisí na volbě Gaussovy - Hermitovy kvadraturní formule a přesně definují rozložení rychlostních směrů a vah v buňce pro D2Q9 případ. V práci [15] je provedena diskretizace fázového prostoru v případě odlišných konfigurací jako například D3Q27, D2Q6 nebo D2Q7 pro trojúhelníkovou buňku.

Hydrodynamické momenty jsou definovány obdobnými vztahy jako v předchozích odstavcích s rozdílem v nahrazení integrálů sumami

$$\rho = \sum_{\alpha} f_{\alpha}, \quad (2.3.17)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} f_{\alpha}, \quad (2.3.18)$$

$$\rho \epsilon = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} (\mathbf{e}_{\alpha} - \mathbf{u})^2 f_{\alpha}. \quad (2.3.19)$$

Tyto vztahy jsou zde uvedené pro distribuční funkce f_α , avšak z odstavce 1.8.3 je zřejmé, že platí i pro $g = f_\alpha^{eq}$.

Výsledná diskretizovaná řídicí rovnice lattice Boltzmannovy metody s BGK kolizním operátorem má tvar

$$f_\alpha(\mathbf{r} + \mathbf{e}_\alpha \delta t, t + \delta t) = f_\alpha(\mathbf{r}, t) - \frac{\delta t}{\tau} (f_\alpha(\mathbf{r}, t) - f_\alpha^{eq}(\mathbf{r}, t)). \quad (2.3.20)$$

Zaměřme se na význam pravé a levé strany rovnice (2.3.20) a na závislé proměnné distribučních funkcí. Pravá strana symbolizuje proces kolize v místě \mathbf{r} a v časové hladině t , kdežto levá strana symbolizuje proces přenosu distribučních funkcí z místa \mathbf{r} do místa $\mathbf{r} + \mathbf{e}_\alpha \delta t$ v časové hladině $t + \delta t$. Tyto procesy lze realizovat odděleně a na jejich pořadí nezáleží.

2.4 Chapmannovo - Enskogovo rozšíření

V předchozím odstavci je odvozen tvar diskretizované lattice Boltzmannovy rovnice, pro níž je v tomto odstavci dokázána vhodnost použití pro numerické simulace. Pomocí Chapmannova - Enskogova rozšíření uvedeného v literatuře [22] lze z lattice Boltzmannovy rovnice odvodit tvar NS rovnic společně se vztahem pro kinematickou viskozitu implicitně používanou v LBM numerických simulacích. Aby byl obdrženo tvar NS rovnic a kinematické viskozity platný je třeba volit určité parametry takovým způsobem, aby bylo Machovo číslo malé.

Pro všechny diskretizované modely včetně modelu D2Q9 platí následující tenzorový zápis

$$E^n = \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha e_{\alpha,i_1} e_{\alpha,i_2} \dots e_{\alpha,i_n}, \quad (2.4.1)$$

kde $i_1, \dots, i_n \in (1, 3)$ jsou indexy označující složky rychlostních směrů. Pro tenzory sudých řádů lze psát

$$\begin{aligned}
E^0 &= \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha = 1, \\
E^2 &= \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha e_{\alpha,i} e_{\alpha,j} = \frac{c^3}{3} \delta_{ij}, \\
E^4 &= \sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha e_{\alpha,i} e_{\alpha,j} e_{\alpha,k} e_{\alpha,l} = \frac{c^4}{9} (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}), \\
E^{2n+1} &= 0, \quad n = 1, 2, 3, \dots
\end{aligned} \tag{2.4.2}$$

kde indexy $i, j, k, l \in (1, 3)$ jsou použity pro označení složek rychlostních směrů. Pro jednodušší značení jsou nadále psány sumy $\sum_{\alpha=0}^8$ jako \sum_α . podle rovnice (2.4.2) lze psát následující momenty

$$\begin{aligned}
\sum_\alpha f_\alpha^{eq} &= \rho, \\
\sum_\alpha e_{\alpha,i} f_\alpha^{eq} &= \rho u_i, \\
\sum_\alpha e_{\alpha,i} e_{\alpha,j} f_\alpha^{eq} &= \frac{c^2}{3} \rho \delta_{ij} + \rho u_i u_j, \\
\sum_\alpha e_{\alpha,i} e_{\alpha,j} e_{\alpha,k} f_\alpha^{eq} &= \frac{c^2}{3} \rho (\delta_{ij} u_k + \delta_{ik} u_j + \delta_{jk} u_i).
\end{aligned} \tag{2.4.3}$$

V pozdější části tohoto odstavce je prokázána důležitost těchto momentů pro odvození NS rovnic. Jestliže váhové koeficienty w_α , rychlostní směry e_α a rovnovážné distribuční funkce f_α^{eq} splňují tyto momenty, pak lze odvodit tvar NS rovnic z lattice Boltzmannovy rovnice. Nyní přistupme k Champannovu - Eskongovu rozšíření.

Podle Taylorova rozvoje lze rovnici (2.3.20) zapsat ve tvaru

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\delta t^n}{n!} D_t^n f_\alpha(\mathbf{r}, t) = \frac{f_\alpha^{eq}(\mathbf{r}, t) - f_\alpha(\mathbf{r}, t)}{\tau}, \tag{2.4.4}$$

kde $D_t = (\partial_t + \mathbf{e}_\alpha \nabla)$. Distribuční funkce lze podle Champmannova - Enskogova rozšíření zapsat ve tvaru součtu

$$\begin{aligned}
f_\alpha &= f_\alpha^0 + \sum_{n=1}^{\infty} f_\alpha^n = f_\alpha^{eq} + \sum_{\alpha} f_\alpha^{eq}, \\
\partial_t &= \sum_{n=0}^{\infty} \partial_{t_n}.
\end{aligned} \tag{2.4.5}$$

Členy v rovnici (2.4.4) lze postupně rozepsat podle řádu n následovně

$$\begin{aligned} \delta t(\partial_{t_0} + \mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla) f_\alpha^{eq} &= \frac{-1}{\tau} f_\alpha^1, \\ \delta t(\partial_{t_0} + \mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla) f_\alpha^1 + \delta t \partial_{t_1} f_\alpha^{eq} + \frac{\delta t^2}{2} (\partial_{t_0} + \mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla)^2 f_\alpha^{eq} &= \frac{-1}{\tau} f_\alpha^2, \\ &\vdots \end{aligned} \quad (2.4.6)$$

Abychom byli schopni sledovat jednotlivé distribuční funkce f_α^n , zavedme následující rovnosti

$$\begin{aligned} \sum_\alpha f_\alpha^n &= 0, \quad \forall n \neq 0 \\ \sum_\alpha \mathbf{e}_{\alpha,i} f_\alpha^n &= 0, \quad \forall n \neq 0 \end{aligned} \quad (2.4.7)$$

Použitím rovnic (2.4.3) a (2.4.7) v rovnicích (2.4.6) a vypsáním nultých řádů získáme

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t_0} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} &= 0, \\ \frac{\partial \rho}{\partial t_1} &= 0, \end{aligned} \quad (2.4.8)$$

kde $\nabla = \frac{\partial}{\partial x_j}$ viz rovnice (1.5.6). Obdobně lze vypsát první řády

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho u_i}{\partial t_0} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{c^2}{3} \rho \delta_{ij} + \rho u_i u_j \right) &= 0, \\ \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t_1} + \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \frac{\partial}{\partial x_j} \sum_\alpha e_{\alpha,i} e_{\alpha,j} f_\alpha^1 &= 0. \end{aligned} \quad (2.4.9)$$

Použitím rovnic (2.4.3), (2.4.6), (2.4.8) a (2.4.9) lze získat

$$\begin{aligned} \sum_\alpha e_{\alpha,i} e_{\alpha,j} f_\alpha^1 &= -\tau \delta t \sum_\alpha e_{\alpha,i} e_{\alpha,j} (\partial_{t_0} + \mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla) f_\alpha^{eq} = \\ &= -\tau \delta t \left[\frac{\partial}{\partial t_0} \left(\frac{c^2}{3} \rho \delta_{ij} + \rho u_i u_j \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \sum_\alpha e_{\alpha,i} e_{\alpha,j} e_{\alpha,k} f_\alpha^{eq} \right] = \\ &= -\tau \delta t \left[\frac{-c^2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k) + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial t_0} + \frac{\partial}{\partial x_k} \sum_\alpha e_{\alpha,i} e_{\alpha,j} e_{\alpha,k} f_\alpha^{eq} \right], \end{aligned} \quad (2.4.10)$$

kde pro člen platí

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial t_0} &= u_i \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial t_0} + u_j \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t_0} - u_i u_j \frac{\partial \rho}{\partial t_0} = \\ &= -u_i \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{c^2}{3} \rho \delta_{jk} + \rho u_j u_k \right) - u_j \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{c^2}{3} \rho \delta_{ik} + \rho u_i u_k \right) + u_i u_j \frac{\partial(\rho u_k)}{\partial x_k} = \\ &= -u_i \frac{c^2}{3} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} - u_j \frac{c^2}{3} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} - u_i \frac{\partial(\rho u_j u_k)}{\partial x_j} - u_j \frac{\partial(\rho u_i u_k)}{\partial x_k} + u_i u_j \frac{\partial(\rho u_k)}{\partial x_k} = \\ &= -u_i \frac{c^2}{3} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} - u_j \frac{c^2}{3} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} - \frac{\partial(\rho u_i u_j u_k)}{\partial x_k}, \end{aligned} \quad (2.4.11)$$

a pro člen

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_k} \sum_{\alpha} e_{\alpha,i} e_{\alpha,j} e_{\alpha,k} f_{\alpha}^{eq} &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\frac{c^2}{3} \rho (\delta_{ij} u_k + \delta_{ik} u_j + \delta_{jk} u_i) \right] = \\ &= \frac{c^2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial(\rho u_k)}{\partial x_k} + \frac{c^2}{3} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} u_j + \frac{c^2}{3} \rho \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{c^2}{3} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} u_i + \frac{c^2}{3} \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_j}. \end{aligned} \quad (2.4.12)$$

Zpětným dosazením rovnice (2.4.11) a (2.4.12) do (2.4.10) získáme

$$\sum_{\alpha} e_{\alpha,i} e_{\alpha,j} f_{\alpha}^1 = -\tau \delta t \left[\frac{c^2}{3} \rho \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_i u_j u_k) \right]. \quad (2.4.13)$$

Kombinací rovnic (2.4.8), (2.4.9), (2.4.13) a zavedením aproximace $\partial_t = \sum_{n=0}^{\infty} \partial_{t_n} \approx \partial_{t_0} + \partial_{t_1}$ získáme

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} &= 0, \\ \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} &= -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{c^2 \rho}{3} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\tau - \frac{1}{2} \right) \delta t \left(\frac{c^2}{3} \rho \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_i u_j u_k) \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.4.14)$$

Porovnáním rovnic (1.5.6) a přidružených vektorů konzervativních proměnných s rovnicemi (2.4.14) je mezi těmito rovnicemi patrná částečná analogie. Jestliže zvolíme hodnoty $\delta x, \delta t, \tau$ takovým způsobem, že velikost rychlosti $|\mathbf{u}| \leq \frac{c}{\sqrt{3}}$, lze zanedbat člen $-\frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_i u_j u_k)$. Člen $-\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{c^2 \rho}{3} \right)$ je roven $-\frac{\partial p}{\partial x_i}$ skrze rovnost $p = c_s^2 \rho = \frac{c^2}{3} \rho$ a kinematická viskozita pro nestlačitelnou kapalinu je rovna

$$\nu = \frac{(\tau - \frac{1}{2}) \delta t c^2}{3}. \quad (2.4.15)$$

Tímto je získán tvar NS rovnic pro nestlačitelnou vazkou kapalinu, který je speciálním případem nelineárního systému NS rovnic uvedených v odstavci 1.5

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} &= 0, \\ \frac{\partial(u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(u_i u_j)}{\partial x_j} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right). \end{aligned} \quad (2.4.16)$$

2.5 Kolizní operátor

Obtížnost řešení Boltzmannovy rovnice (1.8.7) je převážně dána složitostí kolizního operátoru, jež stanovil Boltzmann. Jak už bylo zmíněno tento operátor uvažuje všechny pravděpodobné možnosti kolize mezi dvěma molekulami, což jej činí obtížně řešitelným. Autoři Higuera a Jimenez [16] navrhli zjednodušený kolizní operátor založený na linearizaci v okolí hodnoty rovnovážné distribuční funkce f^{eq} za předpokladu malých rozdílů mezi distribučními funkcemi f a f^{eq} . Linearizovaný kolizní operátor má tvar

$$\Omega_j = K_{ji} (f_i^{eq} - f_i), \quad (2.5.1)$$

kde $i, j = 0, \dots, 8$ pro D2Q9 případ a K_{ji} je tzv. kolizní matice. Na základě tohoto lineari-zovaného kolizního operátoru byly jinými autory navrženy způsoby, jakými lze realizovat kolizi v lattice Boltzmannově metodě.

V následujících odstavcích jsou popsány často používané tvary kolizní matice K_{ji} . Poznámka: místo indexů α vyskytujících se v rovnici (2.3.20), jsou od tohoto okamžiku zavedeny indexy i a j .

2.5.1 SRT - single relaxation time

Nejjednodušším kolizním operátorem v LBM je tzv. BGK kolizní operátor, který navrhli Bhatnagar, Gross a Krook (BGK) [6]. V tomto případě má kolizní matice tvar $K_{ji} = (\delta t/\tau)\delta_{ij}$, kde δ_{ij} je Kroneckerova delta. Pro BGK nebo také SRT kolizní operátor v již diskretizovaném tvaru platí

$$\Omega_i = -\frac{\delta t}{\tau}(f_i - f_i^{eq}). \quad (2.5.2)$$

Tento operátor vyjadřuje odchylku distribuční funkce od jejího lokálního rovnovážného stavu, tedy časová konstanta τ vyjadřuje čas, za který se hodnota f rovná f^{eq} . Relaxace všech distribučních funkcí f_i závisí pouze na jediném zvoleném relaxačním čase. Podle Champmanova - Enskogova rozšíření, které je popsáno v předchozím odstavci existuje vztah mezi tímto relaxačním časem a kinematickou viskozitou

$$\nu = c_s^2 \delta t \left(\tau - \frac{1}{2} \right). \quad (2.5.3)$$

Z této rovnice plyne pro SRT kolizní operátor jisté omezení. Uvažujeme-li hodnotu $\delta t = 1$, pak pro relaxační čas blízký hodnotě $\tau = 1/2$ dochází k numerickým nestabilitám, tudíž simulace proudění pro vysoká Reynoldsova čísla selhávají. Tento nedostatek lze částečně odstranit použitím jiné kolizní matice popsané v následujícím odstavci.

2.5.2 MRT - multiple relaxation time

Alternativou k SRT koliznímu operátoru je „multiple relaxation time“ (MRT) kolizní operátor. Tato modifikace kolizní matice K_{ji} byla vyvinuta z důvodu nedostatku SRT modelu v podobě numerické nestability pro $\tau \rightarrow 1/2$. Základní myšlenkou MRT kolizního operátoru je uskutečnění procesu kolize v momentovém prostoru distribučních funkcí namísto ve fázovém prostoru. Tento přístup umožňuje flexibilnější volbu relaxačních časů pro jednotlivé distribuční funkce a tím dosažení větší stability pro vyšší Reynoldsova čísla v porovnání s SRT operátorem.

Je známo, že SRT operátor je speciálním případem MRT kolizního operátoru za předpokladu identické volby relaxačních časů pro všechny distribuční funkce. Tuto relaci lze využít k odvození MRT kolizního operátoru. Nejdříve napíšeme lattice Boltzmannovu rovnici s SRT kolizním operátorem ve vektorovém zápisu [20]

$$\mathbf{f}(\mathbf{r} + \mathbf{e}\delta t, t + \delta t) - \mathbf{f}(\mathbf{r}, t) = -\omega(\mathbf{f}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{f}^{eq}(\mathbf{r}, t)), \quad (2.5.4)$$

kde ω označuje relaxační čas (namísto $\delta t/\tau$). Proces kolize se nikterak nezmění vynásobíme-

li tuto rovnici jednotkovou maticí $\mathbf{I} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{M}$

$$\begin{aligned}
\mathbf{f}(\mathbf{r} + \mathbf{e}\delta t, t + \delta t) - \mathbf{f}(\mathbf{r}, t) &= -\mathbf{M}^{-1}\mathbf{M}\omega(\mathbf{f}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{f}^{eq}(\mathbf{r}, t)) \\
&= -\mathbf{M}^{-1}\omega(\mathbf{M}\mathbf{f}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{M}\mathbf{f}^{eq}(\mathbf{r}, t)) \\
&= -\mathbf{M}^{-1}\omega\mathbf{I}(\mathbf{m}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{m}^{eq}(\mathbf{r}, t)) \\
&= -\mathbf{M}^{-1}\mathbf{S}(\mathbf{m}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{m}^{eq}(\mathbf{r}, t)),
\end{aligned} \tag{2.5.5}$$

kde pro diagonální matici \mathbf{S} platí $\mathbf{S} = \omega\mathbf{I} = \text{diag}(\omega, \dots, \omega)$ a pro distribuční funkce $\mathbf{m} = \mathbf{M}\mathbf{f}$. Zaměříme se detailněji na část $\mathbf{S}(\mathbf{m}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{m}^{eq}(\mathbf{r}, t))$ v rovnici (2.5.5). Proces kolize je v této části ovlivněn pouze jediným relaxačním časem ω . Výsledek je poté vynásoben inverzní maticí \mathbf{M}^{-1} . Tento krok reprezentuje transformaci z prostoru momentů zpět do fázového prostoru. Jestliže je na diagonále matice \mathbf{S} pouze jediný relaxační čas, pak je MRT totožný s SRT. Jestliže se jednotlivé relaxační časy na diagonále liší, zavádí se označení relaxační matice

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & S_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & S_8 \end{pmatrix}, \tag{2.5.6}$$

kde jsou jednotlivé relaxační časy označeny S_i , kde $i = 0, \dots, 8$ pro D2Q9.

Nyní se zaměříme na momenty \mathbf{m} a jejich význam. Základní myšlenkou je správné přiřazení hydrodynamických veličin (ρ a $\rho\mathbf{u}$) k momentům \mathbf{m} a následné sestavení transformační matice \mathbf{M} . Například nultému momentu se přiřazuje hustota

$$m_0 = \rho = \sum_i f_i. \tag{2.5.7}$$

Platí-li z předchozího odstavce rovnost $m_0 = \sum_i \mathbf{M}_{0,i}f_i$, dokážeme určit první řádek transformační matice jako $\mathbf{M}_{0,i} = 1$, kde $i = 0, \dots, 8$.

Momentu m_1 se přiřazuje vektor hybnosti, který má v D2Q9 dvě složky. Pro složku ve směru x lze psát

$$m_1 = j_x = \rho u_x = \sum_i f_i e_{ix}. \tag{2.5.8}$$

Obdobný postup lze provést i pro druhý moment $m_2 = j_y$. Zbylé řádky transformační matice je podstatně náročnější určit. Častým postupem k určení zbylých řádků transformační matice je Gram - Schmidtův ortogonalizační proces. Tento postup však není v této práci detailněji popsán.

Výsledná kolizní matice pro MRT kolizní operátor má v indexovém zápisu tvar

$$K_{ji} = M_{jk}^{-1} S_{kl} M_{li}, \tag{2.5.9}$$

kde transformační matice je ve tvaru

$$M_{li} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.5.10)$$

Způsoby volby jednotlivých relaxačních parametrů S_0, \dots, S_8 diagonální matice S_{kl} se odlišují podle typu řešeného problému. Konkrétní hodnoty relaxačních časů jsou proto uvedeny v kapitolách 3 a 4.

Stejně jako v případě SRT kolizního operátoru, platí podle Chapmanova - Enskogova rozšíření vztahy mezi relaxačními časy a kinematickou a objemovou viskozitou. Pro kolizní matici MRT operátoru musí platit $S_7 = S_8 = \tau$ a $S_1 = \tau_e$, kde

$$\nu = c_s^2 \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \delta t, \quad (2.5.11)$$

$$\zeta = \frac{1}{2} c_s^2 \left(\tau_e - \frac{1}{2} \right) \delta t, \quad (2.5.12)$$

kde ζ je objemová viskozita. Hodnota zbylých relaxačních časů nemá významný vliv na přesnost nebo stabilitu numerické simulace, tudíž je libovolná.

2.6 Počáteční a okrajové podmínky

Počáteční a okrajové podmínky jsou důležitou součástí numerické simulace a jejich implementace se liší v závislosti na použité metodě. Jejich správná implementace je důležitá pro stabilní a co nejvíce přesnou numerickou simulaci. V tomto odstavci je nejprve uvedeno jakým způsobem realizovat počáteční podmínky pro efektivní inicializaci algoritmu LBM a následně jsou popsány pouze základní okrajové podmínky, které se v LBM používají. Kritériem okrajových podmínek je především správná simulace proudění v místech interakce tekutiny s pevnou stěnou nebo v místech, kde tekutina např. vstupuje do výpočtové oblasti. Některé typy numerických simulací jako například modelování proudění s volnou hladinou nebo proudění v mikrokanálu vyžadují speciální okrajové podmínky. Způsob jejich realizace je popsán v odstavcích zahrnujících zmíněné numerické simulace.

2.6.1 Počáteční podmínky

Pro inicializaci LBM je nutné stanovit počáteční podmínky hydrodynamických veličin. V některých případech může vlivem volby počátečních podmínek docházet k numerickým oscilacím, které naruší stabilitu celé numerické simulace. K eliminaci toho nežádoucího jevu je vhodné volit hodnoty počátečních podmínek co nejbližší hodnotám získaných následnou numerickou simulací.

Pro názornost uvažujme numerickou simulaci proudění ve 2D vodorovném kanálu s předepsanou hodnotou tlaku na vstupu a výstupu. Uvnitř kanálu lze očekávat lineární

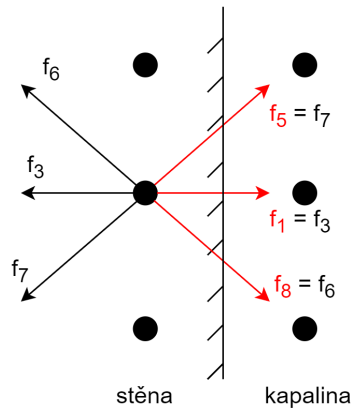
rozložení tlakového pole. Podle stejného trendu zvolíme tlakové pole v počátečním čase, tudíž můžeme psát

$$f_i(\mathbf{r}, t = 0) = f_i^{eq}(\rho_0(\mathbf{r}), u_0), \quad (2.6.1)$$

kde $\rho_0(\mathbf{r})$ je pole hodnot lineárního průběhu tlaku a u_0 je rovno nule. Nelze-li takto predikovat počáteční podmínky, lze formálně zvolit hodnoty rychlostního pole $\mathbf{u}_0(\mathbf{r}) = 0$ a tlakového pole $\rho_0(\mathbf{r}) = 1$.

2.6.2 Okrajové podmínky typu bounceback

Tato okrajová podmínka zajišťuje interakci simulované tekutiny s pevným nepropustným povrchem. Principem této okrajové podmínky je odrazení příchozích distribučních funkcí od pevné stěny do opačného směru, což má za důsledek nahrazení chybějících distribučních funkcí v místě okrajové podmínky viz obr. 6.



Obr. 6: Okrajová podmínka typu bounceback pro neznámé červeně označené distribuční funkce

Způsob této implementace je nazýván bounceback. Jeho matematická formulace, například pro distribuční funkci f_8 , spočívá v rovnosti

$$f_8 - f_8^{eq} = f_6 - f_6^{eq}, \quad (2.6.2)$$

kde rovnovážné distribuční funkce lze rozepsat podle rovnice (2.3.16)

$$f_8 - \frac{1}{36}\rho \left(1 + \frac{3(e_8\mathbf{u})}{c^2} + \frac{9(e_8\mathbf{u})^2}{2c^4} - \frac{3\mathbf{u}^2}{2c^2} \right) = f_6 - \frac{1}{36}\rho \left(1 + \frac{3(e_6\mathbf{u})}{c^2} + \frac{9(e_6\mathbf{u})^2}{2c^4} - \frac{3\mathbf{u}^2}{2c^2} \right). \quad (2.6.3)$$

Je-li proudění vazké, lze uvažovat nulovou rychlost $\mathbf{u} = 0$ tekutiny v blízkosti pevné stěny. Rovnice 2.6.3 se zjednoduší

$$f_8 = f_6. \quad (2.6.4)$$

Analogický postup lze provést pro zbylé distribuční funkce f_1, f_5 .

2.6.3 Okrajové podmínky periodicity

Mezi nejjednodušší okrajové podmínky pro oblast vstupu nebo výstupu výpočtové oblasti patří periodická okrajová podmínka. Tato okrajová podmínka simuluje proudění tekutiny

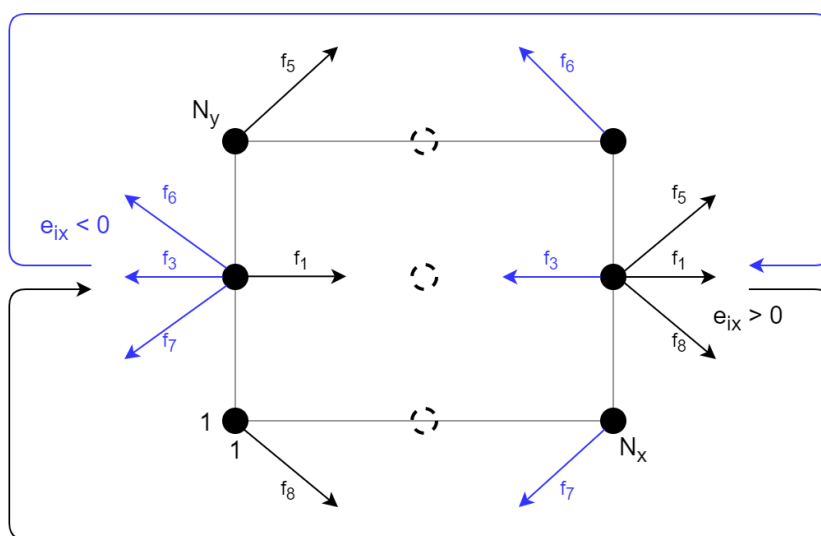
v nekonečně dlouhé výpočtové oblasti (např. v nekonečně dlouhém kanálu). Princip této podmínky je zajištěn distribučními funkcemi opouštějícími výpočtovou oblast, které jsou zároveň distribučními funkcemi vstupujícími do výpočtové oblasti.

Uvažujme výpočtovou síť tvořenou N_x uzly v horizontálním směru a N_y uzly ve vertikálním směru viz obr. 7. Periodické okrajové podmínky jsou situovány v místech $[y; 1]$ (vstup) a $[y; N_x]$ (výstup), kde $y \in (1; N_y)$. Pak pro distribuční funkce v těchto místech platí

$$f_i((y + e_{iy}, 1), t + \delta t) = f_i((y, N_x), t), \quad e_{ix} > 0 \quad (2.6.5)$$

$$f_i((y + e_{iy}, N_x), t + \delta t) = f_i((y, 1), t), \quad e_{ix} < 0 \quad (2.6.6)$$

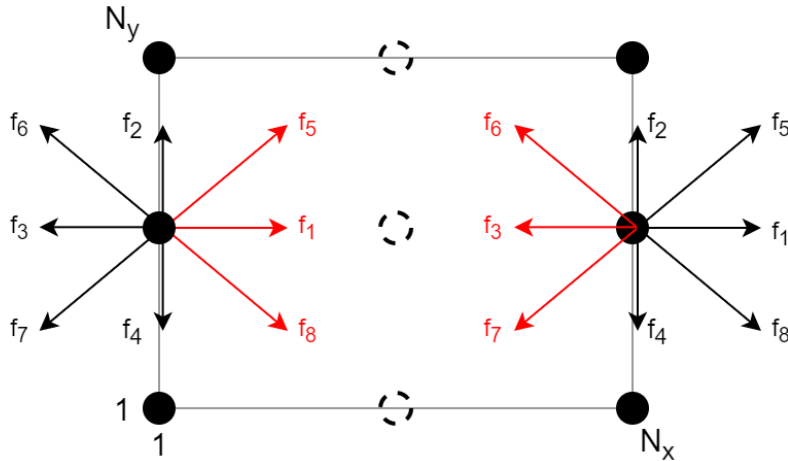
kde e_{ix}, e_{iy} jsou složky i -tého rychlostního směru.



Obr. 7: Okrajové podmínky periodicity

2.6.4 Okrajové podmínky typu tlak nebo rychlost

V CFD numerických simulacích se často používají rychlostní nebo tlakové okrajové podmínky z důvodu snadného měření těchto veličin na skutečném fyzikálním problému. Autoři Zou a He [35] publikovali způsob jejich odvození v závislosti na tom, jaká veličina je v oblasti zmíněných okrajových podmínek známa. V tomto odstavci je popsán způsob jakým lze tyto okrajové podmínky odvodit.



Obr. 8: Červeně - neznámé distribuční funkce, černě - známé distribuční funkce

Zaměříme se na výstup oblasti tzn. místo, kde proudící tekutina opouští výpočtovou oblast. Jedna z neznámých distribučních funkcí je f_3 , kterou lze odvodit obdobným způsobem, jako v případě okrajové podmínky typu bounceback. Lze tedy psát

$$f_3 - f_3^{eq} = f_1 - f_1^{eq}. \quad (2.6.7)$$

Pro rovnovážné funkce f_3^{eq}, f_1^{eq} platí rovnice (2.3.16)

$$f_3 - \frac{1}{9}\rho \left(1 + 3\frac{(\mathbf{e}_3 \mathbf{u})}{c^2} + \frac{9}{2}\frac{(\mathbf{e}_3 \mathbf{u})^2}{c^4} - \frac{3}{2}\frac{\mathbf{u}^2}{c^2} \right) = f_1 - \frac{1}{9}\rho \left(1 + 3\frac{(\mathbf{e}_1 \mathbf{u})}{c^2} + \frac{9}{2}\frac{(\mathbf{e}_1 \mathbf{u})^2}{c^4} - \frac{3}{2}\frac{\mathbf{u}^2}{c^2} \right). \quad (2.6.8)$$

Dále rozepíšeme rychlostní směry a vektory rychlostí

$$\begin{aligned} f_3 - \frac{1}{9}\rho \left(3\frac{\overbrace{(-1,0)(u_x, u_y)}^{-u_x}}{c^2} + \frac{9}{2}\frac{[\overbrace{(-1,0)(u_x, u_y)}^{-u_x}]^2}{c^4} \right) = \\ = f_1 - \frac{1}{9}\rho \left(3\frac{\overbrace{(1,0)(u_x, u_y)}^{u_x}}{c^2} + \frac{9}{2}\frac{[\overbrace{(1,0)(u_x, u_y)}^{u_x}]^2}{c^4} \right), \end{aligned} \quad (2.6.9)$$

kde se odečte člen $\frac{9}{2}\frac{u_x^2}{c^4}$. Tím se rovnice zjednoduší na

$$f_3 + \frac{1}{3}\frac{\rho u_x}{c^2} = f_1 - \frac{1}{3}\frac{\rho u_x}{c^2}, \quad (2.6.10)$$

ze které vyjádříme hledanou funkci

$$f_3 = f_1 - \frac{2\rho u_x}{3c^2}. \quad (2.6.11)$$

Nyní vyjádříme distribuční funkce f_7 a f_6 . Tyto distribuční funkce se odvozují odlišným způsobem než f_3 . K odvození použijeme vztah pro makroskopickou rychlost

$$\sum_{i=0}^8 f_i \mathbf{e}_i = \rho \mathbf{u} \Rightarrow f_0 \mathbf{e}_0 + f_1 \mathbf{e}_1 + f_2 \mathbf{e}_2 + f_3 \mathbf{e}_3 + f_4 \mathbf{e}_4 + f_5 \mathbf{e}_5 + f_6 \mathbf{e}_6 + f_7 \mathbf{e}_7 + f_8 \mathbf{e}_8 = \frac{\rho \mathbf{u}}{c}. \quad (2.6.12)$$

Tuto rovnici lze rozepsat do složek x a y . Nejprve však uvažujme ustálené laminární proudění jehož rychlost ve složce y je nulová. Pak lze rovnici (2.6.12) rozepsat

$$f_0 e_{0x} + f_1 e_{1x} + f_2 e_{2x} + f_3 e_{3x} + f_4 e_{4x} + f_5 e_{5x} + f_6 e_{6x} + f_7 e_{7x} + f_8 e_{8x} = \frac{\rho u_x}{c}. \quad (2.6.13)$$

Tato rovnost lze ještě zjednodušit dosazením za složky směrových vektorů následujícím způsobem

$$f_0 \overbrace{e_{0x}}^0 + f_1 \overbrace{e_{1x}}^1 + f_2 \overbrace{e_{2x}}^0 + f_3 \overbrace{e_{3x}}^{-1} + f_4 \overbrace{e_{4x}}^0 + f_5 \overbrace{e_{5x}}^1 + f_6 \overbrace{e_{6x}}^{-1} + f_7 \overbrace{e_{7x}}^{-1} + f_8 \overbrace{e_{8x}}^1 = \frac{\rho u_x}{c}. \quad (2.6.14)$$

Z rovnice tedy zůstanou jen některé členy

$$f_1 - f_3 + f_5 - f_6 - f_7 + f_8 = \frac{\rho u_x}{c}. \quad (2.6.15)$$

Účelně přesuneme hledané distribuční funkce f_7 a f_6 na levou stranu rovnice a získáme jednu z klíčových rovnic pro jejich odvození

$$f_6 + f_7 = f_1 + f_5 + f_8 - f_3 - \frac{\rho u_x}{c}. \quad (2.6.16)$$

Distribuční funkce f_3 je již známa, a proto ji lze použít k další úpravě

$$f_6 + f_7 = f_1 + f_5 + f_8 - f_1 + \frac{2\rho u_x}{3c^2} - \frac{\rho u_x}{c}, \quad (2.6.17)$$

která se ještě zjednoduší na

$$f_6 + f_7 = f_5 + f_8 + \frac{2\rho u_x}{3c^2} - \frac{\rho u_x}{c}. \quad (2.6.18)$$

Získali jsme jednu rovnici pro dvě neznámé distribuční funkce f_6 a f_7 . Druhá rovnice také vychází z rovnice (2.6.12), ale ve smyslu složky y . Jestliže ji důkladně rozepíšeme a uvažujeme laminární proudění $u_y = 0$, rovnice se zjednoduší

$$\begin{aligned} f_0 \overbrace{e_{0y}}^0 + f_1 \overbrace{e_{y1}}^0 + f_2 \overbrace{e_{2y}}^1 + f_3 \overbrace{e_{3y}}^0 + f_4 \overbrace{e_{4y}}^{-1} + f_5 \overbrace{e_{5y}}^1 + f_6 \overbrace{e_{6y}}^1 + f_7 \overbrace{e_{7y}}^{-1} + f_8 \overbrace{e_{8y}}^{-1} &= \frac{\rho \overbrace{u_y}^0}{c}, \\ \Rightarrow f_6 + f_2 + f_5 &= f_7 + f_4 + f_8. \end{aligned} \quad (2.6.19)$$

V této rovnici se vyskytují hledané distribuční funkce, a proto jednu z nich vyjádříme

$$f_6 = f_7 + f_4 + f_8 - f_2 - f_5, \quad (2.6.20)$$

dosadíme do rovnice (2.6.18)

$$f_7 + f_4 + f_8 - f_2 - f_5 + f_7 = f_5 + f_8 + \frac{2\rho u_x}{3c^2} - \frac{\rho u_x}{c}, \quad (2.6.21)$$

a následnými algebraickými úpravami získáme vztah pro hledanou distribuční funkci f_7

$$f_7 = f_5 + \frac{(f_2 - f_4)}{2} + \frac{\rho u_x}{3c^2} - \frac{\rho u_x}{2c}. \quad (2.6.22)$$

Ze znalosti distribuční funkce f_7 již není obtížné odvodit vztah pro poslední hledanou distribuční funkci f_6 dosazením (2.6.22) do vztahu (2.6.18)

$$f_6 + f_5 + \frac{(f_2 - f_4)}{2} + \frac{\rho u_x}{3c^2} - \frac{\rho u_x}{2c} = f_5 + f_8 + \frac{2\rho u_x}{3c^2} - \frac{\rho u_x}{c}, \quad (2.6.23)$$

a následnými algebraickými úpravami ji vyjádřit

$$f_6 = f_8 - \frac{(f_2 - f_4)}{2} - \frac{\rho u_x}{3c^2}. \quad (2.6.24)$$

Tímto jsou určeny hledané distribuční funkce f_3 , f_7 a f_6 . Avšak v odvozených rovnicích pro tyto funkce figurují neznámé veličiny ρ a u_x , které jsou vzájemně závislé.

Uvažujme předepsanou hodnotu tlaku a tím skrze rovnici (1.6.7) hustotu ρ . Pro hustotu podle rovnice (2.3.17) platí

$$f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8 = \rho. \quad (2.6.25)$$

Dále využijme již odvozenou rovnici (2.6.15)

$$f_1 - f_3 + f_5 - f_6 - f_7 + f_8 = \frac{\rho u_x}{c}. \quad (2.6.26)$$

Sečtením těchto rovnic získáme

$$2f_1 + f_2 + f_4 + 2f_5 + 2f_8 + f_0 = \rho \left(1 + \frac{u_x}{c}\right), \quad (2.6.27)$$

a následnými algebraickými úpravami rovnicí

$$f_2 + f_4 + f_0 + 2(f_1 + f_5 + f_8) = \rho \left(1 + \frac{u_x}{c}\right), \quad (2.6.28)$$

z níž lze vyjádřit neznámou rychlost pro předepsanou hodnotu tlaku resp. hustoty jako

$$u_x = -c + c \frac{(f_2 + f_4 + f_0 + 2(f_1 + f_5 + f_8))}{\rho}. \quad (2.6.29)$$

Jestliže je v oblasti této okrajové podmínky předepsána hodnota rychlosti je uvedený postup totožný, avšak z rovnice (2.6.28) je vyjádřena neznámá hustota

$$\rho = \frac{f_2 + f_4 + f_0 + 2(f_1 + f_5 + f_8)}{1 + \frac{u_x}{c}}. \quad (2.6.30)$$

2.7 Podobnostní modelování

Lattice Boltzmannovu metodu lze efektivně aplikovat na reálné problémy, avšak musí být přesně definovány relace mezi jednotkami reálného a numerického problému. Jelikož simulace nějakého reálného problému ve fyzikálních jednotkách může vyžadovat obrovské množství výpočetní paměti, zavádí se pro lattice Boltzmannovu metodu vlastní jednotky. Toto vyžaduje transformaci veličin fyzikálního prostoru do LBM prostoru.

Lattice Boltzmannova metoda vyžaduje nejen správnou transformaci veličin, ale také volbu parametrů pro dostatečně přesnou a stabilní numerickou simulaci.

V tomto odstavci je popsán jeden z mnoha způsobů, jakým lze transformovat veličiny z fyzikálního do LBM prostoru. Definujeme tzv. konverzní faktor C_Q , který si lze představit jako konstantní převod obecné veličiny Q mezi fyzikálním a LBM prostorem. Pro převod obecné veličiny Q platí [19]

$$\underbrace{Q_R}_{\text{fyzikální veličina}} = \underbrace{Q}_{\text{LBM veličina}} \cdot \underbrace{C_Q}_{\text{konverzní faktor}}, \quad (2.7.1)$$

kde veličina s indexem R označuje veličinu ve fyzikálním prostoru a bez indexu veličinu v LBM prostoru. K určení konverzních faktorů se využívá znalosti změřených nebo předepsaných fyzikálních veličin modelovaného problému, ale i volby některých veličin. Předpokládáme znalost charakteristického rozměru modelovaného problému H_R . Výpočtová oblast modelovaného problému je diskretizována výpočtovou mříží a počet uzlů podél charakteristického rozměru (např. výšky kanálu) je roven charakteristickému rozměru H . Pro rozměr platí vztah

$$H_R = H C_H \Rightarrow C_H = \frac{H_R}{H}, \quad (2.7.2)$$

kde C_H je hledaný konverzní faktor. Nadále předpokládáme znalost hustoty tekutiny ρ_R ve fyzikálních jednotkách, přičemž hustotu v lattice Boltzmannových jednotkách ρ zvolíme rovno jedné. Pro konverzní faktor hustoty platí

$$\rho_R = 1 \cdot C_\rho \Rightarrow C_\rho = \rho_R. \quad (2.7.3)$$

V rovnicích předchozích odstavců často figuruje konstanta $c = \frac{\delta x}{\delta t}$, kterou lze vhodnou volbou δx a δt odstranit. Zvolíme-li délkový krok $\delta x = 1$ a časový krok $\delta t = 1$ rovnice se výrazně zjednoduší. Pro příslušné konverzní faktory pak ale platí

$$\delta x_R = \overbrace{\delta x}^1 C_H \Rightarrow \delta x_R = C_H, \quad (2.7.4)$$

$$\delta t_R = \overbrace{\delta t}^1 C_t \Rightarrow \delta t_R = C_t, \quad (2.7.5)$$

kde konverzní faktor pro rozměr C_H je známý, ale konverzní faktor pro čas C_t není. K jeho určení je potřeba určit konverzní faktor kinematické viskozity. Efektivním způsobem jak tento konverzní faktor určit je využití podobnosti Reynoldsova čísla, jehož hodnota je stejná jak ve fyzikálních jednotkách, tak i v lattice Boltzmannových jednotkách. Pro Reynoldsovo číslo platí

$$(Re)_R = Re \Rightarrow \frac{u_R H_R}{\nu_R} = \frac{u H}{\nu}. \quad (2.7.6)$$

Tento vztah algebraicky upravíme, aby sobě odpovídající veličiny byly ve zlomku vždy nad sebou

$$\frac{\overbrace{\nu_R}^{C_\nu}}{\nu} = \frac{\overbrace{u_R}^{C_u}}{u} \frac{\overbrace{H_R}^{C_H}}{H} \Rightarrow C_\nu = C_u C_H, \quad (2.7.7)$$

kde C_ν je hledaný konverzní faktor pro kinematickou viskozitu. V následujícím kroku, k určení konverzního faktoru C_t , použijme rovnici (2.5.3), kde δt je rovno jedné a $c_s^2 = c^2/3 = 1/3$ čili

$$\nu = \left(\frac{2\tau - 1}{6} \right). \quad (2.7.8)$$

Pro transformaci kinematické viskozity platí

$$\nu_R = \nu C_\nu = \left(\frac{2\tau - 1}{6}\right) C_u C_H, \quad (2.7.9)$$

kde C_u je konverzní faktor pro rychlost. V rovnicích (2.7.4) a (2.7.5) byly odvozeny hodnoty konverzních faktorů pro délkový a časový krok. Pomocí těchto konverzních faktorů lze definovat konverzní faktor pro rychlost jako

$$C_u = \frac{C_H}{C_t}, \quad (2.7.10)$$

který je použit v rovnici (2.7.9). Tato rovnice má poté tvar

$$\nu_R = \left(\frac{2\tau - 1}{6}\right) \frac{C_H^2}{C_t}, \quad (2.7.11)$$

ze které lze vyjádřit hledaný konverzní faktor pro čas

$$C_t = \frac{2\tau - 1}{6} \frac{C_H^2}{\nu_R}, \quad (2.7.12)$$

kde τ je zvolený relaxační čas z intervalu $(0.5; 2)$. Tímto způsobem jsou definovány základní konverzní faktory. V některých případech je potřeba zvolit jiný postup určení konverzních faktorů například v případě působení gravitační síly na tekutinu. Pro úplný přehled výše popsaného postupu jsou konverzní faktory veličin znázorněny v tabulce 1.

veličina	transformace veličiny	konverzní faktor
charakteristický rozměr H	$H_R = H C_H$	$C_H = \frac{H_R}{H}$
hustota ρ	$\rho_R = \rho C_\rho$	$C_\rho = \rho_R$
délkový krok δx	$\delta x_R = C_H$	$\delta x_R = C_H = \frac{H_R}{H}$
časový krok δt	$\delta t_R = C_t$	$C_t = \frac{2\tau - 1}{6} \frac{C_H^2}{\nu_R}$
rychlost u	$u_R = u C_u$	$C_u = \frac{C_H}{C_t}$
kinematická viskozita ν	$\nu_R = \nu C_\nu$	$C_\nu = C_u C_H$

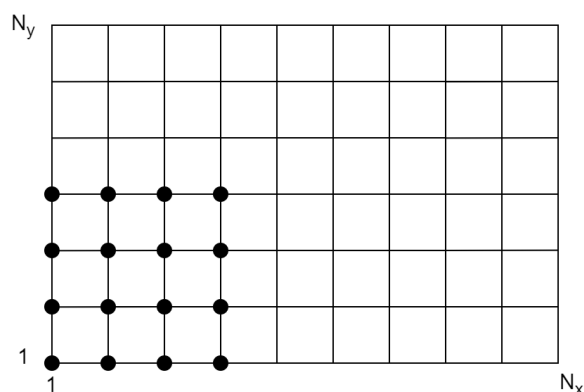
Tab. 1: Transformace veličin a hodnoty konverzních faktorů

2.8 Algoritmus LBM

V tomto odstavci je popsán algoritmus lattice Boltzmannovy metody k dosažení stabilní numerické simulace. Jednotlivé kroky algoritmu jsou očíslovány a seřazeny v takovém pořadí v jakém by měly být implementovány ve výpočtovém prostředí. Nejprve je popsána inicializace algoritmu. Následuje časový cyklus skládající se z posloupnosti kroků nezbytných k numerické simulaci tekutiny v čase. Na závěr je uveden způsob zpracování výstupních dat.

Inicializace algoritmu

Uvažujme 2D výpočetní oblast, ve které proudí tekutina. Uvažovaná oblast je diskretizována výpočtovou sítí o N_x a N_y uzlech viz obr. 9.



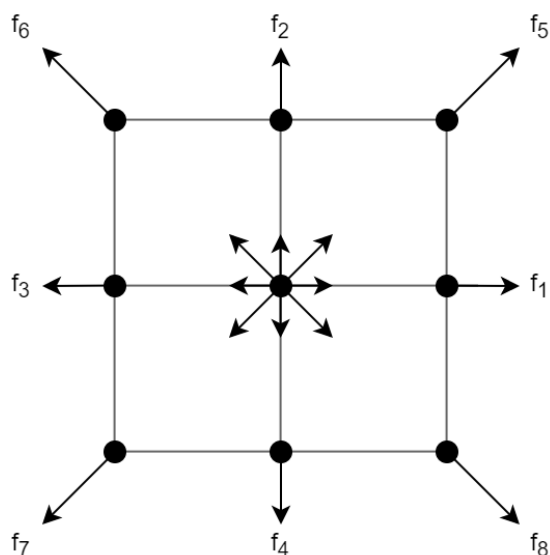
Obr. 9: Výpočtová síť

V každém uzlu jsou definovány počáteční hodnoty hustoty a rychlosti, pomocí kterých jsou definovány rovnovážné distribuční funkce viz rovnice (2.6.1). Obvyklou volbou počátečních makroskopických veličin je $\rho_0(\mathbf{r}) = 1$ a $\mathbf{u}_0(\mathbf{r}) = 0$.

Časový cyklus

Hlavní částí LBM algoritmu je časový cyklus, který se skládá z posloupnosti jednotlivých bodů. Každému cyklu náleží délka časového kroku $\delta t = 1$. Body časového cyklu jsou uskutečněny v každém uzlu výpočtové sítě a jsou následující:

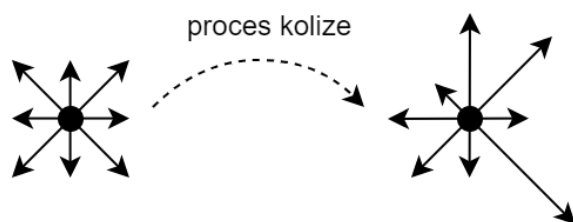
1. proces přenosu (levá strana rovnice (2.3.20))



Obr. 10: Distribuční funkce jsou ze středového uzlu přeneseny ve směru rychlostní směřů do sousedních uzlů.

2. implementace okrajových podmínek
3. vypočítání makroskopických veličin pomocí distribučních funkcí f_i viz rovnice (2.3.17) a (2.3.18)
4. vypočítání distribučních funkcí f_i^{eq} viz rovnice (2.3.16)

5. proces kolize (pravá strana rovnice (2.3.20))



Obr. 11: Hodnoty distribučních funkcí jsou změněny procesem kolize

6. inkrementace časového cyklu o δt a opakování cyklu z 1. bodu dokud není splněna zastavovací podmínka

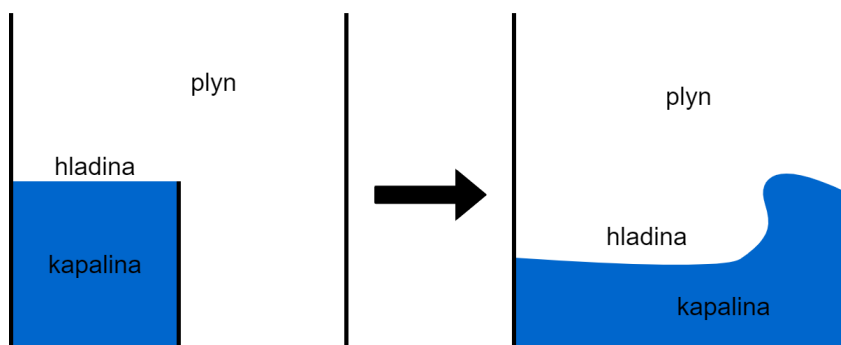
Zpracování výstupních dat

Je-li proveden dostatečný počet časových cyklů, uloží se makroskopické veličiny do paměti. Následně lze vizualizovat např. rychlostní profily proudového pole nebo průběh tlaku ve výpočtové oblasti.

3 Protržení hráze vodní nádrže

Numerická simulace proudění s volnou hladinou je obtížně řešitelným druhem proudění. Vývoj správné a efektivní metody pro numerickou simulaci tohoto druhu proudění je i přes stále zdokonalující se výpočetní zařízení výzvou. Na úvod tohoto odstavce uvedeme nejjednodušší případ proudění s volnou hladinou pro lepší porozumění později řešené problematice.

Uvažujme nádobu tvaru krychle v jejíž levé polovině je držena nestlačitelná vazká kapalina pevnou nepropustnou hrází. Z důvodu symetrie nádoby lze tento případ proudění zjednodušit na případ 2D proudění viz obr. 12.



Obr. 12: Nalevo kapalina držena hrází, napravo proudění kapaliny v prostoru nádoby po odstranění hráze

Po odstranění hráze se začne kapalina vlivem gravitačního zrychlení rozlévat do volného prostoru nádrže dokud nedojde k ustálení volné hladiny.

V numerických simulacích tohoto typu proudění je vnitřní oblast nádoby rozdělena na dvě tekutiny: plyn a kapalina, z nichž je obvykle simulována pouze jedna. Ve většině případů je numericky simulována pouze kapalina z důvodu větší hustoty. Předpokladem pro proudění plynu obklopujícího kapalinu je, že se přizpůsobí proudění simulované kapaliny.

Efektivními metodami pro numerickou simulaci tohoto typu proudění jsou metody sledující pohyb hladiny, která tvoří rozhraní mezi kapalinou a plynem. Mezi těmito metodami zmiňme například „Marker and Cell“ (MAC) metodu [13], jejíž princip je ve sledování nehmotných částic proudících ve výpočtové oblasti. Buňky výpočtové oblasti lze pak rozdělit na typy prázdných buněk, plných buněk a nebo buněk náležících hladině. Další populární metodou je tzv. „Level - set“ (LS) metoda [10], jejíž princip je v řešení rovnice

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \Phi = 0, \quad (3.0.1)$$

kde \mathbf{u} je rychlost kapaliny a Φ je výška vodního sloupce. Nevýhodou této metody, v případě simulování nestlačitelné kapaliny, je obtížné zachování nestlačitelnosti simulované kapaliny. Z důvodu eliminace tohoto nedostatku se LS metoda kombinuje s jinými metodami.

Jako poslední a pro tuto práci nejdůležitější metodu zmiňme „Volume of fluid“ (VOF) metodu [17], na jejímž principu je založen algoritmus LBM popsáný v této práci. VOF metoda je založena na řešení stejné rovnice jako LS metoda, avšak není explicitně řešena. V tomto případě je v každé buňce výpočtové oblasti uchovávána informace o tom, z jak

velké části je buňka zaplněna kapalinou. Tuto informaci definuje objemový podíl ϕ , jež může nabývat hodnot z intervalu $(0; 1)$. Jestliže je buňka zcela zaplněna, objemový podíl je roven 1 a typ buňky je označen jako plný. Jestliže je buňka zcela prázdná, objemový podíl je roven 0 a typ buňky je označen jako prázdný. Jestliže je objemový podíl roven číslu mezi 1 a 0, je buňka zaplněna jen částečně a typ buňky je označen jako hladina. Tento postup umožňuje snadné sledování změn v topologii jednotlivých typů buněk.

V následujících odstavcích je uveden zvolený model lattice Boltzmannovy metody pro případ proudění volné hladiny a formulován způsob implementace LBM - VOF algoritmu. V závěrečném odstavci je provedena analýza a diskuze dosažených numerických výsledků s dostupnými výsledky v literatuře.

3.1 Volba LBM modelu

V tomto odstavci je stručně popsán LBM model, který je zvolen pro numerickou simulaci proudění s volnou hladinou. Uvažujme diskretizovanou Boltzmannovu rovnici ve fázovém prostoru a čase s MRT kolizním operátorem ve tvaru

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{e}_i \delta t, t + \delta t) = f_i(\mathbf{r}, t) - (\mathbf{M}^{-1} \mathbf{S} \mathbf{M})(f_i(\mathbf{r}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{r}, t)) + \delta t F_i, \quad (3.1.1)$$

kde člen $\delta t F_i$ označuje i -tou složku diskretizované vnější síly. Podle autorů Zheng a Guo [12] má diskretizovaný člen pro vnější sílu v maticovém zápisu tvar

$$\mathbf{F} = \mathbf{M}^{-1} \left(\mathbf{I} - \frac{1}{2} \mathbf{S} \right) \mathbf{M} \mathbf{F}', \quad (3.1.2)$$

kde \mathbf{I} je jednotková matice a $\mathbf{F} = (F_0, F_1, \dots, F_8)^T$. Člen \mathbf{F}' je roven

$$F'_i = w_i \left(\frac{\mathbf{e}_i - \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{\mathbf{e}_i \mathbf{u}}{c_s^4} \mathbf{e}_i \right) \mathbf{f}, \quad (3.1.3)$$

kde $\mathbf{f} = (g_x, g_y)^T$ je vektor vnější síly resp. gravitačního zrychlení.

Rovnovážná distribuční funkce f_i^{eq} je rovna

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left(1 + \frac{3\mathbf{e}_i \mathbf{u}}{c^2} + \frac{9(\mathbf{e}_i \mathbf{u})^2}{2c^4} - \frac{3\mathbf{u}^2}{2c^2} \right), \quad (3.1.4)$$

kde $c = \delta x / \delta t$. Rovnice (3.1.1) je diskretizována pro případ D2Q9 modelu. Rychlostní směry jsou tedy rovny

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_i &= (0, 0), & \text{pro } i = 0, \\ \mathbf{e}_i &= c \left(\cos\left((i-1)\frac{\pi}{4}\right), \sin\left((i-1)\frac{\pi}{4}\right) \right), & \text{pro } i = 1, 2, 3, 4, \\ \mathbf{e}_i &= \sqrt{2}c \left(\cos\left((i-1)\frac{\pi}{4}\right), \sin\left((i-1)\frac{\pi}{4}\right) \right), & \text{pro } i = 5, 6, 7, 8, \end{aligned} \quad (3.1.5)$$

s příslušnými hodnotami vah

$$\begin{aligned} w_0 &= 4/9, \\ w_{1..4} &= 1/9, \\ w_{5..8} &= 1/36. \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

Makroskopické veličiny jako hustota a rychlost jsou definovány rovnicemi (2.3.17) a (2.3.18)

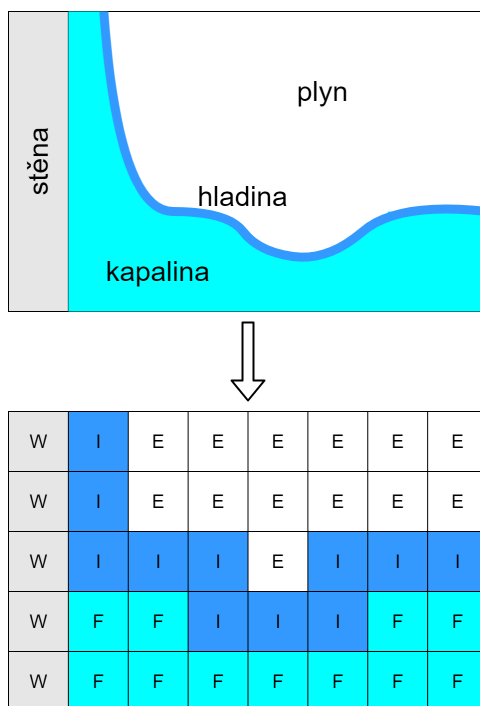
$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_i f_i(\mathbf{r}, t), \quad (3.1.7)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_i \mathbf{e}_i f_i(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2}\mathbf{f}\delta t. \quad (3.1.8)$$

3.2 Algoritmus LBM VOF

Pro numerickou simulaci proudění volné hladiny je použit algoritmus LBM uvedený v odstavci 2.8, který je modifikován pro potřeby VOF metody. Způsob, jakým je LBM algoritmus v této práci modifikován vychází z práce [30].

Ve fázi inicializace algoritmu je potřeba mimo pole hustot $\rho(\mathbf{r}, t)$ a rychlostí $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ definovat pole objemových podílů $\phi(\mathbf{r}, t)$. Toto pole rozděluje uzly výpočtové sítě na tři typy: uzly zcela zaplněné kapalinou s hodnotou $\phi(\mathbf{r}, t) = 1$, uzly částečně zaplněné kapalinou (hladina) s hodnotou $\phi(\mathbf{r}, t) = (0; 1)$ a prázdné uzly (plyn) s hodnotou $\phi(\mathbf{r}, t) = 0$. Pro jednoduchost označme zaplněné uzly jako buňky F, prázdné uzly buňky E a částečně zaplněné uzly buňky I. K těmto typům přidejme označení buněk W pro uzly náležící pevné nepropustné stěně. Poznamenejme, že při inicializaci algoritmu mají buňky s označením I hodnoty objemového podílu rovny jedné, i přestože jsou označeny jako částečně zaplněné.



Obr. 13: Rozdělení buněk podle objemového podílu

Je-li dokončena inicializace algoritmu, nastává časový cyklus. Numerický výpočet LBM VOF neprobíhá v buňkách s označením W a E, protože v nich není tekutina. Výpočet je prováděn pouze v zaplněných nebo částečně zaplněných buňkách. Zatímco zaplněné buňky vyžadují standardní kroky LBM algoritmu (kolize a přenos), částečně zaplněné buňky musí tvořit spojitou vrstvu, jejíž pohyb je sledován viz obr. 13.

Pohyb volné hladiny je sledován neustálým výpočtem objemového podílu v buňkách I a F. Nyní zaved'eme pole hmot $m(\mathbf{r}, t)$, které je ve fázi inicializace identické k poli hustoty. Objemový podíl lze poté psát jako

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \frac{m(\mathbf{r}, t)}{\rho(\mathbf{r}, t)}. \quad (3.2.1)$$

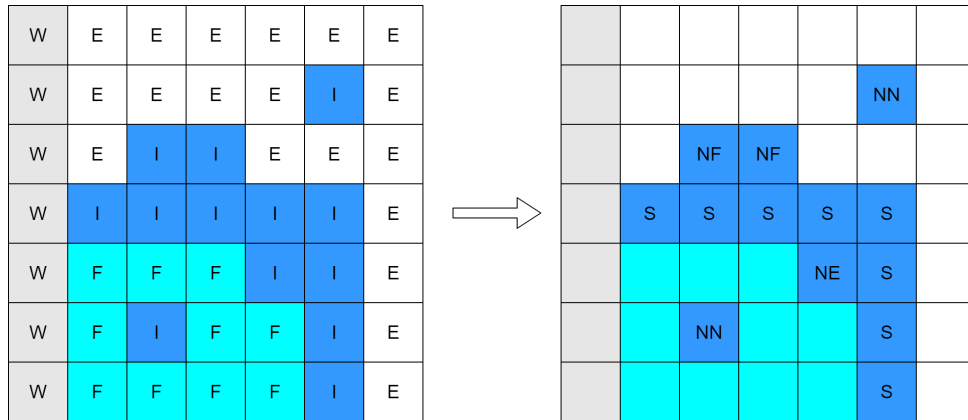
V každém časovém cyklu dochází mezi zaplněnými buňkami k vzájemné výměně hmoty, tudíž dochází i ke změně objemového podílu. Přírůstek nebo úbytek hmoty buňky v místě \mathbf{r} lze definovat pomocí vstupujících a vystupujících distribučních funkcí buňky. Například pro přenos hmoty mezi buňkami typu I a F platí

$$\Delta m_i(\mathbf{r}, t + \Delta t) = f_{\bar{i}}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_i \Delta t, t) - f_i(\mathbf{r}, t), \quad (3.2.2)$$

kde index \bar{i} označuje distribuční funkci vstupující do buňky v místě \mathbf{r} a čase t a index i distribuční funkci opouštějící buňku v místě \mathbf{r} a čase t . Pro přenos hmoty mezi buňkami typu I a I však mohou nastat výjimky. Během pohybu volné hladiny nastávají případy, kdy s buňkou typu I sousedí pouze buňky typu F, nebo buňky typu E. Takovéto buňky jsou považovány za chybné a je doporučeno jejich odstranění v pozdější fázi LBM VOF algoritmu. Jestliže buňky typu I nesousedí s alespoň jednou buňkou typu E nebo F, je potřeba modifikovat rovnici (3.2.2). Pro tyto speciální buňky je přenos hmoty vyjádřen jako

$$\Delta m_i(\mathbf{r}, t + \Delta t) = s_e \frac{\phi(\mathbf{r} + \mathbf{e}_i \Delta t, t) + \phi(\mathbf{r}, t)}{2}, \quad (3.2.3)$$

kde výraz ve zlomku je aritmetický průměr objemových podílů a s_e hodnota definovaná v závislosti na sousedících buňkách, mezi kterými je uskutečňován přenos hmoty. Pro lepší přehled jsou na obr. 14 znázorněny typy buněk v závislosti na sousedních buňkách a v tabulce 2 jsou uvedeny jim odpovídající hodnoty s_e .



Obr. 14: Rozdělení buněk typu I podle sousedních buněk. Standardní buňky jsou označeny písmeny S, buňky nesousedící s alespoň jednou buňkou typu F jsou označeny NF a buňky nesousedící s alespoň jednou buňkou typu E jsou označeny NE. Buňky s písmeny NN jsou považovány za chybné

Typ aktuální a sousední buňky	buňka typu S v místě \mathbf{r}_b	buňka typu NF v místě \mathbf{r}_b	buňka typu NG v místě \mathbf{r}_b
buňka typu S v místě \mathbf{r}	$f_{\bar{i}}(\mathbf{r}_b, t) - f_i(\mathbf{r}, t)$	$f_{\bar{i}}(\mathbf{r}_b, t)$	$-f_i(\mathbf{r}, t)$
buňka typu NF v místě \mathbf{r}	$-f_i(\mathbf{r}, t)$	$f_{\bar{i}}(\mathbf{r}_b, t) - f_i(\mathbf{r}, t)$	$-f_i(\mathbf{r}, t)$
buňka typu NG v místě \mathbf{r}	$f_{\bar{i}}(\mathbf{r}_b, t)$	$f_{\bar{i}}(\mathbf{r}_b, t)$	$f_{\bar{i}}(\mathbf{r}_b, t) - f_i(\mathbf{r}, t)$

Tab. 2: Hodnoty s_e závislé na typech buněk, mezi kterými se uskutečňuje přenos hmoty. Polohový vektor \mathbf{r} označuje polohu aktuální buňky a $\mathbf{r}_b = \mathbf{r} + \mathbf{e}_i \delta t$ polohu sousední buňky

Přenos hmoty se mezi buňkami typu F a F neuskutečňuje a jejich objemový podíl tak zůstává roven jedné. Jsou-li známy přírůstky nebo úbytky hmoty ze všech rychlostních směrů, lze aktualizovat hodnoty pole hmot jako

$$m(\mathbf{r}, t + \Delta t) = m(\mathbf{r}, t) + \sum_{i=0}^8 \Delta m_i(\mathbf{r}, t + \Delta t). \quad (3.2.4)$$

Nyní lze provést proces přenosu distribučních funkcí do sousedních buněk. Distribuční funkce přenesené z buněk typu F a I jsou známé, z buněk ty E a W jsou neznámé a je potřeba je určit z okrajových podmínek. Předpokládáme, že plyn obklopující kapalinu má stejnou hustotu jako je referenční hodnota hustoty kapaliny, tzn. $\rho_A = 1$. Pro neznámé distribuční funkce $f_{\bar{i}}$ buněk typu I v místě \mathbf{r} se sousedními buňkami typu E v místě $\mathbf{r} + \mathbf{e}_i \delta t$ platí

$$f_{\bar{i}}(\mathbf{r}, t + \delta t) = f_i^{eq}(\rho_A, \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)) + f_{\bar{i}}^{eq}(\rho_A, \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)) - f_i(\mathbf{r}, t). \quad (3.2.5)$$

Implementací rovnice (3.2.5) ve všech buňkách typu I sousedících s buňkami E, jsou známy všechny distribuční funkce. Doplňující krokem k této okrajové podmínce je vyrovnaní sil na vnitřní a vnější straně hladiny. Pro učinění tohoto kroku definujme vektor vnější normály ve tvaru centrální diference

$$\mathbf{n} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \phi(k-1, j) - \phi(k+1, j) \\ \phi(k, j-1) - \phi(k, j+1) \end{pmatrix}, \quad (3.2.6)$$

kde indexy k a j označují polohu buňky ve výpočetní síti, v níž je potřeba vyrovnat síly. Všechny distribuční funkce splňující nerovnost $\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_{\bar{i}} < 0$ je potřeba přepočítat podle rovnice (3.2.5). Okrajové podmínky na pevné stěně se také uskutečňují v této fázi algoritmu.

Nyní, když jsou známy všechny distribuční funkce lze uskutečnit proces kolize pro všechny zaplněné buňky a následně vypočítat makroskopické veličiny ρ a \mathbf{u} . Pomocí pole hustoty a hmoty lze určit, jaké buňky se vlivem procesů přenosu a kolize zaplnily nebo vyprázdnily. Zavedme proto pomocné pole obsahující informaci o všech buňkách typu I určených k zaplnění nebo vyprázdnění definované nerovnostmi

$$m(\mathbf{r}, t + \delta t) > (1 + \kappa)\rho(\mathbf{r}, t + \delta t), \quad (3.2.7)$$

$$m(\mathbf{r}, t + \delta t) < (0 - \kappa)\rho(\mathbf{r}, t + \delta t), \quad (3.2.8)$$

kde konstanta κ udává míru, kdy je buňka považována za zaplněnou nebo vyprázdněnou (obvykle $\kappa = 10^{-3}$). Jestliže je splněna první nerovnost, buňka se zaplnila. Jestliže je

splněna druhá nerovnost buňka je určena k vyprázdnění. Nyní lze podle nerovnic (3.2.7) a (3.2.8) přetypovat buňky typu I na F nebo I na E. Jestliže některá buňka změni svůj typ, musí se změnit i typy sousedních buněk z důvodu zachování celistvosti volné hladiny. Během procesu přetypování buněk musí také platit zákon zachování hmoty. Zatímco hodnoty $m(\mathbf{r}, t)$ prázdných a plných buněk jsou rovny nule a jedné, hodnoty zaplněných nebo vyprázdněných buněk mohou mít tyto hodnoty kladné nebo záporné. V obou případech je potřeba nadbytečnou hmotu přenést do sousedních buněk podle určitých pravidel.

Nejprve přetypujeme sousední buňky všech zaplněných buněk. Každá sousední prázdná buňka musí být přetypována z typu E na I. Pro tyto nové buňky je potřeba definovat rovnovážné distribuční funkce. K jejich určení lze extrapolovat makroskopické veličiny z okolních neprázdných buněk a aritmeticky je zprůměrovat. Rovnovážné distribuční funkce jsou pak stanoveny pomocí rovnice (2.3.16) jako $f_i^{eq}(\rho^{avg}, \mathbf{u}^{avg})$. Jestliže má buňka určená k zaplnění sousední buňku určenou k vyprázdnění, není tato buňka nadále označena jako buňka určená k vyprázdnění, ale je označena jako buňka typu I. Nyní je možné změnit typ zaplněných buněk z I na F.

Obdobně, jako v případě zaplněných buněk, lze přetypovat sousední buňky všech vyprázdněných buněk. Sousedící buňky typu F jsou změněny na I a jejich distribuční funkce jsou zachovány. Nyní je možné přeznačit vyprázdněné buňky z I na E.

Jak bylo uvedeno výše, je potřeba přenést nadbytečnou hmotu zaplněných a vyprázdněných buněk do sousedních buněk typu I. Nadbytečnou hmotu definujeme pro zaplněné buňky jako $m_{ex} = m - \rho$ a vyprázdněné buňky jako $m_{ex} = m$. Tato hmota je poté přesunuta do okolních buněk typu I podle platnosti

$$m(\mathbf{r} + \mathbf{e}_i \delta t) = m(\mathbf{r} + \mathbf{e}_i \delta t) + m_{ex} \frac{\mu_i}{\mu_{total}}, \quad (3.2.9)$$

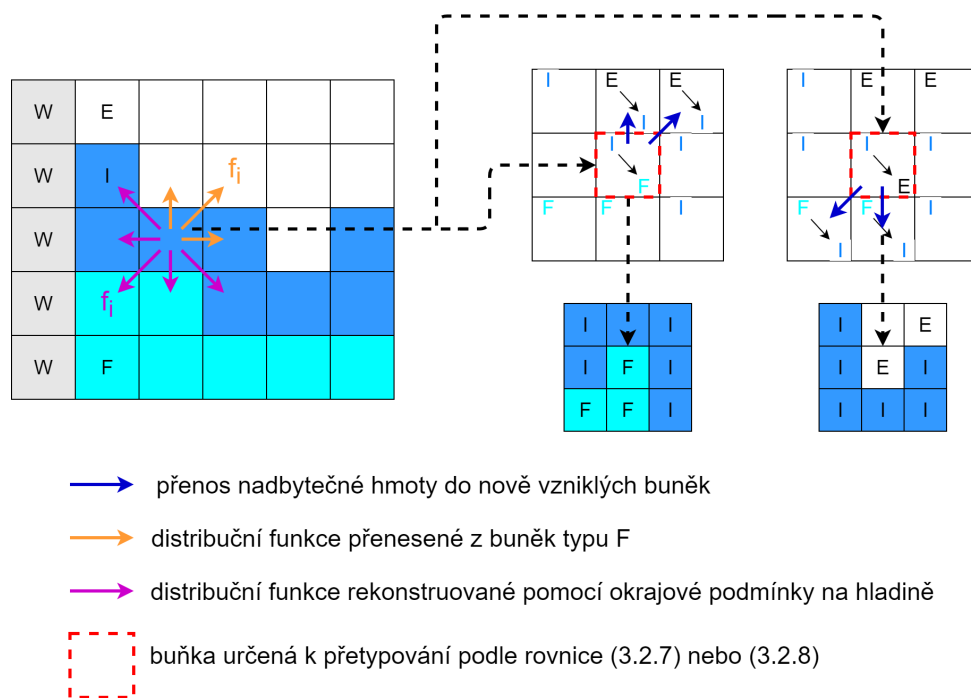
kde μ_{total} je součet všech vah μ_i , pro které platí

$$\mu_i = \begin{cases} \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_i & \text{jestliže } \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_i > 0 \\ 0 & \text{jinak,} \end{cases} \quad (3.2.10)$$

v případě zaplněných buněk a

$$\mu_i = \begin{cases} -\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_i & \text{jestliže } \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_i < 0 \\ 0 & \text{jinak,} \end{cases} \quad (3.2.11)$$

v případě vyprázdněných buněk. V důsledku přenosu hmoty se změnilly hodnoty pole hmot $m(\mathbf{r}, t)$ a tím i hodnoty objemových podílů podle rovnice (3.2.1).



Obr. 15: Proces přetypování buněk a následné rozdělení nadbytečné hmotnosti

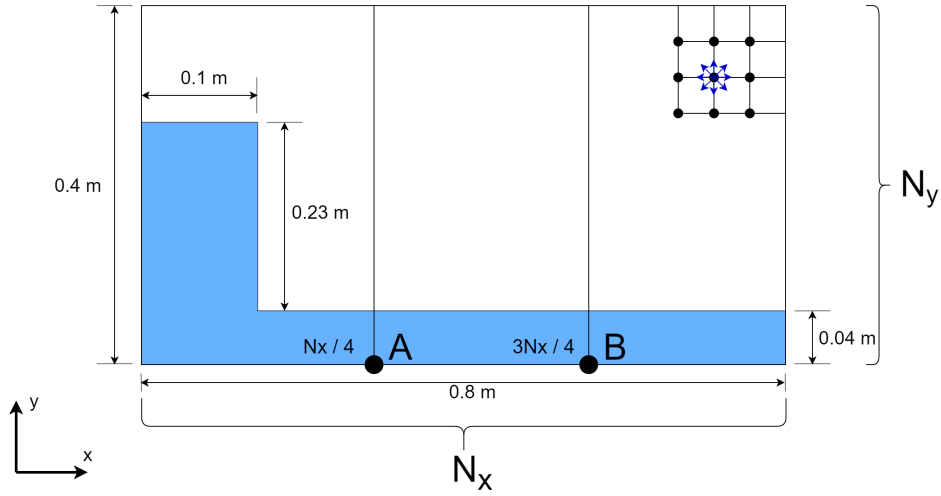
Takto implementovaný algoritmus je použitelný pro numerickou simulaci proudění s volnou hladinou. V průběhu simulace se však mohou vyskytnout numerické artefakty v podobě částečně zaplněných buněk, které se po dobu simulace nezaplňují ani nevyprázdňují (buňky s indexem NN na obr. 14). Tyto artefakty nijak neovlivňují přesnost a stabilitu algoritmu, ale z důvodu estetičnosti se odstraňují. K jejich odstranění lze použít jednoduchý algoritmus, který „donutí“ tyto artefakty k zaplnění nebo vyprázdnění. Jestliže hodnota hustoty v buňce se sousedními buňkami typu E klesne pod hodnotu 0.1ρ lze ji považovat za prázdnou buňku. Tentýž princip platí pro buňku se sousedními buňkami typu F jejíž hodnota hustoty je větší než 0.9ρ . Tuto buňku lze považovat za plnou.

Poté co jsou spočítány makroskopické veličiny se časový cyklus opakuje.

3.3 Numerické výsledky

V tomto odstavci jsou popsány numerické výsledky získané implementací algoritmu LBM VOF v případě numerické simulace proudění s volnou hladinou nestlačitelné kapaliny. Nejprve je popsán fyzikální problém náhlého protržení vodní hráze. Následuje obecné definování konverzních faktorů fyzikálních veličin, jejichž numerické hodnoty jsou následně uvedeny v tabulkách 3 a 4. V závěru tohoto odstavce jsou porovnány numerické výsledky získané vlastním programovým skriptem LBM VOF s numerickými a experimentálními výsledky uvedenými v literatuře [3].

Z volně dostupné literatury [3] je vybrán testovací případ 2D nádoby obdélníkového tvaru, v jejíž levé polovině je držena kapalina myšlenou nepropustnou hrází. Zbylé dno nádoby je pokryto tenkou vrstvou kapaliny. Schéma řešeného problému včetně fyzikálních rozměrů je naznačeno na obr. 16.



Obr. 16: Schématické naznačení řešeného problému náhlého protržení vodní hráze

Výpočtová oblast nádoby je diskretizována výpočetní sítí o počtu N_x uzlů ve směru x a N_y uzlů ve směru y . V této práci jsou provedeny dvě numerické simulace s odlišným počtem uzlů $(N_x, N_y) = (600, 300)$ a $(1000, 500)$. V bodech A a B situovaných v místech $N_x/4$ a $3N_x/4$ je měřena výška hladiny pro validaci dosažených numerických výsledků. Jako kapalina je obou případech zvolena voda s hustotou $\rho_R = 1000 \text{ kg/m}^3$ a kinematickou viskozitou $\nu_R = 1.10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$.

Konverzní faktory jednotlivých veličin jsou definovány stejným způsobem jako v odstavci 2.7 s rozdílem definování časového kroku a jeho konverzního faktoru. Jestliže na kapalinu působí gravitační zrychlení, pak platí

$$\mathbf{g}_R = \frac{C_H}{C_t^2} \mathbf{g}, \quad (3.3.1)$$

odkud pro konverzní faktor času platí

$$C_t = \sqrt{\frac{\mathbf{g} C_H}{\mathbf{g}_R}}, \quad (3.3.2)$$

kde $\mathbf{g} = (0, -g_y)^T$ je gravitační zrychlení v jednotkách LBM prostoru a $\mathbf{g}_R = (0, -9.81)^T \text{ m/s}^2$ je gravitační zrychlení ve fyzikálním prostoru. Hodnota gravitačního zrychlení ve směru y je obvykle volena $g_y < 10^{-4}$. Pro přehled jsou hodnoty jednotlivých fyzikálních veličin a konverzních faktorů uvedeny v následujících tabulkách.

veličina	fyzikální hodnota	hodnota v LB prostoru	konverzní faktor
charakteristický rozměr H	$H_R = 0.8 \text{ m}$	$H = Nx = 600$	$C_H = 0.0013$
hustota ρ	$\rho_R = 1000 \text{ kg/m}^3$	$\rho = 1$	$C_\rho = 1000$
délkový krok δx	$\delta x_R = C_H$	$\delta x = 1$	$\delta x_R = 0.0013$
časový krok δt	$\delta t_R = C_t$	$\delta t = 1$	$C_t = \sqrt{\frac{gC_H}{g_R}} = 5.6 \cdot 10^{-5}$, pro $g_y = 0.0007$
kinematická viskozita ν	$\nu_R = 1.10^{-5} \text{ m/s}^2$	$\nu = \frac{2\tau-1}{6} = 0.01$, pro $\tau = 0.53$	$C_\nu = \frac{C_H^2}{C_t} = 0.0056$

Tab. 3: Hodnoty veličin ve fyzikálním a LB prostoru a hodnoty konverzních faktorů v případě výpočetní sítě (600,300)

veličina	fyzikální hodnota	hodnota v LB prostoru	konverzní faktor
charakteristický rozměr H	$H_R = 0.8 \text{ m}$	$H = Nx = 1000$	$C_H = 0.0008$
hustota ρ	$\rho_R = 1000 \text{ kg/m}^3$	$\rho = 1$	$C_\rho = 1000$
délkový krok δx	$\delta x_R = C_H$	$\delta x = 1$	$\delta x_R = 0.0008$
časový krok δt	$\delta t_R = C_t$	$\delta t = 1$	$C_t = \sqrt{\frac{gC_H}{g_R}} = 4.427 \cdot 10^{-5}$, pro $g_y = 0.000024$
kinematická viskozita ν	$\nu_R = 1.10^{-5} \text{ m/s}^2$	$\nu = \frac{2\tau-1}{6} = 0.01$, pro $\tau = 0.53$	$C_\nu = \frac{C_H^2}{C_t} = 0.0145$

Tab. 4: Hodnoty veličin ve fyzikálním a LB prostoru a hodnoty konverzních faktorů v případě výpočetní sítě (1000,500)

Důležitým aspektem stabilní a efektivní numerické simulace je volba relaxačních parametrů v kolizní matici $\mathbf{S} = \text{diag}(S_0, S_1, S_2, S_3, S_4, S_5, S_6, S_7, S_8)^{-1}$. Při numerické simulaci proudění s volnou hladinou dochází k rychlé změně proudového pole vedoucí k numerickým nestabilitám, a proto autoři Lallemand a Luo [21] představili tvar kolizní matice, pro který byla dokázána vysoká stabilita. Kolizní matice má tvar

$$S = \text{diag}(1, 100/163, 50/57, 1, 25/48, 1, 25/48, \tau, \tau)^{-1}, \quad (3.3.3)$$

kde hodnota relaxačního času τ je volena v intervalu $(0.5; 2)$. Zde je nutno poznamenat, že hodnota τ by měla být volena takovým způsobem, aby byla splněna rovnice (2.7.9) a algoritmus byl stabilní. Z důvodu požadavku vyšší stability algoritmu je pro obě numerické simulace tato hodnota zvolena vyšší viz tabulka 3 a 4.

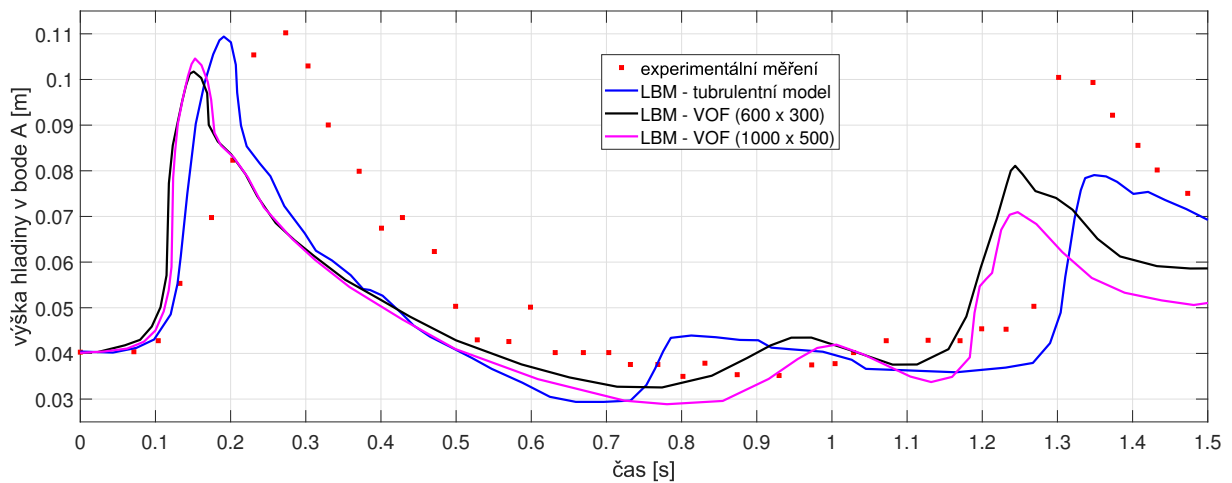
Diskuze numerických výsledky

Na obr. 17 a 18 je znázorněna časová závislost výšky volné hladiny v místě A a B. Numerické výsledky získané vlastním programovým skriptem LBM VOF jsou zvýrazněny fialovou a černou barvou. Numerické a experimentální výsledky publikované v literatuře [3] jsou znázorněny modrou a červenou barvou.

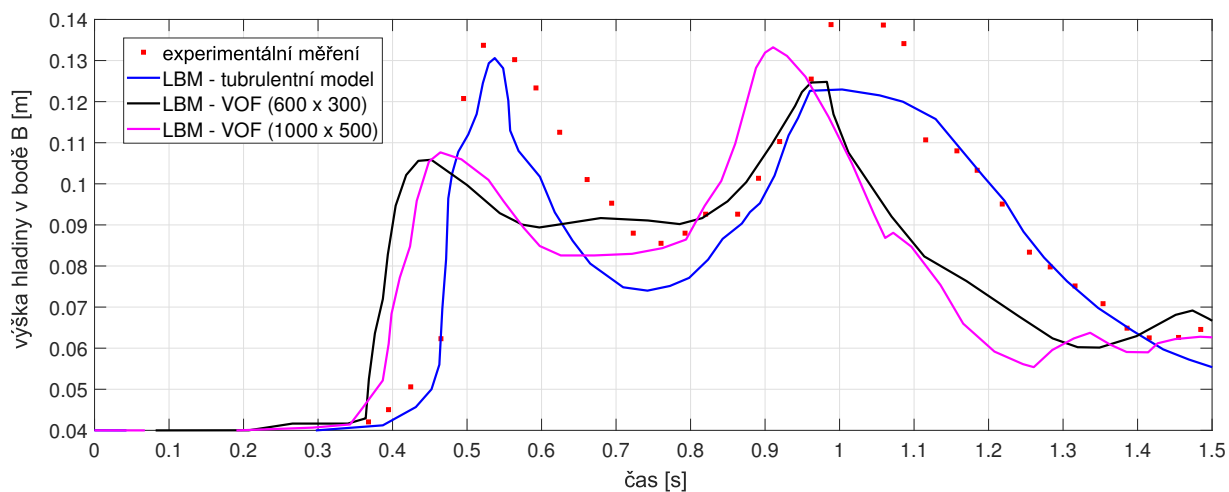
Z uvedených grafů jsou od určitého okamžiku (cca. 0.15 s) zřejmé neshody numerických výsledků s experimentálními daty. Hlavním důvodem těchto neshod je časový úsek v průběhu inicializace experimentu, po jehož dobu byla odstraňována vodní hráz. Experimentální data jsou od numerických výsledků zpožděna o cca. 0.1 s.

Přestože je v literatuře [3] použita modifikace lattice Boltzmannovy metody pro turbulentní proudění, je pomocí této modifikace dosaženo pouze relativně dobré shody s experimentálními daty. Porovnáním LBM VOF přístupu s turbulentním modelem je zřejmá lepší shoda turbulentního modelu s experimentálními daty v časových okamžicích, kdy výška volné hladiny dosahuje nejvyšších hodnot.

Porovnáním grafů získaných vlastním programovým skriptem LBM VOF pro řídnější a hustější výpočetní síť s numerickými a experimentálními výsledky dostupnými v literatuře je v bodech A a B patrná relativně dobrá shoda.



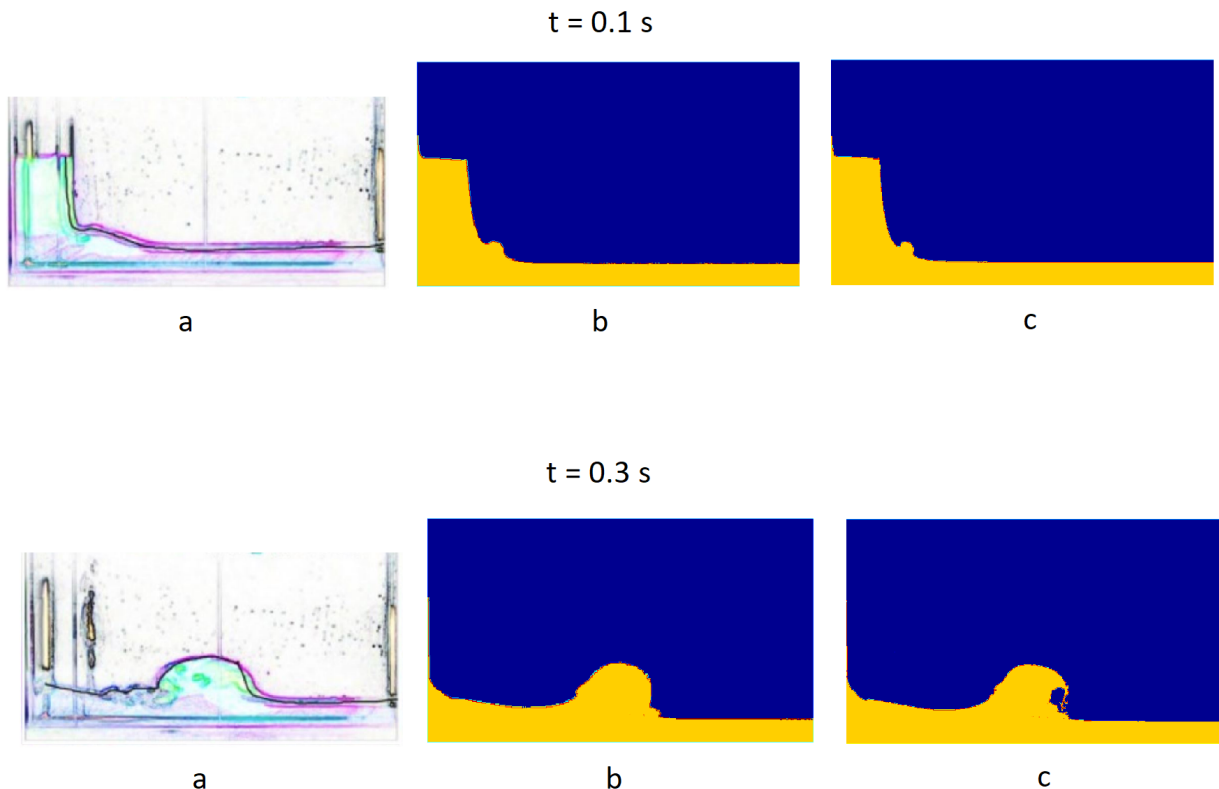
Obr. 17: Srovnání experimentálních a numerických hodnot výšky hladiny v bodě A

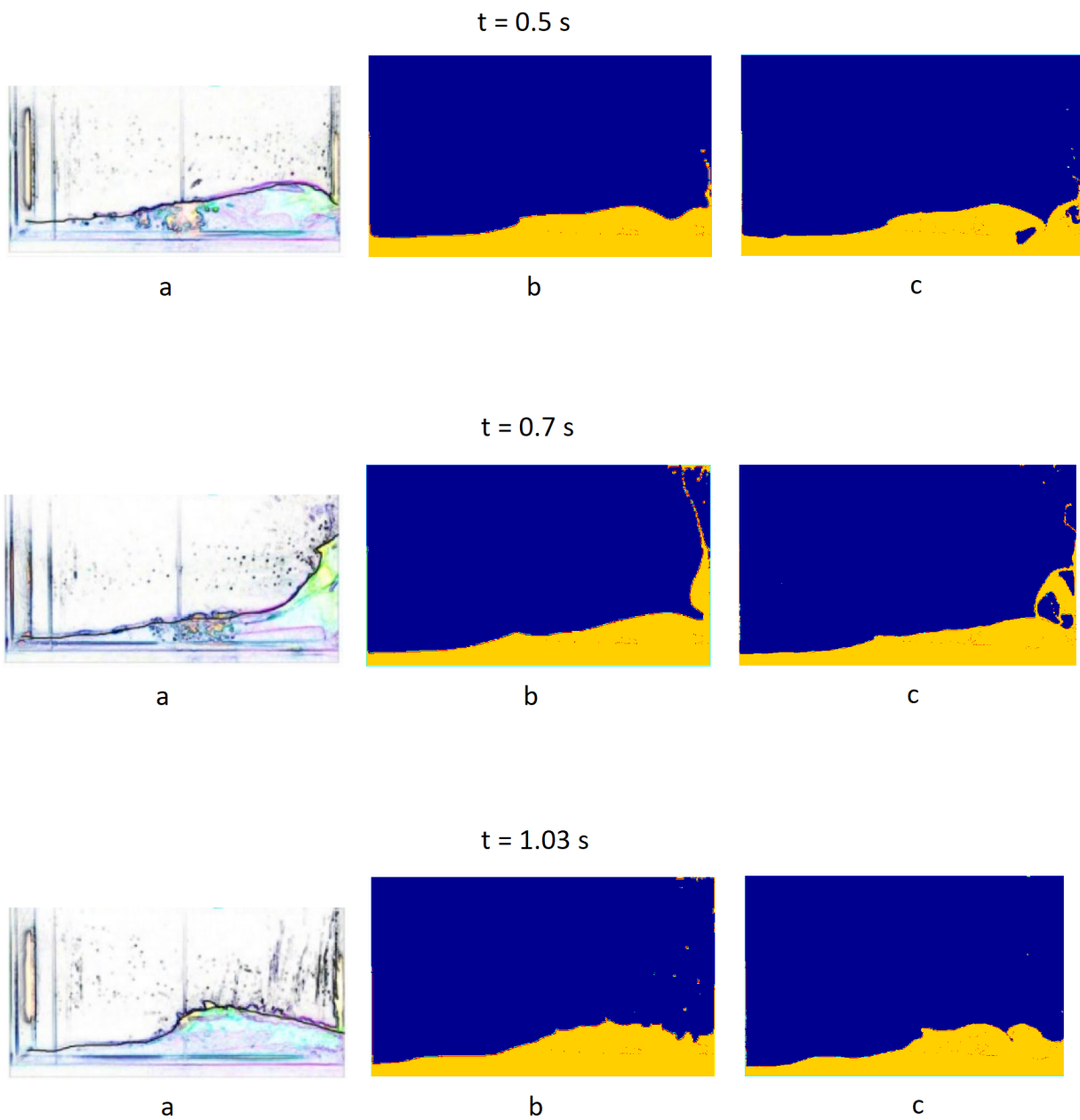


Obr. 18: Srovnání experimentálních a numerických hodnot výšky hladiny v bodě B

Časové okamžiky numerické simulace a experimentálního měření zachycuje obr. 19. Jednotlivé časy, v nichž je zobrazeno proudění s volnou hladinou během experimentálního měření (a) jsou znázorněny s ohledem na zpoždění způsobené odstraňováním vodní hráze.

Série obrázků s označením (b) a (c) zobrazují časové okamžiky proudění s volnou hladinou při použití výpočetní sítě (600,300) a (1000,500).



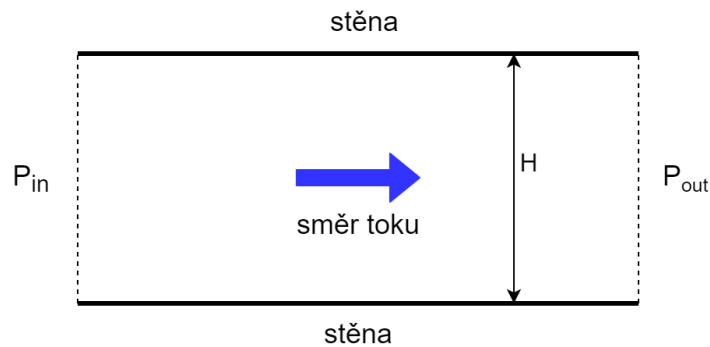


Obr. 19: a - pohyb volné hladiny experimentu, b - pohyb volné hladiny LBM VOF výpočtové sítě $(600,300)$, c - pohyb volné hladiny LBM VOF výpočtové sítě $(1000,500)$

4 Proudění v mikrokanálu

Neustálý technologický vývoj výroby polovodičů a jejich modifikací pro použití v mikroelektromechanických zařízeních (MEMS) rozšiřuje oblast použití těchto zařízení v mnoha různých oblastech. Zařízení MEMS se stávají nedílnou součástí medicíny, biotechnologií, chemického výzkumu ale i výroby běžných domácích elektrospotřebičů. Z důvodu miniaturizace se snižuje cena MEMS zařízení a tím i jejich dostupnost. V mnoha MEMS zařízeních se lze setkat případy proudící tekutiny, která má např. chladičí nebo transportní účely. Správná simulace tohoto proudění může vést ke zlepšení konstruování těchto zařízení a výzkumu nových technologických možností. V literatuře [28] je provedeno porovnání experimentálních měření v zařízeních velikosti $0.5 \mu m$ s numerickými simulacemi zkoumaného proudění. V této literatuře je zároveň dokázáno, že se experimentální data neshodují s numerickými výsledky proudění pro určité rozměry měřeného zařízení. Toto zjištění vytváří prostor pro vývoj nových metod pro simulaci mikroproudění, které odstraňují limitace uvedené v literatuře [28].

Pro lepší představu řešené problematiky uvažujme 2D kanál na jehož vstupu a výstupu je předepsaný tlak P_{in} a P_{out} viz obr. 20. Kanál má velikost výšky H řádově v μm .



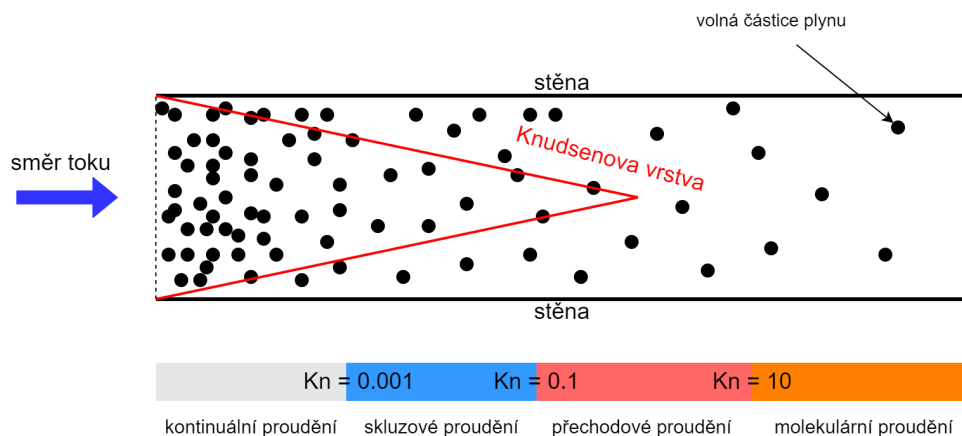
Obr. 20: Uvažovaná oblast mikroproudění ve 2D kanálu

Standardními metodami pro simulaci proudění tekutin jsou numerická řešení NS rovnic. Numerické výsledky získané těmito metodami jsou platné pro takové případy proudění, kdy lze proudící tekutinu uvažovat jako kontinuum, nikoli jako tekutinu složenou z jednotlivých částic. Mikroskopické proudění tekutiny lze rozdělit podle velikosti výšky kanálu H a střední volné dráhy molekul λ na určité režimy proudění. Tyto režimy charakterizuje bezrozměrné Knudsenovo číslo, pro které platí

$$Kn = \frac{\lambda}{H}. \quad (4.0.1)$$

Proudění v mikrokanálu lze rozdělit do čtyř režimů viz obr. 21. Kontinuální proudění ($Kn < 0.001$), skluzové proudění ($0.001 < Kn < 0.1$), přechodové proudění ($0.1 < Kn < 10$) a volné molekulární proudění ($Kn > 10$). V režimu kontinuálního proudění je střední volná dráha molekul v poměru k výšce kanálu mnohonásobně menší a proudící tekutinu lze považovat za kontinuum, tudíž lze aplikovat klasické NS rovnice. V režimu volného proudění molekul je střední volná dráha molekul v porovnání s výškou kanálu velká, proto jsou dominantní srážky se stěnou kanálu. Tento režim lze popsat tzv. Knudsenovou difuzí (také nazývanou jako Knudsenův tok). Interval Knudsenových čísel na obr. 21 je uprostřed

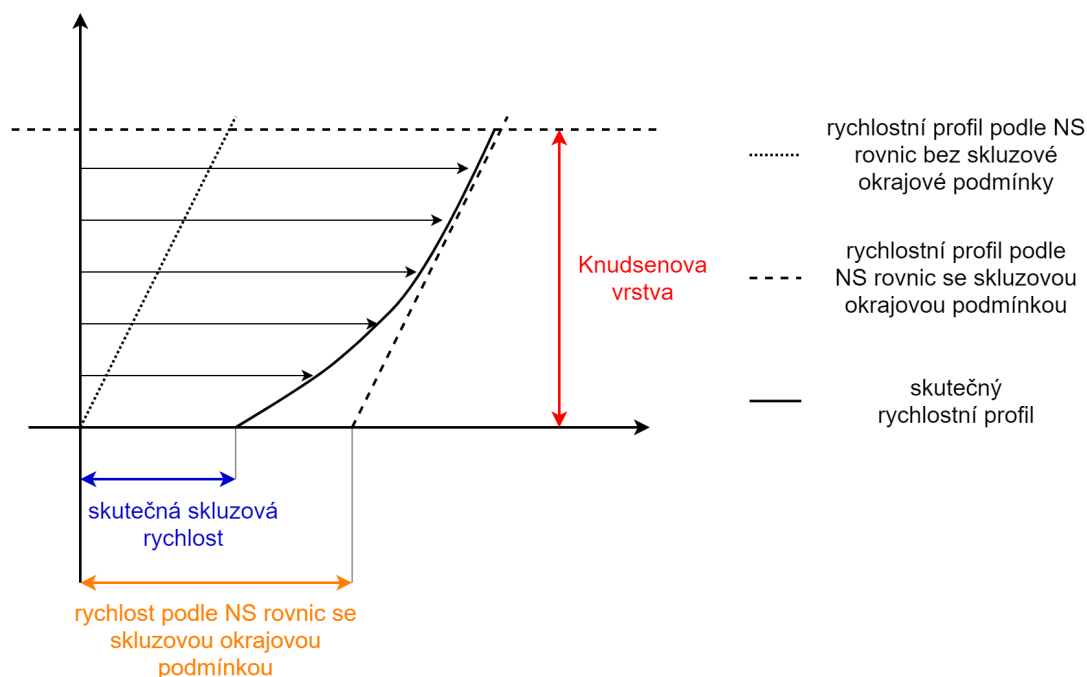
rozdělen na režimy skluzového proudění a přechodového proudění. Skluzové proudění lze popsat NS rovnicemi s aplikací skluzových okrajových podmínek prvního řádu na stěnách [2], zatímco přechodové proudění je stále předmětem výzkumu.



Obr. 21: Režimy proudění v mikrokanálu a tloušťka Knudsenovy vrstvy v závislosti na Knudsenově čísle

Na obr. 21 je červeně znázorněn postupný vliv tloušťky tzv. Knudsenovy vrstvy v závislosti na velikosti střední volné dráhy molekul resp. Knudsenova čísla. Touto vrstvou je označen region v blízkosti pevné stěny, kde je střední volná dráha molekul mnohem menší než střední volná dráha molekul uprostřed kanálu. K tomuto efektu dochází vlivem převažujících srážek s pevnou stěnou oproti zanedbatelným srážkám mezi molekulami. Tloušťka Knudsenovy vrstvy je přibližně stanovena jako tloušťka jedné nebo dvou mezních vrstev a pro vyšší Knudsenova čísla musí být zohledněna.

Na obr. 22 je znázorněno mikroproudění v oblasti pevné stěny. Při numerické simulaci mikroproudění pomocí NS rovnic, pro nějž nelze zanedbat tloušťku Knudsenovy vrstvy dochází k nepřesné numerické simulaci skluzové rychlosti. Použitím bezskluzové nebo skluzové okrajové podmínky se není možné numericky přiblížit hodnotě skutečné rychlosti tekutiny na stěně, což je dokázáno v literatuře [2].



Obr. 22: Vliv Knudsenovy vrstvy na numerický výpočet rychlosti na stěně

Správná numerické simulace rychlosti na stěně není jediným úskalím proudění v mikrozařízeních. Vlivem viskózního proudění dochází k nelineárnímu průběhu tlaku podél mikrokanálu, tudíž ke stlačování proudící tekutiny. Nelze proto použít relaxační čas τ odvozený v odstavci 2.4 pro nestlačitelnou kapalinu, ale je potřeba modifikovaný tvar tohoto relaxačního času.

Kromě lattice Boltzmannovy metody uvedeme metodu DSMC, pomocí níž jsou v literatuře [7] numericky simulovány případy mikroproudění. Přímá simulace Monte Carlo (DSMC) zachycuje pohyb molekul tekutiny a interakce s pevnou stěnou nebo jinými molekulami. Z důvodu velkého množství molekul obsažených v objemu velikosti mikrometrů vyžaduje DSMC velké množství výpočetní paměti. Tento nedostatek brání efektivnímu používání DSMC v případě rozsáhlejšího mikroproudění. Alternativní metodou k DSMC je přímé řešení Boltzmannovy rovnice, avšak pro rozsáhlejší mikroproudění má tato metoda stejný nedostatek jako DSMC.

V následujícím odstavci je popsán zvolený model lattice Boltzmannovy metody následovaný formulací algoritmu LBM pro numerickou simulaci mikroproudění. V posledním odstavci jsou uvedeny numerické výsledky vybraného testovacího případu mikroproudění a jejich diskuze.

4.1 Volba LBM modelu

Pro numerickou simulaci proudění v mikrokanálu pomocí LBM je zvolen následující model. Mějme diskretizovanou Boltzmannovou rovnici ve fázovém prostoru a čase s MRT kolizním operátorem ve tvaru

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{e}_i \delta t, t + \delta t) = f_i(\mathbf{r}, t) - (\mathbf{M}^{-1} \mathbf{S} \mathbf{M})(f_i(\mathbf{r}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{r}, t)). \quad (4.1.1)$$

Konkrétní hodnoty relaxačních časů kolizního operátoru jsou uvedeny v odstavci 4.3. Rovnovážná distribuční funkce f_i^{eq} je rovna

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left(1 + \frac{3\mathbf{e}_i \mathbf{u}}{c^2} + \frac{9(\mathbf{e}_i \mathbf{u})^2}{2c^4} - \frac{3\mathbf{u}^2}{2c^2} \right), \quad (4.1.2)$$

kde $c = \delta x / \delta t$. Rovnice (4.1.1) je diskretizována pro případ D2Q9 modelu. Rychlostní směry jsou tedy rovny

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_i &= (0, 0), & \text{pro } i = 0, \\ \mathbf{e}_i &= c \left(\cos\left((i-1)\frac{\pi}{4}\right), \sin\left((i-1)\frac{\pi}{4}\right) \right), & \text{pro } i = 1, 2, 3, 4, \\ \mathbf{e}_i &= \sqrt{2}c \left(\cos\left((i-1)\frac{\pi}{4}\right), \sin\left((i-1)\frac{\pi}{4}\right) \right), & \text{pro } i = 5, 6, 7, 8, \end{aligned} \quad (4.1.3)$$

s příslušnými hodnotami vah

$$\begin{aligned} w_0 &= 4/9, \\ w_{1\dots 4} &= 1/9, \\ w_{5\dots 8} &= 1/36. \end{aligned} \quad (4.1.4)$$

Makroskopické veličiny hustota a rychlost jsou definovány rovnicemi (2.3.17) a (2.3.18)

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_i f_i(\mathbf{r}, t), \quad (4.1.5)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_i \mathbf{e}_i f_i(\mathbf{r}, t). \quad (4.1.6)$$

4.2 Algoritmus LBM pro případ mikroproudění

Sled postupných kroků algoritmu LBM pro případ proudění v mikrokanálu je téměř analogický k algoritmu uvedenému v odstavci 2.8 s výjimkou pořadí některých kroků. Stejně jako v případě algoritmu proudění s volnou hladinou, i zde je třeba algoritmus modifikovat podle potřeb numerické implementace. Modifikace provedené v této práci jsou založeny na literatuře [23],[4],[34].

Algoritmus LBM je inicializován definováním výpočetní sítě o počtu N_x a N_y uzlů v horizontálním a vertikálním směru. Společně s výpočetní sítí je třeba definovat pole hustot $\rho(\mathbf{r}, t)$ a rychlostí $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$. Jako testovací případ je v této práci zvolen rovný 2D mikrokanál s předepsanými hodnotami tlaku na vstupu a výstupu viz obr. 20. V zájmu úspory výpočtového času lze definovat počáteční rozložení tlaku resp. hustoty jako lineární

funkci, na jejíž koncích jsou hodnoty předepsaných tlaků resp. hustot. Rozložení pole rychlostí nelze takto predikovat, a proto je ve fázi inicializace nulové. Rovnovážné distribuční funkce jsou definovány podle rovnice (2.3.16).

Je-li dokončena inicializace algoritmu, nastává časový cyklus. Ihned po zahájení časového cyklu je provedena kolize distribučních funkcí řízená MRT kolizním operátorem. V této práci je stejně jako v případě proudění s volnou hladinou, zvolen tvar kolizní matice ve tvaru [21]

$$\mathbf{S} = \text{diag}(1, \tau_e, 50/57, 1, \tau_{qx}, 1, \tau_{qy}, \tau, \tau)^{-1}, \quad (4.2.1)$$

s výjimkou relaxačních časů $\tau_e, \tau_{qx}, \tau_{qy}$ a τ . Relaxační čas τ_e je skrze rovnici (2.5.12) spjat s objemovou viskozitou. Z důvodu dominantní tloušťky Knudsenovy vrstvy vzhledem k výšce kanálu se v případech mikroproudění neuplatní vliv objemové viskozity a relaxační čas τ_e lze zvolit libovolně z intervalu $(0.5; 2)$.

Prouděním tekutiny v mikrokanálu dochází ke stlačování tekutiny a vzniku skluzové rychlosti na stěnách. Relaxační časy τ_{qx}, τ_{qy} a τ proto nelze zvolit podle rovnice (2.5.11), ale je potřeba jejich přesnějšího určení. Nejprve je nutné stanovit relaci mezi relaxačním časem τ a střední volnou dráhou molekul resp. Knudsenovým číslem. Obecně lze relaxační čas vyjádřit rovnicí [11]

$$\delta t(\tau - \frac{1}{2}) = \frac{\lambda}{c^*}, \quad (4.2.2)$$

kde λ je střední volná dráha molekul a c^* je určitá průměrovaná rychlost molekul, jejíž hodnotu je třeba stanovit. Alternativně lze relaxační čas vyjádřit pomocí tlaku p a dynamické viskozity μ jako

$$\begin{aligned} \nu &= c_s^2 \delta t(\tau - \frac{1}{2}), \\ \delta t(\tau - \frac{1}{2}) &= \frac{\nu}{c_s^2}, \\ \delta t(\tau - \frac{1}{2}) &= \frac{\mu}{p}. \end{aligned} \quad (4.2.3)$$

Z těchto rovnic lze vyjádřit průměrovaná rychlost molekul

$$c^* = \frac{p\lambda}{\mu}. \quad (4.2.4)$$

Pro plyny, jejichž proudění je věnována tato část práce, je z kinetické teorie stanovena přibližná hodnota střední volné dráhy a dynamické viskozity jako

$$\lambda = \frac{m}{\sqrt{2}\pi\rho\beta^2}, \quad (4.2.5)$$

$$\mu = 1.016 \frac{5m}{16\beta^2} \sqrt{\frac{RT}{\pi}} \approx \frac{1}{2} \rho \bar{c} \lambda, \quad (4.2.6)$$

kde m hmotnost molekul, β je poloměr molekul a $\bar{c} = \sqrt{8RT/\pi}$ je střední molekulová rychlost. Pro průměrovanou rychlost platí

$$c^* = \frac{2RT}{\bar{c}} = \sqrt{\frac{\pi RT}{2}}. \quad (4.2.7)$$

Z rovnic (4.2.4) a (4.2.7) lze vyjádřit střední volnou dráhu molekul

$$\lambda = \frac{\mu}{p} \sqrt{\frac{\pi RT}{2}}, \quad (4.2.8)$$

a následně vztah mezi relaxačním časem τ_ν a střední volnou dráhou molekul

$$\begin{aligned} \tau &= \frac{1}{2} + \frac{\nu}{c_s^2 \delta t}, \\ \tau &= \frac{1}{2} + \frac{1}{\delta t} \frac{\lambda}{\sqrt{\frac{\pi RT}{2}}}, \\ \tau &= \frac{1}{2} + \frac{1}{\delta t} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{RT}} \lambda, \\ \tau &= \frac{1}{2} + \frac{1}{\delta t} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{c_s} \lambda, \\ \tau &= \frac{1}{2} + \frac{1}{\delta t} \sqrt{\frac{6}{\pi}} \lambda. \end{aligned} \quad (4.2.9)$$

Nebo mezi relaxačním časem a Knudsenovým číslem

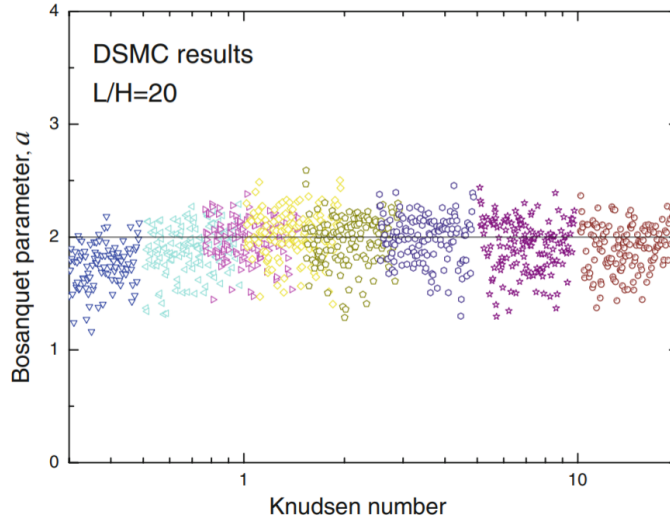
$$\tau = \frac{1}{2} + \frac{1}{\delta t} \sqrt{\frac{6}{\pi}} KnH, \quad (4.2.10)$$

kde H je výška kanálu.

Zde je nutné poznamenat, že odvozené vztahy pro viskozitu a střední volnou dráhu molekul jsou platné pouze pro molekuly plynu ve volném prostoru nebo v dostatečné vzdálenosti od pevné stěny. Jestli že jsou např. v mikrokanálu molekuly plynu obklopeny pevnými stěnami, molekuly do nich narážejí a jejich střední volná dráha je kratší, než je definována rovnicí (4.2.8). Z toho důvodu je zavedena tzv. efektivní střední volná dráha λ_{eff} . Efektivní střední volnou dráhu molekul plynu obklopeného stěnami lze vyjádřit jako $\lambda_{eff} = \lambda \Psi(Kn)$, kde λ je střední volná dráha molekul plynu bez vlivu okolních stěn a $\Psi(Kn)$ je tzv. korekční faktor. V literatuře [25] a [5] je navržen korekční faktor ve tvaru

$$\Psi(Kn) = \frac{1}{1 + Kna}, \quad (4.2.11)$$

kde a je neznámá konstanta. V literatuře [25] je provedena studie závislosti jevu zkrocování střední volné dráhy molekul vlivem přítomnosti pevných stěn na viskozitě při použití DSMC metody. Na obr. 23 jsou znázorněny numericky získané hodnoty parametru a v závislosti na velikosti Knudsenova čísla.



Obr. 23: Závislost parametru a na Knudsenově čísle [25]

Hodnoty parametrů a jsou pro širokou škálu Knudsenových čísel rovny přibližně 2. Stejná hodnota je uvažovaná při numerických simulacích mikroproudění v této práci. Relaxační čas uvedený v rovnici (4.2.9) resp. (4.2.10) je použitím efektivní střední volné dráhy molekul modifikován na tvar

$$\tau = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{6}{\pi} \frac{KnH}{1 + Kna}}, \quad (4.2.12)$$

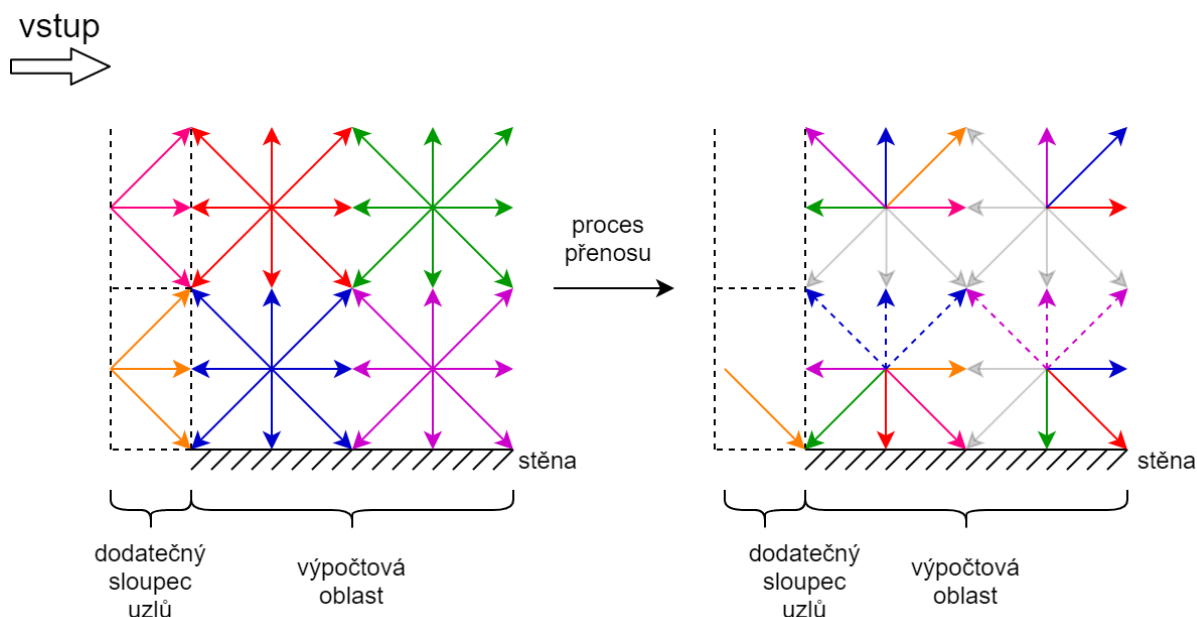
kde $a = 2$. Knudsenovo číslo je ve výpočtové oblasti závislé na tlaku a lze jej definovat podle předepsaného Knudsenova čísla Kn_{out} a tlaku na výstupu p_{out} kanálu jako

$$Kn = \frac{Kn_{out} p_{out}}{p(x)}, \quad (4.2.13)$$

kde $p(x)$ je tlak podél středové čáry kanálu.

Vrátíme-li se k určení relaxačních časů kolizní matice, zbývá určit relaxační čas τ_{qx} . Jelikož je tento relaxační čas spjat s použitím skluzové okrajové podmínky, je jeho určení popsáno dále v tomto odstavci.

Před procesem přenosu je potřeba stanovit okrajové podmínky na vstupu a výstup. K definované výpočetní síti N_x, N_y je potřeba v oblasti vstupu a výstupu mikrokanálu definovat dodatečný sloupec uzlů, který ovšem není součástí výpočtové oblasti. V těchto sloupcích jsou extrapolovány distribuční funkce z výpočtové oblasti, které procesem přenosu vstupují do výpočtové oblasti a nahrazují neznámé distribuční funkce na vstupu a výstupu viz obr. 24.



Obr. 24: Okrajová podmínka na vstupu kanálu následovaná procesem přenosu distribučních funkcí

Jsou-li dodatečné sloupce situované v místech $[y, 0]$ (vstup) a $[y, N_x + 1]$ (výstup), kde $y \in (1, N_y)$, pak pro extrapolované distribuční funkce platí

$$f_i(y, 0) = 2f_i(y, 1) - f_i(y, 2), \quad i = 1, 5, 8 \quad (4.2.14)$$

$$f_i(y, N_x + 1) = 2f_i(y, N_x) - f_i(y, N_x - 1), \quad i = 3, 6, 7 \quad (4.2.15)$$

Nyní lze uskutečnit proces přenosu distribučních funkcí. Hodnoty pole hustot v místech $\rho(y, 1)$ a $\rho(y, N_x)$ lze po procesu přenosu získat součtem distribuční funkce, avšak tyto hodnoty nemusí odpovídat předepsaným hodnotám tlaku resp. hustoty. Následující postup má za cíl přepočítat hodnoty pole hustoty, aby jejich průměrná hodnota odpovídala předepsaným hodnotám tlaku resp. hustoty. Nové pole hustoty je rovno

$$\begin{aligned} \rho(y, 1) &= K_1 \rho(y, 1), \\ \rho(y, N_x) &= K_2 \rho(y, N_x), \end{aligned} \quad (4.2.16)$$

kde pro konstanty K_1 a K_2 platí

$$\begin{aligned} K_1 &= \frac{N_y \rho_{in}}{\sum_{y=0}^{N_y} \rho(y, 1)}, \\ K_2 &= \frac{N_y \rho_{out}}{\sum_{y=0}^{N_y} \rho(y, N_x)}. \end{aligned} \quad (4.2.17)$$

Výhodou této okrajové podmínky je plynulý přechod tlakového a rychlostního pole z oblasti okrajových podmínek vstupu a výstupu do vnitřku výpočtové oblasti.

Proces přenosu distribučních funkcí následuje určení okrajových podmínek na pevné stěně. Aby bylo možné pomocí LBM numericky simulovat mikroproudění v režimu skluzového a přechodového proudění, kdy je použita efektivní střední volná dráha, je potřeba

zvolit vhodnou skluzovou okrajovou podmínku. V této práci je použita skluzová okrajová podmínka druhého řádu [1]

$$u_s = A_1 \sigma_\nu \lambda_e \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{\text{stěna}} - A_2 \lambda_e^2 \frac{\partial^2 u}{\partial n^2} \Big|_{\text{stěna}}, \quad (4.2.18)$$

kde n je vnitřní normála stěny, $\sigma_\nu = (2 - \sigma)/\sigma$ kde σ je tzv. akomodační koeficient a A_1, A_2 jsou skluzové koeficienty. Koeficient σ určuje kvalitu stěny. Pro drsnou stěnu je jeho hodnota rovna $\sigma = 0.5$ naopak pro dokonale hladkou stěnu, která je uvažována v této práci je rovna $\sigma = 1$. V literatuře [24] je zkoumán vliv koeficientu A_1 na přesnost skluzové okrajové podmínky. Na základě této literatury je v této práci zvolena hodnota $A_1 = (1 - 0.1817\sigma)$. Hodnota koeficientu A_2 je důležitá v simulacích mikroproudění pro relativně vysoká Knudsenova čísla. V této práci je zvolena hodnota $A_2 = 0.8$. Pomocí takto zvoleného koeficientu lze získat numerické hodnoty průtoku, které jsou ve velice dobré shodě s numerickými výsledky průtoku linearizované Boltzmannovy rovnice [23]. V rámci LBM není tato okrajová podmínka přímo implementována rovnicí (4.2.18), ale je implicitně zajištěna pomocí odrazu distribučních funkcí na stěně. Skluzová okrajová podmínka na spodní stěně má tvar

$$\begin{aligned} f_2 &= f_4, \\ f_5 &= r f_7 + (1 - r) f_8, \\ f_6 &= r f_8 + (1 - r) f_7. \end{aligned} \quad (4.2.19)$$

V těchto rovnicích je důležitý parametr r pro správné numerické určení rychlosti na stěně. Následující definování parametru r je včetně okrajové podmínky (4.2.19) uvedeno na základě literatury [1].

Vztah mezi skluzovou rychlostí na stěně a okrajovou podmínkou pro hladkou stěnu lze vyjádřit jako

$$u_s = \frac{4(1 - r)}{r} \sqrt{\frac{6}{\pi}} Kn + \frac{32(\tau_{qx} - 0.5)}{\pi(\tau - 0.5)} Kn^2. \quad (4.2.20)$$

Pro analytické řešení skluzové okrajové podmínky platí

$$u_s = 4A_1 Kn + 8A_2 Kn^2. \quad (4.2.21)$$

Porovnáním členů před Knudsenovými čísly Kn a Kn^2 lze vyjádřit hledané vztahy pro parametr r a relaxační čas τ_{qx} jako

$$r = \frac{1}{1 + \sqrt{\frac{\pi}{6}} A_1}, \quad (4.2.22)$$

$$\tau_{qx} = \tau_{qy} = \frac{1}{2} + \frac{\pi A_2 (2\tau - 1)^2 + 3}{8(2\tau - 1)}. \quad (4.2.23)$$

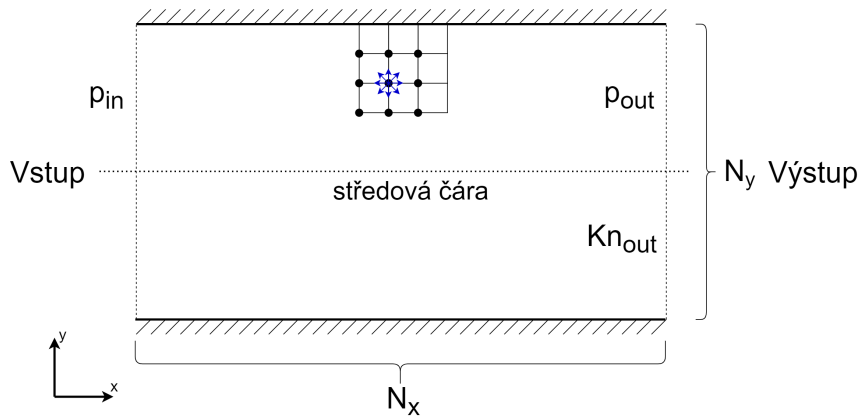
Relaxační čas $\tau_{qx} = \tau_{qy}$ je použit při volbě relaxačních časů kolizní matice.

Posledním krokem LBM algoritmu proudění v mikrokanálu je vypočítání makroskopických veličin a poté se časový cyklus opakuje.

4.3 Numerické výsledky

V tomto odstavci jsou popsány výsledky numerické simulace LBM v případě proudění stlačitelné vazké tekutiny ve 2D mikrokanálu. Nejprve jsou popsány parametry mikrokanálu v LBM prostoru. Jelikož jsou dosažené numerické výsledky validovány s výsledky uvedenými v dostupné literatuře, kde jsou prezentovány v bezrozměrném tvaru, nejsou v tomto případě uvedeny konverzní faktory pro převod veličin mezi fyzikálním a LBM prostorem. Dále jsou uvedeny hodnoty nejdůležitějších parametrů numerické simulace LBM, tzn. relaxační časy τ , τ_{qx} , τ_{qy} a hodnota skluzového koeficientu r . V závěru tohoto odstavce je provedeno porovnání a diskuze numerických výsledků získaných vlastním nástrojem LBM s numerickými výsledky uvedenými v dostupné literatuře.

Z důvodu široké škály využití v zařízeních MEMS a na základě dostupné literatury je zvolen testovací případ proudění plynu ve 2D mikrokanálu. Uvažujme 2D mikrokanál tvořený rovnými nepropustnými stěnami, v němž proudí plyn viz obr. 25.



Obr. 25: Schématické naznačení řešeného problému proudění ve 2D mikrokanálu

Mikrokanál je diskretizovaný výpočetní sítí o počtu N_x uzlů ve směru x a N_y uzlů ve směru y . Aby byla zachována kompatibilita s validovanými numerickými výsledky v dostupné literatuře, je zvolena výpočetní síť o velikost $(N_x, N_y) = (2000, 20)$ uzlů. Na vstupu a výstupu mikrokanálu jsou předepsány hodnoty tlaků p_{in} a p_{out} . Pro hodnoty těchto tlaků platí $p_{in} > p_{out}$ a tvoří tzv. tlakový spád, jehož důsledkem je proudění plynu z místa vyššího tlaku do místa nižšího tlaku. V této práci jsou provedeny celkem tři numerické simulace s odlišnou hodnotou výstupního Knudsenova čísla Kn_{out} a tlakového spádu. Parametry těchto numerických simulací jsou uvedeny v následující tabulce.

Kn_{out}	0.194	0.388	1.128
$\Pi = \frac{p_{in}}{p_{out}}$	2	2	3
výpočetová síť	(2000,20)	(2000,20)	(2000,20)

Tab. 5: Knudsenovo číslo, tlakový spád a velikost výpočetní sítě provedených numerických simulací

Ke stabilní a co nejvíce přesné numerické simulaci LBM je potřeba určit relaxační časy a skluzový koeficient podle rovnic (4.2.12), (4.2.23) a (4.2.22). Jejich hodnoty pro jednotlivé numerické simulace jsou uvedeny v tabulce 6.

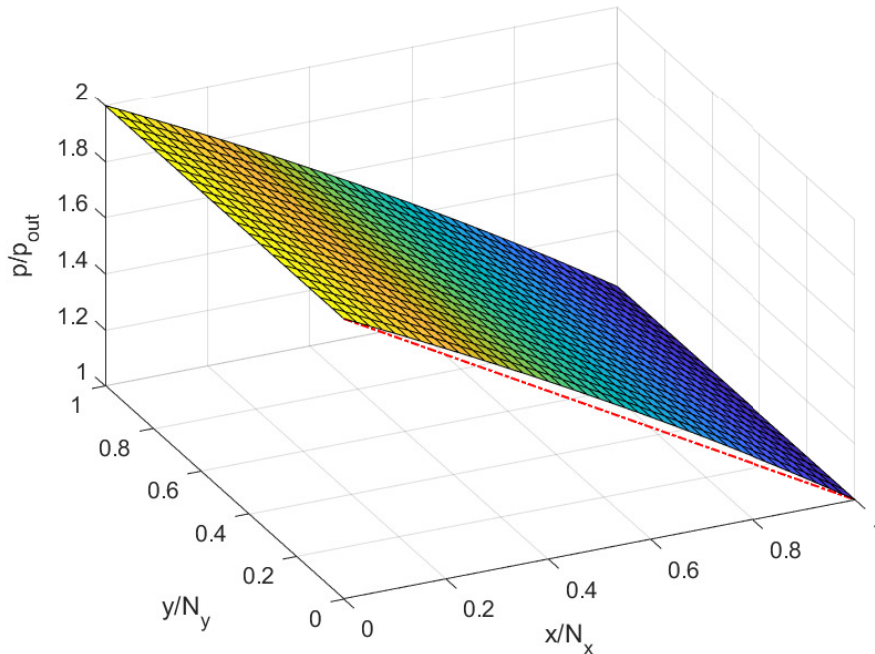
Kn_{out}	0.194	0.388	1.128
$\tau, \tau_{q_x} = \tau_{q_y}$	$\tau = 2.8077, \tau_{q_x} = \tau_{q_y} = 2.0312$	$\tau = 4.5535, \tau_{q_x} = \tau_{q_y} = 3.0932$	$\tau = 7.9295, \tau_{q_x} = \tau_{q_y} = 5.1933$
r	0.6281	0.6281	0.6281

Tab. 6: Hodnoty relaxačních časů a skluzových koeficientů provedených numerických simulací

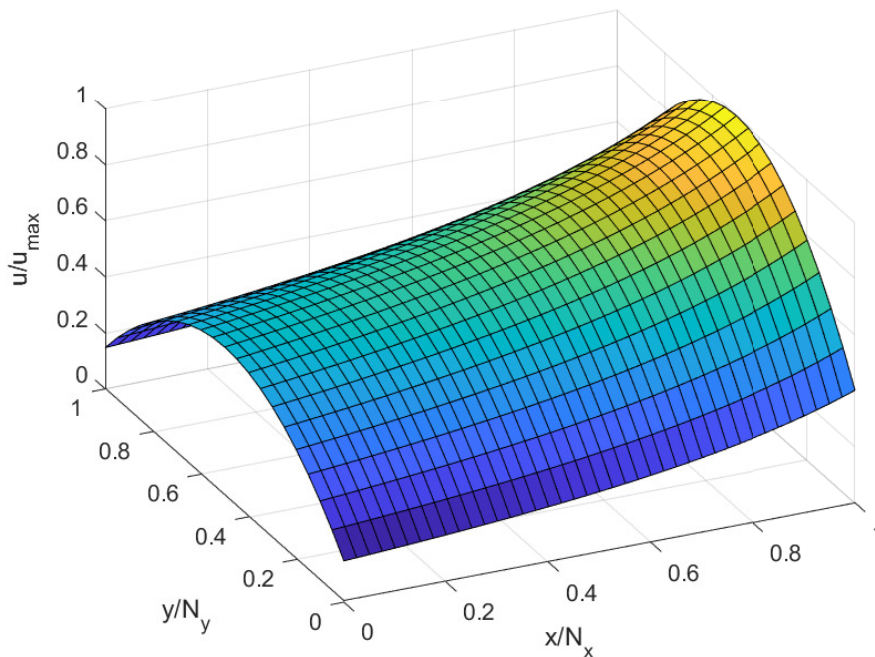
Diskuze numerických výsledků

Na obr. 26 je znázorněn normalizovaný průběh tlaku podél 2D mikrokanálu pro Knudsenovo číslo 0.194. Rozložení tlaku klesá nelineárně z místa vyššího tlaku $p/p_{out} = 2$ do místa nižšího tlaku $p/p_{out} = 1$. Pro lepší představu nelineárního tlakového spádu je červenou přerušovanou čarou znázorněn lineární tlakový spád. Z průběhu tlakového pole je také zřejmá neměnnost tlaku podél výšky kanálu (souřadnice y). Nelinearita tlakového pole závisí na souřadnici x , tedy na místě podél délky kanálu.

Obr. 27 znázorňuje parabolické rozložení rychlostního pole ve 2D mikrokanálu pro Knudsenovo číslo 0.194. Rychlostní pole je normalizováno maximální rychlostí u_{max} vyskytující se podél středové čáry na výstupu mikrokanálu. Z rozložení rychlosti podél stěn je patrná nenulová skluzová rychlost, která společně s rychlostí uvnitř mikrokanálu nelineárně stoupá směrem k výstupu z mikrokanálu. Tento jev je způsobený platností zákona zachování hmoty při nelineárním poklesu tlaku podél mikrokanálu.



Obr. 26: Normalizované rozložení nelineárního tlakového pole ve 2D kanálu pro $Kn_{out} = 0.194$

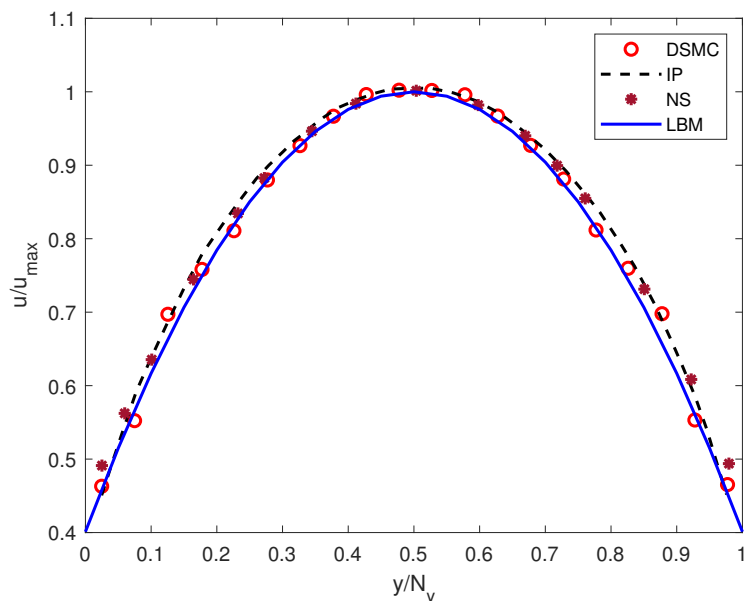


Obr. 27: Normalizované rozložení nelineárního rychlostního pole ve 2D kanálu pro $Kn_{out} = 0.194$

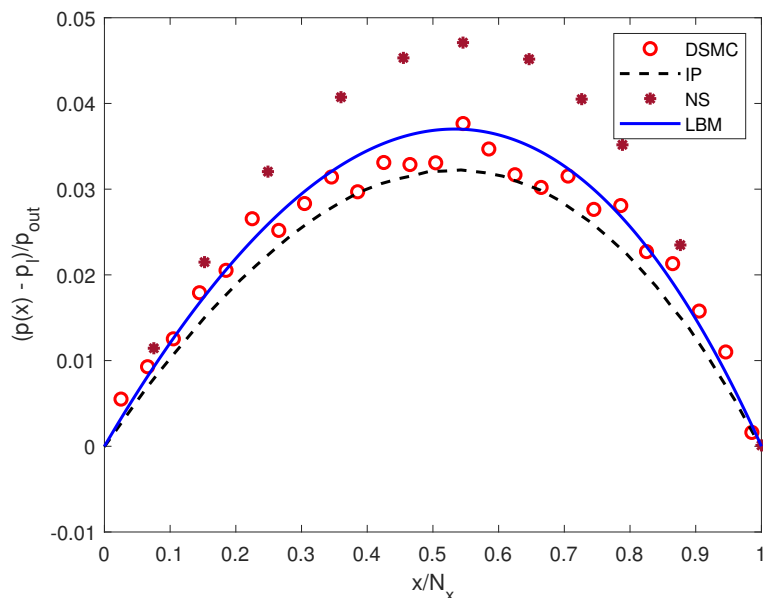
Na obr. 28a až 30a jsou znázorněny normalizované parabolické rychlostní profily na výstupu mikrokanálu podél souřadnice y získané vlastním programovým skriptem LBM. Rychlostní profily jsou normalizovány hodnotou maximální rychlosti u_{max} vyskytující se podél středové čáry na výstupu mikrokanálu. Získané normalizované rychlostní profily jsou porovnány s rychlostními profily uvedenými v dostupné literatuře. V případech numerických simulací s výstupním Knudsenovým číslem 0.194 a 0.388 jsou normalizované rychlostní profily porovnány s normalizovanými rychlostními profily získanými použitím numerických metod DSMC, „information preservation“ IP a řešením nelineárního systému NS rovnic se skluzovými okrajovými podmínkami prvního řádu [29], [31]. Pro případ numerické simulace s výstupním Knudsenovým číslem 1.128 nejsou v dostupné literatuře uvedeny rychlostní profily získané metodou IP a řešením NS rovnic, a proto je normalizovaný rychlostní profil porovnán pouze s rychlostním profilem získaným použitím metody DSMC [9]. Porovnáním rychlostních profilů náležících numerickým simulacím s Knudsenovým číslem 0.194 a 0.388 je patrná velice dobrá shoda. V případě Knudsenova čísla 1.128 je zřejmá velice dobrá shoda rychlostních profilů v oblasti vzdálené od pevné stěny, avšak skluzová rychlost získaná LBM má v porovnání s DSMC metodou vyšší hodnotu.

Obr. 28b až 30b znázorňují odchytku nelineárního průběhu tlakového spádu od lineárního podél středové čáry mikrokanálu. Pro odchytku tlaku platí rovnost $(p(x) - p_l)/p_{out}$, kde p_l je lineární průběh tlakového spádu viz obr. 26. Porovnání odchylek nelineárních tlakových spádů s dostupnou literaturou je provedeno pro stejná Knudsenova čísla a numerické metody (DSMC, IP, řešení NS rovnic) jako porovnání normalizovaných rychlostních profilů. Z uvedených grafů nelineárních tlakových odchylek je patrná dobrá shoda pouze v případě Knudsenova čísla 0.194. Pro Knudsenovo číslo 0.388 je dosaženo dobré shody s metodou IP, zatímco průběh odchylky náležící metodě DSMC je mírně odkloněn směrem ke vstupu

do mikrokanálu. Pro Knudsenovo číslo 1.128 je dosaženo relativně dobré shody s metodou DSMC, avšak průběh odchylky získaný metodou LBM je mírně odkloně směrem ke vstupu do mikrokanálu. Ze získaných grafů nelineárních tlakových odchylek lze usoudit, že velikost tlakového spádu Π a Knudsenova čísla má významný vliv na míru odchylky nelineárního tlakového spádu od lineárního a na její sklon směrem ke vstupu nebo výstupu mikrokanálu.

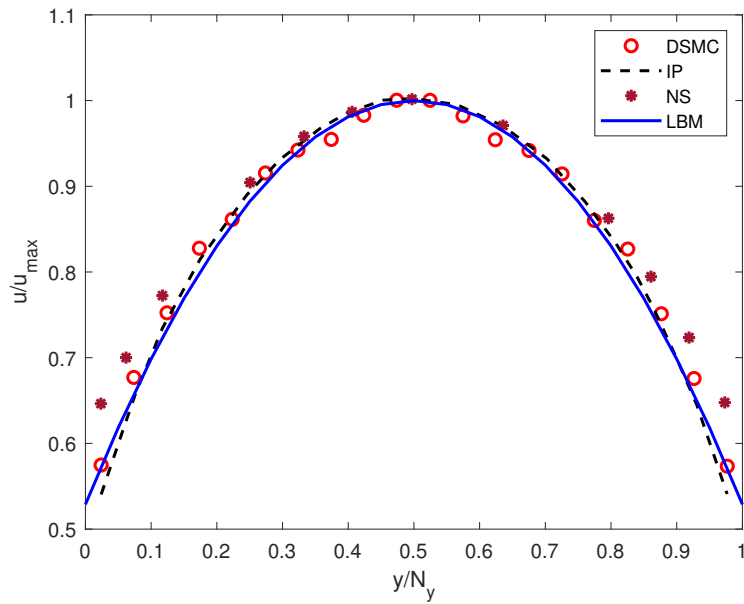


(a) Normalizovaný rychlostní profil na výstupu mikrokanálu

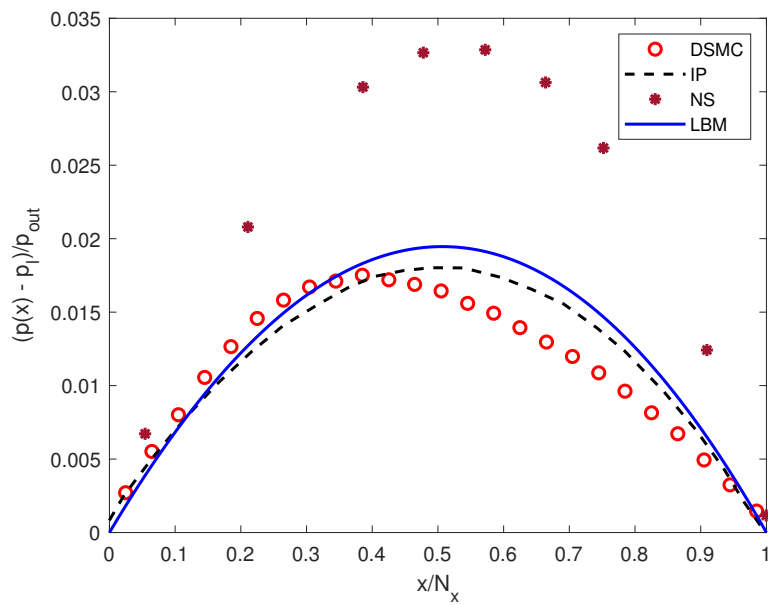


(b) Odchylka nelineárního tlakového spádu od lineárního podél středové čáry mikrokanálu

Obr. 28: $Kn_{out} = 0.194$

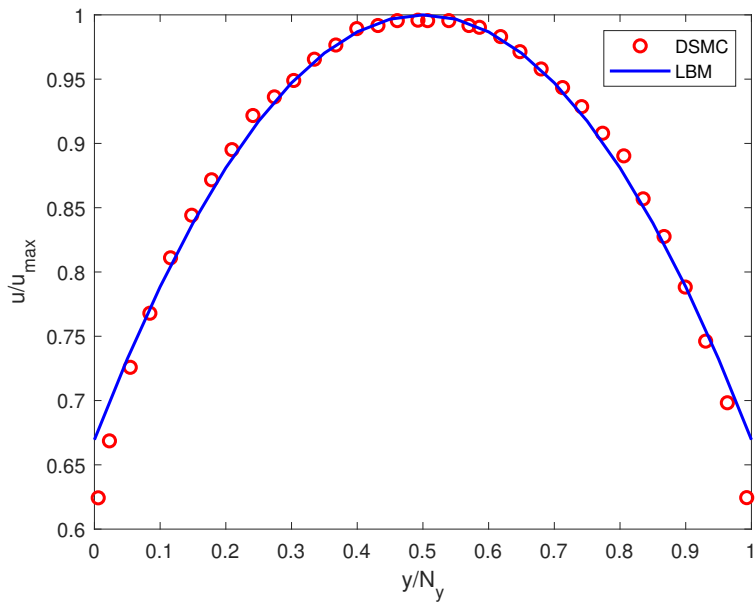


(a) Normalizovaný rychlostní profil na výstupu mikrokanálu

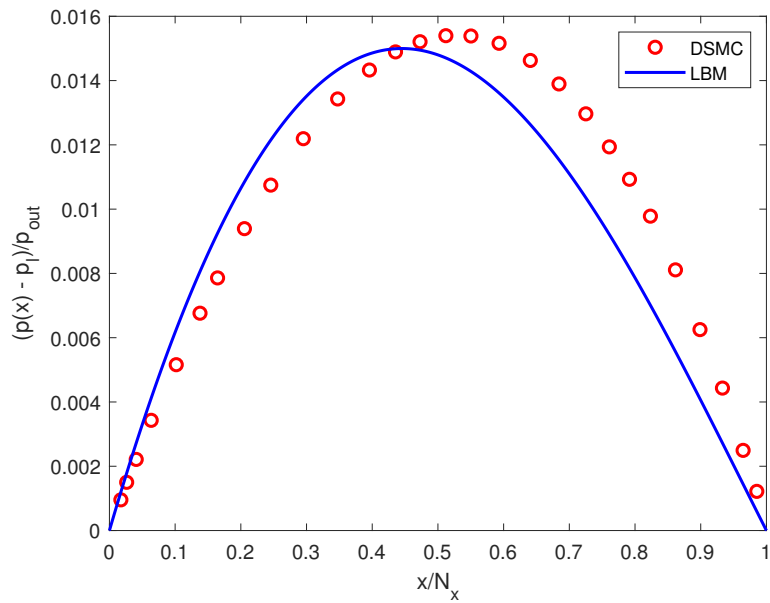


(b) Odchylka nelineárního tlakového spádu od lineárního podél středové čáry mikrokanálu

Obr. 29: $Kn_{\text{out}} = 0.388$



(a) Normalizovaný rychlostní profil na výstupu mikrokanálu



(b) Odchylka nelineárního tlakového spádu od lineárního podél středové čáry mikrokanálu

Obr. 30: $Kn_{\text{out}} = 1.128$

Závěr

V této diplomové práci byly uvedeny výchozí rovnice dynamiky tekutin tvořící nelineární systém Navierových - Stokesových rovnic doplněný o stavovou rovnici pro ideální plyn, dále principy kinetické teorie plynů, na jejich základech byla odvozena lattice Boltzmannova metoda. Následně byly popsány fundamentální rovnice a principy lattice Boltzmannovy metody včetně časové a fázové diskretizace Boltzmannovy rovnice, Chapmanova - Enskogova rozšíření, kolizních operátorů, implementace počátečních a okrajových podmínek a obecného algoritmu lattice Boltzmannovy metody. Ve třetí kapitole byl detailně popsán algoritmus lattice Boltzmannovy metody pro případ proudění s volnou hladinou ve 2D, včetně formulace okrajových podmínek volné hladiny, které tvoří stěžejní část vyvíjeného algoritmu. Následně byl vyvinutý algoritmus počítačově implementován ve výpočtovém prostředí MATLAB pro případ numerického řešení náhlého protržení vodní hráze. Dosažené numerické výsledky byly porovnány s experimentálními a numerickými daty dostupnými v literatuře. Pomocí vlastního vytvořeného programového skriptu bylo dosaženo relativně dobré shody i přes to, že byl použit základní MRT - LBM model bez dalších modifikací, zatímco dostupná numerická data byla získána užitím modelu turbulence. Ve čtvrté kapitole byl popsán algoritmus lattice Boltzmannovy metody pro případ mikroproudění ve 2D mikrokanálu. Byl prezentován způsob modifikace relaxačního času pro případ stlačitelného proudění plynu a způsob implementace skluzových okrajových podmínek 2. řádu na pevné nepropustné stěně mikrokanálu. Numerické výsledky získané pomocí vlastního vyvinutého programového skriptu byly i v tomto případě porovnány s numerickými výsledky dostupnými v literatuře. Porovnáním vlastních numerických výsledků s numerickými výsledky publikovanými v literatuře a získanými pomocí metod přímé simulace Monte - Carlo nebo metod „information preservation“ je zřejmé, že bylo dosaženo dobré shody ve všech simulovaných případech.

Přínosem této práce je ukázka variability a jednoduché implementace algoritmu lattice Boltzmannovy metody v diametrálně odlišných případech proudění ve 2D, stejně tak jako detailní popis odvození řídicí rovnice lattice Boltzmannovy metody a její diskretizace ve fázovém prostoru a čase. Za hlavní přínos této diplomové práce je možné považovat použití lattice Boltzmannovy metody pro řešení úlohy mikroproudění v režimech charakterizovaných Knudsenovým číslem $Kn \in (0.1; 10)$, kdy již selhává aplikace klasického kontinuálního přístupu popsaného nelineárním systémem Navierových - Stokesových rovnic doplněných o skluzové okrajové podmínky prvního řádu. Numerické simulace prezentované v této práci jasně ukázaly, že přístup založený na lattice Boltzmannově metodě rozšířený o skluzové okrajové podmínky druhého řádu dokáže lépe a přesněji zachytit proudové pole než klasický přístup založený na Navierových - Stokesových rovnicích se skluzem.

Na úplný závěr uveďme možná rozšíření navazující na obsah této diplomové práce. Algoritmus lattice Boltzmannovy metody pro proudění s volnou hladinou lze rozšířit o vhodný turbulentní model, který by umožnil modelovat reálnější případy turbulentního proudění. Za zvážení stojí také modifikace výpočetní sítě, jejíž uzly lze v problematických místech výpočtové oblasti dynamicky zhušťovat. Lattice Boltzmannovu metodu pro případ proudění v mikrokanálu je rovněž možné implementovat pro komplexnější geometrie včetně zahrnutí drsnosti stěn mikrokanálu. Další možné vylepšení je v paralelizaci algoritmu lattice Boltzmannovy metody za účelem efektivnější numerické simulace z hlediska výpočtového času.

Literatura

- [1] Ahangar, E. K., Ayani, M. B., and Esfahani, J. A. (2019). Simulation of rarefied gas flow in a microchannel with backward facing step by two relaxation times using lattice boltzmann method–slip and transient flow regimes. *International Journal of Mechanical Sciences*, 157:802–815.
- [2] Arkilic, E. B., Schmidt, M. A., and Breuer, K. S. (1997). Gaseous slip flow in long microchannels. *Journal of Microelectromechanical systems*, 6(2):167–178.
- [3] Badarch, A. (2017). *Application of macro and mesoscopic numerical models to hydraulic problems with solid substances*. PhD thesis, Nagaoka University of Technology.
- [4] Bakhshan, Y. and Omidvar, A. (2015). Calculation of friction coefficient and analysis of fluid flow in a stepped micro-channel for wide range of knudsen number using lattice boltzmann (mrt) method. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 440:161–175.
- [5] Beskok, A. and Karniadakis, G. E. (1999). Report: a model for flows in channels, pipes, and ducts at micro and nano scales. *Microscale thermophysical engineering*, 3(1):43–77.
- [6] Bhathnagar, P., Gross, E., and Krook, M. (1954). A model for collision processes in gases. *Physical Review*, 94(3):511.
- [7] Bird, G. A. and Brady, J. (1994). *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*, volume 5. Clarendon press Oxford.
- [8] D’humières, D. and Lallemand, P. (1986). Lattice gas automata for fluid mechanics. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 140(1-2):326–335.
- [9] Ewart, T., Firpo, J., Graur, I., Perrier, P., and Meolans, J. (2009). Dsmc simulation: Validation and application to low speed gas flows in microchannels. *Journal of fluids engineering*, 131(1).
- [10] Foster, N. and Fedkiw, R. (2001). Practical animation of liquids. In *Proceedings of the 28th annual conference on Computer graphics and interactive techniques*, pages 23–30.
- [11] Guo, Z., Zhao, T., and Shi, Y. (2006). Physical symmetry, spatial accuracy, and relaxation time of the lattice boltzmann equation for microgas flows. *Journal of Applied physics*, 99(7):074903.
- [12] Guo, Z. and Zheng, C. (2008). Analysis of lattice boltzmann equation for microscale gas flows: Relaxation times, boundary conditions and the knudsen layer. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 22(7):465–473.
- [13] Harlow, F. H. and Welch, J. E. (1965). Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *The physics of fluids*, 8(12):2182–2189.

- [14] He, X. and Luo, L.-S. (1997a). A priori derivation of the lattice boltzmann equation. *Physical Review E*, 55(6):R6333.
- [15] He, X. and Luo, L.-S. (1997b). Theory of the lattice boltzmann method: From the boltzmann equation to the lattice boltzmann equation. *Physical Review E*, 56:6811–6817.
- [16] Higuera, F. and Jimenez, J. (1989). Boltzmann approach to lattice gas simulations. *EPL (Europhysics Letters)*, 9(7):663.
- [17] Hirt, C. W. and Nichols, B. D. (1981). Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of computational physics*, 39(1):201–225.
- [18] Hoffmann, K. A. and Chiang, S. T. (2000). Computational fluid dynamics volume i. *Engineering Education System*.
- [19] Krüger, T. (2011). Unit conversion in lbm. In *LBM Workshop*. Dostupné z: http://lbmworkshop.com/wp-content/uploads/2011/08/2011-08-22_Edmonton_scaling.pdf.
- [20] Krüger, T., Kusumaatmaja, H., Kuzmin, A., Shardt, O., Silva, G., and Viggen, E. M. (2016). *The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice*. Springer.
- [21] Lallemand, P. and Luo, L.-S. (2000). Theory of the lattice boltzmann method: Dispersion, dissipation, isotropy, galilean invariance, and stability. *Physical Review E*, 61(6):6546.
- [22] Li, J. (2015). Appendix: Chapman-enskog expansion in the lattice boltzmann method. *ArXiv e-prints*.
- [23] Li, Q., He, Y., Tang, G., and Tao, W. (2011). Lattice boltzmann modeling of micro-channel flows in the transition flow regime. *Microfluidics and nanofluidics*, 10(3):607–618.
- [24] Loyalka, S. (1971). Velocity slip coefficient and the diffusion slip velocity for a multicomponent gas mixture. *The Physics of Fluids*, 14(12):2599–2604.
- [25] Michalis, V. K., Kalarakis, A. N., Skouras, E. D., and Burganos, V. N. (2010). Rarefaction effects on gas viscosity in the knudsen transition regime. *Microfluidics and nanofluidics*, 9(4-5):847–853.
- [26] Modena, M. C. (2019). Analysis and optimization of multiple-relaxation lattice boltzmann methods for under-resolved flow simulations. *Ph. D. Thesis, Universidad Politécnica de Madrid*.
- [27] Reichl, J. and Všetická, M. (2006). Encyklopedie fyziky. *Praha: c2006-2011 [cit. 2011-03-26]*. *Stavová rovnice ideálního plynu*. Dostupné z <http://fyzika.jreichl.com/index.php>.
- [28] Rostami, A., Mujumdar, A., and Saniei, N. (2002). Flow and heat transfer for gas flowing in microchannels: a review. *Heat and Mass transfer*, 38(4-5):359–367.

- [29] Shen, C., Tian, D., Xie, C., and Fan, J. (2004). Examination of the lbm in simulation of microchannel flow in transitional regime. *Microscale Thermophysical Engineering*, 8(4):423–432.
- [30] Thurey, N. (2007). Physically based animation of free surface flows with the lattice boltzmann method. *Ph. D. Thesis, University of Erlangen*.
- [31] Verhaeghe, F., Luo, L.-S., and Blanpain, B. (2009). Lattice boltzmann modeling of microchannel flow in slip flow regime. *Journal of Computational Physics*, 228(1):147–157.
- [32] Viggen, E. (2014). The lattice boltzmann method: Fundamentals and acoustics (ph. d thesis). *Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, Norway*.
- [33] Vimmr, J. (2002). Matematické modelování proudění stlačitelné tekutiny ve vnitřní aerodynamice. *Disertační práce, ZČU v Plzni*.
- [34] Yuan, Y. and Rahman, S. (2016). Extended application of lattice boltzmann method to rarefied gas flow in micro-channels. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 463:25–36.
- [35] Zou, Q. and He, X. (1997). On pressure and velocity boundary conditions for the lattice boltzmann bgk model. *Physics of fluids*, 9(6):1591–1598.