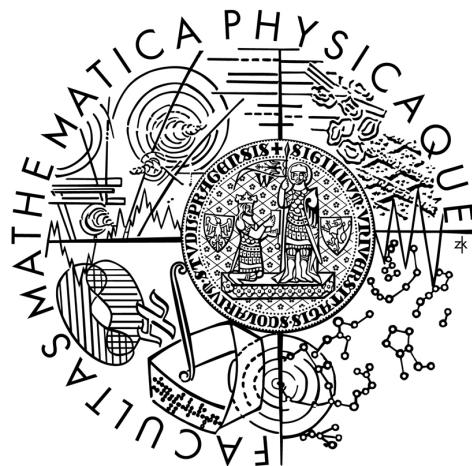


Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

DIPLOMOVÁ PRÁCE



Pavel Kuriščák

Simulace proudění nenewtonovských tekutin pomocí lattice Boltzmannovy metody

Matematický ústav UK

Vedoucí diplomové práce: RNDr. Ing. Jaroslav Hron Ph.D.

Studijní program: Fyzika

Studijní obor: Matematické a počítačové modelování
ve fyzice a technice

Praha 2011

Rád bych poděkoval své rodině a blízkým za podporu při psaní této diplomové práce, za jejich obětavost a vytvoření těch nejlepších podmínek k plnému soustředění. Také děkuji svému vedoucímu Jaroslavu Hronovi za cenné rady a připomínky, za trpělivost při mnohahodinových konzultacích a především za výpomoc s obsluhou programu COMSOL.

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracoval samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova v Praze má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle § 60 odst. 1 autorského zákona.

V Praze dne

Pavel Kurišcák

Obsah

1	Úvod	1
1.1	Koncepce práce	2
1.2	Notace a použité konvence	3
2	Klasický popis tekutin	4
2.1	Rovnice popisující proudění tekutiny	4
2.2	Newtonovské tekutiny	5
2.3	Nenewtonovské tekutiny	6
3	Mikroskopický popis tekutin	7
3.1	Formální odvození Boltzmannovy rovnice	7
3.2	Kolizní operátor	9
3.3	H-teorém a Boltzmannovo rozdělení rychlostí	10
3.4	BGK approximace kolizního operátoru	11
3.5	Přechod do bezrozměrných jednotek	12
4	Hydrodynamická limita Boltzmannovy rovnice	13
4.1	Obecné zákony zachování	13
4.2	Projekce Boltzmannovy rovnice do báze Hermitových polynomů	15
4.3	Limita Eulerových rovnic	16
4.4	Chapmanův-Enskogův rozvoj	18
4.5	Zjednodušení rovnovážného rozdělení	22
4.6	Škálování rychlostí	23
4.7	Člen objemové síly	24
5	Modifikace pro zobecněnou newtonovskou kapalinu	26
5.1	Možné přístupy	26
5.2	Hydrodynamická limita zobecněného newtonovského modelu	28
6	Lattice Boltzmannova metoda	34
6.1	HPP a FHP modely	34
6.2	Diskretizace rychlostního podprostoru	37
6.3	Prostorová diskretizace	39
6.4	Standardní LBM a kinetické schéma	40

6.5	D2Q9 implementace	41
6.6	Okrajové podmínky a výpočty derivací	43
6.7	Převod z mřížkových jednotek	43
7	Numerické výsledky	45
7.1	Simulační zásady	45
7.2	Newtonovské Poiseuillovo proudění	46
7.3	Nenewtonovské modely	48
7.4	Nenewtonovské Poiseuillovo proudění	50
7.5	Proudění kolem čtvercové překážky	55
7.6	Poznámky	66
8	Shrnutí	67
8.1	Závěr	67
8.2	Perspektivy	67
Dodatek A: Hermitovy polynomy		69
Dodatek B: Kvadraturní formule		74
Příloha		79

Název práce: Simulace proudění nenewtonovských tekutin pomocí lattice Boltzmannovy metody

Autor: Bc. Pavel Kuriščák

Katedra (ústav): Matematický ústav UK

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Ing. Jaroslav Hron Ph.D.

e-mail vedoucího: Jaroslav.Hron@mff.cuni.cz

Abstrakt: Cílem této práce je najít a zavést modifikaci lattice Boltzmannovy metody, která by umožňovala simulovat nenewtonovské chování tekutin. V teoretické části práce je představen postup (převzatý z práce [22]), založený na rozvoji do báze Hermitových polynomů, umožňující odvodit Navierovy-Stokesovy rovnice zcela *a priori* z Boltzmanovy rovnice. Tento postup je následně aplikován na metodu navrženou v [11], která umožňuje lokálně nastavovat viskozitu v tekutině dle požadavků konkrétního nenewtonovského modelu pomocí změny rovnovážného rozdělení. V závěrečné části práce je tato metoda implementována v podobě kinetického schématu a aplikována na tři ukázkové problémy.

Klíčová slova: lattice Boltzmannova metoda, nenewtonovské tekutiny, Hermittovský rozvoj, kinetické schéma

Title: Non-newtonian fluid flow simulation using lattice Boltzmann method

Author: Bc. Pavel Kuriščák

Department: Mathematical Institute, Charles University

Supervisor: RNDr. Ing. Jaroslav Hron Ph.D.

Supervisor's e-mail address: Jaroslav.Hron@mff.cuni.cz

Abstract: The aim of this thesis is to find and establish a modification to the Lattice Boltzmann Method, allowing it to simulate non-newtonian behaviour of fluids. In the theoretical part of thesis, there is introduced a derivation, based on the work of [22], that is capable of arriving to macroscopical Navier-Stokes equations completely *a priori* from the Boltzmann equation, utilizing the Hermite basis expansion. This derivation is afterwards applied to the method suggested by [11], that uses the changed equilibrium distribution to fine-tune the local fluid viscosity according to the non-newtonian model. In the last part of thesis, this method is implemented in the form of lattice kinetic scheme and tested on three sample problems.

Keywords: Lattice Boltzmann Method, non-newtonian fluids, Hermite expansion, lattice kinetic scheme

Kapitola 1

Úvod

Lattice Boltzmannova metoda je alternativní explicitní numerické schéma použitelné k řešení úloh mechaniky tekutin. Na rozdíl od jiných přístupů, jako například metody konečných prvků, jde o poměrně novou metodu, která se dostala na výsluní teprve na přelomu 80. a 90. let minulého století. Historicky vychází z numerických schémat založených na tzv. buněčných automatech - simulacích, které probíhají na regulární síti hodnot a vyvíjejí se podle jednoduchých lokálních pravidel založených na hodnotách nejbližších sousedů.

Později, kdy se již schéma v praxi používalo, byly postupně objevovány souvislosti umožňující zasadit ho do širšího teoretického rámce, zejména ve vztahu k Boltzmannově rovnici a obecně kinetické teorii. Základním postupem při zkoumání lattice Boltzmannovy metody je Chapmanův-Enskogův rozvoj, což je postup analogický poruchové teorii, umožňující ukázat konvergenci (či alespoň asymptotické přibližování) řešení, získaného touto metodou, k řešení úlohy formulované pomocí parciálních diferenciálních rovnic, v praxi tedy nejčastěji rovnic Navierových-Stokesových.

Relativně nové teoretické výsledky, týkající se lattice Boltzmannovy metody, které se objevily v uplynulém desetiletí, umožnily odvodit lattice Boltzmannovu metodu zcela *a priori* z Boltzmannovy rovnice na solidnějším (byť ne patrně zcela rigorózním) základě. Tyto výsledky využívají rozkladu řešení Boltzmannovy rovnice do báze Hermitových polynomů a ukazují, v jakém přesně smyslu je lattice Boltzmannova metoda diskretizací této rovnice.

Tato diplomová práce je zaměřena na aplikaci tohoto nového postupu při odvozování modifikace lattice Boltzmannovy metody, která by umožňovala simulovat proudění nenewtonovských (přesněji zobecněných newtonovských) tekutin.

1.1 Koncepce práce

Výklad v této práci je systematický, začínající u základních teoretických poznatků a výsledků, postupně přecházející k praktické implementaci. Poskytuje tak relativně ucelený pohled na problematiku, ovšem s důrazem spíše na teorii. Je členěn do osmi kapitol.

V druhé kapitole jsou rekapitulovány Navierovy-Stokesovy rovnice a současně je tak zavedeno značení veličin, které bude v práci dále používáno. Druhá kapitola také poskytuje základní přehled o nenewtonovských modelech relevantních této práci.

Třetí kapitola je koncipována jako rychlý úvod do statistické fyziky týkající se chování mikroskopických systémů částic. Je formulována Boltzmannova rovnice a další základní poznatky kinetické teorie, umožňující získat základní vhled do pozadí termínů, které se potom v dalším výkladu vyskytnou.

Čtvrtá kapitola již detailně probírá postup, který pomocí rozkladu do Hermittových polynomů a provedení Chapmanova-Enskogova rozvoje ukazuje za jistých předpokladů konvergenci řešení Boltzmannovy rovnice k řešení termálních stlačitelných Navierových-Stokesových rovnic. Zároveň již připravuje půdu pro pozdější diskretizaci zavedením škálování rychlostí a zjednodušených tvarů členů Boltzmannovy rovnice.

Pátá kapitola je potom podrobnou aplikací tohoto postupu pro jeden vybraný nenewtonovský model. Výsledkem jsou jsou konkrétní vztahy pro viskozitu, díky kterým je možné metodu prakticky implementovat.

Sestá kapitola se věnuje diskretizaci. Je zde také zavedeno *kinetické schéma* - drobná modifikace lattice Boltzmannovy metody, pro jehož dvojrozměrnou verzi jsou formulovány konkrétní vztahy, na kterých je založena její implementace.

V sedmé kapitole jsou vyhodnoceny praktické výsledky dosažené touto implementací, v případě Poiseuillova proudění porovnané s teoretickými hodnotami, v ostatních případech s výsledky získanými komerčním programem založeným na metodě konečných prvků - COMSOL.

Dále jsou na konci práce řazeny dva dodatky, týkající se zavedení Hermittových polynomů a kvadraturních formulí. Bylo cílem, aby tyto dodatky nebyly jen pouhým soupisem vztahů a identit, ale pokud možno srozumitelným výkladem - stručným úvodem do problematiky, umožňujícím nahlédnout do pozadí uváděných vztahů.

Součástí práce je rovněž příloha, kterou je zdrojový kód implementace diskutované nenewtonovské modifikace lattice Boltzmannovy metody, spolu s výsledky všech simulací.

1.2 Notace a použité konvence

Jelikož se v oboru vyskytuje mnoho různých konvencí ve značení, zavedeme nejprve pravidla a normy, kterých se drží tato práce. Předně, všechny vektory jsou uvedeny tučným malým písmenem se šipkou (např. \vec{u} , \vec{g}). Tenzory jsou vždy uvedeny tučným velkým písmenem (např. \mathbf{T}). Složky vektorů a tenzorů jsou již uvedeny normálním písmem, s indexy vpravo dole. Ve složkovém zápisu je užívána Einsteinova sumační konvence. Pouze ve složitějších či obzvlášť ilustrativních případech jsou sumy explicitně vypsány. V práci jsou dále použity tyto standardní vektorové a tenzorové operace a diferenciální operátory:

$$\bar{\mathbf{a}} \cdot \vec{\mathbf{b}} = a_i b_i \quad (1.1)$$

$$(\vec{\mathbf{a}} \otimes \vec{\mathbf{b}})_{ij} = a_i b_j \quad (1.2)$$

$$\mathbf{A} : \mathbf{B} = A_{ij} B_{ij} \quad (1.3)$$

$$\mathbf{A}\vec{\mathbf{b}} = A_{ij} b_j \quad (1.4)$$

$$\operatorname{div} \vec{\mathbf{v}} = \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \quad (1.5)$$

$$\operatorname{div} \vec{\mathbf{A}} = \frac{\partial A_{ij}}{\partial x_j} \quad (1.6)$$

$$(\operatorname{grad} \phi)_i = \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \quad (1.7)$$

Pokud nejsou u integrálu uvedeny meze, předpokládá se integrace přes celé \mathbb{R} či \mathbb{R}^n , podle kontextu.

Kapitola 2

Klasický popis tekutin

2.1 Rovnice popisující proudění tekutiny

Pro zařízení výše zmíněné notace a zavedení značení důležitých veličin a proměnných, bude uveden klasický makroskopický fyzikální popis mechaniky tekutin. V tomto popisu je zcela potlačena mikroskopická struktura tekutiny. Tekutina je vnímána jako kontinuum, v jehož libovolném bodě jsou definovány jeho základní makroskopické vlastnosti: ρ - hustota, \vec{u} - rychlosť, E - celková energie, p - tlak, θ - absolutní teplota a e - specifická vnitřní energie (vztažená na jednotku hmotnosti).

Vývoj těchto veličin v čase je potom popsán soustavou parciálních diferenciálních rovnic, které jsou odvozeny z požadavků na zachování hmotnosti, hybnosti, momentu hybnosti a energie. Z požadavku na zachování hmotnosti plyne rovnice kontinuity:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{u}) = 0. \quad (2.1)$$

Požadavek na zachování hybnosti vyžaduje splnění rovnic:

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = \rho \vec{g} + \operatorname{div} \mathbf{T}. \quad (2.2)$$

kde \vec{g} je hustota objemových sil (vztažená na jednotku hmotnosti) působící na tekutinu v daném bodě. Tenzor \mathbf{T} je tzv. tenzor napětí, reprezentující smykové a normálové síly v tekutině. Jeho fyzikální význam lze interpretovat tak, že pokud v daném bodě tekutiny budeme zkoumat vektor napětí \vec{t} na infinitezimální plošce o normálovém vektoru \vec{n} , bude dán vztahem:

$$\vec{t} = \mathbf{T} \vec{n}. \quad (2.3)$$

Dále, z požadavku na zachování momentu hybnosti plyne symetrie tenzoru napětí:

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^T. \quad (2.4)$$

A konečně, ze zákona o zachování celkové energie plyne rovnice pro energii:

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \operatorname{div}(E \vec{u}) = \rho \vec{g} \cdot \vec{u} + \operatorname{div}(\mathbf{T} \vec{u}) + \rho q - \operatorname{div} \vec{q}. \quad (2.5)$$

V této rovnici je q hustota tepelných zdrojů vztažená na jednotku hmotnosti a \vec{q} je tepelný tok. Tepelný tok v tekutině je dán Fourierovým zákonem:

$$\vec{q} = -k \nabla \theta, \quad (2.6)$$

kde k je koeficient tepelné vodivosti, zpravidla také závisející na θ . Specifická vnitřní energie e souvisí s celkovou energií vztahem:

$$E = \rho \left(e + \frac{|\vec{u}|^2}{2} \right). \quad (2.7)$$

Uvedené fyzikální zákony představují soustavu pěti rovnic o sedmi neznámých $e, \rho, u_1, u_2, u_3, p, \theta$ (Fourierův zákon a vztah pro celkovou energii byl použit pro redukci počtu neznámých). Pro doplnění uvedené soustavy rovnic je ještě potřeba popsat mechanické a energetické vlastnosti tekutiny stavovou rovnicí a vztahem pro specifickou vnitřní energii:

$$p = p(\rho, \theta), \quad (2.8)$$

$$e = e(\rho, \theta). \quad (2.9)$$

Mechanické vlastnosti je třeba nakonec dourčit rheologickým vztahem pro tenzor napětí \mathbf{T} .

2.2 Newtonovské tekutiny

Nejjednodušším rheologickým vztahem pro \mathbf{T} je

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I}, \quad (2.10)$$

kde \mathbf{I} je jednotkový tenzor. Tento vztah popisuje nevazké proudění. Ovšem za přepokladu platnosti tzv. Stokesových postulátů (izotropie \mathbf{T} , lineární závislost na tenzoru rychlosti deformace \mathbf{D} a další) plyne pro tenzor napětí \mathbf{T} následující předpis:

$$\mathbf{T} = (-p + \lambda \operatorname{div} \vec{v})\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D}, \quad (2.11)$$

kde \mathbf{D} je tenzor rychlosti deformace definovaný takto:

$$D_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (2.12)$$

Čísla μ resp. λ se nazývají dynamická resp. objemová viskozita a jsou konstantami nebo lineárními funkcemi termodynamických veličin. Tekutiny s tenzorem napětí \mathbf{T} ve tvaru (2.11) nazýváme newtonovské. Soustavu parciálních diferenciálních rovnic vzniklých dosazením tohoto tenzoru do zákonů zachování nazýváme pak Navierovy-Stokesovy rovnice.

2.3 Nenewtonovské tekutiny

Nenewtonovskými tekutinami nazýváme takové, které nesplňují přesně rheologický vztah (2.11). Obecně se jedná o materiály s velmi rozmanitou škálou chování a vlastností, zpravidla charakteristické neobvyklým chováním viskozity.

- **Zobecněné newtonovské tekutiny** - Tekutiny s proměnnou viskozitou závislou na rychlosti smyku. Pokud viskozita s rychlostí smyku klesá, mluvíme o pseudoplastických tekutinách, v opačném případě o dilatantních tekutinách.
- **Viskoelasticke tekutiny** - Mají některé vlastnosti společné s elastickými látkami, například určitý paměťový efekt, díky kterému se po odstranění napětí vrátí do klidového tvaru.
- **S časovou závislostí viskozity** - Pokud viskozita s dobou působení napětí klesá, mluvíme o tixotropních tekutinách, v opačném případě o reopexních tekutinách.
- a další ...

V této práci jsou středem zájmu zobecněné newtonovské tekutiny, neboť jejich konstituční vztah pro \mathbf{T} je velmi podobný tomu newtonovskému - jen s tím rozdílem, že je viskozita μ obecně závislá na rychlosti smyku. Rychlosť smyku $\dot{\gamma}$ definujeme jako

$$\dot{\gamma} = \sqrt{(2\mathbf{D} : \mathbf{D})} = \sqrt{2D_{ij}D_{ij}}. \quad (2.13)$$

Jedním z nejjednodušších vztahů, dávajících závislost dynamické viskozity na rychlosti smyku, je známý mocninný model:

$$\mu = k\dot{\gamma}^{n-1}, \quad (2.14)$$

kde k a n jsou parametry charakteristické pro danou tekutinu. Pro $n = 1$ se tento model redukuje na newtonovské chování. V numerických simulacích v této práci však používáme Carreau model:

$$\mu(\dot{\gamma}) = \frac{\mu_0 - \mu_\infty}{[1 + (K\dot{\gamma}^2)]^{m/2}} + \mu_\infty. \quad (2.15)$$

Konstanty μ_0 resp. μ_∞ jsou viskozity při nulové resp. limitně nekonečné rychlosti smyku. K a m jsou další konstanty závislé na materiálu.

Zobecněných newtonovských modelů je celá řada a není cílem tohoto výkladu se zabývat jejich podrobnějším výčtem. Zdařilý přehled je k nalezení například v [19].

Kapitola 3

Mikroskopický popis tekutin

3.1 Formální odvození Boltzmannovy rovnice

Alternativou k předešlé metodě popisu tekutin je model vycházející přímo z mikroskopických vlastností tekutiny. Tekutina, stejně jako každý jiný hmotný systém, je složena z mnoha vzájemně interagujících mikroskopických částic - atomů nebo molekul. Mějme tedy systém N interagujících částic, popsaných souřadnicemi \vec{q}_i a zobecněnými (nicméně v tomto případě skutečnými) hybnostmi \vec{p}_i . Vývoj tohoto systému je možné předpovědět na základě hamiltoniánu H a hamiltonových kanonických rovnic. V praxi je však pochopitelně nereálné pro libovolný makroskopický systém zjistit nebo připravit požadovaný mikrostav, natož pak provést výpočet. Tuto otázku řeší statistický popis stavu systému pomocí mnohočásticové rozdělovací funkce $f_N(\vec{q}_1, \vec{p}_1, \dots, \vec{q}_N, \vec{p}_N, t)$, která je definována jako hustota pravděpodobnosti nalezení systému v daném stavu ve fázovém prostoru (dimenze fázového prostoru je $3N$). Tato funkce zahrnuje všechny statistické informace o všech dynamických procesech v systému, speciálně zahrnuje i korelace mezi částicemi. f_N splňuje Liouvilleovu rovnici [9]:

$$\frac{\partial f_N}{\partial t} - \sum_{j=1}^{3N} \left(\frac{\partial H}{\partial q_j} \frac{\partial f_N}{\partial p_j} - \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial f_N}{\partial q_j} \right) = 0. \quad (3.1)$$

Integrací přes části fázového prostoru, můžeme definovat tzv. redukované hustoty (jedná se vlastně o marginální rozdělení hustoty pravděpodobnosti):

$$F_s(\vec{q}_1, \vec{p}_1, \dots, \vec{q}_s, \vec{p}_s, t) := V^s \int f_N(\vec{q}_1, \vec{p}_1, \dots, \vec{q}_N, \vec{p}_N, t) d\vec{q}_{s+1} d\vec{p}_{s+1} d\vec{q}_N d\vec{p}_N, \quad (3.2)$$

kde V^s je vhodná normalizační konstanta. Nejvíce redukovanou hustotou je funkce F_1 , kterou nazýváme jednočásticová rozdělovací funkce. Tato funkce je definována již pouze na šestidimenziorním fázovém prostoru a vyjadřuje hustotu pravděpodobnosti výskytu náhodně vybrané částice v dané poloze prostoru a s danou hybností. Částice pokládáme za nerozlišitelné. Nutno podotknout, že touto redukcí jsme drasticky snížili množství informace obsažené v našem popisu.

Například již není možné spočítat střední interakční energii párových interakcí, protože k tomu je nutná znalost dvojčasticových korelací [6].

Předpokládejme pro jednoduchost, že mají všechny částice stejnou hmotnost. Potom vynásobením počtem častic a hmotností definujeme novou funkci (přeznačujeme prostorovou proměnnou na \vec{x}):

$$f(\vec{x}, \vec{v}, t) = NmF_1(\vec{q}_1, \frac{\vec{p}_1}{m}, t). \quad (3.3)$$

Potom platí, že $f(\vec{x}, \vec{v}, t) d\vec{x} d\vec{v}$ bude nabývat střední hodnoty hmotnosti častic v tekutině, jejichž poloha je v malém okolí souřadnice $\vec{x} + d\vec{x}$ a rychlosť v malém okolí dané rychlosťi $\vec{v} + d\vec{v}$.

Fixujeme-li souřadnici \vec{x} , mají momenty rychlostního rozdělení častic v daném bodě makroskopický fyzikální význam hustoty ρ , makroskopické rychlosťi \vec{u} a energie:

$$\int f(\vec{x}, \vec{v}, t) d\vec{v} = \rho(\vec{x}, t) \quad (3.4)$$

$$\int \vec{v} f(\vec{x}, \vec{v}, t) d\vec{v} = \rho \vec{u}(\vec{x}, t) \quad (3.5)$$

$$\frac{1}{2} \int \vec{v}^2 f(\vec{x}, \vec{v}, t) d\vec{v} = \frac{1}{2} \rho \vec{u}^2(\vec{x}, t) + \frac{3}{2} \frac{\rho k T}{m}(\vec{x}, t) \quad (3.6)$$

Zanedbáme-li kolize mezi česticemi, můžeme přesně určit, jak se bude systém vyvíjet, protože nejde o nic jiného než pohyb při působení vnější síly [25]:

$$f\left(\vec{x} + \vec{v} dt, \vec{v} + \frac{\vec{F}}{m} dt, t + dt\right) d\vec{x} d\vec{v} = f(\vec{x}, \vec{v}, t) d\vec{x} d\vec{v}. \quad (3.7)$$

Nicméně v případě, kolize vezmeme do úvahy, tato rovnice přestane platit. Některé částice, směřující do bodu kde je očekáváme, byly kolizí vychýleny ze své předpokládané trajektorie. Jiné částice naopak vlivem kolize neplánovaně dorazí. Rozdíl mezi očekávaným a skutečným počtem častic reprezentujeme pomocí tzv. kolizního operátoru Q . Předchozí rovnici tedy upravíme na tvar:

$$f\left(\vec{x} + \vec{v} dt, \vec{v} + \frac{\vec{F}}{m} dt, t + dt\right) d\vec{x} d\vec{v} - f(\vec{x}, \vec{v}, t) d\vec{x} d\vec{v} = Q d\vec{x} d\vec{v} dt. \quad (3.8)$$

Rozvineme-li pravou stranu rovnice do Taylorova rozvoje prvního řádu, obdržíme Boltzmannovu rovnici:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \text{grad}_x + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \text{grad}_v \right) f(\vec{x}, \vec{v}, t) = \frac{df}{dt} \equiv Q. \quad (3.9)$$

Později bude patrná přímá souvislost mezi touto rovnicí a předpisem pro vývoj systému v lattice Boltzmannově metodě. Tento předpis bude její diskretizací, operující na diskretizované jednočasticové rozdělovací funkci. Hodnoty rozdělovací funkce budou v souřadnicovém podprostoru určeny pouze v bodech regulární mříže (lattice). V rychlostním podprostoru budou hodnoty určeny pouze pro konečný počet rychlostí $i\vec{v}$.

3.2 Kolizní operátor

Samotná Boltzmannova rovnice (3.9), bez další specifikace tvaru kolizního operátoru Q je prázdným tvrzením. Teprve určení operátoru Q vnese do výpočtu všechnu reálnou dynamiku. To je však obecně velmi složitá úloha, neboť částicové systémy, které studujeme mohou být dosti různorodé. Srážky mohou probíhat různými mechanismy - částice mohou mít rozličné vzájemné interakční potenciály, v závislosti na hustotě častic mohou srážky probíhat relativně zřídka (v případě plynu) nebo naopak neustále (kapalina). Na druhou stranu, nezávisle na konkrétním mechanismu srážek mohou být výsledné makroskopické vlastnosti různých látek dost podobné, jak se brzy ukáže. Pro tuto chvíli ale musíme přijmout určité zjednodušující předpoklady, které nám umožní vyjádřit kolizní operátor explicitně [9]:

- **Pouze dvojčásticové interakce** - Tato aproximace je dobře splněna u plynů, kde po většinu doby částice letí bez interakce s ostatními a srážka trvá oproti střední volné době letu relativně krátkou dobu.
- **Molekulární chaos** - Rychlosti častic před interakcí nejsou vzájemně korelovány - opět je dobře splněno u plynů.
- **Kolize jsou nezávislé na vnější síle** - Účinný průřez pro srážky je vnější silou ovlivněn pouze zanedbatelně.

Za výše uvedených přepokladů lze kolizní operátor Q vyjádřit ve formě následujícího integrálu [10]:

$$Q(f, f) = \int \int \sigma(\Omega) |\vec{v} - \vec{v}_1| [f(\vec{v}') f(\vec{v}_1') - f(\vec{v}) f(\vec{v}_1)] d\vec{v}_1 d\Omega, \quad (3.10)$$

kde $\sigma(\Omega)$ je diferenciální účinný průřez dvojčásticové srážky, která mění rychlosti častic $\{\vec{v}, \vec{v}_1\}$ na rychlosti $\{\vec{v}', \vec{v}_1'\}$. Značení $Q(f, f)$ je použito pro lepší korespondenci s literaturou. V textech o Boltzmannově rovnici je Q speciálním případem obecného bilineárního integrálního operátoru $Q(f, g)$.

Nyní si všimněme důležité vlastnosti kolizního operátoru. Nechť $\phi = \phi(\vec{u})$ je funkce, která při výše zmiňované kolizi splňuje podmínu:

$$\phi(\vec{v}) + \phi(\vec{v}_1) = \phi(\vec{v}') + \phi(\vec{v}_1'). \quad (3.11)$$

Takovou funkci nazveme *kolizní invariant*. Je zřejmé, že libovolná lineární kombinace kolizních invariantů je rovněž kolizní invariant. Lze ukázat [6], že každý kolizní invariant splňuje vztah:

$$\int \phi(\vec{v}) Q(f, f) d\vec{v} = 0. \quad (3.12)$$

Při skutečné srážce dvou častic (přepokládme konzervativní interakční síly) se zachovává jejich hmotnost, celkový vektor rychlosti \vec{v} a energie, která je úměrná

\vec{v}^2 . Existuje tedy pět základních kolizních invariantů:

$$\begin{aligned}\phi_1 &= 1 \\ (\phi_2, \phi_3, \phi_4) &= (v_1, v_2, v_3) \\ \phi_5 &= \vec{v}^2\end{aligned}$$

3.3 H-teorém a Boltzmannovo rozdělení rychlostí

Nyní již držíme v rukou kompletní model vývoje jednoduchého plynu. Pořád jde však o model příliš složitý na to, aby byl v praxi aplikovatelný. Ukazuje se, že výpočet kolizního integrálu je dosti náročný. Nicméně již na této úrovni Boltzmann dokázal za pomocí výše uvedených vlastností kolizního operátora odvodit velmi důležitou obecnou zákonitost, a sice že nezávisle na počáteční hodnotě rozdělovací funkce f spěje takový plyn do právě jednoho rovnovážného stavu - Maxwell-Boltzmannova rozdělení rychlostí.

Definujeme veličinu H předpisem:

$$H(t) = \int f(\vec{x}, \vec{v}, t) \ln f(\vec{x}, \vec{v}, t) \, d\vec{v} \, d\vec{x}. \quad (3.13)$$

Pro systém N statisticky nezávislých částic je tato veličina až na multiplikativní konstantu rovna termodynamické entropii systému S :

$$S = -NkH. \quad (3.14)$$

Zderivujeme (3.13) podle času:

$$\frac{dH}{dt} = \int \frac{\partial f}{\partial t}(\vec{x}, \vec{v}, t) [1 + \ln f(\vec{x}, \vec{v}, t)] \, d\vec{x} \, d\vec{v}. \quad (3.15)$$

Za člen $\frac{\partial f}{\partial t}$ dosadíme z Boltzmannovy rovnice (3.9) s kolizním operátorem (3.10). Po krátkém odvození, založeném na diskusi o srážkové symetrii kolizního operátoru (viz např [10]), dostáváme pro časovou změnu H vztah:

$$\frac{dH}{dt} = \frac{1}{2} \int \sigma(\Omega) |\vec{v}_2 - \vec{v}_1| (f'_2 f'_1 - f_2 f_1) [\ln(f_1 f_2) - \ln(f'_1 f'_2)] \, d\vec{v}_1 \, d\vec{v}_2 \, d\vec{x} \, d\Omega. \quad (3.16)$$

Protože však platí nerovnost

$$(b - a)(\ln a - \ln b) < 0 \quad a, b > 0, \quad a \neq b \quad (3.17)$$

dostáváme tvrzení H-teorému:

$$\frac{dH}{dt} \leq 0, \quad (3.18)$$

přičemž rovnost nastává v případě, že $f(\vec{v}') f(\vec{v}'_1) - f(\vec{v}) f(\vec{v}_1) = 0$. Logaritmováním tohoto vztahu dostáváme, že:

$$\ln(f(\vec{v}')) + \ln(f(\vec{v}'_1)) = \ln(f(\vec{v})) + \ln(f(\vec{v}_1)) \quad (3.19)$$

což znamená, že v rovnováze je $\ln(f)$ kolizní invariant a musí být tedy ve tvaru lineární kombinace elementárních kolizních invariantů. f tedy musí být ve tvaru

$$f = \exp(a + \vec{\mathbf{b}} \cdot \vec{\mathbf{v}} + c\vec{\mathbf{v}}^2) \quad a, c \in \mathbb{R}, \vec{\mathbf{b}} \in \mathbb{R}^3 \quad (3.20)$$

Neznámé konstanty určíme z požadavků na korespondenci s makroskopickými veličinami dle (3.4)-(3.6)

$$f^{(0)} = \rho \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{m}{2kT} (\vec{\mathbf{u}} - \vec{\mathbf{v}})^2 \right], \quad (3.21)$$

což je právě Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení rychlostí částic v plynu. Zopakujme, že $\vec{\mathbf{u}}$ je makroskopická rychlosť v daném bodě, zatímco $\vec{\mathbf{v}}$ je mikroskopická rychlosť částice. Ukázalo se tedy, že z rozumných předpokladů (např. dostatečné hladkosti H) spěje stav našeho modelového plynu v čase nenávratně k určitému rovnovážnému rozdělení. Historicky vzbuzovala tato nevratnost nevoli, protože východiskem našeho postupu byly klasické Newtonovské pohybové zákony, které jsou invariantní vůči obrácení chodu času, kdežto výsledkem jsme dostali proces, který tuto invariaci nesplňuje. Ukazuje se, že příčina časové nevratnosti leží v předpokladu molekulárního chaosu, který byl použit pro odvození kolizního operátoru [10].

3.4 BGK approximace kolizního operátoru

Přestože byly i přes velmi obecný tvar kolizního operátoru (3.10) odvozeny poměrně silné výsledky, pro praktické použití zůstává stále nepoužitelný. Obecně nejvíce užívanou approximaci kolizního operátoru navrhli Bhatnagar, Gross a Krook [2] ještě v roce 1954. Pokud se ovšem zamyslíme nad jeho tvarem, je zřejmé, že je to volba přirozená a nejspíš i nejjednoduší možná. Potřebujeme totiž naplnit tyto základní požadavky na kolizní operátor:

- Zachovává kolizní invarianty ve smyslu rovnice (3.12). Alternativně formulováno, podél trajektorií ve fázovém prostoru jsou zachovány makroskopické veličiny těmto kolizním invariantům odpovídající (tedy např. ρ , $\vec{\mathbf{u}}$ a θ).
- Kolizní operátor postupně ustavuje rovnovážné Maxwell-Boltzmannovo rozdělení v duchu H-teorému.

Přirozený způsob, jak tyto požadavky splnit, je nechat lokální rozdělení f relaxovat k rovnovážnému rozdělení $f^{(0)}$ se stejnými makroskopickými vlastnostmi jako f . Rychlosť relaxace nechť je přímo úměrná výchylce z tohoto rovnovážného rozdělení. Relaxace má tedy exponenciální charakter a tímto zavedený tzv. BGK operátor má tvar:

$$\frac{df}{dt} \equiv Q = -\frac{1}{\tau}(f - f^{(0)}(\rho, \vec{\mathbf{u}}, \theta)). \quad (3.22)$$

Veličiny ρ , \vec{u} a θ jsou získány výpočtem z f . Veličina τ je charakteristickým časem relaxace k rovnovážnému rozdělení. Úspěšným aproxirováním kolizního operátoru, který je nyní snadný na vyhodnocení v simulaci, jsme konečně dospěli k formulaci rovnice, jejímuž řešení se nyní budeme až do konce věnovat. Pro přehlednost označme $\vec{F}/m \equiv \vec{g}$:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \text{grad}_x + \vec{g} \cdot \text{grad}_v \right) f(\vec{x}, \vec{v}, t) = -\frac{1}{\tau}(f - f^{(0)}). \quad (3.23)$$

3.5 Přechod do bezrozměrných jednotek

Protože se v příštím postupu budeme věnovat rozkladu rozdělení f do řady v Hermitových polynomech, proved'me ještě přechod k bezrozměrným jednotkám. Nechť θ_0 resp. m_0 jsou charakteristická teplosta resp. jednotková hmotnost molekul v systému. Potom $c_0 \equiv \sqrt{k\theta_0/m_0}$ lze identifikovat s rychlostí zvuku při teplotě θ_0 [22]. Přeskálujme nyní teplotu θ , rychlosti \vec{u} a \vec{v} , vzdálenosti l a časy t do relativních jednotek standardně:

$$\hat{\vec{u}} = \frac{\vec{u}}{c_0} \quad (3.24)$$

$$\hat{\vec{v}} = \frac{\vec{v}}{c_0} \quad (3.25)$$

$$\hat{\theta} = \frac{\theta}{\theta_0} \quad (3.26)$$

$$\hat{l} = \frac{l}{l_0} \quad (3.27)$$

$$\hat{t} = \frac{t}{t_0}. \quad (3.28)$$

Charakteristická vzdálenost l_0 resp. čas t_0 jsou voleny tak, aby $l_0 = c_0 t_0$. Ukazuje se, že Boltzmannova rovnice zůstává v tomto škálování formálně neměnná, pouze s jiným vyjádřením rovnovážného rozdělení (již zobecněno do d dimenzií) [22]:

$$f^{(0)} = \frac{\rho}{(2\pi\hat{\theta})^{d/2}} \exp\left(-\frac{(\hat{\vec{u}} - \hat{\vec{v}})^2}{2\hat{\theta}}\right). \quad (3.29)$$

Rychlosť zvuku je jednotková. Notaci se stríškou ovšem nadále vypustíme a všechny veličiny v dalším výkladu jednoduše považujeme za bezrozměrné.

Kapitola 4

Hydrodynamická limita Boltzmannovy rovnice

4.1 Obecné zákony zachování

V další části budeme diskutovat korespondenci Boltzmannovy rovnice s makroskopickým chováním, popsaným klasickými rovnicemi mechaniky tekutin. Prvním krokem bude odvození obecných zákonů zachování. Ukážeme, že v případně vhodné definice makroskopických veličin (např. tenzoru napětí, tepelného toku apod.) dostaneme rovnice formálně shodné s těmi v kapitole 2. Následují pouze hlavní body postupu, podrobné odvození je k nalezení třeba v [10].

Mějme pozorovatelnou veličinu $A(\vec{x}, \vec{v}, t)$. Pro fixní bod \vec{x} a čas t je její průměrná hodnota vzhledem k rychlostnímu podprostoru definována takto:

$$\langle A \rangle (\vec{x}, t) = \frac{1}{\rho} \int A f \, d\vec{v}. \quad (4.1)$$

Již z dřívějšího ((3.4) a (3.5)) známe vztahy pro hustotu a makroskopickou rychlosť \vec{u} v daném bodě:

$$\rho \langle 1 \rangle = \int f \, d\vec{v} = \rho \quad (4.2)$$

$$\rho \langle v_i \rangle = \int v_i f \, d\vec{v} = \rho u_i \quad (4.3)$$

Definujme nyní novou mikroskopickou rychlosť \vec{c} , vztázenou vůči lokální makroskopické rychlosti \vec{u} :

$$\vec{c}(\vec{v}, \vec{x}, t) = \vec{v} - \vec{u}(\vec{x}, t). \quad (4.4)$$

V této nové vztázné soustavě je z rovnice (3.6) odstraněn člen odpovídající kinetické energii:

$$\frac{\rho}{2} \langle \vec{c}^2 \rangle = \frac{1}{2} \int \vec{c}^2 f \, d\vec{v} \equiv \rho e = \frac{d}{2} \rho \theta. \quad (4.5)$$

Poslední rovnost plyne z ekvipartičního teorému.

Pro odvození obecného zákonu zachování vyjdeme z Boltzmannovy rovnice (3.9), přičemž ani nepotřebujeme BGK approximaci. Rovnici přenásobíme veličinou A a zintegrujeme přes rychlostní podprostor. Dostáváme:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int A f \, d\vec{v} + \frac{\partial}{\partial x_i} \int A v_i f \, d\vec{v} - \int \frac{\partial A}{\partial x_i} v_i f \, d\vec{v} + \int \frac{\partial}{\partial v_i} (A g_i f) \, d\vec{v} \\ - \int \frac{\partial A}{\partial v_i} g_i f \, d\vec{v} - \int A \frac{\partial g_i}{\partial v_i} f \, d\vec{v} = \int A Q(f, f) \, d\vec{v}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Čtvrtý člen na levé straně je nulový, protože $f \rightarrow 0$ pro $|\vec{v}| \rightarrow \infty$. Pro jednoduchost uvažujme sílu nezávislou na mikroskopické rychlosti částic, což nám dovoluje položit roven nule rovněž poslední člen na levé straně. Přepsán v symbolice středních hodnot a diferenciálních operátorů přešel předešlý vztah do tvaru:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \langle A \rangle) + \operatorname{div} (\rho \langle \vec{v} A \rangle) - \rho \langle \vec{v} \cdot \operatorname{grad}_x A \rangle - \rho \langle \vec{g} \cdot \operatorname{grad}_v A \rangle = \int A Q(f, f) \, d\vec{v}. \quad (4.7)$$

Nyní za A dosadíme veličiny, které se zachovávají při kolizích (tedy kolizní invarianty). Člen na pravé straně je nulový díky vztahu (3.12) a dostaneme tak postupně všechny zákony zachování. Pro $A = 1$ máme okamžitě rovnici kontinuity:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \vec{u}) = 0. \quad (4.8)$$

Pro $A = \vec{v}$ dostáváme zákon zachování hybnosti:

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \vec{v} \otimes \vec{v}) = \rho \vec{g}. \quad (4.9)$$

Zadefinujeme-li tenzor napětí \mathbf{T} mikroskopicky vztahem

$$\mathbf{T} = - \int \vec{c} \otimes \vec{c} f \, d\vec{c}, \quad (4.10)$$

přejde předchozí rovnice do správného formálního tvaru:

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) - \operatorname{div} \mathbf{T} = \rho \vec{g}. \quad (4.11)$$

Ze stopy tenzoru napětí můžeme pomocí vztahu (4.5) a ekvipartičního teorému odvodit vztah pro tlak:

$$p = \frac{T_{ii}}{d} = \frac{2\rho e}{d} = \rho \theta. \quad (4.12)$$

Nakonec dosadíme třetí kolizní invariant $A = \vec{v}^2/2$. Dostaneme tak zákon zachování energie.

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho e + \frac{1}{2} \rho \vec{u}^2 \right) + \operatorname{div} \left\langle \frac{1}{2} \vec{v}^2 \vec{v} \right\rangle = 0. \quad (4.13)$$

Pokud definujeme mikroskopicky tepelný tok takto

$$\vec{q} = \frac{1}{2} \int \bar{c} \bar{c}^2 d\bar{c}, \quad (4.14)$$

přejde i rovnice pro energii do známého tvaru:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho e + \frac{1}{2} \rho \vec{u}^2 \right) + \operatorname{div} \left[\vec{u} \left(\rho e + \frac{1}{2} \rho \vec{u}^2 \right) + \mathbf{T} \vec{u} + \vec{q} \right] = 0. \quad (4.15)$$

Dostali jsme tak formálně shodné zákony zachování s těmi uvedenými v kapitole 2. Hydrodynamická limita bude odvozena až ve chvíli, kdy budeme schopni něco říci o tvaru řešení Boltzmannovy rovnice, tedy rozdělovací funkci f . Teprve tehdy, až bude známo řešení f v řeči makroskopických veličin (konstituční vztahy), bude možné jej do těchto zákonů zachování dosadit a ověřit, jestli je výsledkem korektní hydrodynamické limitní chování.

V prvním přiblížení lze řešení Boltzmannovy rovnice odhadnout rovnovážným rozdělením $f = f^{(0)}$. A skutečně, dosadíme-li do zákonů zachování rovnovážné rozdělení, dostaneme jako výsledek Eulerovy rovnice. Protože však v dalším postupu potřebujeme zavést rozklad funkce f do báze Hermitových polynomů, zavedeme nejprve formalismus tohoto rozkladu a přechod k Eulerovým rovnícím provedeme až v něm. S výhodou totiž upotřebíme rozličné mezinásobky, které nám potom usnadní práci při přechodu k Navierovým-Stokesovým rovnicím.

4.2 Projekce Boltzmannovy rovnice do báze Hermitových polynomů

Ze vztahů (3.4) - (3.6) vidíme, že makroskopické veličiny lze spočítat jako momenty rozdělovací funkce f . Jak je popsáno v Dodatku A, je velice výhodné reprezentovat tuto rozdělovací funkci pomocí rozkladu do báze Hermitových polynomů, protože jednotlivé momenty které nás zajímají, jsou bud' přímo rovny koeficientům rozkladu, nebo jsou jejich jednoduchou lineární kombinací. To s sebou nese dvě zásadní pozitiva. Předně, využitím vhodných identit, které platí pro Hermitovy polynomy, můžeme provést projekci Boltzmannovy rovnice, která potom přejde na parciální diferenciální rovnici pro jednotlivé koeficienty. Ukáže se, že tyto rovnice jsou korektní rovnice makroskopické mechaniky tekutin (Eulerovy, později i Navierovy-Stokesovy). Druhým pozitivem je fakt, že po rozložení do této báze můžeme členy od nějakého zvoleného N -tého rádu odstranit, aniž bychom ztratili informaci o prvních N koeficientech a z nich odvozených momentech (na kterých závisí makroskopická dynamika). Tím se však z f stane funkce z konečnědimenzionálního prostoru, která je reprezentovatelná konečným množstvím hodnot. To bude výchozím bodem pro diskretizaci Boltzmannovy rovnice.

Věnujme se tedy nejprve prvnímu kroku, a sice projekci Boltzmannovy rovnice do báze Hermitových polynomů. Použijeme rovnici (3.23) s BGK approximací

kolizního operátoru, přenásobíme ji hermitovým polynomem $\mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}$ a integrujeme přes rychlostní podprostor. Členy na levé straně postupně rozbereme:

$$\int \frac{\partial f}{\partial t} \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} d\vec{v} + \int v_i \frac{\partial f}{\partial x_i} \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} d\vec{v} + \int g_i \frac{\partial f}{\partial v_i} \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} d\vec{v} = -\frac{1}{\tau} \int (f - f^{(0)}) \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} d\vec{v}. \quad (4.16)$$

Integrace prvního členu je triviální:

$$\int \frac{\partial f}{\partial t} \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} d\vec{v} = \frac{\partial}{\partial t} \int f \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} d\vec{v} = \frac{\partial}{\partial t} a_{\vec{\alpha}}^{(n)}. \quad (4.17)$$

V druhém členu využijeme identit (8.26) a (8.27). Pro zjednodušení zápisu je také využito značení (8.28):

$$\begin{aligned} \int v_i \frac{\partial f}{\partial x_i} \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} d\vec{v} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \int v_i \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} f d\vec{v} = \\ &= \frac{\partial}{\partial x_i} \int (\mathbf{H}_{i\vec{\alpha}}^{(n+1)} + \mathbf{H}_{\vec{\alpha},i}^{(n-1)}) f d\vec{v} = \frac{\partial}{\partial x_i} (a_{i\vec{\alpha}}^{(n+1)} + a_{\vec{\alpha},i}^{(n-1)}). \end{aligned} \quad (4.18)$$

V třetím členu nejprve pomocí Greenovy identity přesuneme parciální derivaci podle v_i z funkce f na Hermitův polynom. Povrchový integrál je bezpečně nulový, neboť $f \rightarrow 0$ pro $|\vec{v}| \rightarrow \infty$:

$$\int g_i \frac{\partial f}{\partial v_i} \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} d\vec{v} = -g_i \int \frac{\partial \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}}{\partial v_i} f d\vec{v} = -g_i \int \mathbf{H}_{\vec{\alpha},i}^{(n-1)} f d\vec{v} = -g_i a_{\vec{\alpha},i}^{(n-1)}. \quad (4.19)$$

Zprojektovaná Boltzmannova rovnice s BGK approximací tedy přejde v parciální diferenciální rovnici mezi jednotlivými koeficienty rozkladu:

$$\frac{\partial}{\partial t} a_{\vec{\alpha}}^{(n)} + \frac{\partial}{\partial x_i} (a_{i\vec{\alpha}}^{(n+1)} + a_{\vec{\alpha},i}^{(n-1)}) - g_i a_{\vec{\alpha},i}^{(n-1)} = -\frac{1}{\tau} \int_{\mathbb{R}^d} (f - f^{(0)}) \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} d\vec{v}. \quad (4.20)$$

4.3 Limita Eulerových rovnic

Jak již bylo řečeno, pro odvození Eulerových rovnic stačí položit $f = f^{(0)}$. Spočítejme tedy pro začátek koeficienty $f^{(0)}$ v Hermitově rozkladu, definované vztahem (viz Dodatek A):

$$a_{\vec{\alpha}}^{(0)(n)} = \int f^{(0)} \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} d\vec{v}. \quad (4.21)$$

Tyto koeficienty do čtvrtého rádu jsou [16]:

$$a^{(0)(0)} = \rho \quad (4.22)$$

$$a_i^{(0)(1)} = \rho u_i \quad (4.23)$$

$$a_{ij}^{(0)(2)} = \rho u_i u_j + \rho(\theta - 1)\delta_{ij} \quad (4.24)$$

$$a_{ijk}^{(0)(3)} = \rho u_i u_j u_k + \rho(\theta - 1)(\delta_{ij} u_k + \delta_{ik} u_j + \delta_{jk} u_i) \quad (4.25)$$

$$\begin{aligned} a_{ijkl}^{(0)(4)} &= \rho u_i u_j u_k u_l + \rho(\theta - 1)^2 (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \\ &+ \rho(\theta - 1)(\delta_{ij} u_k u_l + \delta_{ik} u_j u_l + \delta_{il} u_j u_k) \\ &+ \delta_{jk} u_i u_l + \delta_{ji} u_i u_k + \delta_{kl} u_i u_j \end{aligned} \quad (4.26)$$

Takto uvedené koeficienty v [16] jsou sice plně vyjádřené, nicméně vyčíslit příslušné Gaussovské integrály je poměrně pracné. Alternativní metoda výpočtu využívá toho, že je Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení separabilní do jednotlivých proměnných, stejně jako hermitovy polynomy (viz Dodatek A) (8.11).

$$f^{(0)} = \rho \prod_{i=1}^d \frac{1}{\sqrt{2\pi\theta}} \exp\left(-\frac{(v_i - u_i)^2}{2\theta}\right). \quad (4.27)$$

Vztah pro výpočet koeficientu potom přejde do tvaru:

$$a_{\vec{\alpha}}^{(0)(n)} = \rho \prod_{i=1}^d \int H^{c(i,\vec{\alpha})} \frac{1}{\sqrt{2\pi\theta}} \exp\left(-\frac{(v_i - u_i)^2}{2\theta}\right) dv_i \equiv \rho \prod_{i=1}^d \tilde{a}^{(c(i,\vec{\alpha}))}. \quad (4.28)$$

Symbolem $\tilde{a}^{(n)}$ jsme označili příslušný "jednorozměrný" koeficient. Stačí tedy vyčíslit jeden Gaussovský integrál pro každý řadu polynomu:

$$\tilde{a}^{(0)} = 1 \quad (4.29)$$

$$\tilde{a}^{(1)} = u_i \quad (4.30)$$

$$\tilde{a}^{(2)} = u_i^2 + \theta - 1 \quad (4.31)$$

$$\tilde{a}^{(3)} = u_i^3 + 3u_i(\theta - 1) \quad (4.32)$$

$$\tilde{a}^{(4)} = u_i^4 + 3(\theta - 1)^2 + 6u_i^2(\theta - 1) \quad (4.33)$$

Ted' už ovšem pokračujeme dál v projekci. Dosadíme rovnovážné koeficienty do rovnice (4.20). Kolizní operátor na pravé straně rovnice je nulový. Pro $n = 0$ dostáváme okamžitě rovnici kontinuity (koeficienty řádu $n-1$ jsou nulové, protože odpovídají nulovému polynomu). Rovnice necháme v zápisu po složkách, aby byla patrná korespondence s předchozími obecnými projekčními vztahy:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0. \quad (4.34)$$

Pro $n = 1$ dostáváme:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i u_j + \rho(\theta - 1)\delta_{ij} + \rho\delta_{ij}) - \rho g_i \delta_{ij} = 0 \quad (4.35)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i u_j) = \rho g_j + \frac{\partial}{\partial x_j} (-\rho\theta). \quad (4.36)$$

V případě $n = 2$ spočítáme $1/2$ stopy výsledku. Diagonální člen (index j je volný, nesčítá se přes něj) má tvar:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_j^2 + \rho(\theta - 1)) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i u_j^2 + \rho(\theta - 1)(u_i + 2\delta_{ij}u_j) + 2\rho\delta_{ij}u_j) - 2\rho g_i u_j \delta_{ij} = 0. \quad (4.37)$$

Sečteme tyto diagonální členy a vynásobíme je $1/2$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho \vec{u}^2 + \frac{d}{2} \rho \theta - \frac{d}{2} \rho \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[u_i \left(\frac{1}{2} \rho \vec{u}^2 + \frac{d}{2} \rho \theta - \frac{d}{2} \rho \right) \right] = \rho u_i g_i \quad (4.38)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} - \frac{d}{2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(u_i (E + \rho\theta) \right) = \rho u_i g_i \quad (4.39)$$

Druhý člen je nulový díky rovnici kontinuity. Ostatní členy utvoří požadovaný vztah pro zachování energie:

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(u_i E) = \rho u_i g_i + \frac{\partial}{\partial x_i}(-u_i \rho \theta). \quad (4.40)$$

Tuto rovnici lze také napsat ve tvaru bez energie E a vnější sily \vec{g} [16]:

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} - \vec{u} \cdot \text{grad}(\rho \theta) + \left(\frac{d+2}{2} \right) \text{div}(\rho \theta \vec{u}) = 0. \quad (4.41)$$

Dospěli jsme tedy k Eulerovým rovnicím pro stlačitelnou neviskózní tekutinu. Fyzikální interpretace by mohla být následující: Pokud se stav tekutiny v čase vyvíjí tak, že v každém bodě a okamžiku je lokální rozdělení částic Maxwell-Boltzmannovo, splňuje tekutina z makroskopického hlediska Eulerovy rovnice.

4.4 Chapmanův-Enskogův rozvoj

Abychom nakonec vnesli do modelu tekutiny také transportní vlastnosti jako je viskozita a tepelná vodivost, musíme předpokládat odchylky rozdělovací funkce f od rovnovážného rozdělení. Pro provedení hydrodynamické limity je třeba formálně oddělit procesy probíhající na různých prostorových a časových škálách. Tento postup vyvinuli v sedmdesátých letech Chapman, Cowling a Enskog [5]. Analogicky jako v poruchové teorii rozvíjíme rozdělovací funkci f do postupných řádů perturbace (postup také viz [22]):

$$f = f^{(0)} + K f^{(1)} + K^2 f^{(2)} + \dots \quad (4.42)$$

kde perturbační parametr K je tzv. *Knudsenovo číslo*, definované předpisem $K \equiv l/L$, kde l je střední volná dráha částic plynu a L charakteristický rozměr systému. Neperturbovaný člen $f^{(0)}$ je samozřejmě roven rovnovážnému (v našem případě zatím Maxwell-Boltzmannovu) rozdělení $f^{(0)}$. Analogickým způsobem rozvineme časovou derivaci, pro oddělení procesů probíhajících na různých časových škálách:

$$\frac{\partial}{\partial t} = K \frac{\partial}{\partial t}^{(0)} + K^2 \frac{\partial}{\partial t}^{(1)} + \dots \quad (4.43)$$

U derivace podle souřadnic a rychlostí vystačíme s jediným členem, a sice $\text{grad}(\cdot) = K \text{grad}(\cdot)$. Je třeba podotknout, že parametr K slouží jen jako čistě formální „značka“, díky které můžeme v dalším postupu odlišit členy různých řádů. Díky označkování a vazbě na Knudsenovo číslo můžeme sledovat relativní důležitost jednotlivých členů v dané fyzikální situaci a tak se kvalifikovaně rozhodnout, jaký řád poruchy ještě zahrnout. Na konci všech úvah musíme opět formálně položit $K = 1$. Ve skutečnosti je třeba interpretovat rovnici (4.42) takto:

$$f = f^{(0)} + f^{(1)} + f^{(2)} + \dots \quad (4.44)$$

$$f^{(1)} = O(K) \quad (4.45)$$

$$f^{(2)} = O(K^2) \quad (4.46)$$

⋮

Tedy, dosadíme li tento formální rozvoj do rovnice (3.23) a porovnáme-li členy stejného řádu, dostaneme následující rekurentní relaci [22]:

$$f^{(k+1)} = -\tau \left(\sum_{m=0}^k \frac{\partial}{\partial t}^{(k)} f^{(m)} + \vec{v} \cdot \operatorname{grad}_x f^{(k)} + \vec{g} \cdot \operatorname{grad}_v f^{(k)} \right). \quad (4.47)$$

Uvažováním poruchového rozvoje do různých řádů potom dostáváme různé úrovně hydrodynamiky. V předchozí sekci nebyla uvažována žádná perturbace (tj. „nultý“ řád) a výsledkem byly Eulerovy rovnice. Při uvažování poruchy prvního řádu dostaneme Navierovy-Stokesovy rovnice. Při uvažování vyšších řádu potom můžeme dospět až k Burnettovým rovnicím (druhý řád) nebo až k tzv. Super-Burnettovým rovnicím (třetí řád). Nám však stačí zmíněný první řád, a tedy první netriviální instance předchozí rekurentní relace:

$$f^{(1)} = -\tau \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \operatorname{grad}_x + \vec{g} \cdot \operatorname{grad}_v \right) f^{(0)}. \quad (4.48)$$

Tuto relaci opět promítнемe do Hermitovy báze (přenásobením Hermitovým polynomem a integraci přes rychlostní podprostor) podle stejného návodu jako v sekci 4.2, dostaneme tak předpis pro výpočet koeficientů rozkladu perturbace prvního řádu:

$$a_{\vec{\alpha}}^{(1)(n)} = -\tau \left(\frac{\partial}{\partial t} a_{\vec{\alpha}}^{(0)(n)} + \frac{\partial}{\partial x_i} (a_{i\vec{\alpha}}^{(0)(n+1)} + a_{\vec{\alpha},i}^{(0)(n-1)}) - g_i a_{\vec{\alpha},i}^{(0)(n-1)} \right). \quad (4.49)$$

Koeficient $a_{\vec{\alpha}}^{(1)(n)}$ je dán rozkladem rozdělení $f^{(1)}$ zcela standardně:

$$a_{\vec{\alpha}}^{(1)(n)} = \int f^{(1)} \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} \, d\vec{v}. \quad (4.50)$$

Návod, jak dopočítat tyto nerovnovážné koeficienty dává [16]. Přepíšeme časovou derivaci $a_{\vec{\alpha}}^{(0)(n)}$ pomocí derivací podle zachovávajících se veličin, tedy ρ , $\vec{j} = \rho \vec{u}$ a $\varepsilon = \rho e$:

$$\frac{\partial a_{\vec{\alpha}}^{(0)(n)}}{\partial t} = \frac{\partial a_{\vec{\alpha}}^{(0)(n)}}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial a_{\vec{\alpha}}^{(0)(n)}}{\partial \vec{j}} \frac{\partial \vec{j}}{\partial t} + \frac{\partial a_{\vec{\alpha}}^{(0)(n)}}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial t}. \quad (4.51)$$

Časové derivace již máme napočítány z nultého řádu poruchového rozvoje ve vztazích (4.34), (4.36) a (4.40).

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_{\vec{\alpha}}^{(0)(n)}}{\partial t} &= \frac{\partial a_{\vec{\alpha}}^{(0)(n)}}{\partial \rho} \left(-\operatorname{div}(\rho \vec{u}) \right) \\ &+ \frac{\partial a_{\vec{\alpha}}^{(0)(n)}}{\partial \vec{j}} \left(\rho \vec{g} - \operatorname{div}(\rho \theta \mathbf{I} + \rho \vec{u} \otimes \vec{u}) \right) \\ &+ \frac{\partial a_{\vec{\alpha}}^{(0)(n)}}{\partial \varepsilon} \left(\vec{u} \cdot \operatorname{grad}(\rho \theta) - \left(\frac{d+2}{2} \right) \operatorname{div}(\rho \theta \vec{u}) \right) \end{aligned} \quad (4.52)$$

Nyní potřebujeme vyjádřit derivace rovnovážných koeficientů. Koeficienty po-važujeme za funkce čistě zachovaných veličin. Vzhledem k derivování budeme k těmto veličinám přistupovat jako k nezávislým proměnným. Musíme si je tedy pomocí těchto proměnných vyjádřit (budeme potřebovat pouze do třetího řádu):

$$a^{(0)(0)} = \rho \quad (4.53)$$

$$a_i^{(0)(1)} = j_i \quad (4.54)$$

$$a_{ij}^{(0)(2)} = \frac{j_i j_j}{\rho} + \frac{2\varepsilon}{d} \delta_{ij} - \rho \delta_{ij} \quad (4.55)$$

$$a_{ijk}^{(0)(3)} = \frac{j_i j_j j_k}{\rho^2} + \left(\frac{2\varepsilon}{d\rho} - 1 \right) (\delta_{ij} j_k + \delta_{ik} j_j + \delta_{jk} j_i) \quad (4.56)$$

Příslušné derivace potom jsou:

$$\frac{\partial a^{(0)(0)}}{\partial \rho} = 1 \quad (4.57)$$

$$\frac{\partial a_i^{(0)(1)}}{\partial \rho} = 0 \quad (4.58)$$

$$\frac{\partial a_{ij}^{(0)(2)}}{\partial \rho} = -u_i u_j - \delta_{ij} \quad (4.59)$$

$$\frac{\partial a_{ijk}^{(0)(3)}}{\partial \rho} = -2u_i u_j u_k - \theta(\delta_{ij} u_k + \delta_{ik} u_j + \delta_{jk} u_i) \quad (4.60)$$

$$\frac{\partial a^{(0)(0)}}{\partial j_l} = 0 \quad (4.61)$$

$$\frac{\partial a_i^{(0)(1)}}{\partial j_l} = \delta_{il} \quad (4.62)$$

$$\frac{\partial a_{ij}^{(0)(2)}}{\partial j_l} = \delta_{il} u_j + \delta_{jl} u_i \quad (4.63)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_{ijk}^{(0)(3)}}{\partial j_l} &= u_i u_j \delta_{kl} + u_i u_k \delta_{jl} + u_j u_k \delta_{il} \\ &\quad + (\theta - 1)(\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{jk} \delta_{il}) \end{aligned} \quad (4.64)$$

$$\frac{\partial a^{(0)(0)}}{\partial \varepsilon} = \frac{\partial a_i^{(0)(1)}}{\partial \varepsilon} = 0 \quad (4.65)$$

$$\frac{\partial a_{ij}^{(0)(2)}}{\partial \varepsilon} = \frac{2}{d} \delta_{ij} \quad (4.66)$$

$$\frac{\partial a_{ijk}^{(0)(3)}}{\partial \varepsilon} = \frac{2}{d} (\delta_{ij} u_k + \delta_{ik} u_j + \delta_{jk} u_i) \quad (4.67)$$

Nyní již můžeme dosadit vše výše uvedené do rovnice (5.11) a spočítat ne-rovnovážné koeficienty $a_{\alpha}^{(1)(n)}$. Postup je to však velmi pracný, zejména v případě koeficientů třetího řádu. Bude nicméně podrobně proveden v další sekci, kde bude

odvozen nenewtonovský model s nastavitelnou viskozitou. Zde uvedeme pouze výsledky [16]:

$$a^{(1)(0)} = a_i^{(1)(1)} = 0 \quad (4.68)$$

$$a_{ij}^{(1)(2)} = -\tau\rho\theta\Lambda_{ij} \quad (4.69)$$

$$\begin{aligned} a_{ijk}^{(1)(3)} &= -\tau\rho\theta(\Lambda_{ij}u_k + \Lambda_{ik}u_j + \Lambda_{jk}u_i) \\ &\quad + \left(\delta_{ij}\frac{\partial\theta}{\partial x_k} + \delta_{ik}\frac{\partial\theta}{\partial x_j} + \delta_{jk}\frac{\partial\theta}{\partial x_i} \right) \end{aligned} \quad (4.70)$$

kde

$$\Lambda_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{d} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (4.71)$$

Nyní již máme zcela vyčísleny rovnovážné i nerovnovážné koeficienty rozdělovací funkce f , kterou jsme perturbovali malou odchylkou. Konečně se tedy můžeme vrátit k obecným zákonům zachování odvozeným v sekci 4.1 a spočítat konkrétní tvar tenzoru napětí \mathbf{T} a vektoru tepelného toku $\vec{\mathbf{q}}$. Podobně jako rozdělení f , mají tyto veličiny svou rovnovážnou a nerovnovážnou část:

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^{(0)} + \mathbf{T}^{(1)} \quad (4.72)$$

$$\vec{\mathbf{q}} = \vec{\mathbf{q}}^{(0)} + \vec{\mathbf{q}}^{(1)} \quad (4.73)$$

Nyní je postupně vyjádříme pomocí koeficientů a . Nejprve tenzor nápětí definovaný vztahem (4.10):

$$\begin{aligned} T_{ij}^{(n)} &= - \int (v_i - u_i)(v_j - u_j) f^{(n)} d\vec{\mathbf{v}} = - \int (v_i v_j - u_i v_j - v_i u_j + u_i u_j) f^{(n)} d\vec{\mathbf{v}} = \\ &= - \int (\mathbf{H}_{ij}^{(2)} + \delta_{ij} \mathbf{H}^{(0)} - u_j \mathbf{H}_i^{(1)} - u_i \mathbf{H}_j^{(1)} + u_i u_j \mathbf{H}^{(0)}) f^{(n)} d\vec{\mathbf{v}} = \\ &= -(a_{ij}^{(n)(2)} + \delta_{ij} a^{(n)(0)} - u_j a_i^{(n)(1)} - u_i a_j^{(n)(1)} + u_i u_j a^{(n)(0)}) \end{aligned} \quad (4.74)$$

Po dosazení příslušných koeficientů dostáváme:

$$T_{ij}^{(0)} = \rho - \theta \delta_{ij} \quad (4.75)$$

$$T_{ij}^{(1)} = \tau \rho \theta \Lambda_{ij} \quad (4.76)$$

Analogicky vyjádříme tepelný tok $\vec{\mathbf{q}}$ (index i je volný, přes j se sčítá):

$$\begin{aligned} q_i^{(n)} &= \frac{1}{2} \int (v_i - u_i)(v_j - u_j)^2 f^{(n)} d\vec{\mathbf{v}} = \\ &= \frac{1}{2} \int (\mathbf{H}_{ijj}^{(3)} - 2u_j \mathbf{H}_{ij}^{(2)} - u_i \mathbf{H}_{jj}^{(2)} + u_j^2 \mathbf{H}_i^{(1)} + \\ &\quad + 2u_i u_j \mathbf{H}_j^{(1)} - (u_i u_j^2 + (d+2)u_i) \mathbf{H}^{(0)}) f^{(n)} d\vec{\mathbf{v}} = \\ &= a_{ijj}^{(n)(3)} - 2u_j a_{ij}^{(n)(2)} - u_i a_{jj}^{(n)(2)} + u_j^2 a_i^{(n)(1)} + \\ &\quad + 2u_i u_j a_j^{(n)(1)} - (u_i u_j^2 + (d+2)u_i) a^{(n)(0)} \end{aligned} \quad (4.77)$$

Opět po dosazení jsou výsledkem:

$$q_i^{(0)} = 0 \quad (4.78)$$

$$q_i^{(1)} = -\tau\rho\theta\left(\frac{d+2}{2}\right)\frac{\partial\theta}{\partial x_i} \quad (4.79)$$

Vidíme tedy, že pro proudění s malým Knudsenovým číslem splňuje řešení f Boltzmannovy rovnice, také Navierovy-Stokesovy rovnice s tlakem p , dynamickou viskozitou μ , objemovou viskozitou λ a koeficientem tepelné vodivosti k zadanými následovně:

$$p = \rho\theta \quad (4.80)$$

$$\mu = \tau\rho\theta \quad (4.81)$$

$$\lambda = \frac{2}{d}\tau\rho\theta \quad (4.82)$$

$$k = \left(\frac{d+2}{2}\right)\tau\rho\theta \quad (4.83)$$

4.5 Zjednodušení rovnovážného rozdělení

Z předchozího postupu je zcela zřejmé, že na hydrodynamické chování tekutiny ve smyslu Navierových-Stokesových rovnic mají vliv pouze koeficienty do čtvrtého rádu rozvoje do Hermitových polynomů. Pro simulační potřeby tedy můžeme přebytečné koeficienty (obecně od N -tého rádu) odstranit:

$$f^{(0)} = w(\vec{v}) \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!} a_{\vec{\alpha}}^{(0)(n)} \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}(\vec{v}) \quad (4.84)$$

Tímto krokem jsme provedli restrikci funkce f do konečnědimenzionálního podprostoru. Jak již bylo řečeno, tohoto faktu výhodně využijeme jak při diskretizaci, tak při reprezentaci funkce f v konkrétní numerické implementaci. Protože však paměťová a výpočetní náročnost pro větší N velice rychle roste, můžeme uvažovat ještě nad rámec daný korektním hydrodynamickým chováním pro $N = 4$. Pokud vynecháme i nižší členy rozvoje, nebude již hydrodynamické chování dodrženo, nicméně se ukazuje, že pro jednodušší aplikace je toto stále plně dostačující. Konkrétně, pro $N = 3$ již není správně dodržen konstitutivní vztah pro tepelný tok \vec{q} a tedy lze tuto approximaci použít pouze pro simulaci izotermálního stlačitelného proudění (podrobně provedeno [16]). Není to však tak, že vzniklé numerické schéma přesně dodržuje izotermii. Simulované proudění musí být takového charakteru, aby v něm tepelná výměna nehrála zásadní roli. Potom bude simulace korektní.

Největším rozumným zjednodušením je situace při $N = 2$, tedy zanechání členů pouze do druhého rádu rozvoje. V takovém případě simuluje lattice Boltzmannova metoda věrně pouze proudění izotermální nestlačitelné. Tento případ bude diskutován v příští kapitole, kdy v této approximaci zavedeme nenewtonovský

model a podrobně prozkoumáme jeho vlastnosti včetně odchylek od stlačitelnosti a podmínek, za kterých budou zanedbatelné.

Uvedeme zde pro úplnost tvar rovnovážného rozdělení pro $N = 2$. Protože se jedná o izotermální případ, můžeme si zvolit $\theta = 1$, zjednoduší se tak tvar některých koeficientů:

$$\begin{aligned} f^{(0)} &= w(\vec{\mathbf{v}}) \left(a^{(0)(0)} \mathbf{H}^{(0)}(\vec{\mathbf{v}}) + a_i^{(0)(1)} \mathbf{H}_i^{(1)}(\vec{\mathbf{v}}) + \frac{1}{2} a_{ij}^{(0)(2)} \mathbf{H}_{ij}^{(2)}(\vec{\mathbf{v}}) \right) = \\ &= w(\vec{\mathbf{v}}) \rho \left(1 + \vec{\mathbf{v}} \cdot \vec{\mathbf{u}} + \frac{(\vec{\mathbf{v}} \cdot \vec{\mathbf{u}})^2 - \vec{\mathbf{u}}^2}{2} \right). \end{aligned} \quad (4.85)$$

4.6 Škálování rychlostí

Při odvozování diskretizace Boltzmannovy rovnice narazíme na potřebu přeskálovat všechny rychlosti v systému faktorem $1/c_s^2$, který bude vyplývat z použitého množství diskrétních rychlostí. Rozebereme zatím důsledky, které z takového škálování plynu pro rozklad do báze Hermitových polynomů ještě teď, ve spojitém případě. V dodatku A jsou uvedeny změny, které z přeskálování plynu pro Hermitovy polynomy jako takové a pro projekční vztahy jim příslušející. Na straně Boltzmannovy rovnice musíme použít modifikovanou verzi rovnovážného rozdělení. Koeficient c_s se podruhé objeví ve faktoru před exponenciálou kvůli zachování normy:

$$f^{(0)} = \frac{\rho}{(2\pi\theta c_s^2)^{d/2}} \exp\left(-\frac{(\vec{\mathbf{u}} - \vec{\mathbf{v}})^2}{2\theta c_s^2}\right). \quad (4.86)$$

Za zmínku stojí skutečnost, že škálování obecně neprobíhá jen kvůli korektní diskretizaci. V aplikacích lattice Boltzmannovy metody, kde záleží na hodnotě rychlosti zvuku se škáluje pomocí konstanty $c_{ac} = c_s c$ (např. [25]), kde c je fyzikální rychlosť zvuku v daném prostředí (leč, stále vyjádřená v relativních jednotkách). V našem případě je však konkrétní hodnota rychlosti zvuku irelevantní, proto máme $c = 1$ a zůstává škálovací konstanta c_s pevně daná typem diskretizace. Nicméně stále je to hodnota v jistém smyslu odrážející rychlosť zvuku, přesněji, rychlosť šíření informace výpočetní sítě. Informace mezi síťovými body se totiž šíří rychlosťí jeden síťový bod za iteraci (v případě složitějších diskretizací někdy i více, nicméně pořád stejně).

Promítneme-li přeškálované rovnovážné rozdělení do upravené sady Hermittových polynomů, dostaneme lehce odlišné koeficienty:

$$\hat{a}^{(0)(0)} = \rho \quad (4.87)$$

$$\hat{a}_i^{(0)(1)} = \rho u_i \quad (4.88)$$

$$\hat{a}_{ij}^{(0)(2)} = \rho u_i u_j + c_s^2 \rho (\theta - 1) \delta_{ij} \quad (4.89)$$

$$\hat{a}_{ijk}^{(0)(3)} = \rho u_i u_j u_k + c_s^2 \rho (\theta - 1) (\delta_{ij} u_k + \delta_{ik} u_j + \delta_{jk} u_i) \quad (4.90)$$

$$\begin{aligned} \hat{a}_{ijkl}^{(0)(4)} &= \rho u_i u_j u_k u_l + c_s^4 \rho (\theta - 1)^2 (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \\ &+ c_s^2 \rho (\theta - 1) (\delta_{ij} u_k u_l + \delta_{ik} u_j u_l + \delta_{il} u_j u_k \\ &+ \delta_{jk} u_i u_l + \delta_{jl} u_i u_k + \delta_{kl} u_i u_j) \end{aligned} \quad (4.91)$$

V dalším postupu nás bude však zajímat právě izotermální ($\theta = 1$) nestlačitelný ($N = 2$) případ. Rovnovážné rozdělení jemu odpovídající je:

$$\begin{aligned} f^{(0)} &= \hat{w}(\vec{v}) \left(\hat{a}^{(0)(0)} \hat{\mathbf{H}}^{(0)}(\vec{v}) + \frac{1}{c_s^2} \hat{a}_i^{(0)(1)} \hat{\mathbf{H}}_i^{(1)}(\vec{v}) + \frac{1}{2c_s^4} \hat{a}_{ij}^{(0)(2)} \hat{\mathbf{H}}_{ij}^{(2)}(\vec{v}) \right) = \\ &= \hat{w}(\vec{v}) \rho \left(1 + \frac{\vec{v} \cdot \vec{u}}{c_s^2} + \frac{(\vec{v} \cdot \vec{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\vec{u}^2}{2c_s^2} \right). \end{aligned} \quad (4.92)$$

4.7 Člen objemové síly

Nakonec se zabývejme členem $\vec{g} \cdot \text{grad}_v f$ Boltzmannovy rovnice. Všimněme si, že když jsme v Chapmanově-Enskogově rozvoje tento člen projektovali do Hermittovské báze, dostávali jsme díky absenci prostorové derivace pouze člen úměrný koeficientům a hermitovského rozvoje. Můžeme tedy v podstatě zavést rozvoj tohoto členu do báze zcela standardně:

$$F \equiv -\vec{g} \cdot \text{grad}_v f \quad (4.93)$$

$$F^{(k)} = w(\vec{v}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} F_{\vec{\alpha}}^{(k)(n)} \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} \quad (4.94)$$

Jednotlivé koeficienty dostaneme standardní projekcí, přičemž díky projekčnímu vztahu (4.19) je můžeme zapsat rovnou vyjádřené pomocí koeficientů a :

$$F_{\vec{\alpha}}^{(k)(n)} = g_i a_{\vec{\alpha}, i}^{(k)(n-1)}. \quad (4.95)$$

Jak již bylo mnohokrát naznačeno, v dalším postupu nás bude zajímat především rozvoj do druhého řádu v Hermitových polynomech. Pro nultý řád perturbace jsou tyto koeficienty:

$$F^{(0)(0)} = 0 \quad (4.96)$$

$$F_i^{(0)(1)} = \rho g_i \quad (4.97)$$

$$F_{ij}^{(0)(2)} = -\rho(g_i u_j + g_j u_i) \quad (4.98)$$

Nerovnovážné koeficienty $a^{(1)(0)}$ spolu s $a^{(1)(1)}$ jsou nulové díky zachování hmotnosti a hybnosti (4.68). Proto, pokud pracujeme pouze v druhém řádu Hermittovského rozvoje, je $F = F^{(0)}$. Explicitní tvar F včetně příslušných hermitových polynomů je [16]:

$$F = w(\vec{\mathbf{v}})\rho(\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}} - (\vec{\mathbf{v}} \cdot \vec{\mathbf{u}})\vec{\mathbf{v}}) \cdot \vec{\mathbf{g}} \quad (4.99)$$

Jeho přeškálovaná verze potom:

$$F = w(\vec{\mathbf{v}})\rho\left(\frac{\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}}}{c_s^2} - \frac{(\vec{\mathbf{v}} \cdot \vec{\mathbf{u}})\vec{\mathbf{v}}}{c_s^4}\right) \cdot \vec{\mathbf{g}} \quad (4.100)$$

Kapitola 5

Modifikace pro zobecněnou newtonovskou kapalinu

5.1 Možné přístupy

Hlavním předpokladem pro použití lattice Boltzmannovy metody pro zobecněné newtonovské tekutiny je fakt, že simulace probíhá na relativně jemné regulární síti a všechny výpočty jsou naprostě lokální (v základní variantě). V každém bodu sítě se v každém časovém kroku provádí úprava rozdělení rychlostí podle zvoleného kolizního operátoru. A právě úpravou tvaru kolizního operátoru v jednotlivých síťových bodech lze dosáhnout různých vlastností tekutiny v různých místech. Pro případ zobecněných newtonovských tekutin bude cílem přidělit každému síťovému bodu individuální hodnotu viskozity, závislou na zvoleném nenewtonovském modelu.

Jedním z cílů této práce bylo prozkoumat možnosti úpravy kolizního operátoru na základě úvah o mikroskopické struktuře a fyzikálním chování nenewtonovských tekutin. Pokud však začneme studovat fyzikální úvahy vedoucí k definici kolizního operátoru v Boltzmannově tvaru, zjistíme že předpoklady učiněné v tomto procesu odpovídají dokonce pouze řídkým plynům. Jak však již bylo odvozeno v předchozí kapitole, limitním procesem dostáváme zcela obecné Navierovy-Stokesovy rovnice, platné pro tekutiny bez rozdílu hustoty. Z výše uvedeného vyplývá, že někde v předchozím postupu byl učiněn krok, který není pouze pokračováním předešlého, které dědí všechny učiněné předpoklady, nýbrž jistým zobecněním. Ukazuje se, že tímto krokem je pravděpodobně BGK approximace kolizního operátoru. Tato approximace je totiž založena na dvou poměrně obecných předpokladech [24]:

- Kolizní dynamika vykazuje přítomnost lokálního atraktoru (rovnováhy)
- Při malých odchylkách z této rovnováhy je kolizní dynamika popsatelná jako jednoduchý exponenciální relaxační proces směrem k rovnováze

První předpoklad je splněn pro systémy vykazující mikroskopické kolizní invarianty. Druhý předpoklad je velice rozumný pro libovolný systém založený na krátkodosahových interakcích [24].

Z výše uvedeného je tedy patrné, že v současnosti probíhá výzkum dokonce v oblasti postupu propojujícího mikroskopickou dynamiku obyčejných hustých tekutin, s LBGK rovnicí (viz např [17]). Pokus budovat toto spojení směrem od mikroskopické dynamiky nenewtonovských systémů je tedy během na daleko delší trati.

Závěr z této krátké úvahy je tedy ten, že prozatím rezignujeme na studium tohoto hlubšího fyzikálního propojení a budeme chápat LBGK rovnici, resp. lattice Boltzmannovu metodu čistě jako alternativní nástroj - schéma pro řešení jisté třídy parciálních diferenciálních rovnic. K dispozici máme rozumné metody provádějící limitní proces od LBGK k těmto rovnicím a tedy můžeme zkoumat, jaké změny v LBGK provést, abyhom řešili úlohu, kterou aktuálně řešit potřebujeme.

Pro lokální změnu viskozity tedy provádíme čistě *ad hoc* změnu BGK kolizního operátoru. Uvedeme dva hlavní směry, kterými se vývoj v této oblasti zabývá. Nicméně tento výčet rozhodně není zcela vyčerpávající a úplný. Velice obsáhlou a aktuální prací podávající podrobný výčet dosavadního vývoje na poli aplikace lattice Boltzmannovy metody na nenewtonovské tekutiny je [19], kde jsou uvedeny i mnohé výsledky z jiných modelů, než jsou zobecněné newtonovské.

Variace relaxačního parametru τ

První nejvíce rozšířená možnost lokální adaptace viskozity se nabízí při pohledu na BGK operátor téměř sama. Vidíme, že máme k dispozici jeden nastavitelný parametr, a sice relaxační čas τ který, jak je zřejmé z předešlé kapitoly, přímo ovlivňuje hodnotu viskozity dle vztahu (4.80). Tento přístup je hojně rozšířen a zabývá se jím celá řada prací (např. [16][3][7][21][20] a další). Dokonce má svou analogii i v případě užití tzv. MRT (multiple relaxation time) modelu, kdy je BGK operátor upraven tak, aby relaxoval různé části rychlostního rozdělení s různými hodnotami parametru τ [4].

Tento model však nebude v této práci dále rozebírána, neboť by bylo dobré věnovat pozornost alternativní variantě, která poskytuje větší stabilitu simulace a jednodušší numerické schéma.

Variace rovnovážného rozdělení

Z důvodů, které budou podrobně objasněny později u příležitosti zavedení konkrétního numerického schématu se ukazuje, že je velice výhodné v lattice Boltzmannovské simulaci volit pevnou hodnotu $\tau = 1$. Tak ale ztrácíme kontrolu nad viskozitou prostředky předchozí metody. Řešením je změna toho posledního, co zbylo v BGK operátoru, a sice rovnovážného rozdělení. Naplno se zde projevuje zmínovaný *ad hoc* přístup, protože nebudeme vycházet z fyzikální motivace.

Zmiňovaná metoda byla pravděpodobně poprvé navržena v práci [11] a dále numericky testována v práci [26]. Společně uvádějí tvar rovnovážného rozdělení, v kterém je jasně identifikovatelný člen shodný s vazkou částí tenzoru napětí. Parametr A je volně nastavitelný a jak je zřejmé, jedná se o rozdělení druhého

řádu v Hermitových polynomech, tedy pro nestlačitelnou izotermální tekutinu. Je výhodnější užít zápis ve složkách:

$$f^{(0)} = \hat{w}(\vec{\mathbf{v}})\rho \left[1 + \frac{v_i u_i}{c_s^2} + \frac{v_i v_j u_i u_j}{2c_s^4} - \frac{u_i u_i}{2c_s^2} + A \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) v_i v_j \right]. \quad (5.1)$$

Ve zmíněných pracích je uveden výraz pro dynamickou viskozitu závislý na konstantě A s odkazy, že je možné k němu dospět aplikací asymptotické teorie. Konkrétní provedení tohoto postupu však není k nalezení a odkazovaná literatura pojednává pouze o obecných asymptotických postupech, které jsou založeny pouze na již diskretizované verzi Boltzmannovy rovnice. Těžištěm této práce je odvodit příslušný výraz pomocí již předvedené metody projekce do Hermitovy báze, která celou asymptotickou teorií staví na solidnější matematické základy. Zároveň také odvodíme konkrétní chybové členy, které v tomto případě vznikají a jejichž velikost je třeba mít při simulaci pod kontrolou, aby byly obdrženy správné výsledky. Uvedený postup víceméně adaptuje výsledky kapitoly 4 pro tento speciální případ. Vzhledem k tomu, že byla většina potřebných vztahů již odvozena, bude tento postup z teoretického hlediska relativně rychlý a přímočarý, byť lehce pracný.

Velice podobný výsledek, nicméně zcela odlišným postupem, je dosažen v práci [8]. Velice zajímavé rovnovážné rozdělení dává také práce [23]. Toto rovnovážné rozdělení umožňuje regulovat jak viskozitu, tak tepelnou vodivost a bylo by jistě velice zajímavé aplikovat asymptotickou teorii i na něj. Je však relativně dost komplikované a rozklad do Hermitových polynomů až čtvrtého řádu velice pracný. Bohužel tedy zůstalo mimo možnosti této práce se tímto problémem zabývat, nicméně je to jistě zajímavý námět k dalšímu výzkumu.

5.2 Hydrodynamická limita zobecněného newtonovského modelu

Předtím než limitní postup provedeme, ovšem rozdělení (5.1) modifikujeme. Důvody budou hned zřejmé.

$$f^{(0)} = \hat{w}(\vec{\mathbf{v}})\rho \left[1 + \frac{v_i u_i}{c_s^2} + \frac{v_i v_j u_i u_j}{2c_s^4} - \frac{u_i u_i}{2c_s^2} + A \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) (v_i v_j - c_s^2 \delta_{ij}) \right]. \quad (5.2)$$

Prvním krokem limitního procesu je totiž, jako vždy, projekce tohoto rovnovážného rozdělení do Hermitovy báze. Samozřejmě, projekce jeho první části je nám již známa a klíčová je pro nás přidaná část. Od té se očekává, že bude přispívat do koeficientu druhého řádu, nicméně kdybychom provedli projekci (5.1) rovnou, dostaneme v koeficientu nultého řádu nežádoucí člen:

$$\hat{a}^{(0)(0)} = \rho \left(1 + 2A c_s^2 \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right). \quad (5.3)$$

Tento člen je sice úměrný divergenci rychlosti, která by měla být v našem očekávaném použití na nestlačitelné tekutiny nulová, je však třeba mít na paměti,

že simulovaná tekutina pořád lehce stlačitelná bude (byť bude tato stlačitelnost simulována nepřesně), a je náš úkol zajistit takový režim proudění, v kterém stlačitelnost nehraje roli. Nakonec částečně i pro eleganci postupu nahradíme člen $v_i v_j$ plným Hermitovým polynomem druhého řádu.

Rozklad upraveného rozdělení (5.2) do hermitovy báze tedy je:

$$\hat{a}^{(0)(0)} = \rho \quad (5.4)$$

$$\hat{a}_i^{(0)(1)} = \rho u_i \quad (5.5)$$

$$\hat{a}_{ij}^{(0)(2)} = \rho u_i u_j + 2A\rho c_s^4 S_{ij} \quad (5.6)$$

kde jsme pro přehlednost a odstranění přebytečného faktoru 2 zavedli značení

$$S_{ij} = \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) = 2D_{ij}. \quad (5.7)$$

Nyní můžeme provést projekci kompletní Boltzmannovy rovnice v nultém řádu Chapmanova-Enskogova rozvoje. Vzhledem k použití škálovaných polynomů však musíme upravit projekční vztah (4.20) s ohledem na identitu (8.45) takto (přibyl faktor c_s^2):

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{a}_{\vec{\alpha}}^{(n)} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\hat{a}_{i\vec{\alpha}}^{(n+1)} + c_s^2 \hat{a}_{\vec{\alpha},i}^{(n-1)}) - g_i \hat{a}_{\vec{\alpha},i}^{(n-1)} = 0. \quad (5.8)$$

Pro $n = 0$ dostáváme okamžitě rovnici kontinuity:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0. \quad (5.9)$$

Pro $n = 1$ dostáváme zachování hybnosti, v kterém se již projeví přídavný člen k rovnovážnému rozdělení:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i u_j + 2A\rho c_s^4 S_{ij} + c_s^2 \rho \delta_{ij}) - \rho g_i \delta_{ij} &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i u_j) &= \rho g_j + \frac{\partial}{\partial x_i} (-c_s^2 \rho \delta_{ij} - 2A\rho c_s^4 S_{ij}). \end{aligned} \quad (5.10)$$

Projekci s $n = 2$ provádět nemusíme, neboť ji nebudeeme potřebovat.

Nyní se věnujme pozornost prvnímu řádu Chapmanova-Enskogova rozvoje. Projekční formuli (5.11) rovněž musíme adaptovat s ohledem na identitu (8.45):

$$\hat{a}_{\vec{\alpha}}^{(1)(n)} = -\tau \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{a}_{\vec{\alpha}}^{(0)(n)} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\hat{a}_{i\vec{\alpha}}^{(0)(n+1)} + c_s^2 \hat{a}_{\vec{\alpha},i}^{(0)(n-1)}) - g_i \hat{a}_{\vec{\alpha},i}^{(0)(n-1)} \right). \quad (5.11)$$

Časovou derivaci rovnovážného koeficientu opět rozepíšeme stejně jako v (4.51). Situace však bude jednodušší, neboť rovnovážné koeficienty (5.4) - (5.6) díky izotermii nezávisí na θ , resp. po vyjádření na ε . Derivace podle ε tedy vymizí:

$$\frac{\partial \hat{a}_{\vec{\alpha}}^{(0)(n)}}{\partial t} = \frac{\partial \hat{a}_{\vec{\alpha}}^{(0)(n)}}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \hat{a}_{\vec{\alpha}}^{(0)(n)}}{\partial \vec{j}} \frac{\partial \vec{j}}{\partial t}. \quad (5.12)$$

Převyjádřené rovnovážné koeficienty jsou:

$$\hat{a}^{(0)(0)} = \rho \quad (5.13)$$

$$\hat{a}_i^{(0)(1)} = j_i \quad (5.14)$$

$$\hat{a}_{ij}^{(0)(2)} = \frac{j_i j_j}{\rho} + 2A c_s^4 \left[\left(\frac{\partial j_i}{\partial x_j} + \frac{\partial j_j}{\partial x_i} \right) - \frac{j_i}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} - \frac{j_j}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \right] \quad (5.15)$$

Jejich derivace potom:

$$\frac{\partial \hat{a}^{(0)(0)}}{\partial \rho} = 1 \quad (5.16)$$

$$\frac{\partial \hat{a}_i^{(0)(1)}}{\partial \rho} = 0 \quad (5.17)$$

$$\frac{\partial \hat{a}_{ij}^{(0)(2)}}{\partial \rho} = -u_i u_j + 2A c_s^4 \left(\frac{u_i}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} + \frac{u_j}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \right) \quad (5.18)$$

$$\frac{\partial \hat{a}^{(0)(0)}}{\partial j_k} = 0 \quad (5.19)$$

$$\frac{\partial \hat{a}_i^{(0)(1)}}{\partial j_k} = \delta_{ik} \quad (5.20)$$

$$\frac{\partial \hat{a}_{ij}^{(0)(2)}}{\partial j_k} = \delta_{ik} u_j + \delta_{jk} u_i - \frac{2A c_s^4}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x_i} + \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \right) \quad (5.21)$$

Nyní všechno dosadíme do rovnice (5.11). Pro $n = 0$ vypadnou členy řádu $n - 1$ a dostáváme:

$$\hat{a}^{(1)(0)} = -\tau \left(-\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) \right) = 0. \quad (5.22)$$

Pro řád $n = 1$ je již situace složitější, ale nakonec koeficient vyjde také jako nulový, což odpovídá přesně splněnému zákonu zachování hybnosti:

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^{(1)(1)} &= -\tau \left[\delta_{ik} \left(\rho g_k + \frac{\partial}{\partial x_j} (-c_s^2 \rho \delta_{jk} - 2A c_s^4 S_{jk} - \rho u_j u_k) \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i + 2A c_s^4 S_{ji} + c_s^2 \rho \delta_{ji}) - g_j \rho \delta_{ij} \right] = \\ &= -\tau \left[\rho g_i + \frac{\partial}{\partial x_j} (-c_s^2 \rho \delta_{ji} - 2A c_s^4 S_{ji} - \rho u_j u_i) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i + 2A c_s^4 S_{ji} + c_s^2 \rho \delta_{ji}) - \rho g_i \right] = 0. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Pro $n = 2$ sice vypadne člen řádu $n + 1$, ale i tak dostáváme poměrně rozsáhlý výraz:

$$\begin{aligned}\hat{a}_{ij}^{(1)(2)} &= -\tau \left\{ \left[-u_i u_j + 2A c_s^4 \left(\frac{u_i}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} + \frac{u_j}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \right) \right] \left(-\frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k) \right) + \right. \\ &\quad + \left[\delta_{ik} u_j + \delta_{jk} u_i - \frac{2A c_s^4}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x_i} + \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \right) \right] \\ &\quad \left(\rho g_k + \frac{\partial}{\partial x_m} (-c_s^2 \rho \delta_{mk} - 2A c_s^4 S_{mk} - \rho u_m u_k) \right) + \\ &\quad \left. + c_s^2 \frac{\partial}{\partial x_m} (\delta_{im} \rho u_j + \delta_{jm} \rho u_i) - g_m (\delta_{im} \rho u_j + \delta_{jm} \rho u_i) \right\}. \quad (5.24)\end{aligned}$$

V této chvíli již musíme zahrnout dodatečné předpoklady a přejít k proudění v režimu, kdy se neprojevují účinky stlačitelnosti. V takovém případě můžeme okamžitě zanedbat členy úměrné gradientu hustoty, čímž se celá situace podstatně zjednoduší.

$$\begin{aligned}\hat{a}_{ij}^{(1)(2)} &= -\tau \left[u_i u_j \frac{\partial \rho u_k}{\partial x_k} + (\delta_{ik} u_j + \delta_{jk} u_i) \right. \\ &\quad \left(\rho g_k + \frac{\partial}{\partial x_m} (-c_s^2 \rho \delta_{mk} - 2A c_s^4 S_{mk} - \rho u_m u_k) \right) + \\ &\quad \left. + c_s^2 \frac{\partial}{\partial x_m} (\delta_{im} \rho u_j + \delta_{jm} \rho u_i) - g_m (\delta_{im} \rho u_j + \delta_{jm} \rho u_i) \right]. \quad (5.25)\end{aligned}$$

Druhý člen roznásobíme a členy s δ vysčítáme:

$$\begin{aligned}\hat{a}_{ij}^{(1)(2)} &= -\tau \left[u_i u_j \frac{\partial \rho u_k}{\partial x_k} + \right. \\ &\quad + u_j \left(\rho g_i + \frac{\partial}{\partial x_m} (-c_s^2 \rho \delta_{mi} - 2A c_s^4 S_{mi} - \rho u_m u_i) \right) + \\ &\quad + u_i \left(\rho g_j + \frac{\partial}{\partial x_m} (-c_s^2 \rho \delta_{mj} - 2A c_s^4 S_{mj} - \rho u_m u_j) \right) + \\ &\quad \left. + c_s^2 \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_i} + c_s^2 \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_j} - g_i \rho u_j - g_j \rho u_i \right]. \quad (5.26)\end{aligned}$$

Vidíme, že členy obsahující g se odečtou. Rozdělíme $\frac{\partial}{\partial x_m}$ na samostatné členy, preznačíme index m na k , roznásobíme a přeskupíme:

$$\begin{aligned}\hat{a}_{ij}^{(1)(2)} &= -\tau \left[u_j \frac{\partial}{\partial x_k} (2A c_s^4 S_{ki}) + u_i \frac{\partial}{\partial x_k} (2A c_s^4 S_{kj}) + \right. \\ &\quad + u_i u_j \frac{\partial \rho u_k}{\partial x_k} - u_j \frac{\partial \rho u_k u_i}{\partial x_k} - u_i \frac{\partial \rho u_k u_j}{\partial x_k} + \\ &\quad \left. + c_s^2 \left(\frac{\partial \rho u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_j} - u_j \frac{\partial \rho}{\partial x_i} - u_i \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \right) \right]. \quad (5.27)\end{aligned}$$

V druhém a třetím řádku pokračujeme v derivování:

$$\begin{aligned}\hat{a}_{ij}^{(1)(2)} &= -\tau \left[u_j \frac{\partial}{\partial x_k} (2A c_s^4 S_{ki}) + u_i \frac{\partial}{\partial x_k} (2A c_s^4 S_{kj}) + \right. \\ &\quad + u_i u_j \frac{\partial \rho u_k}{\partial x_k} - u_j u_i \frac{\partial \rho u_k}{\partial x_k} - u_j \rho u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - u_i u_j \frac{\partial \rho u_k}{\partial x_k} - u_i \rho u_k \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \\ &\quad \left. + c_s^2 \left(u_j \frac{\partial \rho}{\partial x_i} + \rho \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + u_i \frac{\partial \rho}{\partial x_j} + \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - u_j \frac{\partial \rho}{\partial x_i} - u_i \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \right) \right].\end{aligned}\quad (5.28)$$

V druhém a třetím řádku se nyní mnohé členy odečtou.

$$\begin{aligned}\hat{a}_{ij}^{(1)(2)} &= -\tau \left[u_j \frac{\partial}{\partial x_k} (2A c_s^4 S_{ki}) + u_i \frac{\partial}{\partial x_k} (2A c_s^4 S_{kj}) - \right. \\ &\quad - u_j \rho u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - u_i u_j \frac{\partial \rho u_k}{\partial x_k} - u_i \rho u_k \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \\ &\quad \left. + c_s^2 \rho \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \right].\end{aligned}\quad (5.29)$$

Ted' už vidíme, že člen v druhém řádku můžeme upravit dle vztahu o derivaci součinu a člen v třetím řádku je vlastně úměrný S_{ij} :

$$\hat{a}_{ij}^{(1)(2)} = -\tau \rho c_s^2 S_{ij} + \tau \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_i u_j u_k) - \tau u_j \frac{\partial}{\partial x_k} (2A c_s^4 S_{ki}) - \tau u_i \frac{\partial}{\partial x_k} (2A c_s^4 S_{kj}). \quad (5.30)$$

První člen je zcela očekávaný. V modelech s normálním rovnovážným rozdělením způsobuje nenulovou viskozitu závislou na τ . Druhý člen je rovněž standardní produkt Chapmanova-Enskogova rozvoje, vyplývající z ořezání rozvoje f od třetího řádu hermitových polynomů. Tento člen je zanedbatelný v případě nestlačitelného proudění, je úměrný $\vec{u}^2 \operatorname{div} \vec{u}$ a standardně je pokládán jako řádu $O(\vec{u}^3) = O(Ma^3)$ [13] [22].

Další dva členy jsou podle stejné logiky minimálně $O(Ma)$, nicméně je nutné se v rámci těchto odhadů držet obezřetnosti. A je jistě otázkou k dalšímu výzkumu, jaký řád dokážeme těmto členům čistě z teoretického hlediska přisoudit. V současné chvíli je však zanedbáme, přičemž oprávněnost tohoto kroku budeme velice záhy testovat v rámci numerických simulací.

Nyní již můžeme spočítat konkrétní tvar tenzoru napětí v tomto případě. Použijeme vztah (4.74), který opět musíme opravit pro přeškálované Hermitovy polynomy:

$$T_{ij}^{(n)} = -(\hat{a}_{ij}^{(n)(2)} + c_s^2 \delta_{ij} \hat{a}^{(n)(0)} - u_j \hat{a}_i^{(n)(1)} - u_i \hat{a}^{(n)(1)} + u_i u_j \hat{a}^{(n)(0)}). \quad (5.31)$$

Po dosazení všech koeficientů rozvoje dostaváme:

$$T_{ij}^{(0)} = -c_s^2 \rho \delta_{ij} - 2A \rho c_s^4 S_{ij} \quad (5.32)$$

$$T_{ij}^{(1)} = \tau \rho c_s^2 S_{ij} \quad (5.33)$$

Celkový závěr tedy je, že pro proudění v režimech, kdy nehrají roli účinky stlačitelnosti a tepelné výměny, splňuje řešení f za předpokladu rovnovážného rozdělení určeného (5.2) také rovnice:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{u}) = 0 \quad (5.34)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = \rho \vec{g} + \operatorname{div} \mathbf{T} \quad (5.35)$$

Kde je tenzor napětí \mathbf{T} dán vztahem:

$$T_{ij} = -p\delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (5.36)$$

Kde jsou tlak p a dynamická viskozita μ jsou definovány předpisem:

$$p = c_s^2 \rho \quad (5.37)$$

$$\mu = c_s^2 \rho (\tau - 2c_s^2 A) \quad (5.38)$$

Vidíme tedy, že je viskozita závislá také na parametru A a budeme-li tedy záhy hodnotu τ fixovat, máme nadále kontrolu nad viskozitou prostřednictvím změny rovnovážného rozdělení.

Kapitola 6

Lattice Boltzmannova metoda

6.1 HPP a FHP modely

Pro lepší ilustraci principu lattice Boltzmannovy metody, je vhodné uvést její historické předchůdce: HPP a FHP modely. Vznik těchto metod byl podmíněn prudkým rozvojem výkonu výpočetní techniky v 70. a 80. letech dvacátého století. Tento způsob simulace tekutin patří do rodiny tzv. buňčených automatů. Výpočetních schémat, operujících na regulární síti kde je každému mřížovému bodu (buňce) přiřazena určitá číselná hodnota. Vývoj systému probíhá po krocích, v kterých se aktualizuje celá síť. Hodnota v daném síťovém bodě v další iteraci je určena většinou jednoduchým lokálním pravidlem, beroucím v úvahu hodnoty nacházející se nejbližších sousedních bodech. K údivu průkopníků v této oblasti, vedou i relativně jednoduchá lokálně-evoluční pravidla k makroskopicky netriviálnímu chování. Příkladem budiž snad nejznámější buňčený automat *Conway's Game of Life*.

Simulace HPP modelu, který zavedli Hardy, Pomeau a de Pazzis v roce 1973, se odehrává na dvojrozměrné čtvercové síti a lze si ji představit jako hodně zjednodušenou molekulární dynamiku. V každé buňce se může nacházet částice, letící jednou ze čtyř možných rychlostí $i\vec{v}$ (viz obrázek 6.1):

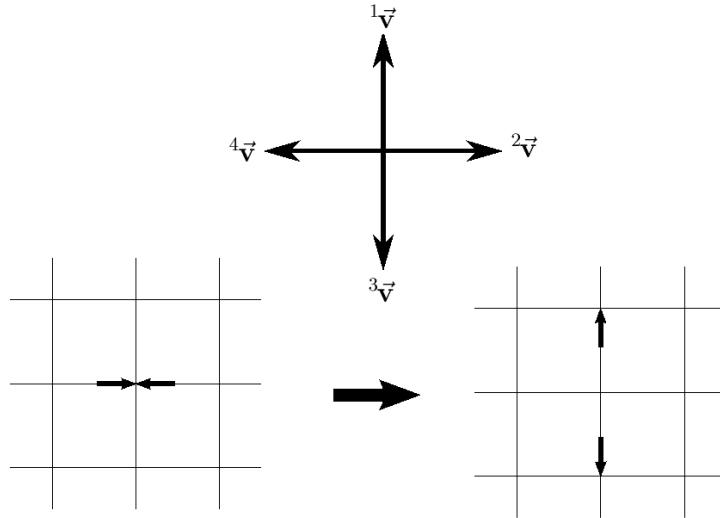
$${}^1\vec{v} = (0, 1) \quad {}^2\vec{v} = (1, 0) \quad {}^3\vec{v} = (0, -1) \quad {}^4\vec{v} = (-1, 0)$$

V buňce se tedy mohou nacházet nejvíše 4 částice, každá s jinou rychlostí. K reprezentaci stavu buňky jsou potřeba pouhé 4 bity. Matematicky lze popsat stav síť definováním funkce ${}^i f(\vec{x}, t)$ $i = 1 \dots 4$ nabývající hodnoty 1 v případě, že se v t -té iteraci, v síťovém bodě $\vec{x} = [x_1, x_2] \in \mathbb{N}^2$ nachází částice letící rychlostí $i\vec{v}$. V opačném případě nabývá ${}^i f$ hodnoty 0. Vývoj systému k následující iteraci je složen ze dvou kroků:

- **Pohyb částic** - Všechny částice v buňkách jsou posunuty o jednu buňku dál, v souladu se svým vektorem rychlosti:

$${}^i f(\vec{x} + {}^i\vec{v}, t + 1) = {}^i f(\vec{x}, t). \quad (6.1)$$

- **Kolize** - Pro každou buňku se vyhodnotí hodnoty ${}^i f$ a provede se jejich modifikace v souladu s kolizním pravidlem



Obrázek 6.1: Rychlosti a kolizní pravidlo HPP modelu [25].

Kolizní pravidlo musí být voleno tak, aby odpovídalo skutečným kolizím mezi částicemi a aby splňovalo zákony zachování. Při kolizích mezi částicemi tedy musí být zachován jejich počet a celkový vektor rychlosti. Aplikací těchto podmínek dospějeme k závěru, že existují pouze dvě netriviální kolizní pravidla (viz obr. 6.1):

$$\begin{aligned}\vec{f}^{in} = (1, 0, 1, 0) &\longrightarrow (0, 1, 0, 1) = \vec{f}^{out} \\ \vec{f}^{in} = (0, 1, 0, 1) &\longrightarrow (1, 0, 1, 0) = \vec{f}^{out}\end{aligned}$$

Všimněme si, že v principu lze oba tyto kroky zformulovat jediným vztahem, který je nápadně podobný Boltzmannové rovnici (3.9):

$${}^i f(\vec{x} + {}^i \vec{v}, t + 1) - {}^i f(\vec{x}, t) = {}^i Q(\vec{f}(\vec{x}, t)). \quad (6.2)$$

Q je vhodně zvolený kolizní operátor. Vztah mezi Q a kolizními pravidly je jednoduchý:

$$\vec{f}^{out} = \vec{f}^{in} + \vec{Q}(\vec{f}^{in}). \quad (6.3)$$

Pro HPP model je tedy Q dáno předpisem:

$$\begin{aligned}Q((1, 0, 1, 0)) &= (-1, 1, -1, 1) \\ Q((0, 1, 0, 1)) &= (1, -1, 1, -1) \\ Q &= 0 \text{ jinak}\end{aligned}$$

Hodnoty \vec{f} v každé buňce můžeme makroskopicky interpretovat například takto:

$$\rho(\vec{x}) = m \sum_i {}^i f \quad (6.4)$$

$$\vec{p}(\vec{x}) = m \sum_i {}^i \vec{v} {}^i f \quad (6.5)$$

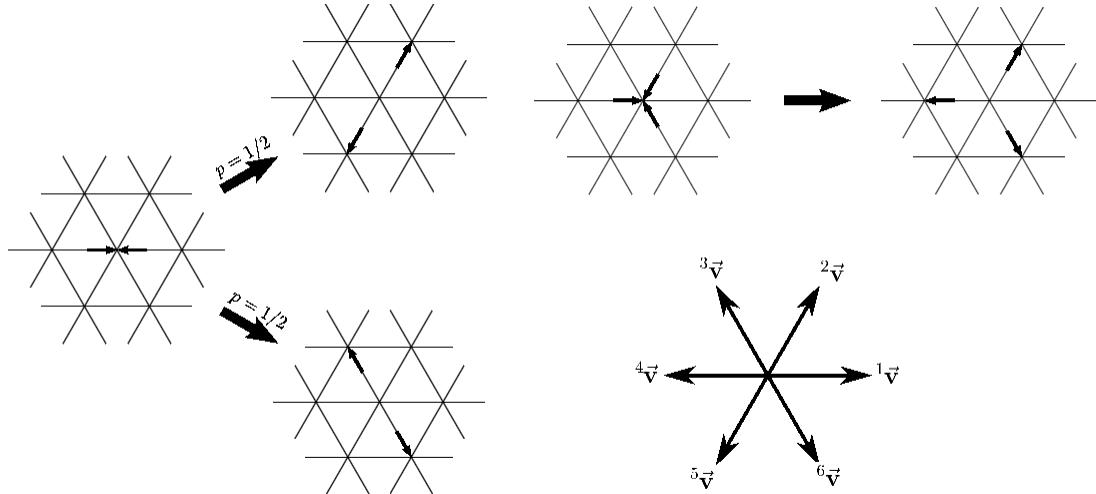
Problémem HPP modelu, který brání praktickému užití, je jeho anizotropie. Ačkoli simulace při prvním přiblížení vypadá relativně realisticky, je anizotropní chování rozeznatelné i pouhým pohledem. Problém s izotropií modelu zůstával dlouhou dobu nevyřešený. Vyřešit se jej podařilo až v roce 1983, kdy Frisch, Hasslacher a Pomeau navrhli FHP schéma.

Ukazuje se, že řešením je lepší volba množiny rychlostí ${}^i \vec{v}$. Simulace se tentokrát odehrává na šestiúhelníkové síti a vektory rychlostí jsou voleny jako (viz obrázek 6.2):

$${}^1 \vec{v} = (1, 0), \quad {}^2 \vec{v} = (1/2, \sqrt{3}/2), \quad {}^3 \vec{v} = (-1/2, \sqrt{3}/2)$$

$${}^4 \vec{v} = (-1, 0), \quad {}^5 \vec{v} = (-1/2, -\sqrt{3}/2), \quad {}^6 \vec{v} = (1/2, -\sqrt{3}/2)$$

Netriviální kolizní pravidla existují pouze dvě (nepočítaje rotace ze symetrie síť). Tentokrát však již jde o nedeterministickou simulaci, protože čelní srážka dvou částic může vyústit do dvou stejně pravděpodobných výsledků. Exaktní formulace kolizních pravidel již nemá žádnou přidanou ilustrativní hodnotu, proto jsou zobrazeny pouze na obrázku 6.2.



Obrázek 6.2: Rychlosti a kolizní pravidlo FHP modelu [25].

Ukazuje se, že lze odvodit nutné podmínky k tomu, aby sada vektorů ${}^i \vec{v}$ postačovala pro izotropní simulaci [25]. Můžeme dokonce ukázat limitní chování

Navierových-Stokesových rovnic (viz např [9]). Historicky se dále objevila ještě řada modifikací FPP metody s jiným počtem rychlostí $^i\vec{v}$ a jinými kolizními pravidly. Nevýhodou tohoto schématu ale zůstal již dříve zmíněný statistický šum, který zesložituje získání makroskopických veličin.

Rešením je nahradit binarní hodnotu funkce $^i f$ hodnotou spojitou, rovnou střednímu obsazení daného stavu ve smyslu statistického souboru systémů. Taková hodnota již nepodléhá šumu, a přesto umožňuje získání makroskopických veličin stejným postupem, jako dříve (vztahy (6.4) a (6.5)). Samozřejmě je nyní třeba zcela změnit kolizní pravidla, tak aby se zachoval fyzikální smysl simulace. Historicky byly nové kolizní operátory odvozeny z původních, které známe z HPP a FHP modelu.

V této práci však půjdeme proti směru historického vývoje a ukážeme, jak odvodit „buňčné“ numerické schéma - lattice Boltzmannovu metodu, *a priori* diskretizací spojité LBGK rovnice. Inspirací je nám do očí bijící podobnost, mezi vztahem (6.2) určujícím vývoj buněčného automatu a (3.8) popisujícím vývoj reálného systému.

6.2 Diskretizace rychlostního podprostoru

Zopakujme si zásadní východiska, umožňující provést rychlostní diskretizaci:

- Makroskopické veličiny, které hrají roli v hydrodynamickém chování tekutiny, závisejí na koeficientech nejvýše čtvrtého rádu, rozvoje f do Hermitovské báze (tj. závisejí pouze na projekci f do podprostoru konečné dimenze)
- Zanedbáním zbytku tohoto rozvoje zůstává tedy hydrodynamika zachována. Dalším zkracováním rozvoje potom dostaváme speciální modely jako izo-termální ($N = 3$) resp. nestlačitelný ($N = 2$).
- Všechny makroskopické veličiny, které v průběhu výpočtu potřebujeme získat, jsou dány integrálem přes rychlostní podprostor vždy ve stejném tvaru:

$$A = \int P(\vec{v}) f \, d\vec{v}. \quad (6.6)$$

Kde $P(\vec{v})$ je obecně polynom omezeného stupně, v závislosti na délce Hermitovského rozvoje. Toto vše nám umožňuje v pevně daném bodě \vec{x} a čase t , reprezentovat f konečným množstvím čísel. Jak je popsáno v dodatku B, můžeme zvolit tato čísla jako hodnoty f v jisté předem dané sadě rychlostí $\{^1\vec{v}, ^2\vec{v}, \dots, ^k\vec{v}\}$, což nám zároveň umožní jednoduše vyhodnocovat příslušné integrály (6.6) pomocí kvadraturních formulí.

Pokud označíme $\{^1w, ^2w, \dots, ^kw\}$ váhy příslušející výše zmíněným rychlostem v kvadraturní formuli, můžeme definovat:

$$^i f(\vec{x}, t) \equiv \frac{^iw}{w(^i\vec{v})} f(\vec{x}, ^i\vec{v}, t). \quad (6.7)$$

Výpočet jednotlivých makroskopických veličin potom přejde z integrálu na vážené sumy. Váhy jsme zahrnuli již do definice ${}^i f$ čistě z důvodů přehlednosti. Máme tedy:

$$\rho = \sum_i {}^i f \quad (6.8)$$

$$\rho \vec{u} = \sum_i {}^i \vec{v} {}^i f \quad (6.9)$$

$$\rho e = \frac{1}{2} \sum_i {}^i \vec{c}^2 {}^i f \quad (6.10)$$

$$\mathbf{T} = \sum_i {}^i \vec{c} \otimes {}^i \vec{c} {}^i f \quad (6.11)$$

$$\vec{q} = \frac{1}{2} \sum_i {}^i \vec{c} {}^i \vec{c}^2 {}^i f \quad (6.12)$$

kde jsme označili

$${}^i \vec{c} = {}^i \vec{v} - \vec{u}. \quad (6.13)$$

Analogicky (6.7) definujeme i diskrétní silový člen:

$${}^i F(\vec{x}, t) \equiv \frac{{}^i w}{{}^i w({}^i \vec{v})} F(\vec{x}, {}^i \vec{v}, t). \quad (6.14)$$

Můžeme tedy napsat tzv. diskrétní Boltzmannovu rovnici:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + {}^i \vec{v} \cdot \text{grad}_x \right) {}^i f = -\frac{1}{\tau} ({}^i f - {}^i f^{(0)}) + {}^i F. \quad (6.15)$$

Celkem tedy jde o soustavu k konvektivních rovnic pro skalárni veličinu ${}^i f$ (kde k je počet rychlostí diskretizace), vzájemně spjatých prostřednictvím rovnovážného rozdělení $f^{(0)}$ a silového členu F , jejichž parametry jsou makroskopické veličiny získatelné kvadraturními formulemi (6.8) - (6.12). Navíc můžeme zavést upravené rovnovážné rozdělení:

$${}^i f^{(eq)} \equiv {}^i f^{(0)} + \tau {}^i F. \quad (6.16)$$

Potom přejde rovnice (6.15) do pohodlnějšího tvaru:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + {}^i \vec{v} \cdot \text{grad}_x \right) {}^i f = -\frac{1}{\tau} ({}^i f - {}^i f^{(eq)}). \quad (6.17)$$

Připomeňme, že pro zadaný řad rozvoje N v Hermitových polynomech je tato diskretizace přesná a soustava rovnic (6.17) zcela ekvivalentní rovnici (3.23) s funkcí f ve tvaru (4.84).

6.3 Prostorová diskretizace

Diskretizace konvektivního členu je relativně přímočará a je přehledně uvedena v [16]. Přepišme nejprve (6.17):

$$\frac{d^i f}{dt} = -\frac{1}{\tau} ({}^i f - {}^i f^{(eq)}). \quad (6.18)$$

Tuto rovnici můžeme rovnou integrovat:

$$\begin{aligned} {}^i f(\vec{x} + {}^i \vec{v} \Delta t, t + \Delta t) - {}^i f(\vec{x}, t) &= \\ -\frac{1}{\tau} \int_0^{\Delta t} ({}^i f(\vec{x} + {}^i \vec{v} s, t + s) - {}^i f^{(eq)}(\vec{x} + {}^i \vec{v} s, t + s)) ds. \end{aligned} \quad (6.19)$$

symbolem Δt značíme velikost časového kroku mezi jednotlivými iteracemi. Integrál approximujeme pomocí lichoběžníkového pravidla:

$$\begin{aligned} {}^i f(\vec{x} + {}^i \vec{v} \Delta t, t + \Delta t) - {}^i f(\vec{x}, t) &= \\ -\frac{\Delta t}{2\tau} \left({}^i f(\vec{x} + {}^i \vec{v} \Delta t, t + \Delta t) - {}^i f^{(eq)}(\vec{x} + {}^i \vec{v} \Delta t, t + \Delta t) \right. \\ \left. + {}^i f(\vec{x}, t) - {}^i f^{(eq)}(\vec{x}, t) \right) + O(\Delta t^2). \end{aligned} \quad (6.20)$$

Jedná se o approximaci druhého řádu, která je ovšem implicitní, to však není problém, stačí použít substituci ve tvaru

$${}^i \bar{f}(\vec{x}, t) = {}^i f(\vec{x}, t) + \frac{1}{2\tau} ({}^i f(\vec{x}, t) - {}^i f^{(eq)}(\vec{x}, t)). \quad (6.21)$$

kde jsme navíc zavedli pro jednoduchost $\Delta t = 1$ (přešli jsme tak do tzv *mřížkových jednotek*, podrobnosti viz dále v sekci 6.7) Po převyjádření dostáváme

$${}^i \bar{f}(\vec{x} + {}^i \vec{v}, t + 1) - {}^i \bar{f}(\vec{x}, t) = -\frac{1}{\bar{\tau}} ({}^i \bar{f}(\vec{x}, t) - {}^i f^{(eq)}(\vec{x}, t)), \quad (6.22)$$

kde je $\bar{\tau}$ určeno vztahem

$$\bar{\tau} = \tau + \frac{1}{2}. \quad (6.23)$$

Dostáváme tak rovnici zcela shodnou s (6.2). Zároveň vidíme, proč je dobré volit množinu rychlostí ${}^i \vec{v}$ tak, aby měla stejnou geometrii jako diskrétní síť bodů, v kterých budeme informace o f uchovávat.

Ještě je třeba spočítat, nezmění-li se vlivem změny proměnných výpočet makroskopických veličin. Zkusme tedy spočítat hustotu:

$$\bar{\rho} \equiv \sum_i {}^i \bar{f} = \sum_i {}^i f + \frac{1}{2\tau} \sum_i ({}^i f - {}^i f^{(0)}) + \frac{1}{2} \sum_i {}^i F = \sum_i {}^i f = \rho. \quad (6.24)$$

Druhý člen v této rovnici vypadl proto, že je rovnovážné rozdělení f z definice zkonztruováno se stejnou hustotou jako původní f . Třetí člen je nulový díky tomu, že ${}^i F$ nemá nultý koeficient Hermitovského rozvoje (4.96).

Provedeme-li to samé pro výpočet makroskopické rychlosti $\vec{\mathbf{u}}$, zůstává stejný argument pro druhý člen, nicméně zbylé dva jsou již nenulové:

$$\rho \bar{\mathbf{u}} = \sum_i {}^i \vec{\mathbf{v}} {}^i \bar{f} = \sum_i {}^i \vec{\mathbf{v}} {}^i f + \frac{1}{2} \sum_i {}^i \vec{\mathbf{v}} {}^i F = \rho \vec{\mathbf{u}} - \frac{\rho \vec{\mathbf{g}}}{2}. \quad (6.25)$$

Výsledek projekce silového členu je opět zřejmý např. z koeficientu (4.97). Vidíme tedy, že vypočtenou rychlosťi $\bar{\mathbf{u}}$ musíme korigovat s ohledem na silový člen:

$$\vec{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{u}} + \frac{\vec{\mathbf{g}}}{2}. \quad (6.26)$$

Nakonec ještě musíme ošetřit změnu relaxačního času τ na $\bar{\tau}$. V (6.16) bylo definována praktičtější verze rovnovážného rozdělení, nicméně s použitím τ . Musíme tedy provést odpovídající substituci. Na pravé straně rovnice (6.22) máme

$$-\frac{1}{\bar{\tau}}({}^i \bar{f} - {}^i f^{(0)} - \tau {}^i F) = -\frac{1}{\bar{\tau}}({}^i \bar{f} - {}^i f^{(0)}) + \left(1 - \frac{1}{2\bar{\tau}}\right) {}^i F. \quad (6.27)$$

A nakonec musíme příslušnou substituci provést ve výrazech pro transportní koeficienty. Uvedémě tedy změněný výraz pro viskozitu v modelu diskutovaném v předešlé kapitole, který nás primárně zajímá:

$$\mu = c_s^2 \rho \left(\bar{\tau} - \frac{1}{2} - 2c_s^2 A \right). \quad (6.28)$$

V dalším výkladu již u všech veličin vypustíme značení s pruhem.

6.4 Standardní LBM a kinetické schéma

Standardní lattice Boltzmannova metoda operuje ve třech krocích:

- **1. Propagace** - Hodnoty ${}^i f$ příslušející jednotlivým rychlostem se posunou v jím odpovídajících směrech do sousedních síťových bodů:

$${}^i f^{in}(\vec{\mathbf{x}} + {}^i \vec{\mathbf{v}}, t+1) = {}^i f^{out}(\vec{\mathbf{x}}, t). \quad (6.29)$$

- **2. Kolize** - Rozdělení před kolizí (značíme ${}^i f^{in}$) se modifikuje podle příslušného kolizního operátoru (výsledné rozdělení značíme ${}^i f^{out}$)

$${}^i f^{out}(\vec{\mathbf{x}}, t) = {}^i f^{in}(\vec{\mathbf{x}}, t) - \frac{1}{\tau}({}^i f - {}^i f^{(eq)}). \quad (6.30)$$

- **3. Vyčíslení makroskopických veličin** - Z pokolizního rozdělení jsou vypočteny hodnoty makroskopických veličin v daném bodě, aby mohly být použity pro konstrukci rovnovážného rozdělení v další iteraci.

V této práci však zavedeme speciální případ lattice Boltzmannovy metody, v literatuře označovaný jako *kinetické schéma*. Spočívá v pevném určení relaxačního parametru $\tau = 1$. Dosadíme-li do (6.22) tuto hodnotu, zjistíme, že se zcela odečte člen odpovídající lokálnímu mikroskopickému rozdělení:

$${}^i f(\vec{x} + {}^i \vec{v}, t + 1) = {}^i f^{(eq)}(\vec{x}, t). \quad (6.31)$$

Mezi síťovými body tak probíhá transport pouze hodnot ${}^i f^{(eq)}$. Rovnovážné rozdělení je ale závislé pouze na makroskopických veličinách v daném bodě, nikoli už však na jednotlivých mikroskopických rychlostech. Odtud plyne první výhoda použití kinetického schématu: odpadá nutnost držet v paměti pro každý síťový bod všechny hodnoty ${}^i f$. Stačí držet v paměti pouze hodnoty makroskopických veličin, které by byly v standardní lattice Boltzmannově metodě uchovávány také.

Další nezanedbatelnou výhodou kinetického schématu je dramatické zjednodušení zadání okrajových podmínek. Při formulacích problému jsou na hranicích výpočetní oblasti určeny pochopitelně pouze makroskopické veličiny. Pokud ne-používáme kinetické schéma, stojíme před úkolem určit z několika málo zadaných makroskopických veličin (např. jen. \vec{u}) celou sadu mikroskopických hodnot ${}^i f$. Tato úloha nemá jednoznačné řešení (např. se ukazuje, že nahradit je ${}^i f^{(eq)}$ je v obecném případě velmi nepřesné) a tato otázka je velice rozsáhlým podoborem celého výzkumu týkajícího se lattice Boltzmannovy metody. Jako práci uvádějící nejčastěji používané okrajové podmínky, které jsou zároveň podrobny numerickému testování, uvedmě třeba [15]. V kinetickém schématu je ovšem otázka okrajových podmínek daleko jednodušší. Protože operujeme pouze s makroskopickými hodnotami, jsou okrajové podmínky zadány zcela přirozeně. Jak se však ukazuje v praxi numerických simulací, určení okrajových podmínek je sice jednodušší, není však bez problémů.

6.5 D2Q9 implementace

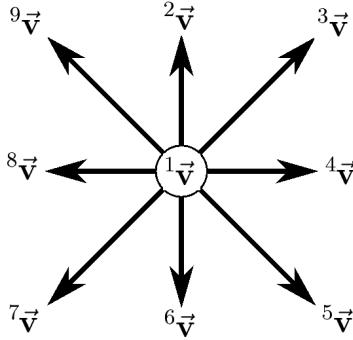
Nyní budou uvedeny konkrétní vztahy použité při implementaci kinetického schématu v simulacích. Omezíme se pouze na dvoudimenzionální simulace. Předně je třeba podotknout, že jsme přešli do mřížkových jednotek, což jsou relativní jednotky, pro které $\Delta x = 1$ a $\Delta t = 1$. Problematicke převodu z těchto jednotek do standardních relativních jednotek, se věnuje sekce 6.7.

Budeme používat D2Q9 systém rychlostí (viz dodatek B), který odpovídá regulární čtvercové síti, pokrývající celou výpočetní oblast. Sada rychlostí D2Q9 modelu v mřížových jednotkách škálovaných koeficientem c_s je tato (viz také obrázek 6.3):

$${}^1 \vec{v} = (0, 0) \quad {}^2 \vec{v} = (0, 1) \quad {}^3 \vec{v} = (1, 1)$$

$${}^4 \vec{v} = (1, 0), \quad {}^5 \vec{v} = (1, -1) \quad {}^6 \vec{v} = (0, -1)$$

$${}^7 \vec{v} = (-1, -1), \quad {}^8 \vec{v} = (-1, 0) \quad {}^9 \vec{v} = (-1, 1)$$



Obrázek 6.3: Sada rychlostí v diskretizaci typu D2Q9 [25].

Zmíněný škálovací koeficient pro rychlosti je v tomto případě:

$$c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}. \quad (6.32)$$

Rovnovážné rozdělení je dáno vztahem:

$${}^i f^{(eq)} = {}^i w \rho \left(1 + 3({}^i \vec{v} \cdot \vec{u}) + \frac{9}{2}({}^i \vec{v} \cdot \vec{u})^2 - \frac{3}{2} \vec{u}^2 + A \mathbf{S}({}^i \vec{v} \otimes {}^i \vec{v} - 1/3) \right) + \frac{1}{2} {}^i F. \quad (6.33)$$

Člen pro objemovou sílu je roven:

$${}^i F = {}^i w \rho \left(3({}^i \vec{v} - \vec{u}) - 9(({}^i \vec{v} \cdot \vec{u}) {}^i \vec{v}) \right) \cdot \vec{g}. \quad (6.34)$$

Hustotu ρ a makroskopickou rychlosť \vec{u} spočítáme pomocí součtu:

$$\rho = \sum_i {}^i f \quad \vec{u} = \frac{1}{\rho} \sum_i {}^i \vec{v} {}^i f + \frac{\vec{g}}{2} \quad (6.35)$$

A nakonec jsou tlak p a dynamická viskozita μ dány relacemi:

$$p = \frac{1}{3} \rho \quad \mu = \rho \left(\frac{1}{6} - \frac{2}{9} A \right) \quad (6.36)$$

Stojí za povšimnutí, že tyto vztahy jsou identické s uvedenými pro toto kinetické schéma v [26] a [11]. Zde se je však podařilo odvodit podrobným postupem přes projekci do Hermitovy báze, v citovaných zdrojích jsou uvedeny bez dalších podrobností.

6.6 Okrajové podmínky a výpočty derivací

Zdroje zabývající se kinetickým schématem [26] a [11] nijak blíže neuvádějí konkrétní implementace svých okrajových podmínek, není tedy k dispozici žádné srovnání analogické [15]. Uvedémě zde okrajové podmínky tak, jak byly implementovány v numerické simulaci a o kterých se ukázalo že jsou vyhovující. Okrajové podmínky byly voleny co nejjednodušší, tak aby byla jejich vlivem do simulace vnesena pouze nejnutnější chyba.

- **Periodická okrajová podmínka** - Je řešena vhodnou implementací příslušného pole mřížových bodů, body na hranici výpočetní oblasti tedy navzájem sousedí s body na protilehlé hranici.
- **Okrajová podmínka na překážce** - Na pevných překážkách volíme hodnotu rychlosti $\vec{u} = 0$. Hodnotu hustoty volíme pevnou $\rho = \rho_0$. Jelikož jde o nestlačitelnou simulaci, je v celé oblasti až na malé odchylky způsobené zanedbáním v Hermitovském rozvoji hustota stejná. My volíme $\rho_0 = 1$.

Dále je naším úkolem vypočítat hodnoty derivací rychlosti podle jednotlivých souřadnic. Uvnitř oblasti používáme centrální konečnou differenci (zápis je pro jednoduchost pouze symbolický, jednorozměrný, $\Delta x = 1$):

$$\frac{\partial u_i}{\partial x}(x) = \frac{1}{2}(u_i(x+1) - u_i(x-1)). \quad (6.37)$$

Pro výpočet derivace na hranici používáme jednostrannou konečnou differenci, podle orientace hranice buď zpětnou nebo dopřednou. V rohových bodech hranice podle potřeby provádíme jednostrannou differenci ve dvou směrech.

6.7 Převod z mřížkových jednotek

Problematice převodu z mřížkových jednotek se velmi podrobně věnuje návod [14]. Uvedeme zde pro úplnost seznam hlavních vztahů. V sekci 3.5 byl již proveden převod z fyzikálních do relativních jednotek. Simulaci lattice Boltzmannovou metodou jsme ovšem zavedli v jiné sadě relativních jednotek - mřížových (značíme lb), kde je $\Delta x = \Delta t = 1$ (připomeňme, že Δx je vzdálenost mezi mřížovými body, Δt je časový rozestup mezi jednotlivými iteracemi). Dostáváme tak základní škálovací vztahy:

$$x_r = x_{lb}\Delta x \quad t_r = t_{lb}\Delta t \quad (6.38)$$

Jednoduchou jednotkovou analýzou dostáváme potom vztahy i pro odvozené veličiny:

$$\vec{u}_r = \vec{u}_{lb} \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad \mu_r = \mu_{lb} \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \quad (6.39)$$

$$\frac{\partial u_r}{\partial x_r} = \frac{\partial u_{lb}}{\partial x_{lb}} \frac{1}{\Delta t} \quad \vec{g}_r = \vec{g}_{lb} \frac{\Delta t^2}{\Delta x} \quad (6.40)$$

Poslední otázkou zůstává, jak volit velikost časového kroku Δt ve vztahu k prostorovému kroku Δx . Návod [14] předkládá na toto téma krátkou úvahu. Ta vychází z faktu, že chyby způsobené nedodržením stlačitelného režimu proudění se škálují jako $O(\vec{u}_{lb}^2) = O(\Delta t^2/\Delta x^2)$. Chyby způsobené prostorovou diskretizací jsou rádu $O(\Delta x^2)$, protože jsme pro approximaci konvektivního členu užili schéma druhého rádu (lichoběžníkové pravidlo). Aby byly tyto chyby při zjemňování sítě redukovány společně, vyplývá z této úvahy nutnost škálování $\Delta t \propto \Delta x^2$. V našem případě volíme většinou dokonce

$$\Delta t = \Delta x^2, \quad (6.41)$$

což má za vedlejší důsledek $\mu_r = \mu_{lb}$.

Kapitola 7

Numerické výsledky

7.1 Simulační zásady

Základním cílem numerických simulací v této práci, je otestovat vhodnost použití D2Q9 kinetického schématu s modifikovaným rovnovážným rozdělením k simulaci zobecněných newtonovských tekutin. Bylo tedy snahou soustředit se hlavně na tyto jevy a ostatní možné problémy pokud možno minimalizovat a model zjednodušit, pro co nejjasnější vysvětlení původu chyb. Tato poznámka se zejména týká okrajových podmínek. Vzhledem k povaze lattice Boltzmannovy metody, je ve standarní formulaci možné specifikovat hranici oblasti pouze jako po částech lineární křivku (resp. plochu), v každém svém úseku rovnoběžnou s některou ze souřadnicových os. Proto jsou všechny simulace prováděny v geometriích, které tyto požadavky splňují. Provádění aproximace křivočaré hranice by do simulace mohlo vnést nežádoucí chyby. Práce zabývající se neregulární mříží jsou například [12], nebo přímo pro kinetické schéma [18].

Poznámka: V následujícím textu označujeme rychlosť v relativních mřížkových jednotkách vždy u_{lb} , ostatní rychlosti jsou vždy ve standardních relativních jednotkách. Zpravidla je to zdůrazněno indexem r . Také, pokud není určeno výslově jinak, jsou všechny rychlosti chápány pouze v x -ovém směru.

Výsledky numerických simulací jsou porovnávány s teoretickými vztahy, nebo s výsledky získanými metodou konečných prvků pomocí komerčního programu COMSOL. Při porovnávání rychlostních profilů je pro stanovení chyby používána l^2 relativní norma

$$\varepsilon_r = \sqrt{\frac{\sum_i (u(x_i) - u^T(x_i))^2}{\sum_i u^T(x_i)^2}}, \quad (7.1)$$

kde $u(x_i)$ je nasimulovaná hodnota v i -tému bodě dělení, a $u^T(x_i)$ je jí odpovídající hodnota teoretická, případně získaná metodou konečných prvků.

7.2 Newtonovské Poiseuillovo proudění

Prvním testem metody je čistě newtonovské proudění mezi dvěma rovnoběžnými rovinami o vzájemné vzdálenosti $L = 1$. Cílem bylo zjistit, jestli vůbec dokáže změna parametru A účinně měnit viskozitu a jaký vliv na přesnost mají různá nastavení výpočtu, zejména jemnost dělení Δx , přídavný parametr A a rychlosť v mřížových jednotkách u_{lb} . Jelikož jde o problém symetrický vzhledem k posunutí ve směru proudění, byl simulován na síti $2 \times N$, kde N je počet buňek sítě ve směru kolmém na proudění. Okrajové podmínky na stěnách byly nastaveny na nulovou rychlosť, na vstupu a výstupu byla uplatněna periodická okrajová podmínka. Proudění bylo uvedeno do chodu objemovou silou $\vec{g} = (g, 0)$. Hustota byla stanovena na $\rho = 1$.

Tyto okrajové podmínky byly vybrány jako nevhodnější. Standardně je v simulacích Poiseuillovo proudění uváděno do chodu tlakovým gradientem. V lattice Boltzmannově metodě je však tlak přímo úměrný hustotě a tlakový gradient by se tedy musel nastavovat prostřednictvím změny hustoty. Ta ale zpětně ovlivňuje viskozitu, což je nežádoucí.

Z analytického řešení Navierových-Stokesových rovnic pro tento případ plyne, že stacionární řešením je parabolický profil rychlostí pouze v x -ovém směru.

$$u_x(y) = -\frac{\rho g}{2\mu} y(y - L). \quad (7.2)$$

Maximální hodnota rychlosti se nabývá ve středu profilu $y = L/2$:

$$u_x(L/2) \equiv u_{max} = \frac{\rho g L^2}{8\mu}. \quad (7.3)$$

Reynoldsovo číslo pro tento typ simulace definujme vztahem:

$$\text{Re} = \frac{\rho u_{max} L}{\mu}. \quad (7.4)$$

V první sérii testů byla zafixována maximální makroskopická rychlosť v mřížových jednotkách na $u_{lb} = 0,01$. Simulace byly prováděny pro různé hodnoty N . Touto hodnotou je potom jednoznačně určena velikost $\Delta x = L/N = 1/N$. Používáme standardně škálování $\Delta t = \Delta x^2$. Diskretizací je tedy plně určena hodnota rychlosti u_r v standardních relativních jednotkách. V rámci každé diskretizace byly nastavovány různé hodnoty viskozity. Vnější síla byla pro každou viskozitu dle vztahu (7.3) nastavena tak, aby teoretická maximální rychlosť proudění u_{max}^T byla rovná již určené u_r .

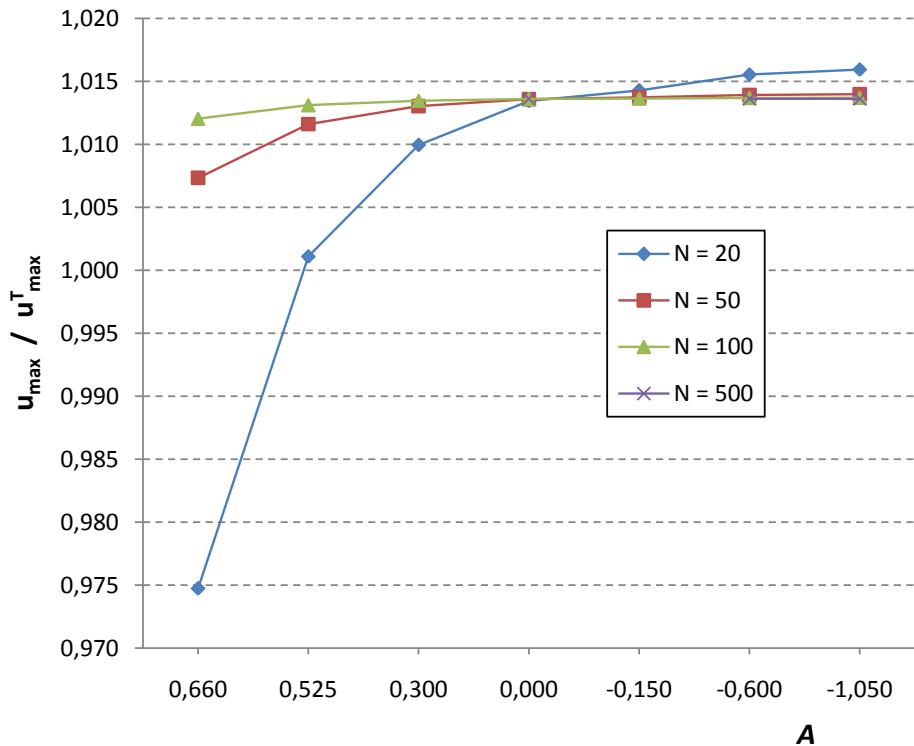
Výsledky simulací jsou uvedeny v tabulce 7.1. Z nich je patrné, že že při dodržení podmínky konstantního u_{lb} , závisí chyba simulace na nastavení parametru A . Přesněji, pro $A < 0$ ($\mu > 1/6$) je rychlosť proudění mírně nadhodnocena (což odpovídá nižší „efektivní“ viskozitě), naopak pro $A > 0$ ($\mu < 1/6$) je rychlosť proudění mírně podhodnocena oproti $A = 0$. V mnoha případech je tedy způsoben pokles relativní chyby. Zlepšení je to ovšem pravděpodobně jen zdánlivé, protože

je výsledkem vzájemné kompenzace dvou jevů: obecného nadhodnocení rychlosti, které nastává i při $A = 0$ (je tedy dáno jinými vlivy než zahrnutím tohoto parametru) a podhodnocení rychlosti vlivem kladného A . Nejvíce relevantním zobrazením tohoto jevu je závislost u_{max}/u_{max}^T na μ (resp. na A), zobrazená v grafu 7.1.

V grafu 7.1 je také vidět, že se tento efekt s hustším dělením sítě zmenšuje a hodnoty postupně konvergují k těm, které by odpovídaly $A = 0$ ($\mu = 1/6$). Tato konvergence je celkem přesně druhého rádu. V grafu 7.2 je zobrazen vývoj odchylky $\varepsilon = |u_{max}/u_{max}^T| - u_0$, kde jsme u_0 označili hodnotu u_{max} získanou při $A = 0$. Tato hodnota je systematicky odchýlena od teoretické hodnoty u_{max}^T a její závislost na dělení je zanedbatelná, což lze pravděpodobně připsat chybě vzniklé stlačitelnosti, která se škáluje právě úměrně u_{lb} .

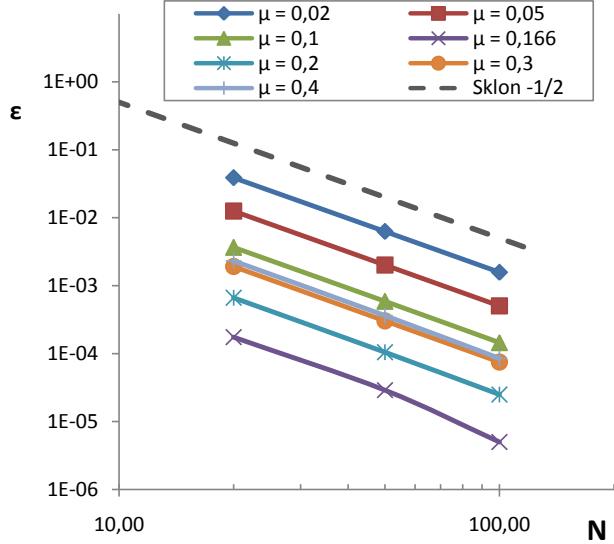
Dále bylo ve všech simulacích ověřeno, že se výpočet stává nestabilním pro hodnoty přibližně $A < -1$. Z druhé strany máme omezení na A takové, aby nebylo dosaženo záporné viskozity. Odtud plyne, že je tato metoda stabilní a použitelná pouze v rozsahu parametru

$$-1 < A < \frac{3}{4}. \quad (7.5)$$



Obrázek 7.1: Závislost u_{max}/u_{max}^T na μ v sérii simulací s konstantním $u_{lb} = 0,1$

Zatímco první sérii testů se povedlo relativně izolovat chybu vnesenou změnou rovnovážného rozdělení, druhá série testů je zaměřena spíše prakticky. V newtonovských simulacích je zpravidla známa určitá charakteristická rychlosť proudění, nicméně jeho viskozita se může v prostoru měnit v poměrně velkém



Obrázek 7.2: Závislost chyby $\varepsilon = |u_{max}/u_{max}^T - u_0|$, na jemnosti dělení N , v sérii simulací s konstantním $u_{lb} = 0, 1$

rozsahu hodnot. Je tedy problematické definovat Reynoldsovo číslo. Na druhou stranu, nenewtonovské změny viskozity mají vliv často více na tvar proudového pole, než na absolutní hodnotu charakteristické rychlosti.

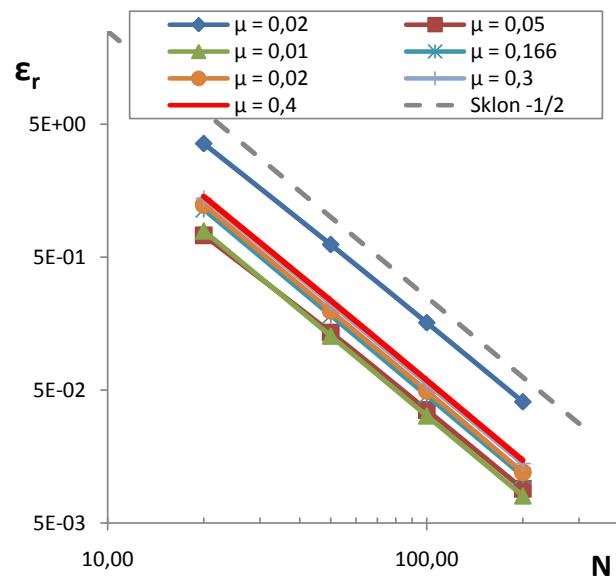
V druhé sérii simulací tedy fixujeme rychlosť $u_r = u_{max} = 2$ a sledujeme, jaké praktické výhody plynou z postupného zjemňování výpočetní sítě. Tímto se totiž postupně snižuje mřížková rychlosť u_{lb} a tedy klesá chyba související se stlačitelností. Pro různá dělení jsou opět testovány různé viskozity. Dodržujeme $\Delta t = \Delta x^2$. Ke zvolené viskozitě je vždy dopočtena taková síla, aby u_{max}^T byla stejná. Výsledky simulací jsou shrnutы v tabulce 7.2.

Pozorujeme (viz graf 7.3), že chyby způsobené stlačitelností jsou skutečně druhého řádu, jak již bylo diskutováno v sekci 6.7, škálují se jako $O(u_{lb}^2) = O(1/N^2)$. V grafu 7.4 můžeme sledovat vývoj chyby vyvolané nenulovým parametrem A . Vidíme, že pro viskozity $\mu < 1/6$ nejprve relativní chyba mírně poklesne, což bylo již komentováno a pro nízké viskozity relativně hodně vzroste. Jako celek jsou však chyby druhého řádu, takže je lze dostatečně jemnou mřížkou držet pod kontrolou.

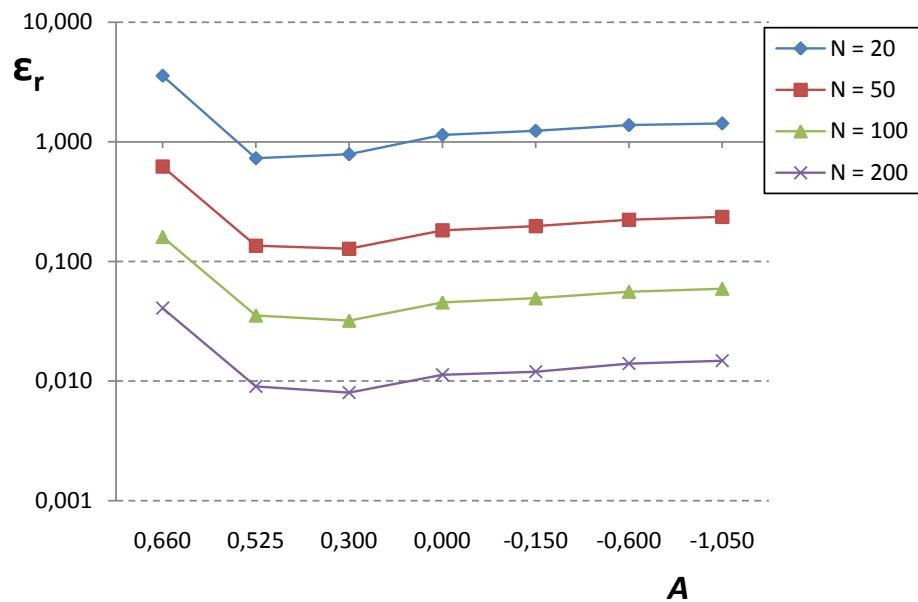
7.3 Nenewtonovské modely

Z předchozí sekce jsme dostali přibližný odhad, vymezující použitelnost metody v rozsahu viskozit $0 < \mu < 0,4$. V nízkých viskozitách roste strmě relativní chyba, horní mez na viskozitu je dána stabilitou simulace. Pro testování nenewtonovského chování tekutin tedy volíme Carreau model, který má na rozdíl od mocninného modelu jednoduše nastavitelnou maximální a minimální hodnotu viskozity:

$$\mu(\dot{\gamma}) = \frac{\mu_0 - \mu_\infty}{[1 + (K\dot{\gamma}^2)]^{m/2}} + \mu_\infty \quad (7.6)$$



Obrázek 7.3: Závislost relativní chyby ε_r oproti teoretickým výsledkům, na N . Podotkněme, že $u_{lb} = O(1/N)$. Simulace udržuje konstantní u_r .



Obrázek 7.4: Závislost relativní chyby ε_r simulace oproti teoretickým výsledkům, na hodnotě parametru A , pro různé hustoty dělení. Simulace udržuje konstantní u_r .

N	Δx	Δt	A	μ	u_{max}^T	Re	g	u_{max}	$\varepsilon_r [\%]$
20	0,05	0,0025	0,660	0,02	2	100	0,32	1,9495	3,58
			0,525	0,05	2	40	0,8	2,0022	0,73
			0,300	0,10	2	20	1,6	2,0199	0,79
			0,000	1/6	2	12	8/3	2,0269	1,14
			-0,150	0,20	2	10	3,2	2,0286	1,24
			-0,600	0,30	2	20/3	4,8	2,0311	1,38
			-1,050	0,40	2	5	6,4	2,0319	1,43
50	0,02	0,0004	0,660	0,02	5	250	0,8	5,0367	0,60
			0,525	0,05	5	100	2	5,0580	0,95
			0,300	0,10	5	50	4	5,0651	1,10
			0,000	1/6	5	30	20/3	5,0679	1,16
			-0,150	0,20	5	25	8	5,0686	1,17
			-0,600	0,30	5	50/3	12	5,0696	1,19
			-1,050	0,40	5	12,5	16	5,0699	1,20
100	0,01	0,0001	0,660	0,02	10	500	1,6	10,1204	0,992
			0,525	0,05	10	200	4	10,1311	1,106
			0,300	0,10	10	100	8	10,1347	1,444
			0,000	1/6	10	60	40/3	10,1361	1,160
			-0,150	0,20	10	50	16	10,1364	1,164
			-0,600	0,30	10	100/3	24	10,1369	1,169
			-1,050	0,40	10	25	32	10,1370	1,171
500	0,002	0,000004	0,000	0,17	50	300	200/3	50,6807	1,1605
			-0,600	0,30	50	500/3	120	50,6808	1,1608
			-1,050	0,40	50	125	160	50,6809	1,1609

Tabulka 7.1: Výsledky série simulací newtonovského Poiseuillova proudění s konstantním $u_{lb} = 0, 1$. Symbol ε označuje relativní chybu ve smyslu (7.1)

Simulace byly provedeny pro tři vybrané typy průběhů $\mu(\dot{\gamma})$. V dalším textu je budeme označovat Model 1, 2 a 3. Parametry jednotlivých modelů jsou uvedeny v tabulce 7.3. Každému modelu byla zároveň přidělena síla g , která v simulaci uvádí tekutinu do pohybu. Tato síla je společná pro obě následující simulace.

Průběhy $\mu(\dot{\gamma})$ jsou zobrazeny v grafu 7.5. Modely 1 a 2 jsou pseudoplastické tekutiny, první z nich má díky vyššímu m změny viskozity trochu prudší, zatímco druhý je spíš blíže newtonovskému chování. Model 3 je naopak dilatantní tekutina.

7.4 Nenewtonovské Poiseuillovo proudění

Ve stejné konfiguraci jako v předchozí simulaci byly testovány uvedené tři nenewtonovské modely. Výsledné profily proudění pro různá dělení byly porovnány s profily získanými metodou konečných prvků programem COMSOL.

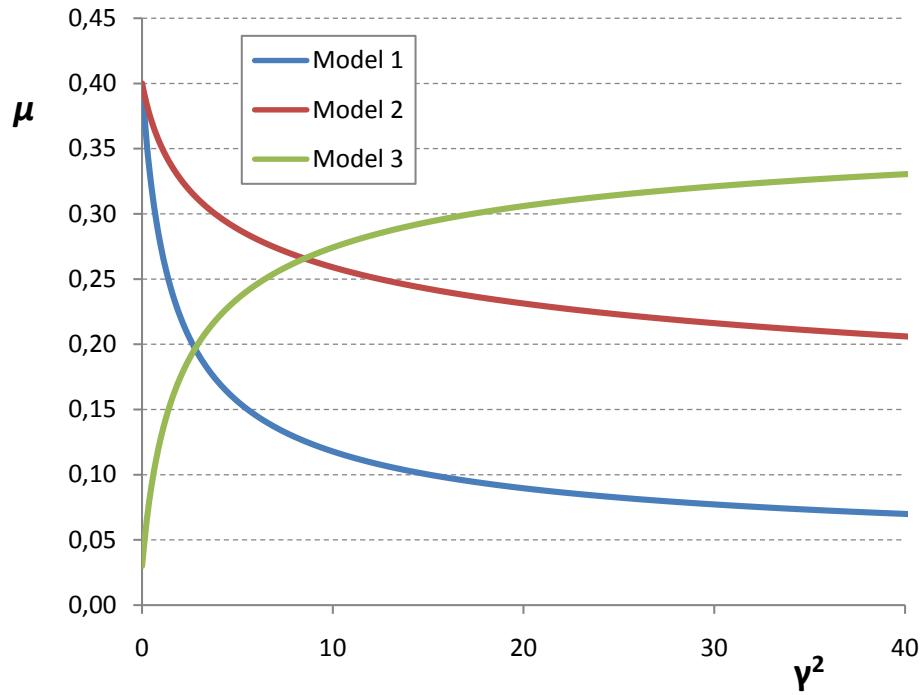
V grafech 7.6, 7.7 a 7.8 jsou zobrazeny průběhy rychlosti a viskozity v profilu. Vidíme, že lattice Boltzmannova metoda se shoduje s FEM řešením velice dobře.

N	Δx	Δt	A	μ	u_{max}^T	Re	g	u_{max}	$\varepsilon_r [\%]$
50	0,02	0,0004	0,660	0,02	0,04	100	0,32	1,99242	0,62
			0,525	0,05	0,04	40	0,8	2,00050	0,14
			0,300	0,10	0,04	20	1,6	2,00320	0,13
			0,000	0,17	0,04	12	8/3	2,00420	0,18
			-0,150	0,20	0,04	10	3,2	2,00454	0,20
			-0,600	0,30	0,04	20/3	4,8	2,00498	0,22
			-1,050	0,40	0,04	5	6,4	2,00518	0,24
100	0,01	0,0001	0,660	0,02	0,02	100	0,32	1,99805	0,161
			0,525	0,05	0,02	40	0,8	2,00012	0,035
			0,300	0,10	0,02	20	1,6	2,00080	0,032
			0,000	0,17	0,02	12	8/3	2,00100	0,046
			-0,150	0,20	0,02	10	3,2	2,00113	0,049
			-0,600	0,30	0,02	20/3	4,8	2,00124	0,056
			-1,050	0,40	0,02	5	6,4	2,00130	0,059
200	0,005	0,000025	0,660	0,02	0,01	100	0,32	1,99953	0,0408
			0,525	0,05	0,01	40	0,8	2,00003	0,0090
			0,300	0,10	0,01	20	1,6	2,00020	0,0080
			0,000	0,17	0,01	12	8/3	2,00027	0,0113
			-0,150	0,20	0,01	10	3,2	2,00029	0,0120
			-0,600	0,30	0,01	20/3	4,8	2,00031	0,0140
			-1,050	0,40	0,01	5	6,4	2,00033	0,0148

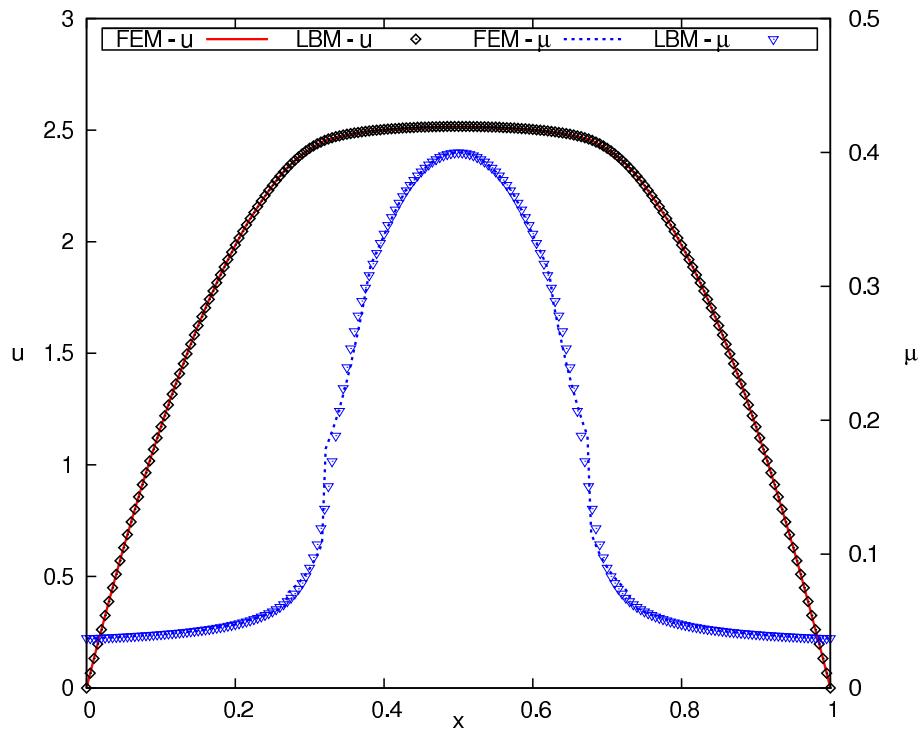
Tabulka 7.2: Výsledky série simulací newtonovského Poiseuillova proudění s konstantním $u_r = u_{max} = 2$. Symbol ε označuje relativní chybu ve smyslu (7.1)

V tabulce 7.4 jsou vypsány relativní chyby jednotlivých profilů. Pro viskozitu jsou tyto chyby dost velké, nicméně při pohledu na konkrétní průběhy v grafech je jasné, že je to způsobeno nedokonalou interpolací programu **COMSOL**. Relativní chyby průběhů viskozity tedy považujeme za irrelevantní. V grafu 7.9 je zobrazena závislost relativní chyby na N . Ačkoli je tato závislost zpočátku druhého rádu, pro vyšší hodnoty dělení již konvergence přestává, pro Model 3 se dokonce zcela zastavuje. Z těchto informací však nelze vydovit žádné další závěry stran toho, která ze simulací je přesnější.

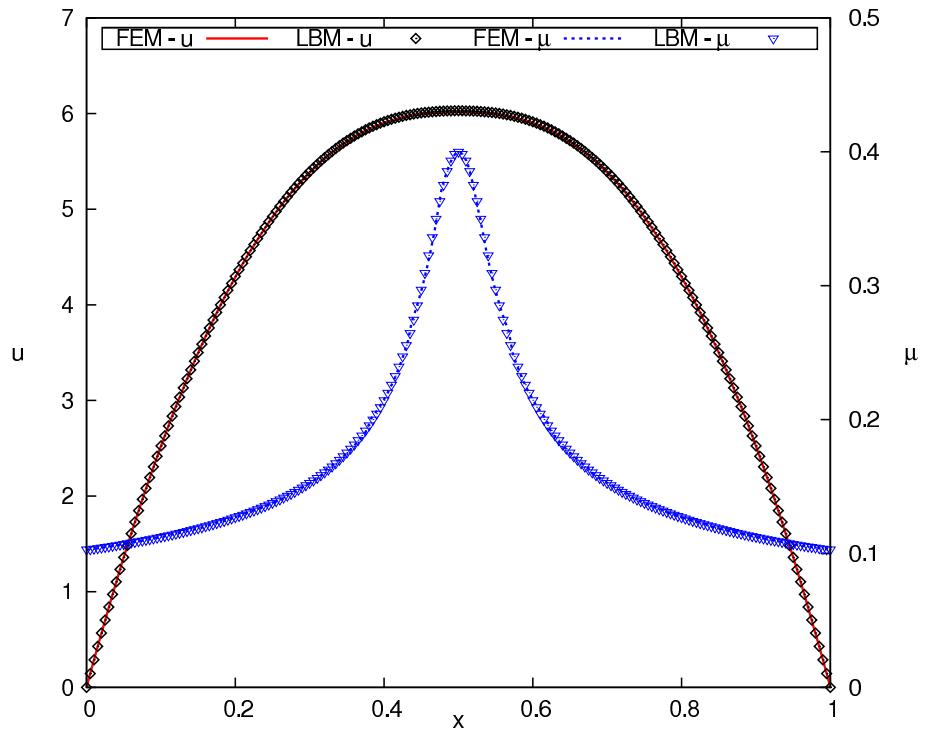
V grafu 7.9 dále pozorujeme standardní závislost relativní chyby na u_{lb} . Nejvyšší relativní chybu vykazuje Model 2, který však v profilu dosahuje rychlostí až $u \approx 6$, na rozdíl od Modelu 1 s rychlostmi $u \approx 0,9$.



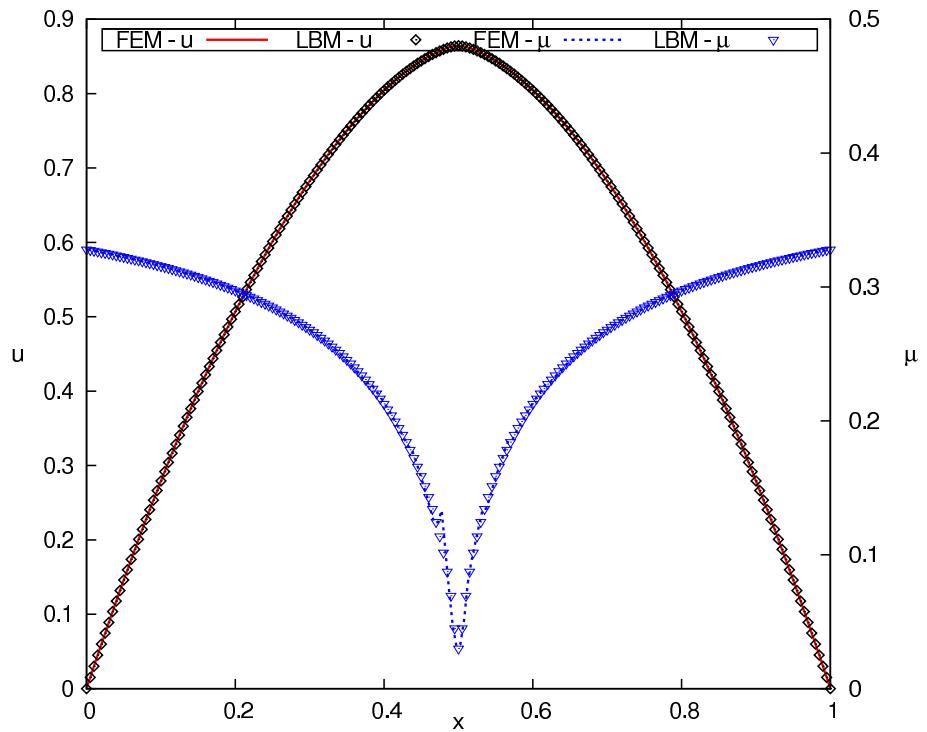
Obrázek 7.5: Závislost viskozity μ na rychlosti smyku $\dot{\gamma}^2$ pro jednotlivé ne-newtonovské modely



Obrázek 7.6: Průběh rychlosti u a viskozity μ v profilu pro tekutinu Modelu 1 při $N = 100$.



Obrázek 7.7: Průběh rychlosti u a viskozity μ v profilu pro tekutinu Modelu 2 při $N = 100$.



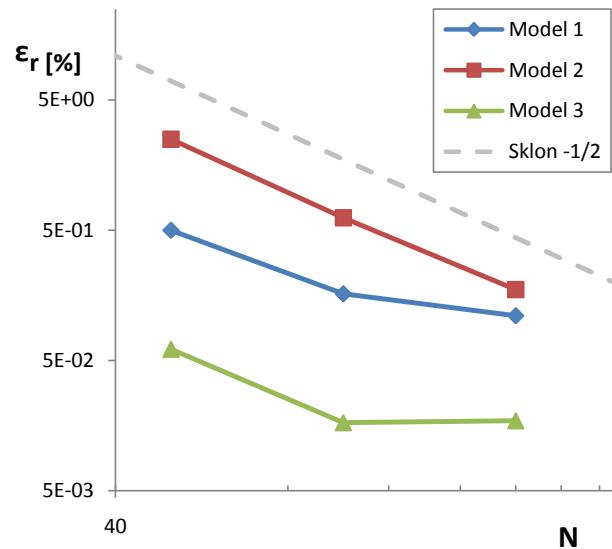
Obrázek 7.8: Průběh rychlosti u a viskozity μ v profilu pro tekutinu Modelu 3 při $N = 100$.

	Model 1	Model 2	Model 3
μ_0	0,4	0,4	0,03
μ_∞	0,03	0,03	0,4
m	1,2	0,4	0,9
K	1	1	1
g	1	6	2

Tabulka 7.3: Parametry jednotlivých modelů nenewtonovského chování

N	Model 1		Model 2		Model 3	
	$u \varepsilon_r [\%]$	$\mu \varepsilon_r [\%]$	$u \varepsilon_r [\%]$	$\mu \varepsilon_r [\%]$	$u \varepsilon_r [\%]$	$\mu \varepsilon_r [\%]$
50	0,50	5,9	2,50	8,1	0,0610	17,0
100	0,16	3,6	0,62	5,6	0,0166	12,0
200	0,11	2,9	0,18	3,9	0,0172	8,6

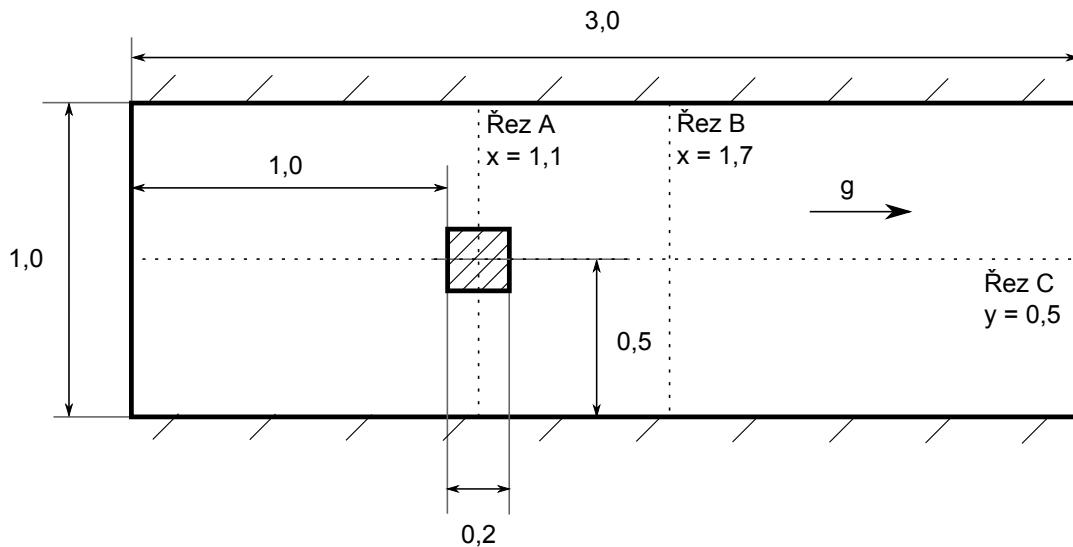
Tabulka 7.4: Závislost relativních chyb profilů u a μ na jemnosti dělení N , pro jednotlivé nenewtonovské modely. Vysoké relativní chyby u viskozity jsou pravděpodobně důsledkem nepřesné interpolace FEM řešiče.



Obrázek 7.9: Závislost relativní chyby ε_r na jemnosti dělení N pro jednotlivé modely.

7.5 Proudění kolem čtvercové překážky

Již jsme se přesvědčili, že navrhovaná úprava lattice Boltzmannovy metody dává výsledky dobře srovnatelné s FEM řešičem minimálně v jednorozměrném případě. Posledním testem této metody bude simulace dvojrozměrného proudění kolem čtvercové překážky v kanálu. Okrajové podmínky v ústích kanálu zůstanou periodické, pohon proudění bude opět zajišťovat objemová síla g . Na stěnách kanálu a překážce je předepsaná rychlosť $\vec{u} = 0$. Geometrie oblasti je zobrazena na obrázku 7.5.

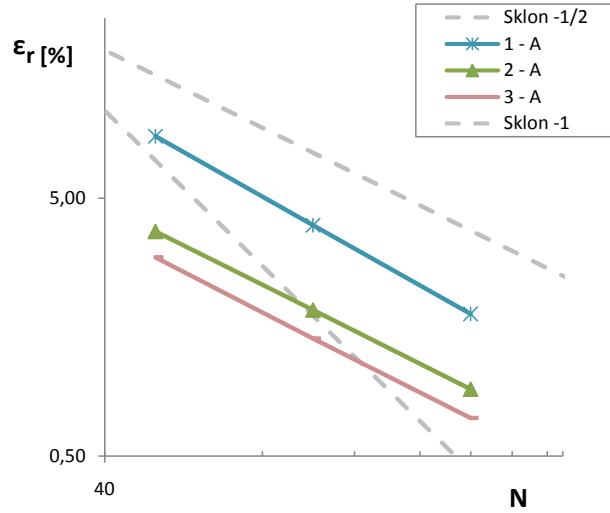


Obrázek 7.10: Schéma geometrie oblasti u problému obtékání čtvercové překážky. Označeny jsou také tři řezy: A,B a C, v kterých porovnáváme profily rychlosti a viskozity.

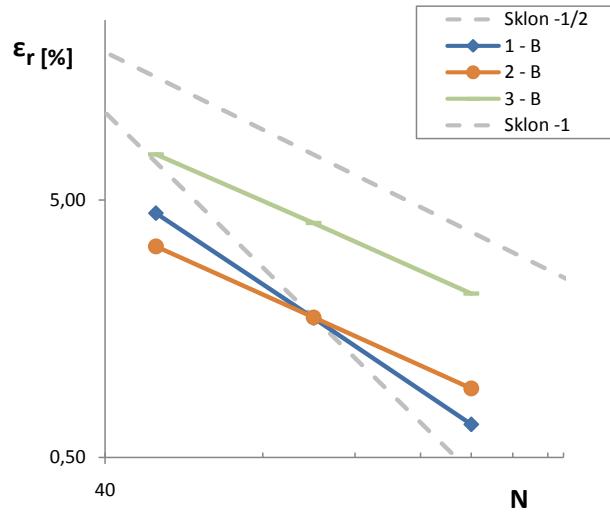
Připomínáme, že čtvercová geometrie překážky a periodické okrajové podmínky jsou voleny kvůli maximálnímu zjednodušení simulace a odstínění potenciálních zdrojů chyb. Dále se snažíme co nejvíce prověřit proudění v režimech, kdy nastává netriviální nenewtonovské chování. Proto jsou v proudění voleny rychlosti spíše menší, takové, při kterých je viskozita co nejvíce nehomogenní a její účinek srovnatelný s efekty konvekce. Opět jsou použity tři modely popsané v tabulce 7.4, objemové síly uvedené v tabulce jsou zachovány.

Výpočetní oblasti jsou vedeny tři řezy, dva příčné a jeden podélný, značíme je A,B a C. V těchto řezech jsou porovnávány průběhy rychlostí a viskozit. Dále jsou pro každý nenewtonovský model zobrazena skalární pole viskozity a velikosti rychlosti. Vidíme, že jsou naprostě k nerozeznání, především v poli viskozit vidíme prostorovou shodnost i poměrně komplikovaných struktur. Lattice Boltzmannovská simlace je tedy rozhodně relevantní metodou pro tento typ simulace. V tabulce 7.5 je přehled relativních chyb rychlostních profilů v závislosti na řezu a hustotě dělení. Relativní chyby průběhů viskozity jsou opět zatíženy vysokou

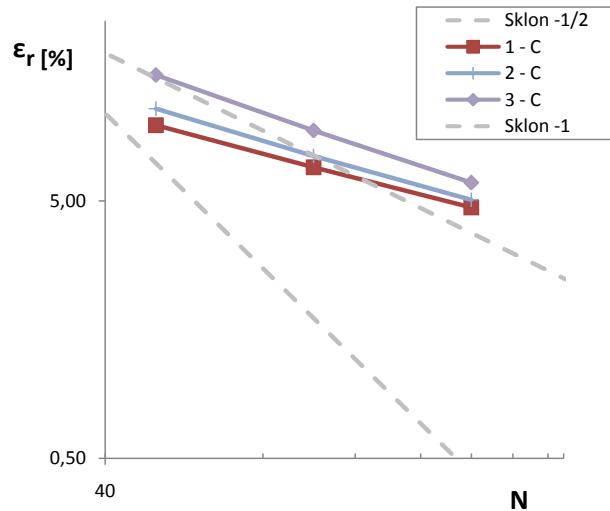
interpolaci chybou na straně programu **COMSOL**, kterou se nepodařilo odstranit ani volbou vyšší hustoty výpočetní sítě, a proto nejsou uvedeny. Vývoj relativních chyb profilů rychlosti lze nahlédnout v grafech 7.11, 7.12 a 7.13. Vidíme, že v profilech A a B je řád konvergence přibližně první. Konvergence profilů C je pomalejší. To však není překvapivé. C-profily obecně vykazují největší relativní chybu, neboť se její převážná část odehrává v oblasti mimo překážku v režimu relativně ustáleného proudění, jehož maximální rychlosť je od FEM řešení odchýlena. V příčném profilu se tento efekt projeví daleko méně, než v podélném. Přestože zobrazená data, především v grafech, mají velkou vypovídající hodnotu, některé výsledky přeci jen okomentujme.



Obrázek 7.11: Závislost relativní chyby rychlostního průběhu v řezech A, na jemnosti dělení N



Obrázek 7.12: Závislost relativní chyby rychlostního průběhu v řezech B, na jemnosti dělení N



Obrázek 7.13: Závislost relativní chyby rychlostního průběhu v řezech C, na jemnosti dělení N

Model - Profil	$N = 50$	$N = 100$	$N = 200$
1 - A	8,7	3,9	1,8
1 - B	4,4	1,7	0,7
1 - C	9,8	6,8	4,7
2 - A	3,7	1,8	0,9
2 - B	3,3	1,8	0,9
2 - C	11,4	7,5	5,1
3 - A	3,0	1,4	0,7
3 - B	7,5	4,1	2,2
3 - C	15,4	9,4	5,9

Tabulka 7.5: Závislost relativní chyby rychlosti u_x v procentech, na jemnosti dělení, pro jednotlivé nenewtonovské modely a jejich profily.

Model 1

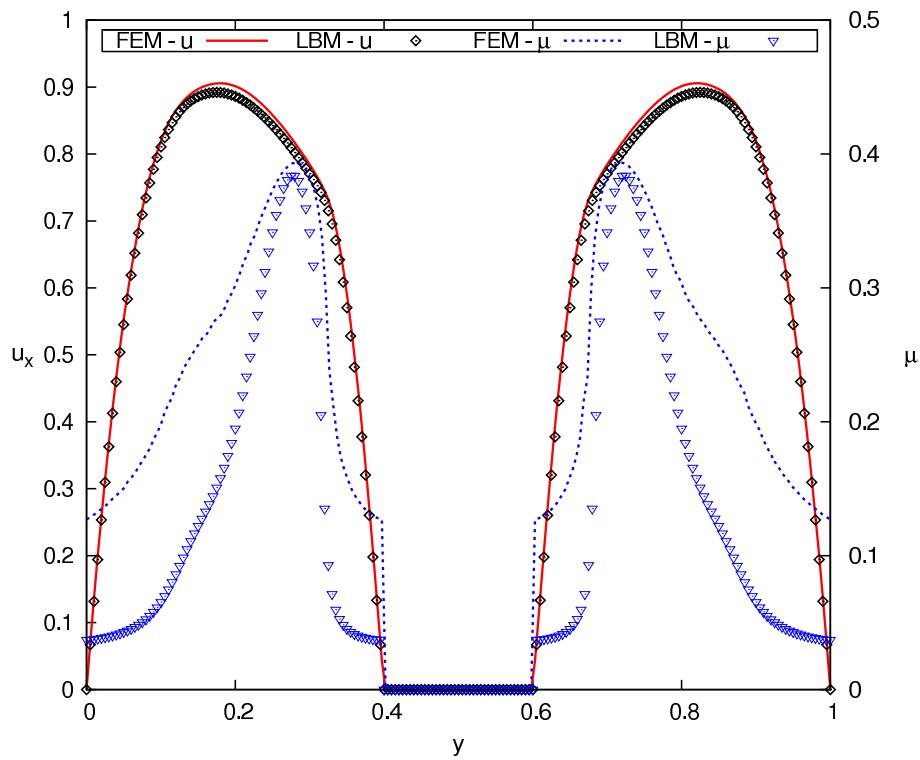
Profily pro tento model jsou zobrazeny v grafech 7.14, 7.15 a 7.16. Porovnání pole viskozity resp. velikosti rychlosti zase v obrázcích 7.17 resp. 7.18. Za povšimnutí stojí velice výrazně odlišný průběh viskozity v řezu A, který nemá v ostatních simulacích obdobu. Anomální je také proto, že osatní profily (i na stejném modelu) takovou chybu nevykazují. Z povahy této chyby je patrné, že by její příčina mohla ležet v nastavení okrajových podmínek, nicméně důkladným prověřováním nastavení obou simulací nebyla bohužel odhalena. Patrně kvůli této chybě je tak profil v řezu A zatížen největší relativní chybou v porovnání se stejným řezem na modelech 2 a 3. Tím více je překvapivé, že v dalších dvou řezech si model 1 vede s relativní chybou nejlépe ze všech tří.

Model 2

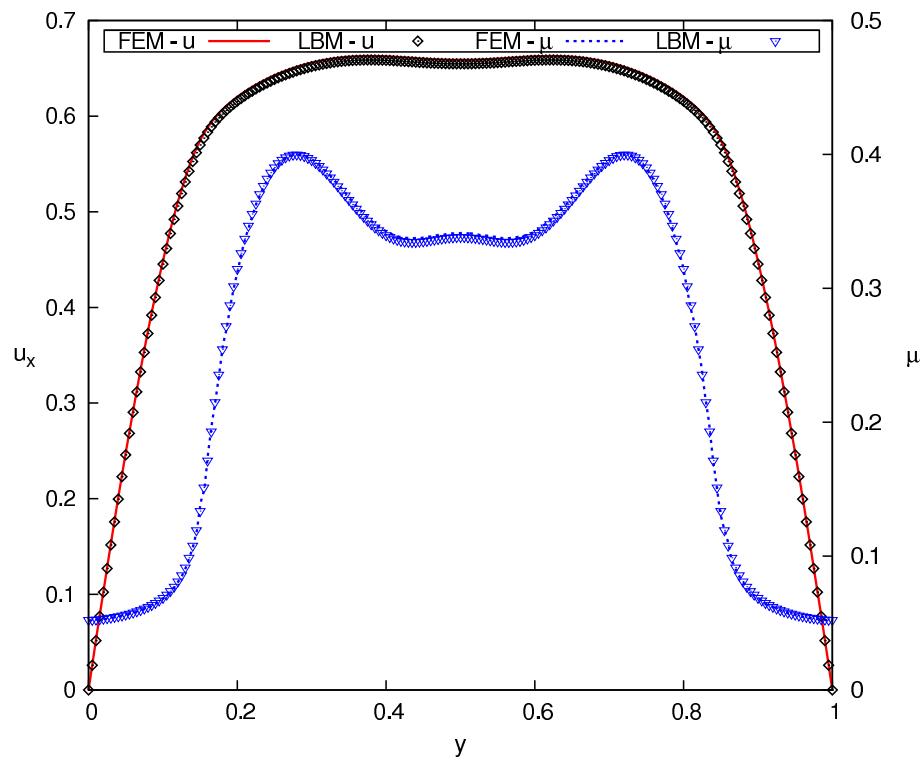
Profily pro tento model jsou zobrazeny v grafech 7.19, 7.20 a 7.21. Porovnání pole viskozity resp. velikosti rychlosti zase v obrázcích 7.22 resp. 7.23. Výsledky v tomto modelu dívají velice uspokojivou shodu s FEM řešením. K tomu je nutné dodat, že vlivem vyšší hodnoty působící síly, má model ze všech tří nejrychlejší proudění (a tedy i největší u_{lb}). Je tu však také možnost, že by nízká relativní chyba řešení byla způsobena nižší konstantou m v Carreau modelu, která ho přibližuje standardnímu newtonovskému chování.

Model 3

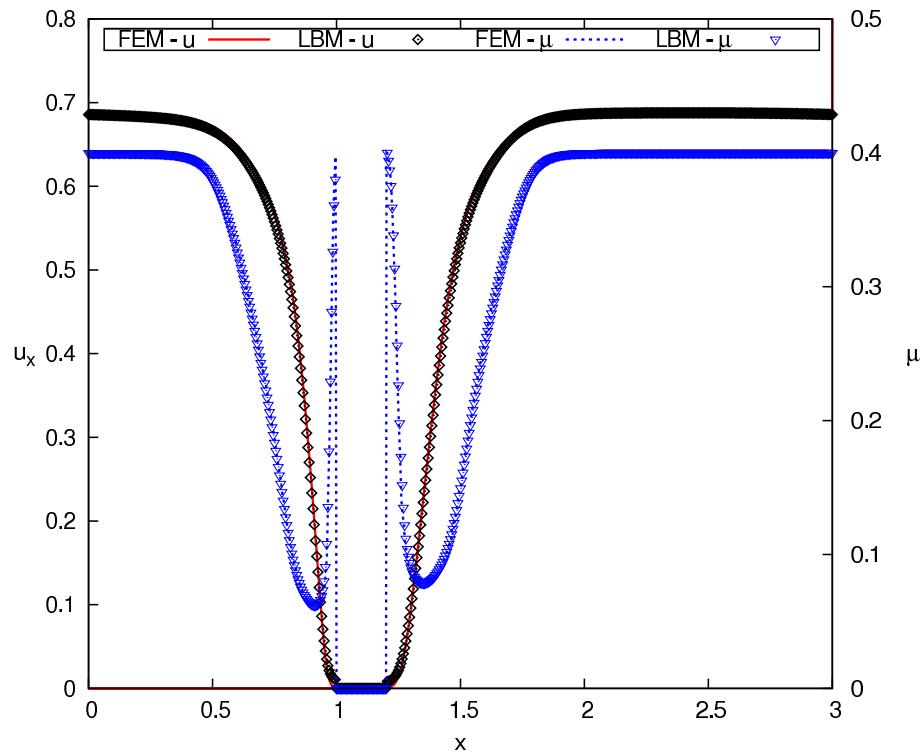
Profily pro tento model jsou zobrazeny v grafech 7.24, 7.25 a 7.26. Porovnání pole viskozity resp. velikosti rychlosti zase v obrázcích 7.27 resp. 7.28. Tento model je rovněž v relativně dobré shodě s FEM řešením, nicméně v ustáleném proudění mimo překážku pozorujeme nadhodnocení maximální rychlosti proudění, což má za následek zvýšení relativní chyby zejména v profilu C.



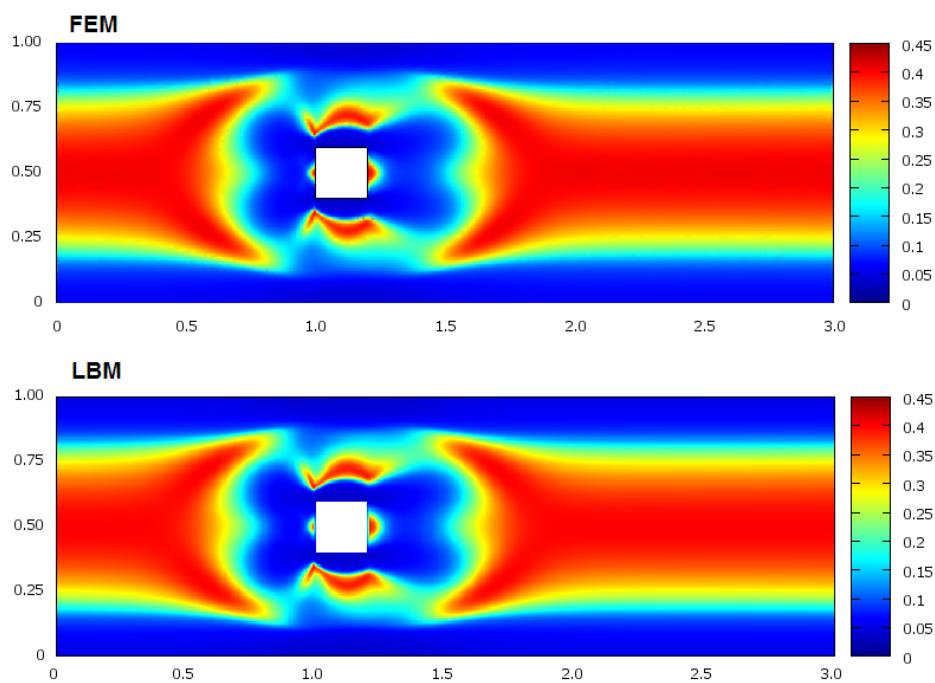
Obrázek 7.14: Model 1 - Profil A: Průběh rychlosti u a viskozity μ v porovnání s FEM řešením. $N = 200$.



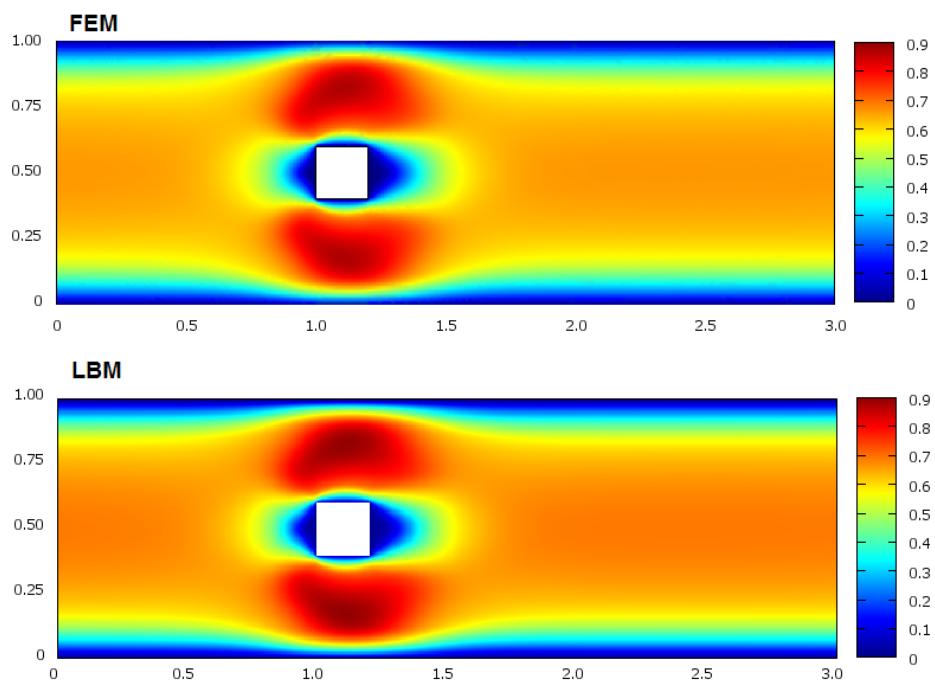
Obrázek 7.15: Model 1 - Profil B: Průběh rychlosti u a viskozity μ v porovnání s FEM řešením. $N = 200$.



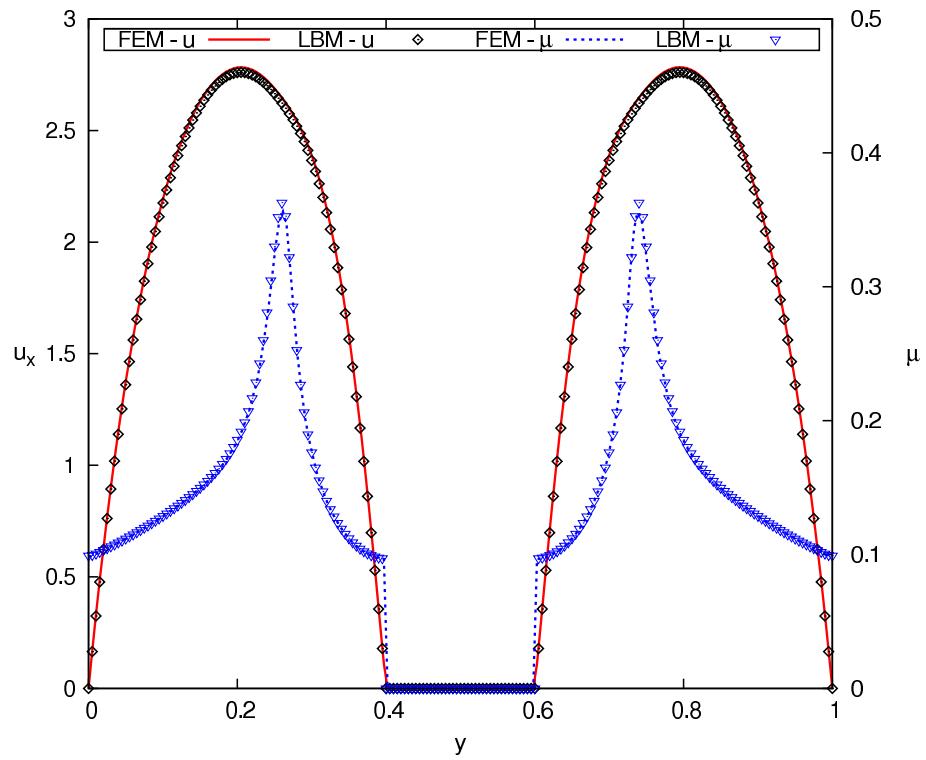
Obrázek 7.16: Model 1 - Profil C: Průběh rychlosti u a viskozity μ v porovnání s FEM řešením. $N = 200$.



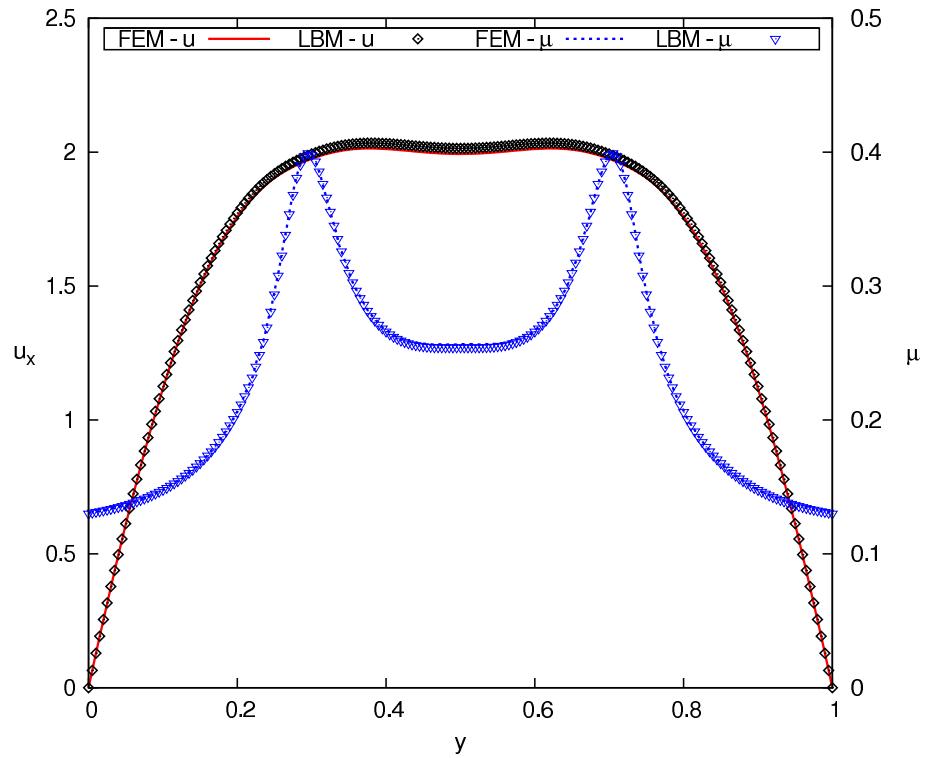
Obrázek 7.17: Model 1 - Prostorové rozložení viskozity v porovnání s FEM řešením.



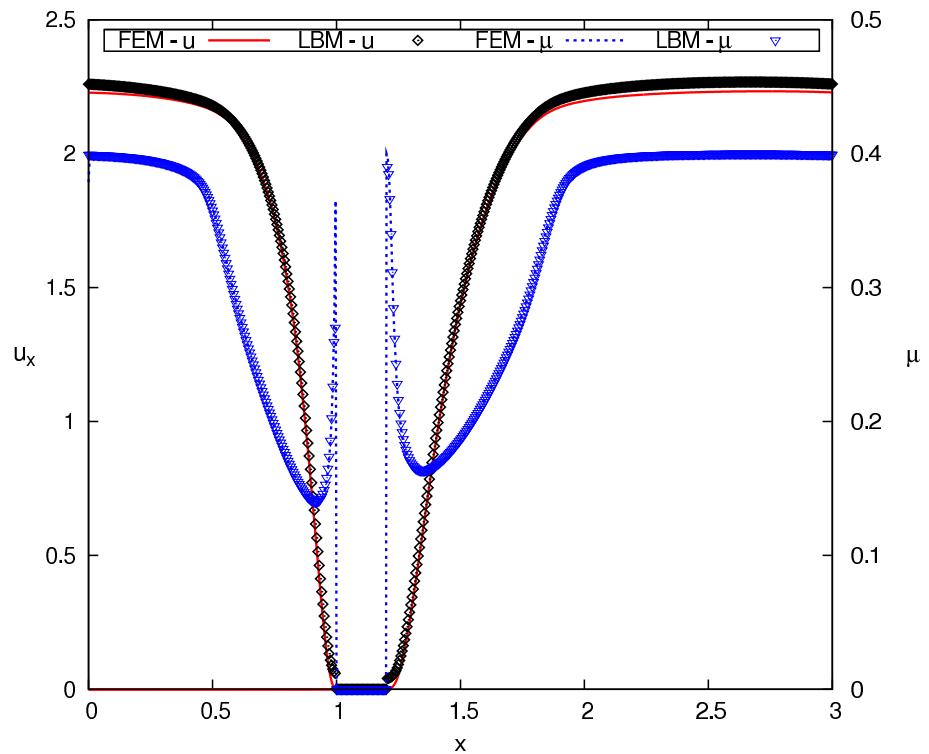
Obrázek 7.18: Model 1 - Prostorové rozložení velikosti rychlosti v porovnání s FEM řešením.



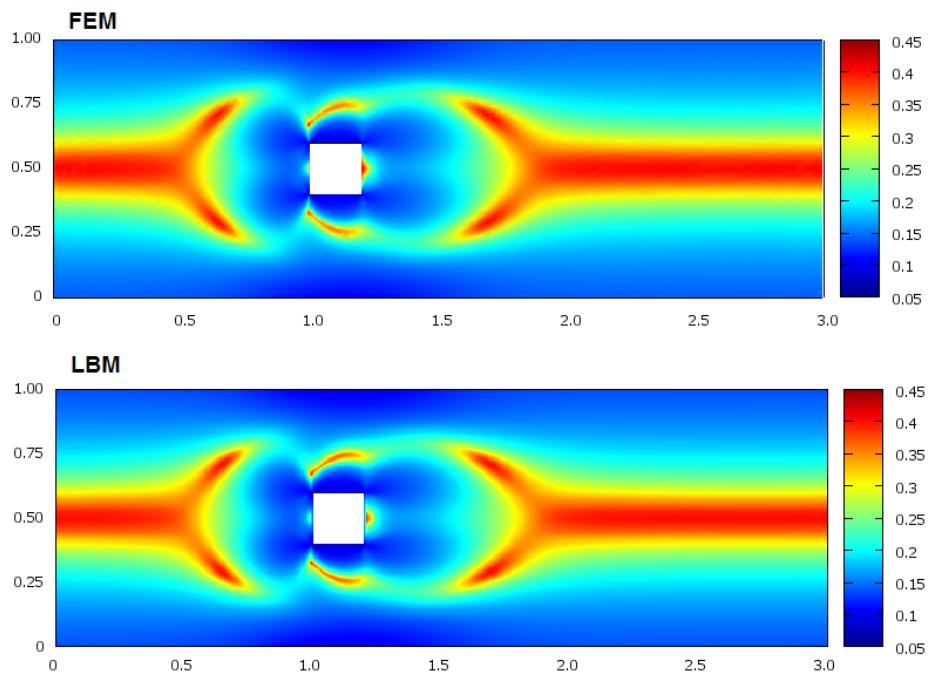
Obrázek 7.19: Model 2 - Profil A: Průběh rychlosti u a viskozity μ v porovnání s FEM řešením. $N = 200$.



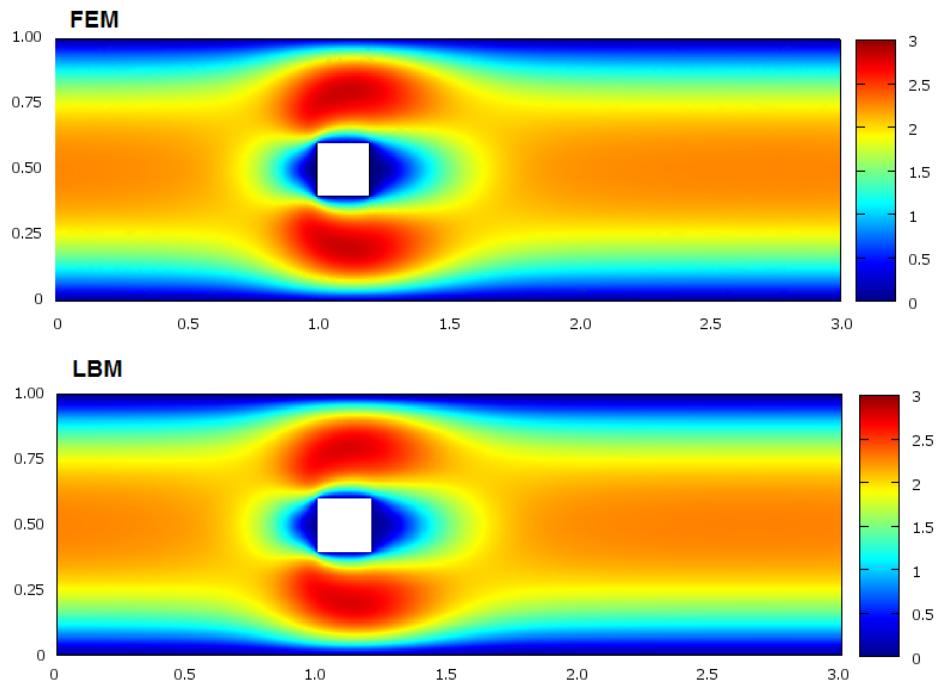
Obrázek 7.20: Model 2 - Profil B: Průběh rychlosti u a viskozity μ v porovnání s FEM řešením. $N = 200$.



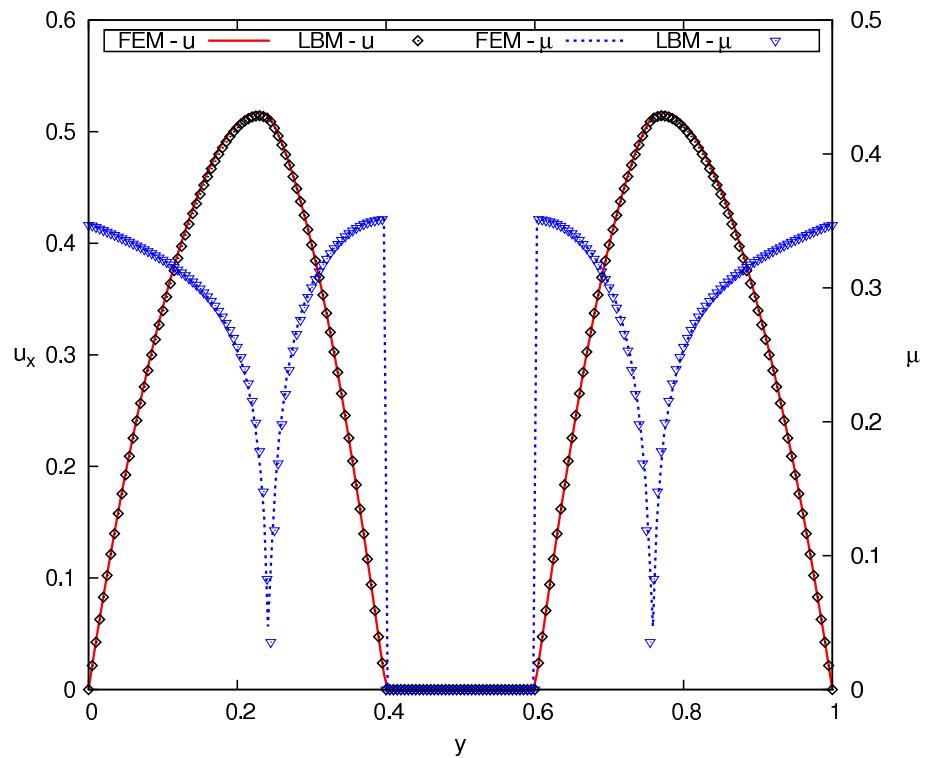
Obrázek 7.21: Model 2 - Profil C: Průběh rychlosti u a viskozity μ v porovnání s FEM řešením. $N = 200$.



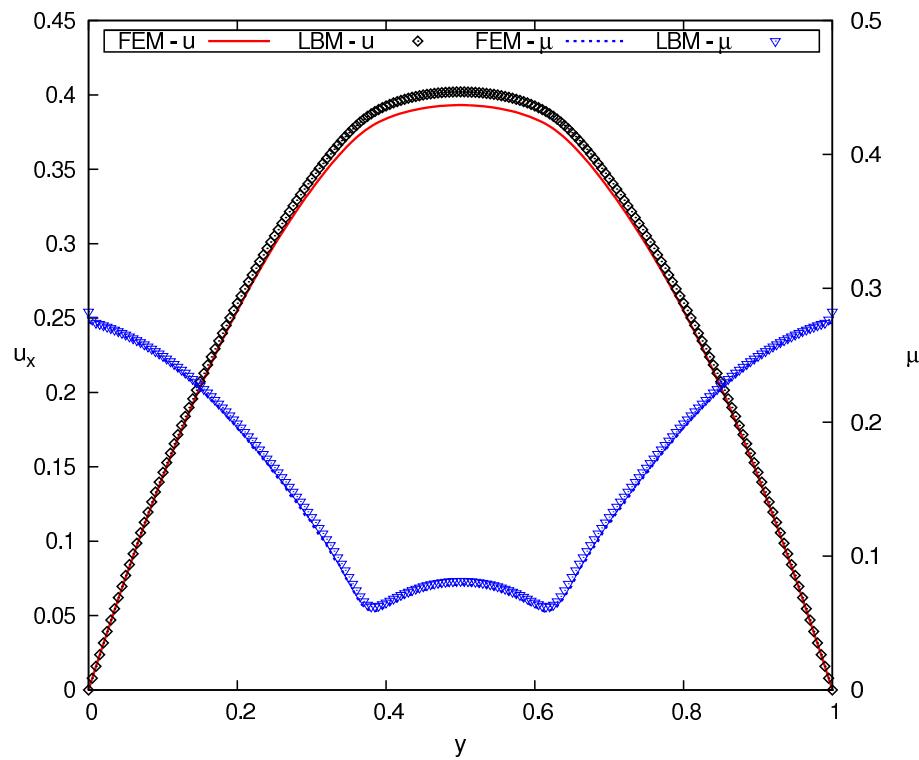
Obrázek 7.22: Model 2 - Prostorové rozložení viskozity v porovnání s FEM řešením.



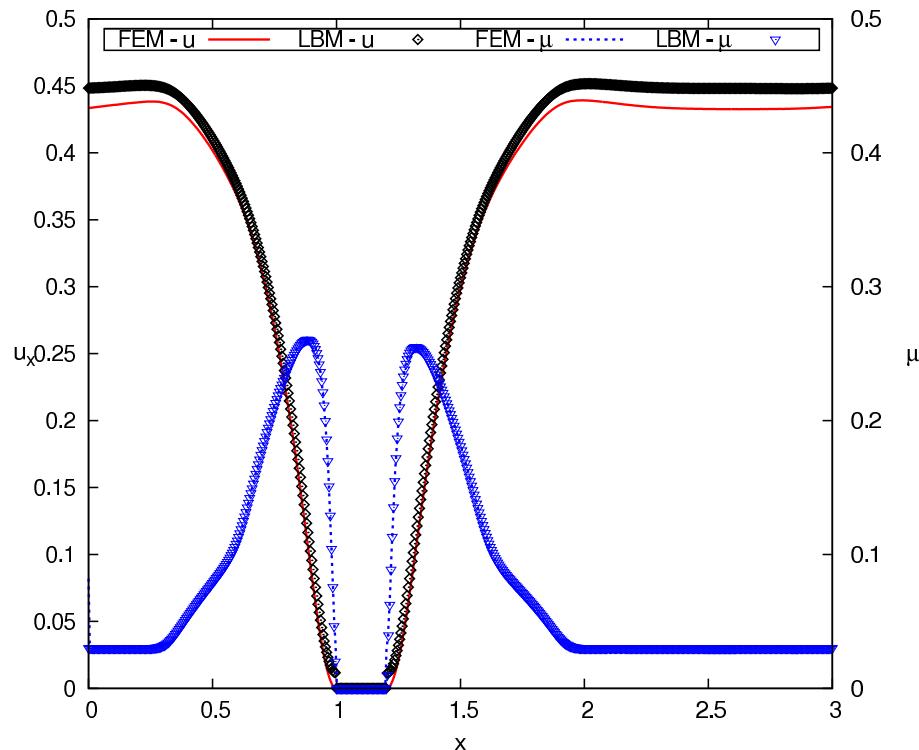
Obrázek 7.23: Model 2 - Prostorové rozložení velikosti rychlosti v porovnání s FEM řešením.



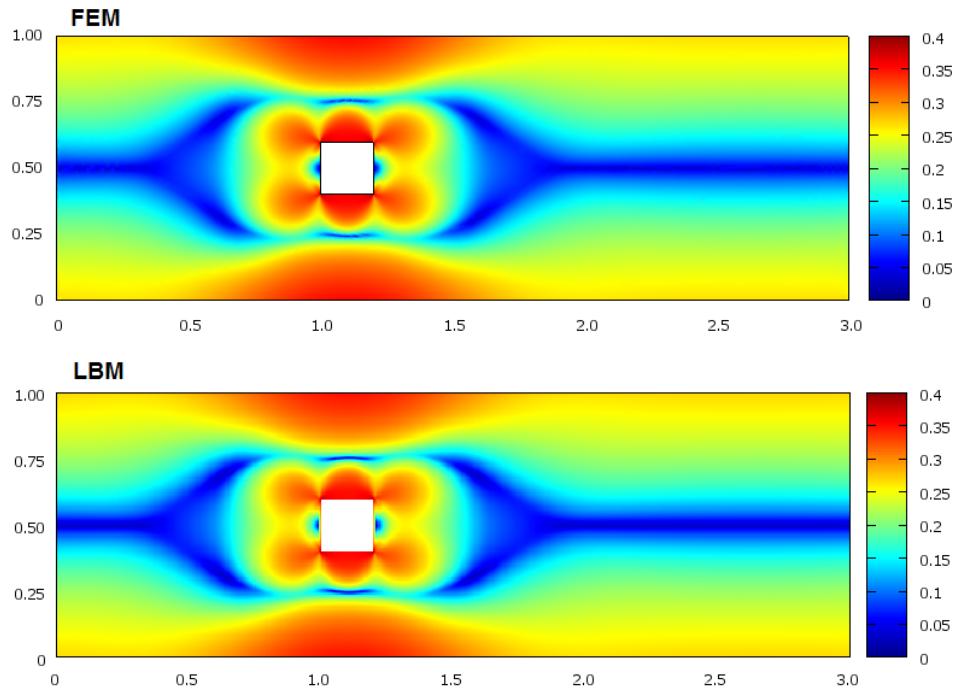
Obrázek 7.24: Model 3 - Profil A: Průběh rychlosti u a viskozity μ v porovnání s FEM řešením. $N = 200$.



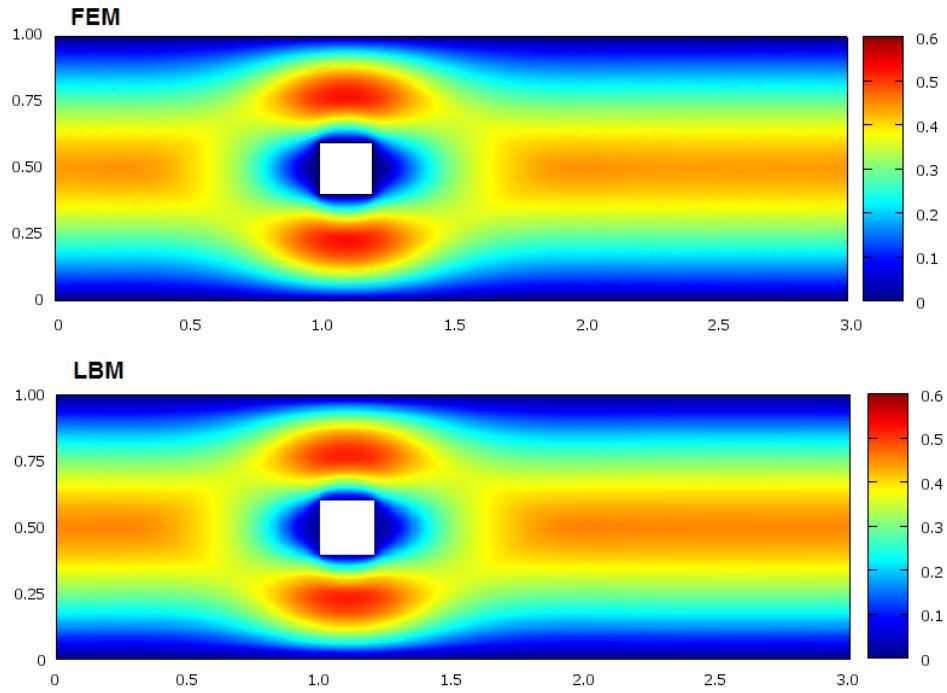
Obrázek 7.25: Model 3 - Profil B: Průběh rychlosti u a viskozity μ v porovnání s FEM řešením. $N = 200$.



Obrázek 7.26: Model 3 - Profil C: Průběh rychlosti u a viskozity μ v porovnání s FEM řešením. $N = 200$.



Obrázek 7.27: Model 3 - Prostorové rozložení viskozity v porovnání s FEM řešením.



Obrázek 7.28: Model 3 - Prostorové rozložení velikosti rychlosti v porovnání s FEM řešením.

7.6 Poznámky

Při srovnávání výsledků s programem **COMSOL** je nutné taky dbát zvýšené obezřetnosti. Jistě není dokonale zaručeno, že je jeho použití na daný problém vhodné, či dokonce oprávněné. Zatímco při řešení úloh s klasickým newtonovským chováním, dospěl v daných problémech k výsledku velmi rychle a snadno, při pokusech o výpočet nenewtonovských modelů se již objevovaly velké problémy se stabilitou a konvergencí řešení. Často bylo nutno vyřešit několik přidružených úloh (např. se sérií nižších exponentů než určené m), aby bylo nalezeno požadované řešení. Výše uvedené úlohy byly dokonce speciálně voleny tak, aby bylo řešení metodou konečných prvků vůbec nalezeno.

Lattice Boltzmannova metoda se v tomto směru ukázala jako daleko více robustní. Díky její explicitní povaze není možné, aby nebylo dosaženo výsledku a bylo pozorováno stabilní chování pro daleko extrémnější nenewtonovské modely, než jsou zde uvedeny (zejméne právě s vysokými hodnotami exponentu m). Samozřejmě není jasné, zdali nalezené řešení také skutečně uvedené rovnice splňuje, což je námětem k dalšímu výzkumu, nicméně tak dostaváme určitou naději k existenci metody použitelné v případech, kdy standardní metoda konečných prvků selhává.

Kapitola 8

Shrnutí

8.1 Závěr

V této práci byl učiněn pokus uvést čtenáře do problematiky teorie a aplikace lattice Boltzmannovy metody. Důraz byl kladen především na využití nových teoretických metod pro její zkoumání, jmenovitě analýzu prostřednictvím rozvoje do Hermitových polynomů. Ústředním bodem práce byla aplikace této analýzy na nenewtonovský model založený na modifikaci tvaru rovnovážného rozdělení v BGK operátoru. Výsledkem byl vztah pro viskozitu, který je ve shodě s původními zdroji. Je stále otevřenou teoretickou i praktickou otázkou, za jakých podmínek lze zanedbat přebytečné členy ve vztahu pro vazkou část tenzoru napětí, které byly odvozeny. Jistě by to mělo být námětem dalšího výzkumu, stejně jako aplikace zmíněné Hermitovské metody také na jiné typy modifikací rovnovážných rozdělení.

V praktické části práce bylo implementováno kinetické schéma založené na studovaném modelu a porovnáváno výsledky získanými komerčním řešičem využívajícím metodu konečných prvků. Shoda se ukázala být ve většině případů uspokojivá, nicméně byly objeveny i některé otevřené otázky týkající se korektní implementace okrajových podmínek.

8.2 Perspektivy

Lattice Boltzmannova metoda patří rozhodně k velmi perspektivním směrům na poli matematického modelování. Mezi její hlavní přednosti patří velmi jednoduchá implementace a explicitní, lokálně definovaný vývoj. Právě tato lokálnost ji umožňuje velmi efektivně a jednoduše paralelizovat. Sice tedy platí, že za předpokladu dodržení difuzního škálování, tj. $\Delta t = \Delta x^2$ roste v 2D případě doba výpočtu jako N^4 , ve 3D případě dokonce jako N^5 , ale tyto jevy je možné vhodně vyvažovat zapojením dostatečně vysokého výpočetního výkonu, který je při dobré správě paměti v podstatě neomezený.

Pro ilustraci uved'me dosažené výsledky v oblasti implementace. V praxi lattice Boltzmannovy metody se rychlosť programu měří v jednotkách MLUPS, tedy Mega Lattice Updates Per Second. Implementace použitá v simulacích v této

práci dosahovala i při parallelizaci na více jader procesoru rychlosti přibližně 0,4 MLUPS. V současnosti nejvíce propracovaný balík implementující tuto metodu - **Palabos**, ovšem už při paralelním výpočtu na deseti počítačích dosahuje rychlostí až 25 MLUPS. Na zcela jiné škále jsou rychlosti simulací využívající paralelní výpočetní schopnosti grafických karet. Rekordní dosažené rychlosti výpočtu na jediné grafické kartě se pohybují až u hodnoty 600 MLUPS [1].

Dodatek A: Hermitovy polynomy

Tento dodatek představuje rychlý úvod do problematiky Hermitových polynomů v rozsahu potřebném pro aplikaci v této práci. Je založen primárně na informacích uvedených v [22], nicméně je doplněn o podrobnější zpracování přechodu k vícerozměrným polynomům, takže umožňuje snadnější pochopení problematiky. Díky tomu zároveň uvádí na pravou míru vztah pro normu vícerozměrného polynomu, který je v [22] uveden minimálně dosti zavádějícím způsobem a odkud je se stejně přejat do mnoha ostatních zdrojů (např. [16]).

Jednorozměrné Hermitovy polynomy

Uvažujme prostor $L^2((a, b))$ a funkci $w(v) : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$ takovou, že integrál

$$\int_a^b P(v)w(v) \, dv, \quad (8.1)$$

je konečný pro libovolný polynom $P(v)$. Potom můžeme definovat skalarní součin na tomto prostoru předpisem:

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(v)g(v)w(v) \, dv. \quad (8.2)$$

Systém ortogonálních polynomů na tomto Hilbertově prostoru lze získat pomocí Rodriguezova vztahu:

$$P^{(n)}(v) = \frac{(-1)^n}{w(v)} \frac{d^n}{dv^n} w(v). \quad (8.3)$$

Pro váhovou funkci ve tvaru gaussiánu definovanou na celém \mathbb{R} ,

$$w(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{v^2}{2}\right), \quad (8.4)$$

dostáváme dle vztahu (8.3) Hermitovy polynomy, které na daném prostoru tvoří úplný ortogonální systém. Prvních pět Hermitových polynomů má tvar:

$$H^{(0)} = 1 \quad (8.5)$$

$$H^{(1)} = v \quad (8.6)$$

$$H^{(2)} = v^2 - 1 \quad (8.7)$$

$$H^{(3)} = v^3 - 3v \quad (8.8)$$

$$H^{(4)} = v^4 - 6v^2 + 3 \quad (8.9)$$

Norma jednotlivých polynomů je dána vztahem:

$$\langle H^{(n)}, H^{(n)} \rangle = n!. \quad (8.10)$$

Vícerozměrné Hermitovy polynomy

Jednou z možností, nikoli však jedinou, jak zkonstruovat vícerozměrné polynomy, je vzájemné vynásobení jednorozměrných polynomů postupně ve všech proměnných.

$$\mathbf{H}(\vec{v}) = \prod_{i=1}^d H^{(n_i)}(v_i). \quad (8.11)$$

Tento postup odpovídá analogické volbě váhové funkce pro skalární součin:

$$w(\vec{v}) \equiv \prod_{i=1}^d \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{v_i^2}{2}\right) \equiv \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \exp\left(-\frac{\vec{v}^2}{2}\right). \quad (8.12)$$

Je zřejmé, že při výpočtu normy tohoto vícerozměrného Hermitova polynomu lze příslušný integrál separovat do jednotlivých proměnných. Pro normu potom dostaváme vztah:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{H}, \mathbf{H} \rangle &= \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\mathbf{H}^2(\vec{v})}{(2\pi)^{d/2}} \exp\left(-\frac{\vec{v}^2}{2}\right) d\vec{v} = \prod_{i=1}^d \int_{\mathbb{R}} (H^{(n_i)}(v_i))^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{v_i^2}{2}\right) dv_i \\ &= \prod_{i=1}^d \langle H^{(n_i)}, H^{(n_i)} \rangle = \prod_{i=1}^d (n_i)!. \end{aligned} \quad (8.13)$$

Nyní přepišme výraz (8.11) pomocí Rodriguezova vztahu (8.3):

$$\mathbf{H}(\vec{v}) = \prod_{i=1}^d H^{(n_i)}(v_i) = \prod_{i=1}^d \frac{(-1)^{n_i}}{w(v_i)} \frac{d^{n_i}}{dv_i} w(v_i). \quad (8.14)$$

Všimněme si, že váhová funkce je hladká a v jistém smyslu invariantní vůči opakovánímu derivování. To nám umožňuje předchozí rovnost zapsat jako parciální derivaci vícerozměrné váhové funkce (8.12), čímž dostaváme vícerozměrnou obdobu Rodriguezovy formule:

$$\mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}(\vec{v}) = \frac{(-1)^n}{w(\vec{v})} \frac{\partial^n}{\partial v_{\vec{\alpha}}} w(\vec{v}). \quad (8.15)$$

Tímto vztahem jsme zavedli indexování vícerozměrných hermitových polynomů pomocí multiindexu $\vec{\alpha} \in \mathbb{N}^n$. Takto jsou běžně značeny vícerozměrné Hermitovy polynomy v dostupné literatuře. Operátor parciální derivace derivuje váhovou

funkci postupně podle všech proměnných určených multiindexem. Uved'me zde tyto polynomy do čtvrtého řádu:

$$\mathbf{H}^{(0)} = 1 \quad (8.16)$$

$$\mathbf{H}_i^{(1)} = v_i \quad (8.17)$$

$$\mathbf{H}_{ij}^{(2)} = v_i v_j - \delta_{ij} \quad (8.18)$$

$$\mathbf{H}_{ijk}^{(3)} = v_i v_j v_k - (\delta_{ij} v_k + \delta_{ik} v_j + \delta_{jk} v_i) \quad (8.19)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{ijkl}^{(4)} = & v_i v_j v_k v_l - (\delta_{ij} v_k v_l + \delta_{ik} v_j v_l + \delta_{il} v_j v_k + \delta_{jk} v_i v_l + \\ & \delta_{jl} v_i v_k + \delta_{kl} v_i v_j) + (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \end{aligned} \quad (8.20)$$

Tento používaný způsob značení má však jisté nevyhody. Zaprvé by se mohlo zdát, že Hermitových polynomů n -tého řádu je d^n . To však není pravda. Vzhledem k hladkosti váhové funkce jsou parciální derivace záměnné, a proto ve vztahu (8.15) dostáváme stále stejný polynom pro libovolnou permutaci zvoleného multiindexu $\vec{\alpha}$. Zadruhé se s touto nuancí pojí také skutečnost, že norma polynomu n -tého řádu již není $n!$. Toto je také zdروjem všech nesprávných formulací v dostupné literatuře (např. [22]).

S tímto se ovšem lze vyrovnat, tak aby navazující teorie zůstala přehledná. Ukazuje se totiž, že součet norem všech identických polynomů n -tého řádu vzniklých permutací multiindexu (permutace označme $\pi(\vec{\alpha})$) již je roven $n!$. Tedy že:

$$\sum_{\pi(\vec{\alpha})} \left\langle \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}, \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} \right\rangle = n!. \quad (8.21)$$

Toto tvrzení nyní dokažme. Budeme značit $c(i, \vec{\alpha})$ počet výskytů indexu i v multiindexu $\vec{\alpha}$. Vrátíme-li se k zavedení vícerozměrných polynomů výrazem (8.11), vidíme, že $c(i, \vec{\alpha})$ je řád jednorozměrného Hermitova polynomu příslušejícího i -té proměnné. Norma vícerozměrného polynomu s pevně zvoleným $\vec{\alpha}$ je tedy:

$$\left\langle \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}, \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} \right\rangle = \prod_{i=1}^d \left\langle H^{(c(i, \vec{\alpha}))}, H^{(c(i, \vec{\alpha}))} \right\rangle = \prod_{i=1}^d c(i, \vec{\alpha})!. \quad (8.22)$$

Nyní si stačí již jen uvědomit výraz pro počet permutací $\pi(\vec{\alpha})$. Jde o permutace s opakováním, kde $c(i, \vec{\alpha})$ jsou právě četnosti jednotlivých skupin indexů, co se opakují. Dostáváme tedy hned, že:

$$\sum_{\pi(\vec{\alpha})} \left\langle \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}, \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} \right\rangle = \frac{n!}{\prod_{i=1}^d c(i, \vec{\alpha})!} \prod_{i=1}^d c(i, \vec{\alpha})! = n!. \quad (8.23)$$

Odvozený vztah okamžitě použijeme. Pro přehlednou projekci funkce $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$ do báze Hermitových polynomů totiž předpokládáme, že je f ve tvaru:

$$f = w(\vec{v}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} a_{\vec{\alpha}}^{(n)}. \quad (8.24)$$

V tomto vztahu se předpokládá vysčítání vnitřní části sumy přes všechny multiindexy $\vec{\alpha}$. Koeficienty $a_{\vec{\alpha}}^{(n)} \in \mathbb{R}$ lze pak spočítat integrací:

$$a_{\vec{\alpha}}^{(n)} = \int_{\mathbb{R}^d} f \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} d\vec{v}. \quad (8.25)$$

Výše uvedené odvození ospravedlňuje právě oprávněnost použití faktoru $1/n!$ v rozkladu, přestože norma jednotlivých polynomu není $n!$.

Při projekci Boltzmannovy rovnice do Hermitovy báze, jsou dále klíčové následující vztahy:

$$v_{\alpha_0} \mathbf{H}_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)} = \mathbf{H}_{\alpha_0 \alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n+1)} + \frac{\partial \mathbf{H}_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}}{\partial v_{\alpha_0}}, \quad (8.26)$$

kde poslední parciální derivaci můžeme spočítat z následující identity:

$$\frac{\partial \mathbf{H}_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}}{\partial v_{\alpha_0}} = \sum_{i=1}^n \delta_{\alpha_0 \alpha_i} \mathbf{H}_{\alpha_1 \dots \alpha_{i-1} \alpha_{i+1} \dots \alpha_n}^{(n-1)}. \quad (8.27)$$

Pro lepší přehlednost zavedeme ještě zkrácené označení:

$$\mathbf{H}_{i \alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n+1)} \equiv \mathbf{H}_{i \vec{\alpha}}^{(n+1)} \quad \text{a dále} \quad \frac{\partial \mathbf{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}}{\partial v_i} \equiv \mathbf{H}_{\vec{\alpha}, i}^{(n-1)}. \quad (8.28)$$

Stejně značení platí i pro koeficienty těchto polynomů, používáme tedy $a_{i \vec{\alpha}}^{(n+1)}$ případně $a_{\vec{\alpha}, i}^{(n-1)}$. Je třeba však pamatovat na fakt, že $a_{\vec{\alpha}, i}^{(n-1)}$ není derivací koeficientu podle v_i . Vznikne tak, že se nejprve zderivuje příslušný Hermitův polynom (s multiindexem $\vec{\alpha}$), což dá obecně součet několika dalších polynomů (nebo taky nulu), a tyto polynomy se zprojektují přesně podle vztahu (8.26), vznikne tedy obecně součet několika koeficientů.

Přeškálované Hermitovy polynomy

Při formulaci numerického schématu lattice Boltzmannovy metody se ukazuje, že pro správnou koexistenci regulární mřížky a kvadraturních formulí pro výpočet integrálů, je nutné v simulaci přeškálovat všechny rychlosti multiplikativním faktorem $1/c_s$. Tento faktor se posléze objeví na několika dalších místech a je nutné ho důkladně sledovat. Uvedeme zde tedy výčet všech změn, které kvůli škálování nastanou. V první řadě budeme používat jinou sadu Hermitových polynomů. Zavedeme tedy novou váhovou funkci s přeškálovanou rychlostí $\hat{w}(v) \equiv w(v/c_s)$. Upravíme normovací koeficient tak, aby integrál přes \mathbb{R} zůstal jednotkový.

$$\hat{w}(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi c_s^2}} \exp\left(-\frac{v^2}{2c_s^2}\right). \quad (8.29)$$

V Rodriguezově vztahu přidáme faktor c_s^{2n} , aby byly koeficienty u vedoucích členů polynomů jednotkové:

$$\hat{P}^{(n)}(v) = \frac{(-c_s^2)^n}{\hat{w}(v)} \frac{d^n}{dv^n} \hat{w}(v). \quad (8.30)$$

Jednotlivé jednorozměrné Hermitovy polynomy do čtvrtého rádu potom jsou:

$$\hat{H}^{(0)} = 1 \quad (8.31)$$

$$\hat{H}^{(1)} = v \quad (8.32)$$

$$\hat{H}^{(2)} = v^2 - c_s^2 \quad (8.33)$$

$$\hat{H}^{(3)} = v^3 - 3c_s^2 v \quad (8.34)$$

$$\hat{H}^{(4)} = v^4 - 6c_s^2 v^2 + 3c_s^4 \quad (8.35)$$

Norma jednotlivých polynomů je rovna:

$$\left\langle \hat{H}^{(n)}, \hat{H}^{(n)} \right\rangle = n! c_s^{2n}. \quad (8.36)$$

Po zobecnění do více dimenzí dostáváme vícerozměrné polynomy:

$$\hat{\mathbf{H}}^{(0)} = 1 \quad (8.37)$$

$$\hat{\mathbf{H}}_i^{(1)} = v_i \quad (8.38)$$

$$\hat{\mathbf{H}}_{ij}^{(2)} = v_i v_j - c_s^2 \delta_{ij} \quad (8.39)$$

$$\hat{\mathbf{H}}_{ijk}^{(3)} = v_i v_j v_k - c_s^2 (\delta_{ij} v_k + \delta_{ik} v_j + \delta_{jk} v_i) \quad (8.40)$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}}_{ijkl}^{(4)} = & v_i v_j v_k v_l - c_s^2 (\delta_{ij} v_k v_l + \delta_{ik} v_j v_l + \delta_{il} v_j v_k + \delta_{jk} v_i v_l + \\ & \delta_{jl} v_i v_k + \delta_{kl} v_i v_j) + c_s^4 (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \end{aligned} \quad (8.41)$$

Příslušný součet norem polynomů odpovídající stejné permutaci indexů je stejný jako v jednorozměrném případě:

$$\sum_{\pi(\vec{\alpha})} \left\langle \hat{\mathbf{H}}_{\vec{\alpha}}^{(n)}, \hat{\mathbf{H}}_{\vec{\alpha}}^{(n)} \right\rangle = n! c_s^{2n}. \quad (8.42)$$

Rozklad funkce f do báze Hermitových polynomů tak má mírně upravený tvar:

$$f = \hat{w}(\vec{v}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n! c_s^{2n}} \hat{\mathbf{H}}_{\vec{\alpha}}^{(n)} \hat{a}_{\vec{\alpha}}^{(n)}. \quad (8.43)$$

Projekční vztah pro jednotlivé koeficienty je ovšem stejný jako v neškálovaném případě.

$$\hat{a}_{\vec{\alpha}}^{(n)} = \int_{\mathbb{R}^d} f \hat{\mathbf{H}}_{\vec{\alpha}}^{(n)} d\vec{v}. \quad (8.44)$$

Faktor c_s^2 ovšem přibude do identity (8.26), což je velice podstatná změna při projekcích užívaných v limitních procesech:

$$v_{\alpha_0} \hat{\mathbf{H}}_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)} = \hat{\mathbf{H}}_{\alpha_0 \alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n+1)} + c_s^2 \frac{\partial \hat{\mathbf{H}}_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)}}{\partial v_{\alpha_0}}. \quad (8.45)$$

Dodatek B: Kvadraturní formule

V průběhu diskretizace Boltzmannovy rovnice dospejeme k nutnosti řešit následující úlohu. Je dána váhová funkce $w(\vec{v})$ definovaná v dodatku A. Je třeba najít takovou množinu bodů $\{{}^1\vec{v}, {}^2\vec{v}, \dots, {}^k\vec{v}\} \in \mathbb{R}^d$ a jim odpovídajících vah $\{{}^1w, {}^2w, \dots, {}^kw\} \in \mathbb{R}$ tak, aby bylo možno přesně vyčíslit integrál takto:

$$\int_a^b w(\vec{v})f(\vec{v}) \, dv = \sum_{i=1}^k {}^i w f({}^i\vec{v}), \quad (8.46)$$

kde f je libovolný polynom nejvýše předem pevně zvoleného stupně.

Jednorozměrné Gaussovy kvadraturní formule

Nechť $P^{(0)}, P^{(1)}, \dots$ je posloupnost ortogonálních polynomů vůči váze $w(v)$ na prostoru $L^2((a, b))$. Zvolme nyní libovolné $n \in \mathbb{N}$ a libovolný polynom $p \in \mathbf{P}_{2n+1}$ (symbolem \mathbf{P}_k značíme prostor polynomů stupně nejvýše k), jehož integrál budeme odhadovat. Takový polynom můžeme rozložit následovně:

$$p(v) = P^{(n+1)}(v)q(v) + r(v), \quad (8.47)$$

kde $q, r \in \mathbf{P}_n$ a $P^{(n+1)} \in \mathbf{P}_{n+1}$ je jeden z výše zmíněných ortogonálních polynomů. Zapišme nyní integrál z p :

$$\int_a^b w(v)p(v) \, dv = \int_a^b w(v)P^{(n+1)}(v)q(v) \, dv + \int_a^b w(v)r(v) \, dv. \quad (8.48)$$

Všimněme si, že první člen je vlastně skalárním součinem $\langle P^{(n+1)}, q \rangle$. Ten ale musí být nutně nulový, protože prostor \mathbf{P}_{n+1} je ortogonální k prostoru \mathbf{P}_n . Označme nyní $\{{}^0v, {}^1v, \dots, {}^nv\}$ množinu kořenů ortogonálního polynomu $P^{(n+1)}$. Platí tedy $P^{(n+1)}({}^iv) = 0 \ \forall i \in 0 \dots n$. Polynom $r(v)$ můžeme přepsat v tomto tvaru:

$$r(v) = \sum_{i=0}^n r({}^iv)l_i(v). \quad (8.49)$$

Symbolom $l_i(v)$ značíme tzv. Lagrangeův bázový polynom. Platí pro něj, že $l_i(v) \in \mathbf{P}_n$ a jeho funkční hodnoty jsou jednoznačně určeny relací:

$$l_i({}^jv) = \delta_{ij}. \quad (8.50)$$

Nabývá tedy hodnoty 1 v jednom z kořenů ${}^i v$ a je nulový ve všech ostatních. Protože jsou ${}^i v$ právě kořeny polynomu $P^{(n+1)}$, je ze vztahu (8.47) zřejmé, že:

$$p({}^i v) = r({}^i v). \quad (8.51)$$

Nyní všechny uvedené konstrukce skloubíme dohromady. Pišme opět výraz pro integrál z p :

$$\begin{aligned} \int_a^b w(v)p(v) \, dv &= \int_a^b w(v)r(v) \, dv = \\ &= \int_a^b w(v) \sum_{i=0}^n r({}^i v)l_i(v) \, dv = \sum_{i=0}^n {}^i w p({}^i v), \end{aligned} \quad (8.52)$$

kde jsme označili

$${}^i w = \int_a^b w(v)l_i(v) \, dv, \quad (8.53)$$

což je vztah pro konstrukci Gaussovy kvadraturní formule. Shrnujeme: pokud zvolíme jako množinu vyhodnocovacích bodů kořeny ortogonálního polynomu řádu $n + 1$ s vahami určenými vztahem (8.53), platí kvadraturní formule (8.46) resp. (8.52) přesně pro libovolný polynom $p \in \mathbf{P}_{2n+1}$.

Vícerozměrná kvadraturní formule 5. řádu

Při výpočtech lattice Boltzmannovy metody s rovnovážným rozdělením ořezaným od druhého řádu Hermitových polynomů a výše, užijeme předchozí teorii s Hermitovým polynomem druhého řádu. Dostaneme tak kvadraturní formuli přesnou pro polynomy až pátého stupně, což je plně postačující.

$$H^{(3)}(v) = v^3 - 3v. \quad (8.54)$$

Kořeny tohoto polynomu a jím příslušející váhy jsou:

$$\begin{aligned} {}^1 v &= -\sqrt{3} & {}^1 w &= \frac{1}{6} \\ {}^2 v &= 0 & {}^2 w &= \frac{2}{3} \\ {}^3 v &= \sqrt{3} & {}^3 w &= \frac{1}{6} \end{aligned} \quad (8.55)$$

Při zobecňení této kvadraturní formule do více dimenzí s výhodou využijeme faktu, že jsou váhová funkce i integrovaný polynom separovatelní do jednotlivých dimenzí. Stačí proto aplikovat jednorozměrnou kvadraturní formuli pro každý rozměr zvlášť a výsledky vynásobit:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} P(\vec{v}) \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \exp\left(-\frac{\vec{v}^2}{2}\right) d\vec{v} &= \prod_{i=1}^d \int_{\mathbb{R}} \tilde{P}_i(v_i) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{v_i^2}{2}\right) dv_i = \\ \prod_{i=1}^d \sum_{j=1}^k {}^j w P({}^j \vec{v}) &\equiv \sum_{i=1}^k {}^i \tilde{w} P({}^i \tilde{\vec{v}}) \end{aligned} \quad (8.56)$$

Podstatnou součástí aplikace kvadraturní formule v lattice Boltzmannově metodě je škálování. Z praktických důvodů chceme dodržet jednotkovou vzdálenost mezi body mříže, nicméně uzly kvadraturní formule se v jednotkové vzdálenosti nenacházejí. Musíme proto použít škálování faktorem c_s . Pro tuto kvadraturní formuli je škálovací faktor $c_s = 1/\sqrt{3}$. V následující tabulce je přehled uzlů ${}^i v$ a vah ${}^i w$ pro dvojrozměrnou a trojrozměrnou kvadraturní formuli. Pro množinu uzlů a vah zavádíme značení DdQn kde d je dimenze a n počet uzlů v kvadratuře. Symbolem S se míní všechny symetrické varianty téhož vektoru.

Pravidlo	${}^i \vec{v}$	${}^i w$
D2Q9	(0, 0)	4/9
$\forall f \in \mathbf{P}_5$	$(\sqrt{3}, 0)_S$	1/9
	$(\sqrt{3}, \sqrt{3})_S$	1/36
		$c_s = 1/\sqrt{3}$
D3Q27	(0, 0, 0)	8/27
$\forall f \in \mathbf{P}_5$	$(\sqrt{3}, 0, 0)_S$	2/27
	$(\sqrt{3}, \sqrt{3}, 0)_S$	1/54
	$(\sqrt{3}, \sqrt{3}, \sqrt{3})_S$	1/216
		$c_s = 1/\sqrt{3}$

Kvadraturní formule vyšších řádů

Výše uvedeným postupem lze pochopitelně zkonstruovat kvadraturní formuli libovolně vysokého řádu. Problém s tímto postupem je, že kořeny Hermitových polynomů čtvrtého a vyššího řádu již nejsou ekvidistantní. Pro použití v numerickém schématu standardní formulace lattice Boltzmannovy metody však potřebujeme, aby množina uzlů kvadraturní formule vykazovala stejnou prostorovou strukturu jako výpočetní síť, na které simulace probíhá. Maximálně se může lišit až na multiplikativní škálovací faktor c_s , který jsme již do teorie zapracovali.

Existuje tedy i jiný způsob konstrukce kvadraturních formulí, kde můžeme předem provést volbu množiny uzlů $\{{}^1 \vec{v}, {}^2 \vec{v}, \dots, {}^k \vec{v}\}$ předem. Je li váhová funkce $w(\vec{v})$ normalizována, tj. je-li její integrál přes celý prostor roven jedné, je první ortogonální polynom $\mathbf{P}^{(0)} = 1$ a platí vztah:

$$\int w(\vec{v}) P^{(n)}(\vec{v}) \, d\vec{v} = \delta_{1n}. \quad (8.57)$$

Libovolný polynom $f(\vec{v}) \in \mathbf{P}_m$ je rozložitelný do báze ortogonálních polynomů:

$$f(\vec{v}) = \sum_{i=0}^m a_i P^{(i)}(\vec{v}). \quad (8.58)$$

Pokud požadujeme, aby vztah (8.46) platil přesně, musí zvolená množina uzlů $\{{}^1\vec{\mathbf{v}}, {}^2\vec{\mathbf{v}}, \dots, {}^k\vec{\mathbf{v}}\}$ a jim odpovídajících vah $\{{}^1w, {}^2w, \dots, {}^kw\}$ splňovat následující soustavu rovnic pro všechna $i = 1 \dots m$ [22]:

$$\sum_{j=1}^k {}^j w P^{(i)}({}^j \vec{\mathbf{v}}) = \delta_{0i}. \quad (8.59)$$

Samozřejmě, pro přesnost zadaného stupně budeme potřebovat obecně více uzlových bodů než v případě Gaussových kvadraturních formulí. Zevrubnějsí vzhled do problematiky kvadraturních formulí použitelných v lattice Boltzmannově metodě i pro jiné než čtvercové mříže, je k nalezení v [22]. Zde pouze pro praktické účely přejímáme a [16] tabulkou kvadraturních formulí sedmých a devátých řádů ve dvou a třech rozdílech na čtvercové síti.

Pravidlo	${}^i \vec{\mathbf{v}}$	${}^i w$
D2Q17	(0, 0)	$(575 + 192\sqrt{193})/8100$
$\forall f \in \mathbf{P}_7$	$(a, 0)_S$	$(5555 - 91\sqrt{193})/18000$
	$(a, a)_S$	$(655 + 17\sqrt{193})/27000$
	$(2a, 2a)_S$	$(685 - 49\sqrt{193})/54000$
	$(3a, 0)_S$	$(1445 - 101\sqrt{193})/162000$
	$a = \sqrt{(125 + 5\sqrt{193})/72}$	
	$c_s = 1/a$	
D2Q37	(0, 0)	0.23315066913235250228650
$\forall f \in \mathbf{P}_9$	$(a, 0)_S$	0.10730609154221900241246
	$(a, a)_S$	0.05766785988879488203006
	$(2a, 0)_S$	0.01420821615845075026469
	$(2a, 2a)_S$	0.00101193759267357547541
	$(3a, 0)_S$	0.00024530102775771734547
	$(a, 2a)_S$	0.00535304900051377523273
	$(a, 3a)_S$	0.00028341425299419821740
	$a = 1.19697977039307435897239$	
	$c_s = 1/a$	

Pravidlo	$i\vec{v}$	iw
D3Q39	(0, 0, 0)	1/12
$\forall f \in \mathbf{P}_7$	$(a, 0, 0)_S$	1/12
	$(a, a, a)_S$	1/27
	$(2a, 0, 0)_S$	2/135
	$(2a, 2a, 0)_S$	1/432
	$(3a, 0, 0)_S$	1/1620
		$a = \sqrt{(125 + 5\sqrt{193})/72}$
		$c_s = 1/a$
D3Q121	(0, 0, 0)	0.03059162202948600642469
$\forall f \in \mathbf{P}_9$	$(a, 0, 0)_S$	0.09851595103726339186467
	$(a, a, a)_S$	0.02752500532563812386479
	$(a, 2a, 0)_S$	0.00611102336683342432241
	$(2a, 2a, 0)_S$	0.00042818359368108406618
	$(3a, 0, 0)_S$	0.00032474752708807381296
	$(2a, 3a, 0)_S$	0.00001431862411548029405
	$(2a, 2a, 2a)_S$	0.00018102175157637423759
	$(a, 3a, 0)_S$	0.00010683400245939109491
	$(3a, 3a, 3a)_S$	0.00000069287508963860285
		$a = 1.19697977039307435897239$
		$c_s = 1/a$

Příloha

Součástí práce je také elektronická příloha s následujícím obsahem:

Zdrojový kód programu

Zdrojový kód programu který byl použit k simulaci. V tomto zdrojovém kódu je pevně zanesena úloha obtékání čtvercové překážky. K jeho kompliaci nejsou potřeba žádné nestandardní knihovny. Doporučuje se však kompilovat s parametrem `-O3` a v případě možnosti i s parametrem `-fopenmp`.

Surové výsledky simulací

Všechny výsledné soubory dodržují konvenci, že první číslo v názvu souboru označuje číslo nenewtonovského modelu, kterého se simulace týkala.

Soubory vygenerované programem COMSOL mají příponu `.txt`. Pokud následuje jediné písmeno, jde o 1D profil. (V - průběh viskozity, P - průběh rychlosti). Pokud následují dvě písmena, tak druhé označuje řez, kterého se profil týká. Následováno opět V nebo P.

Soubory vygenerované programem vyvinutým k této práci mají koncovku `.dat`. Po prvním čísle vždy následuje `NXXX`, kde `XXX` je hodnota N pro danou simulaci. Dále může následovat:

- P - Jedná se o 1D rychlostní profil
- V - Jedná se o 1D profil viskozity
- XY - X je označení řezu v 2D modelu, Y je opět V nebo P dle předchozího.
- VIS - Matice hodnot viskozity
- UX - Matice hodnot x -ové složky rychlosti
- UY - Matice hodnot y -ové složky rychlosti
- UXY - Matice hodnot velikosti rychlosti

Obrázky a grafy

Soubor všech obrázků a grafů použitých v této práci.

Literatura

- [1] Bailey, P.; Myre, J.; Walsh, S. D. C.; aj.: Accelerating Lattice Boltzmann Fluid Flow Simulations Using Graphics Processors. In *Proceedings of the 2009 International Conference on Parallel Processing*, ICPP '09, Washington, DC, USA: IEEE Computer Society, 2009, ISBN 978-0-7695-3802-0, s. 550–557.
- [2] Bhatnagar, P. L.; Gross, E. P.; Krook, M.: A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems. *Phys. Rev.*, ročník 94, č. 3, May 1954: s. 511–525.
- [3] Boyd, J.; Buick, J.; Green, S.: A second-order accurate lattice Boltzmann non-Newtonian flow model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, ročník 39, č. 46, 2006: str. 14241.
- [4] Chai, Z.; Shi, B.; Guo, Z.; aj.: Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann model for generalized Newtonian fluid flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, ročník 166, č. 5-6, 2011: s. 332 – 342, ISSN 0377-0257.
- [5] Chapman, S.; Cowling, T. G.: *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases: An Account of the Kinetic Theory of Viscosity, Thermal Conduction and Diffusion in Gases (Cambridge Mathematical Library)*. Cambridge University Press, 1991, ISBN 052140844X.
- [6] Cross, M.: Statistical Mechanics, Lecture Notes, October 2006, [online] [cit. 15.4.2011].
URL <<http://www.pma.caltech.edu/~mcc/Ph127/b/index.html>>
- [7] Gabbanelli, S.; Drazer, G.; Koplik, J.: Lattice-Boltzmann Method for Non-Newtonian Fluid Flows. 2005, <[arXiv:cond-mat/0506768](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0506768)>.
- [8] Geist, R.; Rasche, K.; Westall, J.: An HSV representation of non-Newtonian, lattice-Boltzmann flows.
- [9] Gladrow, D.: *Lattice-gas cellular automata and lattice Boltzmann models : an introduction*. New York: Springer, 2000, ISBN 9783540669739.
- [10] Huang, K.: *Statistical mechanics*. New York: Wiley, 1987, ISBN 0471815187.

- [11] Inamuro, T.: A lattice kinetic scheme for incompressible viscous flows with heat transfer. *Philosophical Transactions of the Royal Society - Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, ročník 360, č. 1792, 2002: s. 477–484.
- [12] Karlin, I. V.; Succi, S.; Orszag, S.: Lattice Boltzmann Method for Irregular Grids. *Phys. Rev. Lett.*, ročník 82, č. 26, Jun 1999: s. 5245–5248, doi:10.1103/PhysRevLett.82.5245.
- [13] Latt, J.: *Hydrodynamic limit of lattice Boltzmann equations*. Dizertační práce, Université de Geneve, 2007.
- [14] Latt, J.: Choice of units in lattice Boltzmann simulations, April 2008, [online] [cit. 28.7.2011].
URL <http://www.palabos.org/wiki/_media/howtos:lbunits.pdf>
- [15] Latt, J.; Chopard, B.; Malaspinas, O.; aj.: Straight velocity boundaries in the lattice Boltzmann method. *Phys. Rev. E*, ročník 77, č. 5, May 2008: str. 056703, doi:10.1103/PhysRevE.77.056703.
- [16] Malaspinas, O.: *Lattice Boltzmann Method for the Simulation of Viscoelastic Fluid Flows*. Dizertační práce, Ecole Polytechnique Federale de Lausanne, October 2009.
- [17] Marconi, U. M. B.; Tarazona, P.: Dynamic density functional theory of fluids. *Journal of Physics: Condensed Matter*, ročník 12, č. 8A, 2000: str. A413.
- [18] Peng, Y.; Shu, C.; Chew, Y. T.; aj.: Lattice kinetic scheme for the incompressible viscous thermal flows on arbitrary meshes. *Phys. Rev. E*, ročník 69, č. 1, Jan 2004: str. 016703, doi:10.1103/PhysRevE.69.016703.
- [19] Phillips, T. N.; Roberts, G. W.: Lattice Boltzmann models for non-Newtonian flows. *IMA Journal of Applied Mathematics*, 2011.
- [20] Pontrelli, G.; Ubertini, S.; Succi, S.: The unstructured lattice Boltzmann method for non-Newtonian flows. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, ročník 2009, č. 06, 2009: str. P06005.
- [21] Psihogios, J.; Kainourgiakis, M.; Yiotis, A.; aj.: A Lattice Boltzmann study of non-newtonian flow in digitally reconstructed porous domains. *Transport in Porous Media*, ročník 70, 2007: s. 279–292, ISSN 0169-3913.
- [22] Shan, X.; Yuan, X. F.; Chen, H.: Kinetic theory representation of hydrodynamics: a way beyond the Navier–Stokes equation. *J. Fluid Mech.*, ročník 550, 2006: s. 413–441.
- [23] Sone, Y.: Notes on kinetic-equation approach of fluid-dynamic equations, September 2000, [online] [cit. 20.7.2011].
URL <www.mech.kth.se/~lhs/kinetic2_000.pdf>

- [24] Succi, S.; Sbragaglia, M.; Ubertini, S.: Lattice Boltzmann Method. *Scholarpedia*, ročník 5, č. 5, 2010: str. 9507.
- [25] Viggen, E.: The Lattice Boltzmann Method with Applications in Acoustics. June 2009.
- [26] Yoshino, M.; Hotta, Y.; Hirozane, T.; aj.: A numerical method for incompressible non-Newtonian fluid flows based on the lattice Boltzmann method. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, ročník 147, č. 1-2, Listopad 2007: s. 69–78.