



ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská



Matematické modelování neizotermálního turbulentního proudění při obtékání překážek pomocí mřížkové Boltzmannovy metody

Mathematical modeling of non-isothermal turbulent flow around obstacles using the lattice Boltzmann method

Diplomová práce

Autor: **Bc. Dominik Horák**
Vedoucí práce: **Ing. Jakub Klinkovský, Ph.D.**
Konzultant: **doc. Ing. Radek Fučík, Ph.D.**
Akademický rok: 2023/2024

I. OSOBNÍ A STUDIJNÍ ÚDAJE

Příjmení: **Horák** Jméno: **Dominik** Osobní číslo: **494949**
Fakulta/ústav: **Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská**
Zadávající katedra/ústav: **Katedra matematiky**
Studijní program: **Matematické inženýrství**

II. ÚDAJE K DIPLOMOVÉ PRÁCI

Název diplomové práce:

Matematické modelování neizotermálního turbulentního proudění při obtékání překážek pomocí mřížkové Boltzmannovy metody

Název diplomové práce anglicky:

Mathematical modeling of non-isothermal turbulent flow around obstacles using the lattice Boltzmann method

Pokyny pro vypracování:

1. Formulujte úlohu neizotermálního turbulentního proudění tekutiny (Navierovy-Stokesovy-Fourierovy rovnice včetně počátečních a okrajových podmínek) v obecné oblasti.
2. Navrhněte vhodné numerické schéma založené na mřížkové Boltzmannově metodě (LBM) pro řešení této úlohy.
3. Rozšířte výpočetní kód TNL-LBM (<https://gitlab.com/tnl-project/tnl-lbm>) vyvíjený na KM FJFI ČVUT pro účely řešení úlohy z bodu 1.
4. Otestujte implementaci LBM na vhodně zvolené testovací úloze a proveďte porovnání s vhodnými referenčními výsledky.

Seznam doporučené literatury:

1. H. Schlichting, K. Gersten, Boundary-layer theory. Springer, 9. vydání, 2017.
2. T. Krüger, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, O. Shardt, G. Silva, E. M. Viggien, The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice. Springer, 2017.
3. Z. Guo, Ch. Shu, Lattice Boltzmann method and its application in engineering. World Scientific, 2013.
4. S. Succi, The lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond. Clarendon Press, 2001.

Jméno a pracoviště vedoucí(ho) diplomové práce:

Ing. Jakub Klinkovský, Ph.D. katedra softwarového inženýrství FJFI

Jméno a pracoviště druhé(ho) vedoucí(ho) nebo konzultanta(ky) diplomové práce:


doc. Ing. Radek Fučík, Ph.D. katedra matematiky FJFI

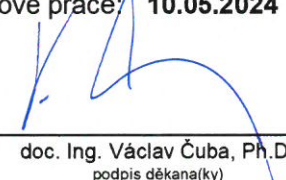
Datum zadání diplomové práce: **31.10.2023**

Termín odevzdání diplomové práce: **10.05.2024**

Platnost zadání diplomové práce: **31.10.2025**

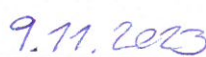

Ing. Jakub Klinkovský, Ph.D.
podpis vedoucí(ho) práce

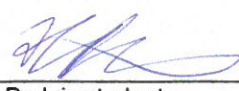

prof. Ing. Zuzana Masáková, Ph.D.
podpis vedoucí(ho) ústavu/katedry


doc. Ing. Václav Čuba, Ph.D.
podpis děkana(ky)

III. PŘEVZETÍ ZADÁNÍ

Diplomant bere na vědomí, že je povinen vypracovat diplomovou práci samostatně, bez cizí pomoci, s výjimkou poskytnutých konzultací. Seznam použité literatury, jiných pramenů a jmen konzultantů je třeba uvést v diplomové práci.


Datum převzetí zadání


Podpis studenta

Poděkování:

Chtěl bych zde poděkovat především mým vedoucím Ing. Jakobovi Klinkovskému, Ph.D. a doc. Ing. Radku Fučíkovi, Ph.D. za ochotu, zájem, pečlivost a v neposlední řadě také za neocenitelné rady bez kterých by tato práce nevznikla. Mé díky patří také mé rodině a přítelkyni za veškerou podporu při studiu.

Tato práce byla podpořena granty č. SGS20/184/OHK4/3T/14 a SGS23/188/OHK4/3T/14 Studentské grantové soutěže ČVUT, stipendiem Hlávkovy nadace, Nadace pro rozvoj vzdělání, Hanzlovy nadace a Nadace Český literární fond. Tato práce byla podpořena Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky prostřednictvím e-INFRA CZ (ID:90254).

Čestné prohlášení:

Prohlašuji, že jsem tuto práci vypracoval samostatně a uvedl jsem všechnu použitou literaturu.

V Praze dne 10. května 2024

Bc. Dominik Horák

Název práce:

Matematické modelování neizotermálního turbulentního proudění při obtékání překážek pomocí mřížkové Boltzmannovy metody

Autor: Bc. Dominik Horák

Studijní program: Matematické inženýrství

Druh práce: Diplomová práce

Vedoucí práce: Ing. Jakub Klinkovský, Ph.D., Katedra softwarového inženýrství, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení technické v Praze, Trojanova 13, 120 00, Praha 2

Konzultant: doc. Ing. Radek Fučík, Ph.D., Katedra matematiky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení technické v Praze, Trojanova 13, 120 00, Praha 2

Abstrakt: Práce se zabývá matematickým modelováním neizotermálního turbulentního proudění nestlačitelné newtonovské tekutiny. Práce si klade za cíl implementovat a otestovat přestup tepla ve 3D numerickém modelu a dále také prozkoumat možnosti použití dvou propojených schémat mřížkové Boltzmannovy metody pro řešení Navierových-Stokesových rovnic a advekčně-difuzní rovnice pro vedení tepla. V teoretické části je prezentován matematický model neizotermálního proudění newtonovské tekutiny spolu s popisem turbulentního proudění. Ve druhé části je čtenář seznámen s mřížkovou Boltzmannovou metodou (LBM) a poslední část je pak věnována diskuzi výsledků aplikace LBM s implementovaným přestupem tepla na matematický model. Implementace přestupu teploty byla úspěšná a metoda produkuje uspokojivé výsledky.

Klíčová slova: mřížková Boltzmannova metoda, Navierovy-Stokesovy rovnice, rovnice vedení tepla, simulace proudění na GPU

Title:

Mathematical modeling of non-isothermal turbulent flow around obstacles using the lattice Boltzmann method

Author: Bc. Dominik Horák

Abstract: The work deals with the mathematical modeling of non-isothermal turbulent flow of incompressible Newtonian fluids. The aim of the work is to implement and test heat transfer and investigate usage of coupled LBM-LBM scheme for solving Navier-Stokes equations and advection-diffusion equation. In the theoretical part, the mathematical model of non-isothermal flow of Newtonian fluids is presented together with the description of turbulent flow. In the second part, the reader is introduced to the lattice Boltzmann method (LBM), and the last part discusses the results of the application of LBM with implemented heat transfer to the mathematical model. The implementation of heat transfer was successful, and the method produces satisfactory results.

Key words: lattice Boltzmann method, heat equation, Navier-Stokes equations, flow simulation on GPU

Obsah

Úvod	9
1 Matematický model	11
1.1 Popis dynamiky tekutiny	11
1.2 Vedení tepla	12
1.3 Charakteristické veličiny	13
1.4 Turbulentní proudění	13
1.4.1 Reynoldsův rozklad	14
1.5 Formulace úlohy	14
2 Mřížková Boltzmannova metoda	16
2.1 Diskretizace	16
2.2 Přechod k bezrozměrnému systému jednotek	18
2.3 Numerické schéma pro proudění tekutiny	19
2.3.1 Počáteční a okrajové podmínky	20
2.4 Numerické schéma pro vedení tepla	21
2.4.1 Počáteční a okrajové podmínky	22
2.5 Symetrická okrajová podmínka	23
2.6 Inamurova okrajová podmínka pro přestup tepla	23
2.7 Algoritmus LBM	23
3 Implementace	26
3.1 Datové struktury pro implementaci LBM	26
3.1.1 Pole pro difuzní koeficient	27
3.1.2 Poznámky k počítání na více grafických kartách	27
3.2 Implementace přestupové podmínky pro ADR schéma	27
3.2.1 Poznámka k implementaci přestupové okrajové podmínky	30
4 Výsledky	31
4.1 Implementace prostorově proměnlivé difuze	31
4.2 Testování přestupové okrajové podmínky	33
4.2.1 Formulace úlohy	34
4.2.2 Výsledky úlohy	34
4.3 Zkoumání chyby numerické aproximace teploty	38
4.3.1 Formulace úlohy	39
4.3.2 Výsledky úlohy	39
4.3.3 Shrnutí úlohy	49

4.4	Experiment CUBI	49
4.4.1	Formulace úlohy	51
4.4.2	Výsledky úlohy	51
	Závěr	56
	Literatura	57

Úvod

Tato práce se zabývá problematikou simulace neizotermálního proudění tekutin (anglicky computational fluid dynamics, dále CFD [11]), za použití mřížkové Boltzmannovy metody (LBM), což patří mezi nejskloňovanější témata na poli numerické matematiky. Zároveň je CFD velmi hojně využíván v praxi, například ve Formuli 1 [24]. V automobilovém průmyslu obecně je v posledních letech stále větší důraz kladen na numerické simulace narozdíl od experimentů, které bývají finančně mnohem náročnější.

V předcházející bakalářské práci [21] bylo zkoumáno izotermální proudění okolo překážek a spolu s ním i aerodynamické vlastnosti tohoto proudění [6, 10]. V této práci je hlavním cílem simulovat izotermální proudění spolu s přestupem tepla mezi různými typy prostředí.

Tato práce si klade za hlavní cíl prozkoumat možnosti použití mřížkové Boltzmannovy metody pro řešení izotermálního proudění. Nutno podotknout, že v rámci výzkumného týmu na KM FJFI ČVUT již jsou zkušenosti se simulacemi neizotermálního proudění pomocí LBM, avšak pouze s případem, kdy je LBM použito k řešení Navierových-Stokesových rovnic (NSR) a pro řešení advekčně-difuzní rovnice (ADR) se použije smíšená metoda konečných prvků (MHFEM) [7]. Jak bylo zmíněno výše, tato práce bude zkoumat možnosti použití LBM pro řešení NSR i ADR. Fakt, že LBM je založeno na ryze explicitním schématu, může vést k několikerým úskalím při řešení advekčně-difuzní rovnice. Tato práce prozkoumá tato úskalí a otestuje možnost použití LBM pro řešení ADR. Na vybrané úloze pak porovnáme získané výsledky s výsledky použití LBM-MHFEM na stejnou úlohu.

Dalším cílem této práce je zkoumání úlohy s tělesem CUBI (překážka tvaru písmene L), kterou výzkumný tým připravuje pro porovnání s připravovaným experimentem v americkém výzkumném centru SENSE. V této úloze budeme simulovat neizotermální proudění ve větrném tunelu, do kterého bude umístěna zmíněná překážka. Předmětem zájmu v této úloze bude primárně vývoj teplotního pole v oblasti mezní vrstvy [25].

Ke zmíněným numerickým simulacím byl využíván kód LBM vyvíjený již několik let na KM FJFI ČVUT v Praze [26]. Kód je napsán v jazyce C++ a je v něm využita architektura CUDA umožňující paralelní počítání na grafických kartách. Tento kód byl následně modifikován dle potřeb zadání – byla do něj implementována přestupová okrajová podmínka a dále bylo přidáno difuzní pole umožňující nastavení odlišného difuzního koeficientu pro různé objekty v simulaci. Dále kód využívá knihovny OpenMPI pro paralelní počítání na více grafických kartách. Výpočty byly primárně uskutečněny na výpočetním clusteru Helios na KM FJFI ČVUT, konkrétně na grafických kartách NVIDIA A100 s 80 GB pamětí. Díky funkcionalitě OpenMPI bylo možné využít všechny čtyři dostupné grafické karty najednou. K výpočtům byl také používán superpočítač Karolina v Ostravě [19], na kterém byly k dispozici karty NVIDIA A100 se 40 GB pamětí. Na tomto clusteru bylo však k dispozici těchto karet až osm na každém nodu, a tyto nody pak bylo možné ještě propojit mezi sebou. Největší výpočty v této práci tak byly počítány až na 64 akcelerátorech GPU najednou s celkovou pamětí 2560 GB.

Práce je rozdělena do čtyř kapitol. V první kapitole je představen matematický model dynamiky tekutin spolu s rovnicí vedení tepla. V kapitole jsou popsána všechna bezrozměrná čísla, která jsou v této práci použita k charakterizaci proudění. Dále je v této kapitole uvedena pseudodefinice turbulence spolu

s definovanými veličinami, které se k popisu turbulentního proudění používají. Kapitulu pak uzavírá formulace úlohy.

Ve druhé kapitole je čtenář seznámen s mřížkovou Boltzmannovou metodou. Popsány jsou základní principy metody, numerická schémata používaná při simulacích spolu s představením okrajových podmínek a algoritmu LBM. V této kapitole je také popsána přestupová okrajová podmínka implementovaná v rámci této práce.

Třetí kapitola je věnována poznámkám k implementaci kódu a popisu datových struktur použitých k implementaci LBM.

V poslední kapitole jsou prezentovány výsledky aplikace mřížkové Boltzmannovy metody na matematický model zavedený v první kapitole. V této části je ověřována přestupová okrajová podmínka a zkoumány numerické chyby aproximace teploty v advekčně-difuzním schématu. Na závěr této kapitoly jsou diskutovány výsledky simulace s tělesem CUBI a možné směry dalšího zlepšení modelu.

Kapitola 1

Matematický model

Mějme trojrozměrnou oblast $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ s hranicí $\partial\Omega$. V této oblasti uvažujeme pevné těleso Ω_b a tekutinu Ω_a , pro které platí, že jsou to oblasti a navíc $\overline{\Omega_a} \cup \overline{\Omega_b} = \overline{\Omega}$. Časový interval uvažujeme $\mathcal{I} = \langle 0, \mathcal{T} \rangle \subset \mathbb{R}$ pro $\mathcal{T} > 0$.

1.1 Popis dynamiky tekutiny

K popisu tekutin chceme použít diferenciální počet. To lze za předpokladu, že při makroskopickém pohledu můžeme tekutinu považovat za spojité prostředí (kontinuum), ve kterém zanedbáváme částicové vlastnosti tekutin. To platí i pro infinitezimálně malou část kontinua. Pro tekutinu tedy dostáváme Navierovy-Stokesovy-Fourierovy rovnice v konzervativním tvaru popisující dynamiku tekutiny [22, 25]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (1.1a)$$

$$\frac{\partial (\rho u_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u_i \mathbf{u}) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{i1}}{\partial x_1} + \frac{\partial \tau_{i2}}{\partial x_2} + \frac{\partial \tau_{i3}}{\partial x_3} + \rho F_i, \quad i \in \{1, 2, 3\}, \quad (1.1b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(E + \frac{\mathbf{u}^2}{2} \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \left(E + \frac{\mathbf{u}^2}{2} \right) \mathbf{u} \right] = -\nabla \cdot \boldsymbol{\varphi} + \rho \mathbf{F} \cdot \mathbf{u} + \rho Q + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\sum_{i=1}^3 u_i \tau_{ik} \right) - \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}), \quad (1.1c)$$

kde $\rho = \rho(\mathbf{x}, t, T)$ [kg m⁻³] je hustota tekutiny, $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ [m s⁻¹] značí vektor rychlosti pro $\mathbf{x} \in \Omega$ [m], $t \in \mathcal{I}$ [s], $p = p(\mathbf{x}, t, T)$ [kg m⁻¹ s⁻²] vyjadřuje tlak okolního materiálu, $\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{x}, t, T)$ [m² s⁻²] je objemová síla vztážená na jednotku hmotnosti a dynamický tenzor napětí značíme $\mathbf{T}_D = (\tau_{ij})$ [kg m⁻¹ s⁻²]. Dále $E = E(\mathbf{x}, t, T)$ [m² s⁻²] vyjadřuje specifickou vnitřní energii, $\boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}, T)$ [kg s⁻³] se nazývá tepelný tok, $T = T(\mathbf{x}, t)$ [K] je teplota tekutiny a $Q = Q(\mathbf{x}, t)$ [m² s⁻³] je hustota tepelných zdrojů na jednotku hmotnosti.

Tekutinu uvažujeme newtonovskou, tudíž složky dynamického tenzoru napětí, viz [5], jsou pro $i, j \in \{1, 2, 3\}$ ve tvaru

$$\tau_{ij} = \lambda \nabla \cdot \mathbf{u} + 2\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad i = j, \quad (1.2a)$$

$$\tau_{ij} = \tau_{ji} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad i \neq j, \quad (1.2b)$$

kde μ [kg m⁻¹ s⁻¹] se nazývá součinitel molekulární viskozity nebo také dynamická viskozita a platí $\mu = \rho \nu$, pro kinematickou viskozitu ν [m² s⁻¹]. Ve vztahu (1.2a) se objevuje také druhý viskózní koeficient λ [kg m⁻¹ s⁻¹], pro který uvažujeme Stokesovu hypotézu [23]

$$\lambda = -\frac{2}{3}\mu. \quad (1.3)$$

1.2 Vedení tepla

Rovnici pro zákon zachování energie (1.1c) zjednodušíme zanedbáním působení vnějších sil a předpokladem na nestlačitelnost tekutiny. Pak lze přepsat tuto rovnici do tvaru [4, 14]

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c T) = -\nabla \cdot (\boldsymbol{\varphi} + \rho c T \mathbf{u}), \quad (1.4)$$

kde $c = c(\mathbf{x}, T)$ [$\text{m}^2 \text{s}^{-2} \text{K}^{-1}$] je měrná tepelná kapacita. Tepelný tok $\boldsymbol{\varphi}$ je dle Fourierova zákona definován vztahem

$$\boldsymbol{\varphi} = -\kappa \nabla T, \quad (1.5)$$

kde $\kappa = \kappa(\mathbf{x})$ [$\text{kg m s}^{-3} \text{K}^{-1}$] vystupuje v roli součinitele tepelné vodivosti a ∇T [K m^{-1}] označuje teplotní gradient. Pro přestup tepla mezi prostředími zavádíme součinitel přestupu tepla ω [$\text{kg s}^{-3} \text{K}^{-1}$]

$$\omega = \frac{|\boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{n}|}{|T_b - T_a|}, \quad (1.6)$$

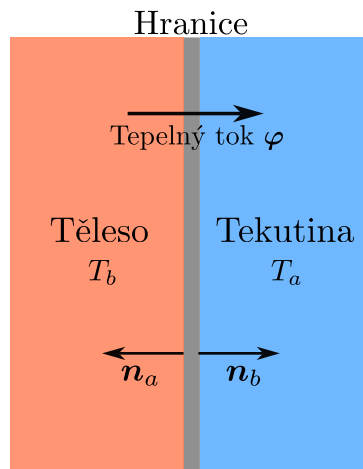
kde T_b označuje teplotu tělesa Ω_b na rozhraní, T_a vyjadřuje hodnotu teploty tekutiny v prostředí Ω_a na rozhraní a \mathbf{n} značí normálový vektor na rozhraní tekutiny a tělesa. Uvažujme situaci jako na obrázku 1.1 a předpokládejme, že $T_b > T_a$, tedy že dochází k ochlazování tělesa. Pak lze Fourierův zákon aproximovat vztahy

$$\boldsymbol{\varphi}_a = -\kappa \frac{T_b - T_a}{L} \mathbf{n}_a, \quad (1.7a)$$

$$\boldsymbol{\varphi}_b = -\kappa \frac{T_a - T_b}{L} \mathbf{n}_b, \quad (1.7b)$$

kde jsme výraz ∇T nahradili diferencí s prostorovým krokem L , který reprezentuje aproximaci šíře hranice mezi tělesem a tekutinou. Pro tepelné toky $\boldsymbol{\varphi}_a, \boldsymbol{\varphi}_b$ pak platí

$$\boldsymbol{\varphi}_a \cdot \mathbf{n}_a = -\boldsymbol{\varphi}_b \cdot \mathbf{n}_b \quad (1.8)$$



Obrázek 1.1: Schéma tepelného toku na rozhraní tělesa a tekutiny.

Dosazením (1.5) do (1.4) a vydělením hustotou ρ dostaneme

$$\frac{\partial(cT)}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\kappa \nabla T) - \nabla \cdot (cT\mathbf{u}). \quad (1.9)$$

V případě, že κ a c jsou konstantní, lze tuto rovnici přepsat do tvaru

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \Delta T - \mathbf{u} \cdot \nabla T, \quad (1.10)$$

kde jsme označili difuzní koeficient $D = \frac{\kappa}{\rho c}$ [$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$].

1.3 Charakteristické veličiny

Při popisu proudění tekutin je dobré zavést některé veličiny, které pomohou během následného vyhodnocování výsledků lépe charakterizovat jednotlivé typy proudění tekutin, viz [18]. Mezi tyto veličiny patří:

- Reynoldsovo číslo

$$\text{Re} = \frac{l_0^2}{t_0 \nu} = \frac{l_0 u_0}{\nu}, \quad (1.11)$$

charakterizující vliv vnitřního tření na odpor prostředí,

- Nusseltovo číslo

$$\text{Nu} = \frac{\omega l_0}{\kappa}, \quad (1.12)$$

vyjadřující poměr konvektivního a konduktivního přenosu tepla a

- Péceletovo číslo

$$\text{Pe} = \frac{l_0 u_0}{D_0}, \quad (1.13)$$

označující poměr advekce a difuze při vedení tepla.

Ve vztazích (1.11), (1.12) a (1.13) značí l_0, t_0, u_0, D_0 po řadě charakteristickou délku, čas, rychlost a difuzi.

1.4 Turbulentní proudění

Turbulentní proudění je specifický typ nepravidelného proudění, ve kterém náhodně vznikají a zanikají nestabilní víry. Turbulence se vyskytují v přírodních jevech (např. proudění vody, tok krve v cévách, atmosférické procesy, aj.), ale také v mnohých průmyslových aplikacích (např. aerodynamika dopravních prostředků, výměníky tepla, ...).

Turbulentní proudění je **náhodný** proces, při kterém se i malé počáteční výchylky stávají časem nepředvídatelné. Jedná se o vysoce **difuzivní** proces, tedy mísení skalárních veličin probíhá mnohem rychleji než při běžné difuzi. Velká **vířivost** proudění způsobuje výskyt četných vírových struktur různých rozměrů. Tyto víry jsou v celém spektru **měřitek** – shora je omezují rozměry oblastí, zdola pak velikost disipujících vírů. Výskyt těchto vírových struktur je náhodný v celém **prostoru** turbulentního proudového pole. **Disipativnost** vírů, tedy měnění kinetické energie na teplo, zaručuje, že pro udržení

turbulentního proudění je nutností neustále dodávat energii. Toto proudění **není** v čase **lineární**, ale mění se dynamicky v čase.

Pro takový typ proudění nemáme k dispozici rigorózní definici, musíme si proto vystačit pouze s vyjádřením výčtu vlastností, které turbulentní proudění charakterizují [35, 33]. Jelikož je turbulentní proudění ze své podstaty ryze nestabilní, je popis okamžitého stavu takového proudění velice obtížný. Pro popis turbulentního pole se tak uchýlil spíše statistický přístup.

1.4.1 Reynoldsův rozklad

Turbulentní pole lze popsat pomocí rovnic založených na středních hodnotách, tzv. Reynoldsův rozklad popsany koncem 19. století Osbornem Reynoldsem [30]. V definici Reynoldsova rozkladu pro rychlost hraje klíčovou roli střední hodnota rychlosti $\overline{\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)}$ spolu s fluktuací $\mathbf{u}'(\mathbf{x}, t)$. Ty se společně sečtou na okamžitou rychlost $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$, matematicky vyjádřeno:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \overline{\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)} + \mathbf{u}'(\mathbf{x}, t). \quad (1.14)$$

Známe-li okamžitou a střední hodnotu rychlosti, lze pak pomocí získaných fluktuací spočítat turbulentní kinetickou energii k [m^2s^{-2}] pomocí vztahu

$$k = \frac{1}{2} \overline{\left((u'_1(\mathbf{x}, t))^2 + (u'_2(\mathbf{x}, t))^2 + (u'_3(\mathbf{x}, t))^2 \right)}, \quad (1.15)$$

kde $\mathbf{u}'(\mathbf{x}, t) = (u'_1(\mathbf{x}, t), u'_2(\mathbf{x}, t), u'_3(\mathbf{x}, t))^T$.

1.5 Formulace úlohy

Tato sekce bude věnována formulaci úlohy proudění tekutiny. Mějme 3D oblast tvaru kvádrů $\Omega = (0, W) \times (0, H) \times (0, H)$, $W, H \in \mathbb{R}^+$, stejně jako v sekcích 1.1 a 1.2 rozdělenou na oblast tělesa Ω_b a oblast tekutiny Ω_a , pro které platí $\overline{\Omega} = \Omega_a \cup \Omega_b$. Hranici oblasti označíme jako $\partial\Omega = \Gamma_w \cup \Gamma_{in} \cup \Gamma_{out}$ a hranici tělesa označíme $\partial\Omega_b = \Gamma_b$. Časový interval uvažujme $\mathcal{I} = \langle 0, \mathcal{T} \rangle$ pro $\mathcal{T} \in \mathbb{R}^+$.

Pro neizotermální systém s nestlačitelnou, newtonovskou, vazkou tekutinou bez působení vnějších sil (tj. $Q = 0$) mějme zákony zachování ve tvaru

$$\sum_{i=1}^3 \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (1.16a)$$

$$\rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j u_i) = \rho \nu \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial p}{\partial x_i} \quad i \in \{1, 2, 3\}, \quad (1.16b)$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\kappa}{c} \Delta T - \rho \mathbf{u} \cdot \nabla T, \quad (1.16c)$$

na $\Omega_a \times \mathcal{I}$, kde $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)^T$ značí vektor rychlosti a x_i jsou po řadě složky polohového vektoru $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)^T$. První rovnice odpovídá rovnici kontinuity (1.1a), druhá zákonu zachování hybnosti (1.1b) a poslední rovnici vedení tepla (1.10). Pro část tělesa $\Omega_b \times \mathcal{I}$ pak Navierovy-Stokesovy rovnice neřešíme, jelikož rychlost je nulová a hustota nabývá konstanty. Řešíme pouze rovnici vedení tepla, která bude tvaru

$$\mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad (1.17a)$$

$$\rho = \rho_0, \quad (1.17b)$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\kappa}{c} \Delta T, \quad (1.17c)$$

pro počáteční hustotu ρ_0 . Všechny veličiny mohou být obecně závislé na poloze \mathbf{x} , čase t a teplotě T .

Pro úlohu zbývá ještě dodefinovat okrajové a počáteční podmínky. Ty jsou pro řešení Navierových-Stokesových rovnic tvaru

$$(\nabla p(\mathbf{x}, t) - \nu \rho \Delta \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = (u_{in}, 0, 0)^\top \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_{in} \times \mathcal{I}, \quad (1.18a)$$

$$\nabla p(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_w \times \mathcal{I}, \quad (1.18b)$$

$$p(\mathbf{x}, t) = p_{out}(\mathbf{x}, t), \quad \nabla u_i(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \forall i \in \{1, 2, 3\}, \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_{out} \times \mathcal{I}, \quad (1.18c)$$

$$\rho(\mathbf{x}, 0) = \rho_0, \quad \mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad (1.18d)$$

kde \mathbf{u}_{in} značí rychlost na vstupní části hranice Γ_{in} a \mathbf{n} symbolizuje jednotkový vektor vnější normály na příslušnou hranici. Pro řešení advektivně-difuzní úlohy (1.16c) a (1.17c) jsou okrajové a počáteční podmínky tvaru

$$T(\mathbf{x}, t) = T_{in} \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_{in} \times \mathcal{I}, \quad (1.19a)$$

$$T(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_w \times \mathcal{I}, \quad (1.19b)$$

$$\nabla T(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_{out} \times \mathcal{I}, \quad (1.19c)$$

$$T(\mathbf{x}, 0) = T_{ini,a} \quad \forall \mathbf{x} \in \bar{\Omega}_a, \quad (1.19d)$$

$$T(\mathbf{x}, 0) = T_{ini,b} \quad \forall \mathbf{x} \in \bar{\Omega}_b, \quad (1.19e)$$

$$\boldsymbol{\varphi}_a(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}_a = \omega(T_a(\mathbf{x}, t) - T_b(\mathbf{x}, t)) \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_b \times \mathcal{I}, \quad (1.19f)$$

$$\boldsymbol{\varphi}_b(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}_b = \omega(T_b(\mathbf{x}, t) - T_a(\mathbf{x}, t)) \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_b \times \mathcal{I}, \quad (1.19g)$$

kde T_{in} značí teplotu na vstupní části oblasti, $T_{ini,a}$ je počáteční teplota v oblasti mimo překážku, $T_{ini,b}$ značí počáteční teplotu na překážce a \mathbf{n}_a a \mathbf{n}_b označují jednotkové vnější normálové vektory dle obrázku 1.1. Rovnice (1.19f) resp. (1.19g) odpovídají tepelnému toku z tekutiny do tělesa resp. z tělesa do tekutiny, viz [8].

Při řešení úlohy budeme uvažovat různé hodnoty difuzního koeficientu v závislosti na poloze, tj. $D = D(\mathbf{x})$. Připomeňme, že difuzní koeficient je definován jako $D = \frac{\kappa}{\rho c}$. V případě, že se budeme nacházet na tělese Ω_b , uvažujeme difuzní koeficient s označením D_b . V opačném případě jej budeme značit D_a .

Kapitola 2

Mřížková Boltzmannova metoda

Numerická metoda použitá k simulaci neizotermálního proudění tekutin je mřížková Boltzmannova metoda, zkráceně LBM [15, 16, 32]. Tato metoda je jedna z nejmladších hojně používaných metod k simulaci tekutin. Následující kapitola se bude věnovat popisu této metody v prostoru \mathbb{R}^3 .

LBM používá mezoskopického popisu tekutiny, kdy uvažujeme tekutinu složenou z částic a popsanou jednočásticovou pravděpodobnostní hustotou f [$\text{kg m}^{-6} \text{s}^3$]. Funkce $f = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ znázorňuje pravděpodobnost, že fiktivní částici najdeme v malém okolí ($H_{\mathbf{x}} \subset \mathbb{R}^3$) bodu \mathbf{x} , s rychlostí v malém okolí ($H_{\boldsymbol{\xi}} \subset \mathbb{R}^3$) rychlosti $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)^\top$ [m s^{-1}] a v čase $t \in \mathbb{R}_0^+$. Prostor rychlostí budeme značit Ξ , tj. $\boldsymbol{\xi} \in \Xi = \mathbb{R}^3$. Takto zavedená distribuční funkce $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ se pak řídí Boltzmannovou transportní rovnicí [16]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \xi_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + \sum_{i=1}^3 G_i \frac{\partial f}{\partial \xi_i} = C, \quad (2.1)$$

kde $\mathcal{G} = (\mathcal{G}_1, \mathcal{G}_2, \mathcal{G}_3)^\top$ [m s^{-2}] vyjadřuje vektor zrychlení a C [$\text{kg m}^{-6} \text{s}^2$] je kolizní operátor, který bude popsán později.

2.1 Diskretizace

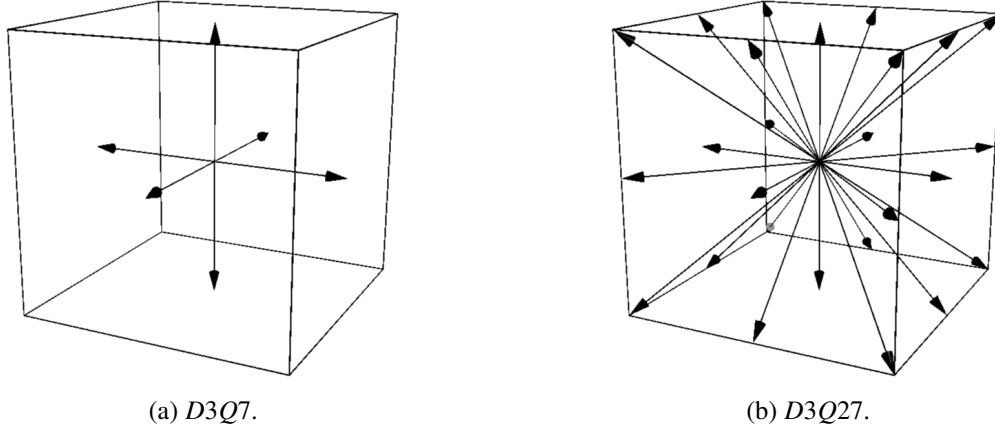
Diskretizace prostoru se v LBM provádí za pomoci pravidelné mřížky (angl. lattice). Diskretizace prostoru rychlostí se potom odvíjí od zvoleného rychlostního modelu $DdQq$, kde d a q postupně značí dimenzi prostoru a počet směrů, kterými se z každého uzlu lze vydat. V této práci budeme uvažovat modely $D3Q27$ pro simulaci proudění a $D3Q7$ pro řešení advekčně-difuzní rovnice. Oba modely jsou vyobrazeny na obrázku 2.1. Modely mají následující rozložení rychlostí:

D3Q27:

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\xi}_k)_{k=0}^{26} = & \left(\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right), \\ & \left(\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} \right), \end{aligned} \quad (2.2)$$

D3Q7:

$$(\xi_k)_{k=0}^6 = \left(\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \right). \quad (2.3)$$



Obrázek 2.1: Znáornění rychlostních modelů $D3Q7$ a $D3Q27$.

V kapitole 1 jsme definovali oblast Ω , kterou nyní diskretizujeme izotropní mřížkou $\overline{\hat{\Omega}}$ ve tvaru

$$\overline{\hat{\Omega}} = \{\mathbf{x}_{i,j,\ell} = (ih, jh, \ell h)^T \mid i \in \{0, 1, \dots, N_x - 1\}, j \in \{0, 1, \dots, N_y - 1\}, \ell \in \{0, 1, \dots, N_z - 1\}\}, \quad (2.4a)$$

$$\hat{\Omega} = \{\mathbf{x}_{i,j,\ell} \mid i \in \{1, 2, \dots, N_x - 2\}, j \in \{1, 2, \dots, N_y - 2\}, \ell \in \{1, 2, \dots, N_z - 2\}\}, \quad (2.4b)$$

$$\hat{\Gamma} := \overline{\hat{\Omega}} \setminus \hat{\Omega}, \quad (2.4c)$$

kde $\hat{\Omega}$ značí vnitřek mřížky diskretizující oblast Ω , $\hat{\Gamma}$ označuje uzly diskretizující hranici této oblasti a N_x, N_y, N_z jsou počty uzlů na každé z kartézských os. Prostorový krok uvažujeme ve všech směrech kartézských os stejný (tzv. ekvidistantní mřížka), značme jej proto h . Časový interval \mathcal{I} diskretizujeme množinou

$$\hat{\mathcal{I}} = \{t_i = i\Delta t \mid i \in \{0, 1, \dots, N_t - 1\}\}, \quad (2.5)$$

ve které $\Delta t = \frac{\mathcal{I}}{N_t}$ a $N_t \in \mathbb{N}$. Diskretizovanou překážku budeme značit $\overline{\hat{\Omega}}_b \subset \overline{\hat{\Omega}}$, její hranici $\hat{\Gamma}_{b,q}$ budeme rozumět uzly $\mathbf{x}_b \in \overline{\hat{\Omega}}_b$, pro které existuje $k \in \{1, 2, \dots, q - 1\}$ takové, že mřížkový bod $\mathbf{x}_b + \Delta t \xi_k \notin \overline{\hat{\Omega}}_b$. Zde je nutno zmínit, že hranice překážky může obsahovat různé uzly v závislosti na rychlostním modelu $DdQq$. Obecně platí, že $\hat{\Gamma}_{b,7} \subset \hat{\Gamma}_{b,27}$.

Pomocí dalších úprav popsaných v [31, 16] dostáváme z (2.1) diskrétní Boltzmannovu transportní rovnici

$$f_k(\mathbf{x} + \Delta t \xi_k, t + \Delta t) - f_k(\mathbf{x}, t) = C_k(\mathbf{x}, t) + S_k(\mathbf{x}, t) \quad (2.6)$$

pro všechna $k \in \{0, 1, 2, \dots, q - 1\}$, kde k je index směru dané rovnice v modelu $DdQq$. Na pravé straně rovnice se vyskytují kolizní operátor C_k a silový člen S_k , oba závislé na zvoleném typu LBM [16, 3, 13].

Při zavedení postkolizní distribuční funkce f_k^* vztahem

$$f_k^*(\mathbf{x}, t) = f_k(\mathbf{x}, t) + C_k(\mathbf{x}, t) + S_k(\mathbf{x}, t), \quad (2.7)$$

můžeme rovnici (2.6) přepsat do tvaru

$$f_k(\mathbf{x} + \Delta t \boldsymbol{\xi}_k, t + \Delta t) = f_k^*(\mathbf{x}, t), \quad (2.8)$$

který platí $\forall \mathbf{x} \in \hat{\Omega}, \forall k \in \{0, 1, \dots, q-1\}, \forall t \in \{0, 1, \dots, N_t-2\}$.

V rámci kolizního kroku, který bude popsán později, se objevuje diskrétní aproximace Maxwelllovy-Boltzmannovy rovnovážné distribuční funkce f_k^{eq} , $\forall k \in \{0, 1, \dots, q-1\}$. Ta je tvaru

$$f_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}) = \rho w_k \left(1 + \frac{\boldsymbol{\xi}_k \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\boldsymbol{\xi}_k \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2c_s^2} \right). \quad (2.9)$$

Hodnoty c_s hrají roli mřížkové rychlosti zvuku, která závisí na zvoleném modelu – $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}$ pro *D3Q27* a $c_s = \frac{1}{2}$ pro *D3Q7*. Dále se ve vztahu vyskytují váhy w_k , jejichž tvar je určen rychlostním modelem, kterého se daná rovnovážná distribuční funkce týká [1]. Váhy nabývají hodnot

$$(w_k)_{k=0}^6 = \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8} \right) \quad \text{pro } D3Q7, \quad (2.10)$$

a u modelu *D3Q27* jsou to hodnoty

$$w_k = \begin{cases} \frac{8}{27}, & k = 0, \\ \frac{2}{27}, & k \in \{1, 2, 3, \dots, 6\}, \\ \frac{1}{54}, & k \in \{7, 8, \dots, 18\}, \\ \frac{1}{216}, & k \in \{19, 20, \dots, 26\}. \end{cases} \quad (2.11)$$

2.2 Přechod k bezrozměrnému systému jednotek

Pro zjednodušení vzorců používaných v LBM volíme mřížkový prostorový krok $h = 1$ a časový krok $\Delta t' = 1$ dle [16]. Díky této volbě pak získáváme tyto převodní vztahy:

$$v = \frac{h^2}{\Delta t} v', \quad (2.12a)$$

$$D = \frac{h^2}{\Delta t} D', \quad (2.12b)$$

$$u_i = \frac{h}{\Delta t} u'_i \quad \forall i \in \{1, 2, 3\}, \quad (2.12c)$$

$$(2.12d)$$

kde čárkované veličiny označují příslušné veličiny v mřížkových jednotkách.

Hustota kapalin v LBM fluktuuje okolo své referenční hodnoty ρ'_{ref} , kterou bývá ve zvyku volit rovnou 1. V kapitole 1 byla ale jedním z předpokladů na proudění kapaliny její nestlačitelnost. Z tohoto důvodu bývá LBM někdy označováno za metodu řešící slabě stlačitelné proudění [16]. Lze tedy psát

$$\rho' = \rho'_{ref} + \delta'_\rho. \quad (2.13)$$

Dále budeme v této kapitole používat pouze bezrozměrné veličiny v LBM, proto pro zjednodušení zápisu u nich budeme vynechávat čárky.

2.3 Numerické schéma pro proudění tekutiny

Rovnice proudění tekutin budeme řešit modelem $D3Q27$, pro který máme sadu distribučních funkcí označenou

$$\{f_k(\mathbf{x}, t) \mid k \in \{0, 1, 2, \dots, 26\}\} \quad \forall(\mathbf{x}, t) \in \bar{\Omega} \times \hat{I} \quad (2.14)$$

Vývoj těchto distribučních funkcí f_k je řízen diskrétní Boltzmannovou transportní rovnicí (2.6), kde za diskrétní kolizní operátor C_k volíme kumulantní LBM kolizní operátor (CuLBM) [3].

Makroskopické veličiny získáme ze vztahů

$$\rho = \sum_{k=0}^{26} f_k, \quad (2.15a)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_{k=0}^{26} f_k \boldsymbol{\xi}_k + \frac{1}{2} \rho \Delta t \mathcal{G}, \quad (2.15b)$$

kde při řešení NSR odpovídá nultý moment hustotě a první moment vektoru hybnosti. Rychlost získáme z rovnice pro hybnost vydělením předem spočtenou hustotou.

Základem kumulantního kolizního operátoru jsou relaxační časy makroskopických momentů, které jsou zároveň Galileovskými invariantní a statisticky nezávislé. Mějme tedy rychlostní model $D3Q27$, pro který jsou obecné a centrální momenty ve tvaru

$$m_{\alpha} := \sum_{k=0}^{26} f_k \xi_{k,1}^{\alpha_1} \xi_{k,2}^{\alpha_2} \xi_{k,3}^{\alpha_3}, \quad (2.16)$$

a

$$k_{\alpha} := \sum_{k=0}^{26} f_k (\xi_{k,1} - u_1)^{\alpha_1} (\xi_{k,2} - u_2)^{\alpha_2} (\xi_{k,3} - u_3)^{\alpha_3}, \quad (2.17)$$

kde $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)^{\top} \in \mathbb{N}_0^3$, $\alpha_i \in \{0, 1, 2\} \forall i \in \{1, 2, 3\}$ značí multiindex a \mathbf{u} vyjadřuje makroskopickou rychlost.

Kolizní operátor je tvaru [3, 9]

$$C(f(\mathbf{x}, t)) = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{G}^{-1} \left(\mathbf{N}^{-1} \mathbf{S} \mathbf{N} \mathbf{G} (\mathbf{M} f^{eq}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{M} f(\mathbf{x}, t)) \right), \quad (2.18)$$

tudíž pro postkolizní distribuční funkci (2.7) dostáváme vztah

$$f^*(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x}, t) + \mathbf{M}^{-1} \mathbf{G}^{-1} \left(\mathbf{N}^{-1} \mathbf{S} \mathbf{N} \mathbf{G} (\mathbf{M} f^{eq}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{M} f(\mathbf{x}, t)) \right), \quad (2.19)$$

kde matice \mathbf{S} je pro relaxační časy τ_i , $i \in \{1, 2, \dots, 10\}$ ve tvaru

$$\mathbf{S} = \Delta t \operatorname{diag} \left(0, 0, 0, 0, \frac{1}{\tau_1}, \frac{1}{\tau_1}, \frac{1}{\tau_1}, \frac{1}{\tau_1}, \frac{1}{\tau_1}, \frac{1}{\tau_2}, \frac{1}{\tau_3}, \frac{1}{\tau_3}, \frac{1}{\tau_3}, \frac{1}{\tau_3}, \frac{1}{\tau_4}, \frac{1}{\tau_4}, \frac{1}{\tau_4}, \frac{1}{\tau_5}, \frac{1}{\tau_6}, \frac{1}{\tau_6}, \frac{1}{\tau_7}, \frac{1}{\tau_8}, \frac{1}{\tau_8}, \frac{1}{\tau_8}, \frac{1}{\tau_9}, \frac{1}{\tau_9}, \frac{1}{\tau_9}, \frac{1}{\tau_{10}} \right). \quad (2.20)$$

Pomocí matice \mathbf{M} definujeme vektor makroskopických momentů $\boldsymbol{\mu}$ jako

$$\boldsymbol{\mu} = \mathbf{M} f. \quad (2.21)$$

Další maticí, která vystupuje ve vztahu (2.19), je matice kombinace kumulantů N . Podrobný popis těchto matic lze nalézt v [3, 9]. Posledním výrazem, který vystupuje ve vztahu pro postkolizní funkce, je nelineární operátor \mathbf{G} , za pomoci kterého je provedena transformace obecných momentů $\boldsymbol{\mu}$ do kumulantního vektoru $\boldsymbol{\gamma}$

$$\boldsymbol{\gamma} = \mathbf{G}(\boldsymbol{\mu}) = \mathbf{G}(\mathbf{M}\mathbf{f}) = (\gamma_{(0,0,0)}, \gamma_{(1,0,0)}, \gamma_{(0,1,0)}, \dots, \gamma_{(2,2,2)})^\top, \quad (2.22)$$

kde $\gamma_\alpha = \mathbf{G}(m_\alpha)$ pro multiindexy α . Nakonec definujeme vektor

$$\boldsymbol{\gamma}^{eq} = (\rho, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 3\rho c_s^2, 0, 0, \dots, 0)^\top \in \mathbb{R}^{27} \quad (2.23)$$

a následně můžeme vztah (2.19) přepsat v řeči vektoru $\boldsymbol{\gamma}$

$$\boldsymbol{\gamma}^*(\mathbf{x}, t) = \boldsymbol{\gamma}(\mathbf{x}, t) + N^{-1} \mathbf{S} \mathbf{N} (\boldsymbol{\gamma}^{eq}(\mathbf{x}, t) - \boldsymbol{\gamma}(\mathbf{x}, t)). \quad (2.24)$$

Předpokládáme-li izotropní viskozitu, lze volit relaxační časy

$$\tau_1 = \tau_{shear}, \quad (2.25a)$$

$$\tau_i = 1 \quad \forall i \in \{2, 3, 4, \dots, 10\}, \quad (2.25b)$$

kde τ_{shear} splňuje

$$v_{LBM} = c_s^2 \left(\tau_{shear} - \frac{\Delta t}{2} \right). \quad (2.26)$$

2.3.1 Počáteční a okrajové podmínky

V této části uvedeme LBM aproximace pro počáteční a okrajové podmínky úlohy 1.5.

Počáteční stav distribučních funkcí pokládáme roven rovnovážným distribučním funkcím f_k^{eq} za pomoci počátečních hodnot hustoty ρ_{ini} a rychlosti \mathbf{u}_{ini} vztahem

$$f_k(\mathbf{x}_{i,j,\ell}, 0) = f_k^{eq}(\rho_{ini}(\mathbf{x}_{i,j,\ell}), \mathbf{u}_{ini}(\mathbf{x}_{i,j,\ell})). \quad (2.27)$$

Okrajové podmínky volíme následující:

$\hat{\Gamma}_w$: Full-way bounce-back okrajová podmínka:

U okrajových podmínek typu bounce-back uvažujeme odrazy fiktivních částic tekutiny od hranice zpátky do oblasti s tekutinou. Pro odrazy od stěn u simulace proudění použijeme variantu full-way této podmínky. Pro její popis uvažujme uzel tekutiny \mathbf{x}_f a uzel stěny \mathbf{x}_w . Potom můžeme psát $\mathbf{x}_w = \mathbf{x}_f + \Delta t \boldsymbol{\xi}_k$ pro směr k , ve kterém se, z pohledu \mathbf{x}_f , nachází uzel \mathbf{x}_w . Pro uzly překážky poté předepisujeme podmínku

$$f_k^*(\mathbf{x}_w, t) = f_k^*(\mathbf{x}_f, t - \Delta t) \quad \mathbf{x}_w \in \hat{\Gamma}_{b,27}, \quad \mathbf{x}_f \in \hat{\Omega} \setminus \overline{\hat{\Omega}}_b, \quad (2.28)$$

kde $\boldsymbol{\xi}_{\bar{k}} = -\boldsymbol{\xi}_k$. Samotný algoritmus pro odraz od stěny mezi uzly \mathbf{x}_b a \mathbf{x}_f je popsán v [21].

$\hat{\Gamma}_{top}$: Symetrická okrajová podmínka:

V některých případech budeme pro horní stěnu využívat alternativně symetrickou okrajovou podmínku (namísto bounce-back podmínky), díky které se značně sníží nároky na výpočetní paměť. Tato podmínka bude podrobně popsána v sekci 2.5.

$\hat{\Gamma}_{in}$: Okrajová podmínka na vstupu:

K aproximaci podmínky na vstupu použijeme předpoklad, že známe hustotu a rychlost tekutiny, která do oblasti proudí. Hustota je navázána na tlak pomocí vztahu $p = c_s^2 \rho$, viz [16]. Distribuční funkce f_k položíme rovny rovnovážným distribučním funkcím f_k^{eq} , které jsou vyčísleny v daných hodnotách hustoty a rychlosti.

$\hat{\Gamma}_{out}$: Neumannova okrajová podmínka na výstupu:

Pro simulaci odtokové okrajové podmínky na části hranice $\hat{\Gamma}_{out}$ nemáme v LBM k dispozici všechny potřebné distribuční funkce [16, 21]. Abychom tyto funkce nahradili, využijeme uzlů předešlých (uvnitř oblasti), čímž bude platit $\nabla f_k \cdot \mathbf{n} = 0$ pro k splňující $\xi_k \cdot \mathbf{n} = -1$ a $\mathbf{n} = (1, 0, 0)^\top$ vnější normálový vektor pro $\hat{\Gamma}_{out}$. Zbývající distribuční funkce se řídí vztahem (2.6).

$\hat{\Gamma}_{b,27}$: Full-way bounce-back okrajová podmínka:

Pro simulování překážky použijeme stejnou odrazovou okrajovou podmínku jako v případě stěn $\hat{\Gamma}_w$.

2.4 Numerické schéma pro vedení tepla

Vedení tepla v tekutině budeme řešit za pomoci rychlostního modelu $D3Q7$, pro který jsou k dispozici distribuční funkce

$$\{g_k(\mathbf{x}, t) \mid k \in \{0, 1, 2, \dots, 6\}\} \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \bar{\Omega} \times \hat{\mathcal{I}} \quad (2.29)$$

Distribuční funkce g_k jsou, stejně jako v případě NSR, řízeny diskrétní Boltzmannovou rovnicí (2.6), kde tentokrát volíme za kolizní operátor centrální LBM kolizní operátor (CLBM), [2]. Z důvodu odlišení od NSR schématu se budeme na distribuční funkce v této sekci odkazovat symbolem g .

Teplotě odpovídá v případě řešení ADR nultý moment distribučních funkcí, tj.

$$T = \sum_{k=0}^6 g_k. \quad (2.30)$$

U centrálního kolizního operátoru se kolize provádí v prostoru centrálních momentů g_k . Ve zvoleném rychlostním modelu $D3Q7$ pro advektivně difuzní schéma definujeme obecné a centrální momenty

$$m_\alpha := \sum_{k=0}^6 g_k \xi_{k,1}^{\alpha_1} \xi_{k,2}^{\alpha_2} \xi_{k,3}^{\alpha_3}, \quad (2.31)$$

a

$$k_\alpha := \sum_{k=0}^6 g_k (\xi_{k,1} - u_1)^{\alpha_1} (\xi_{k,2} - u_2)^{\alpha_2} (\xi_{k,3} - u_3)^{\alpha_3}, \quad (2.32)$$

kde se vyskytuje makroskopická rychlost $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)^\top$ definovaná vztahem (2.15b) a $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)^\top \in \mathbb{N}_0^3$, $\alpha_i \in \{0, 1, 2\} \forall i \in \{1, 2, 3\}$ je multiindex. Operátor CLBM je tvaru

$$C(\mathbf{g}(\mathbf{x}, t)) = \mathbf{K}^{-1} \mathbf{S} \mathbf{K} (\mathbf{g}^{eq}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{g}(\mathbf{x}, t)), \quad (2.33)$$

z čehož pak z rovnice (2.7) dostáváme vztah pro postkolizní distribuční funkci

$$\mathbf{g}^*(\mathbf{x}, t) = \mathbf{g}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{K}^{-1} \mathbf{S} \mathbf{K} (\mathbf{g}^{eq}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{g}(\mathbf{x}, t)), \quad (2.34)$$

kde matice \mathbf{S} je pro relaxační časy $\tau_i, i \in \{1, 2, \dots, 7\}$ tvaru

$$\mathbf{S} = \Delta t \operatorname{diag} \left(\frac{1}{\tau_1}, \frac{1}{\tau_2}, \dots, \frac{1}{\tau_7} \right). \quad (2.35)$$

Dále matici \mathbf{K} volíme tak, aby splňovala

$$\boldsymbol{\kappa} := \mathbf{K}\mathbf{g} = \begin{pmatrix} k_{(0,0,0)} \\ k_{(1,0,0)} \\ k_{(0,1,0)} \\ k_{(0,0,1)} \\ k_{(2,0,0)} + k_{(0,2,0)} + k_{(0,0,2)} \\ k_{(2,0,0)} - k_{(0,2,0)} \\ k_{(2,0,0)} - k_{(0,0,2)} \end{pmatrix}, \quad (2.36)$$

kde $k_\alpha = \mathbf{K}m_\alpha$ pro multiindex α , a pro vektor centrálních momentů distribučních funkcí platilo, že

$$\boldsymbol{\kappa}^{eq} := \mathbf{K}\mathbf{g}^{eq} = (\rho, 0, 0, 0, 3Tc_s^2, 0, 0)^\top. \quad (2.37)$$

Relaxační časy volíme

$$\tau_1 = \tau_h, \quad (2.38a)$$

$$\tau_i = 1 \quad \forall i \in \{2, 3, \dots, 7\}, \quad (2.38b)$$

kde τ_h splňuje vztah

$$D_j = c_s^2 \left(\tau_h - \frac{\Delta t}{2} \right) \quad (2.39)$$

pro $j \in \{a, b\}$ v závislosti na tom, jestli kolize probíhá na tělese (koeficient D_b) nebo mimo něj (koeficient D_a).

2.4.1 Počáteční a okrajové podmínky

V případě řešení advektivně difuzního schématu použijeme stejnou počáteční podmínku jako u řešení NSR schématu, tj. položíme počáteční stav distribučních funkcí g_k roven rovnovážným distribučním funkcím g_k^{eq} vyčísleným v počáteční teplotě T_{ini} a rychlosti \mathbf{u}_{ini} :

$$g_k(\mathbf{x}_{i,j,\ell}, 0) = g_k^{eq}(T_{ini}(\mathbf{x}_{i,j,\ell}), \mathbf{u}_{ini}(\mathbf{x}_{i,j,\ell})). \quad (2.40)$$

Aproximace okrajových podmínek pro řešení ADR budou následující:

$\hat{\Gamma}_w$: Full-way bounce-back okrajová podmínka:

Pro simulaci stěn, se kterými neprobíhá výměna tepla, použijeme stejnou okrajovou podmínku jako v případě proudění – tedy bounce-back okrajovou podmínku, případně symetrickou okrajovou podmínku 2.5.

$\hat{\Gamma}_{in}$: Okrajová podmínka na vstupu:

Na vstupní části hranice předepíšeme hodnoty rovnovážné distribuční funkce g_k^{eq} vypočtené pro zadanou hodnotu teploty T_{in} .

$\hat{\Gamma}_{out}$: Neumannova okrajová podmínka na výstupu:

Pro simulaci odtokové podmínky v ADR schématu použijeme stejnou odtokovou okrajovou podmínku jako v případě NSR schématu [16, 21].

$\hat{\Gamma}_{b,7}$: Pro simulaci stěn, se kterými probíhá výměna tepla použijeme Inamurovu okrajovou podmínku pro přestup, viz sekce 2.6. Ta se pro nulový koeficient přestupu ω chová jako full-way bounce-back okrajová podmínka.

2.5 Symetrická okrajová podmínka

Symetrické okrajové podmínky se v LBM těší velké oblibě, a to především díky jejich možnosti významně snížit celkový objem potřebné paměti. Pro jejich použití je však nutné, aby proudění v jejich blízkosti bylo laminární. V opačném případě simulace selže.

Co se implementace týče, podmínka se podobá bounce-back okrajové podmínce. Distribuční funkce v čase t vychází z uzlu \mathbf{x}_s a dosáhnou plochy symetrie v čase $t + \frac{\Delta t}{2}$. Od této plochy se odrazí tak, že výsledná rychlost ξ_j má oproti ξ_i opačnou normálovou složku rychlosti, tj. $\xi_{j,n} = -\xi_{i,n}$, kde dolní index n značí normálovou složku dané rychlosti. Tečné složky rychlosti s dolním indexem r zůstávají neměnné, tedy $\xi_{j,r} = \xi_{i,r}$ a je pro ně standardní krok šíření nahrazen následující rovnicí [16]

$$f_j(\mathbf{x}_s + \xi_{j,r}\Delta t, t + \Delta t) = f_i^*(\mathbf{x}_s, t). \quad (2.41)$$

2.6 Inamurova okrajová podmínka pro přestup tepla

Tok teploty \mathbf{j} přes hranici ve směru normálového vektoru \mathbf{n} vyjadřuje vztah [34, 28]

$$\mathbf{j} \cdot \mathbf{n} = \sum_{k=0}^6 g_k \xi_k \cdot \mathbf{n}. \quad (2.42)$$

Pro známou normálu \mathbf{n} lze tok aproximovat hledanou teplotou $T_b(\mathbf{x}_b, t)$ a teplotou tekutiny T_f v sousedním uzlu (ve směru normály \mathbf{n}). Můžeme tedy psát

$$\mathbf{j} \cdot \mathbf{n} = D \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \approx D \frac{T_b - T_f}{h}. \quad (2.43)$$

Díky volbě rychlostního modelu $D3Q7$ je rozklad teploty do normálového směru přímo roven distribuční funkci v daném směru [16]. Tento fakt značně zjednodušuje implementaci podmínky. V bezrozměrném zápise budeme psát

$$\mathbf{j} \cdot \mathbf{n} \approx D \frac{T_b - T_f}{h}. \quad (2.44)$$

2.7 Algoritmus LBM

Pokud opomeneme samotnou inicializaci, kde se nastaví počáteční a okrajové podmínky, algoritmus jednoho schématu LBM probíhá následovně:

- Během **šíření** jsou rozeslány hodnoty distribučních funkcí v příslušných směrech.
- Dále jsou spočteny **makroskopické veličiny** za pomoci vztahů (2.15) a (2.30) v závislosti na daném schématu.

- Poté nastává **kolizní krok**, který závisí na konkrétním schématu a během kterého se spočtou post-kolizní distribuční funkce dle vztahu (2.7).
- Na konci cyklu se vyřeší **okrajové podmínky**, viz sekce 2.3.1 a 2.4.1.

Při numerických simulacích byl použit kód používající dvě LBM schémata – NSR schéma řešící Navierovy-Stokesovy rovnice (1.1a) a (1.1b) a ADR schéma použité k řešení rovnice vedení tepla 1.10. Tato schémata jsou při jednotlivých krocích výpočtu od sebe oddělena. Jejich propojení obstarává propojovací krok, během kterého se nastaví rychlost používaná pro advekčně-difuzní schéma tak, že rovnice (1.16c) přejde do následujícího tvaru

$$1 \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\kappa}{c} \Delta T - \rho \mathbf{u} \cdot \nabla T, \quad (2.45)$$

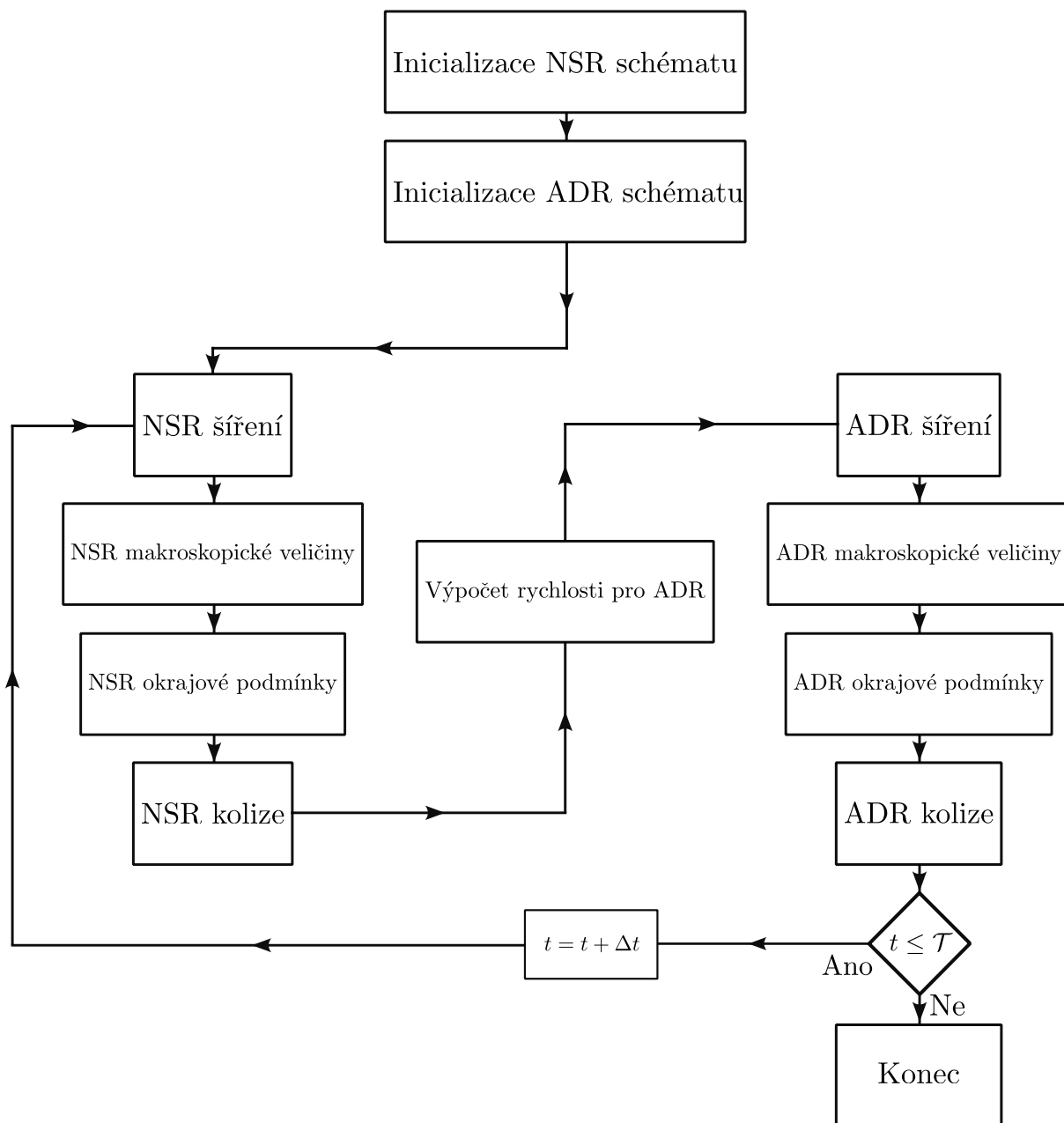
tedy ρ u výrazu $\frac{\partial T}{\partial t}$ jsme v bezrozměrném tvaru aproximovali hodnotou 1. Schéma celého algoritmu pak lze nalézt na obrázku 2.2.

Na počátku simulace volíme kinematickou viskozitu ν a LBM viskozitu ν' pro NSR schéma. Z těchto informací spočteme nejdříve časový krok

$$\Delta t = \frac{\nu'}{\nu} h^2. \quad (2.46)$$

Pro inicializaci ADR pak zvolíme pouze fyzikální difuzi D a LBM difuze D' je pak vypočtena za pomoci časového kroku jako

$$D' = \frac{\Delta t}{h^2} D. \quad (2.47)$$



Obrázek 2.2: Schéma algoritmu LBM pro řešení NSR a ADR.

Kapitola 3

Implementace

V rámci této práce byl k numerickým simulacím používán LBM kód vyvíjený již několik let na KM FJFI ČVUT v Praze. Tento kód je napsán v jazyce C++ s využitím knihovny TNL [27]. Kód využívá softwaru CUDA od společnosti Nvidia, který umožňuje paralelní počítání na grafické kartě. Dále využívá také knihovnu OpenMPI, které umožňují paralelní počítání na více zařízeních najednou. Tato sekce se bude věnovat popisu datových struktur používaných při implementaci LBM a také k popisu implementace přestupové okrajové podmínky.

3.1 Datové struktury pro implementaci LBM

V této sekci se zaměříme na popis datových struktur, které jsou použity při implementaci mřížkové Boltzmannovy metody.

Jak bylo popsáno podrobně v minulé kapitole, podstatou LBM jsou distribuční funkce, které jsou rozmístěny na ekvidistantní mřížce. Rozměry mřížky jsou v případě 3D schémat N_x, N_y, N_z . Pro každý uzel mřížky máme v paměti uloženou celou sadu distribučních funkcí, tj. pro NSR schéma využívající modelu $D3Q27$ to je celkem $27N_xN_yN_z$ hodnot, pro ADR schéma s modelem $D3Q7$ pak jen $7N_xN_yN_z$ hodnot. Navíc je tento algoritmus navržen tak, aby měl k dispozici 2 sady distribučních funkcí, které se při každém časovém kroku střídají, tudíž jen k uložení distribučních funkcí je potřeba několik polí o celkové délce $68N_xN_yN_z$. Při počítání na grafických kartách se tato pole duplikují mezi systémovou pamětí a grafickou kartou. Během inicializace se pak pole kopírují z RAM do GPU, při výstupu na disk kopírování probíhá z GPU do RAM.

Dále je zapotřebí definovat pole o velikosti $N_xN_yN_z$, ve kterém budou uloženy hodnoty okrajových podmínek v daném uzlu. Tato pole budou potřeba dvě – jedno pro NSR a druhé pro ADR schéma.

Nakonec pak dostáváme vzorec pro odhad celkové paměti potřebné pro jednu simulaci:

$$Me = 8 (68N_xN_yN_z) + 8 (VN_xN_yN_z) + 2 (2N_xN_yN_z), \quad (3.1)$$

kde Me [B] značí celkový odhad potřebné paměti. První sčítanec zastupuje velikost polí pro distribuční funkce, druhý odhaduje velikost ukládaných makroskopických veličin V [–] a třetí člen aproximuje pole s okrajovými podmínkami. První dva členy jsou typu **double** s velikostí 8 bajtů, poslední pak může být ukládán pouze jako **short int**, tedy s velikostí 2 bajty. Co se počtu makroskopických veličin V týče, jejich počet je pro simulace v této práci roven 5 – složky rychlosti u_i pro $i \in \{1, 2, 3\}$, hustota ρ a teplota T . V případě některých simulací bylo nutné středovat rychlost v čase a následně počítat fluktuace dle (1.14) – v těchto případech je počet veličin V roven 6.

3.1.1 Pole pro difuzní koeficient

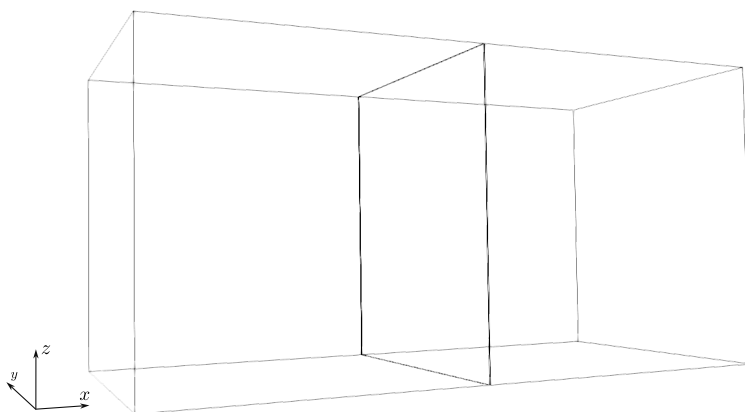
Schéma řešící ADR bylo v rámci této práce rozšířeno o pole pro difuzní koeficient, díky čemuž je možnost nastavit v oblasti různou fyzikální difuzi. Toto pole inicializujeme na počátku algoritmu hodnotami difuze ve všech bodech mřížky a následně je zkopírováno na grafickou kartu, kde hodnoty z něj jsou pak používány v dalších částech algoritmu.

Například chceme-li simulovat těleso, které má jiný difuzní koeficient než okolní tekutina, stačí pro uzly náležící tomuto tělesu nastavit difuzi na požadovanou hodnotu.

3.1.2 Poznámky k počítání na více grafických kartách

Při paralelním počítání na více grafických kartách je celá mřížka rozdělena do bloků dle počtu použitých grafických karet. Toto rozdělení v použitém kódu probíhá výhradně podél osy x , viz obrázek 3.1.

Pro zajištění správné komunikace mezi jednotlivými bloky mezi sebou je nutné zavést tzv. překryvy jednotlivých bloků. Pro každý blok na každé kartě alokujeme pole o 1 větší v každém směru osy x . Během komunikace si sousedící bloky předávají informace z těchto překryvů a mohou tedy získat potřebné distribuční funkce ze směrů, které by jinak byly nedostupné.



Obrázek 3.1: Rozdělení výpočetní oblasti $\overline{\Omega}$ na dva identické bloky pro umožnění počítání na dvou grafických kartách. Rozdělení oblasti je provedeno ve směru osy x .

3.2 Implementace přestupové podmínky pro ADR schéma

V rámci této práce byla implementována přestupová podmínka pro ADR schéma popsána v sekci 2.6. V této sekci blíže popíšeme její implementaci pro LBM schéma $D3Q7$ pomocí pseudokódu.

Při prvotní inicializaci okrajových podmínek je umístěna do výpočetní oblasti $\overline{\Omega}$ překážka $\overline{\Omega}_b$. V samotném kódu je to provedeno nastavením hodnoty `GEO_SOLID` pro uzly příslušející překážce.

Následně je zavolána funkce, která pro výše zvolenou překážku nastaví samotnou přestupovou okrajovou podmínku. Mohou nastat tři situace, které musíme v kódu rozlišit:

- přestup z tekutiny (vzduchu) do překážky,

- přestup z překážky do tekutiny,
- přestup mezi překážkou a zdí.

Funkce nejprve inicializuje pomocná pole pro jednotlivé situace a nastavíme je na hodnotu **false**:

```

1 bool_array_t TransferFS
2 bool_array_t TransferSF
3 bool_array_t TransferSW
4 bool_array_t TransferDIR
5
6 TransferFS.setSizes(N_x-1, N_y-1, N_z-1)
7 TransferSF.setSizes(N_x-1, N_y-1, N_z-1)
8 TransferSW.setSizes(N_x-1, N_y-1, N_z-1)
9 TransferDIR.setSizes(7, N_x-1, N_y-1, N_z-1)
10
11 FOR (x, y, z) = (0, 0, 0) TO (N_x-1, N_y-1, N_z-1)
12     TransferFS(x, y, z) = false
13     TransferSF(x, y, z) = false
14     TransferSW(x, y, z) = false
15     FOR direction = 0 TO 6
16         TransferDIR(direction, x, y, z) = false
17     END FOR direction
18 END FOR (x, y, z)

```

Datový typ `bool_array_t` je specifický pro knihovnu TNL a značí 3D boolovské pole. Funkce `setSizes(N_x-1, N_y-1, N_z-1)` pak tato pole alokuje s požadovanou velikostí. Alokuje zde také další pomocné boolovské pole `TransferDIR`, které si uchovává informaci o směrech, ve kterých v každém uzlu probíhá přestup, tedy hodnota `TransferDIR(direction, x, y, z)` bude **true** v okamžiku, že pro daný uzel probíhá v daném směru přestup.

Když jsou pomocná pole inicializovaná, nastane prohledání celé oblasti a přiřazení hodnoty **true** pro takové uzly, které splňují podmínku pro jednu ze situací pro přestup popsaných výše, tj.

```

1 FOR (x, y, z) = (0, 0, 0) TO (N_x-1, N_y-1, N_z-1)
2     IF isFluid(x,y,z) THEN
3         FOR direction = 1 TO 6
4             IF isSolid(direction) THEN
5                 TransferFS(x, y, z) = true
6                 transferDIR(direction,x, y, z) = true
7             END IF
8         END FOR direction
9     END IF
10    IF isSolid(x,y,z) THEN
11        FOR direction = 1 TO 6
12            IF isFluid(direction) THEN
13                TransferSF(x, y, z) = true
14                transferDIR(direction,x, y, z) = true
15            END IF
16            IF isWall(direction) THEN
17                TransferSW(x, y, z) = true
18                transferDIR(direction,x, y, z) = true
19            END IF
20        END FOR direction
21    END IF
22 END FOR (x, y, z)

```

Zde funkce `isFluid(x, y, z)` vrací hodnotu `true`, pokud daný uzel náleží tekutině. Analogicky pak funkce `isSolid`, popř. `isWall` kontrolují, jestli uzel patří tělesu, popř. zdi. Proměnná `direction` označuje směr, ve kterém kontrolujeme danou vlastnost (z počátečního uzlu o souřadnicích `x, y, z` se tedy díváme na sousední uzly ve směru daném rychlostmi (2.3)).

Po nastavení směrů pro přestup již můžeme přejít ke kroku nastavení samotné přestupové okrajové podmínky na základě pomocných polí výše definovaných:

```

1 FOR (x, y, z) = (0, 0, 0) TO (N_x-1, N_y-1, N_z-1)
2   IF TransferFS(x, y, z) THEN
3     setMap(x, y, z, GEO_TRANSFER_FS)
4   END IF
5   IF TransferSF(x, y, z) THEN
6     setMap(x, y, z, GEO_TRANSFER_SF)
7   END IF
8   IF TransferSW(x, y, z) THEN
9     setMap(x, y, z, GEO_TRANSFER_SW)
10  END IF
11 END FOR (x, y, z)

```

Funkce `setMap()` nastavuje pro uzel `x, y, z` okrajové podmínky v poli `Map()`, v tomto případě se jedná o `GEO_TRANSFER_FS`, `GEO_TRANSFER_SF` a `GEO_TRANSFER_SW`.

Implementace jednotlivých přestupových podmínek je pak následující.

- Uvažujme, že pro uzel `x, y, z` byla v předchozí části definována podmínka `GEO_TRANSFER_FS`. Potom řešíme:

```

1 IF (Map(x, y, z) == GEO_TRANSFER_FS) THEN
2   double TEMP
3
4   TEMP.setSize(7)
5
6   FOR direction = 0 TO 6
7     FOR df_direction = 0 TO 6
8       TEMP[direction] += df(df_direction, direction)
9     END FOR df_direction
10  END FOR direction
11
12  FOR transfer_direction = 0 TO 6
13    IF transferDIR(transfer_direction, x, y, z) THEN
14      f[inverse_direction] = df(transfer_direction, x, y, z)
15                          + coef*(TEMP[direction] - T[x, y, z])
16    END IF
17  END FOR transfer_direction
18
19  computeDensityAndVelocity()
20 END IF

```

Zde nejprve alokujeme pomocné pole `TEMP`, ve kterém si postupně napočítáme teploty ve všech okolních uzlech. Toho docílíme vysčítáním distribučních funkcí `df` ve všech směrech `df_direction` dle (2.3). Ve druhé části procházíme všechny směry a v případě, že v daném směru má dojít k přestupu, tj. `transferDIR(transfer_direction, x, y, z) = true`, vy počteme hodnotu distribuční funkce `f` v uzlu `x, y, z` v opačném směru `inverse_direction` pomocí 2.6, tedy k postkolizní distribuční funkci `df(transfer_direction, x, y, z)` je přičten rozdíl dříve spočtené teploty v sousedním uzlu `TEMP[direction]` a teploty v současném uzlu `T[x, y, z]` vynásobený koeficientem přestupu `coef`. Posledním krokem je výpočet celkové teploty v daném uzlu, což je zajištěno funkcí `computeDensityAndVelocity()`.

- V případě, že uzel x, y, z byl označen podmínkou `GEO_TRANSFER_SF`, je implementace analogická.
- V případě `GEO_TRANSFER_SW` je implementovaná podmínka obdobou bounce-back okrajové podmínky (2.28) [16]:

```

1 IF(Map(x, y, z) == GEO_TRANSFER_SW) THEN
2   FOR direction = 0 TO 6
3     IF transferDIR(direction, x, y, z) THEN
4       f[inverse_direction] = df(direction, x, y, z)
5     END IF
6   END FOR direction
7
8   computeDensityAndVelocity();
9 END IF

```

Pokud překážka sousedí přímo se zdí, stává se z přestupové okrajové podmínky podmínka odrazová. To znamená, že distribuční funkci `f[inverse_direction]` nastavíme na hodnotu postkolizní distribuční funkce `df(direction, x, y, z)`.

3.2.1 Poznámka k implementaci přestupové okrajové podmínky

Při implementaci přestupové okrajové podmínky došlo k odhalení chyby, kvůli které teplota unikala do okolí i při nulovém koeficientu přestupu. Po lokalizaci chyby bylo zjištěno, že problém nastává v situaci, kdy dojde ke kontaktu stěn oblasti s překážkou, tj. $\exists k \in \{0, 1, 2, \dots, 6\}$ takové, že

$$g(\mathbf{x}_b + \xi_k \Delta t, t) = g(\mathbf{x}_w, t), \quad (3.2)$$

pro nějaké uzly \mathbf{x}_b a \mathbf{x}_w označující po řadě uzel tělesa a uzel stěny.

Pro vyřešení této chyby se nakonec ukázalo nutné do přestupové podmínky zahrnout ještě i tento případ, tedy situaci, kdy se uzly tělesa nachází v kontaktu s uzlem zdi.

Kapitola 4

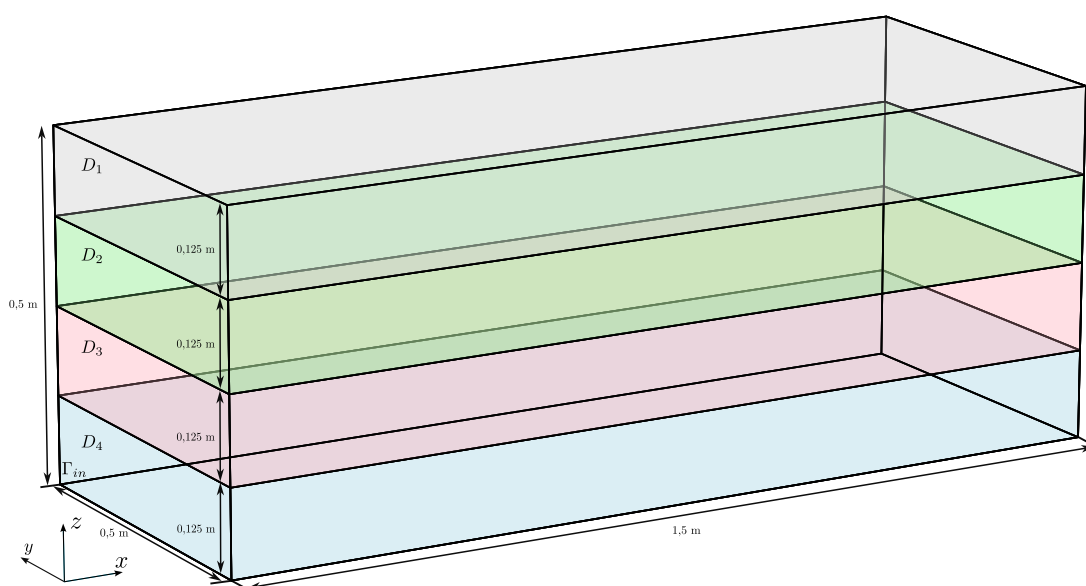
Výsledky

Tato kapitola shrnuje výsledky použití mřížkové Boltzmannovy metody popsané v kapitole 2 a implementované v kapitole 3 na matematický model, který byl popsán v kapitole 1.

První sekce bude zaměřena na diskuzi testování implementované prostorově proměnlivé difuze. Ve druhé a třetí části blíže zaměříme na otestování zavedených numerických schémat na testovací úloze. Nejprve budeme testovat vlastnosti přestupové okrajové podmínky a následně prozkoumáme numerické chyby v ADR schématu. Poslední sekce bude věnována přípravě simulace pro experiment CUBI a zkoumání vlastností turbulentního proudění.

4.1 Implementace prostorově proměnlivé difuze

V této sekci krátce shrneme výsledky aplikace různých difuzních koeficientů na neizotermální proudění. Budeme uvažovat kanál ve tvaru kvádru. Tento kanál rozdělíme podél roviny xz na čtyři části za pomoci pevné zdi. Na vstupu uvažujeme konstantní rychlost s hodnotou $u_{in} = 2 \text{ m s}^{-1}$. V každé části pak předepíšeme jiný difuzní koeficient D_i pro $i \in \{1, 2, 3, 4\}$ a budeme pozorovat vliv na šíření teploty v jednotlivých částech.



Obrázek 4.1: Schéma výpočetní oblasti pro úlohu 4.1.

Úloha 4.1

Parametry úlohy:

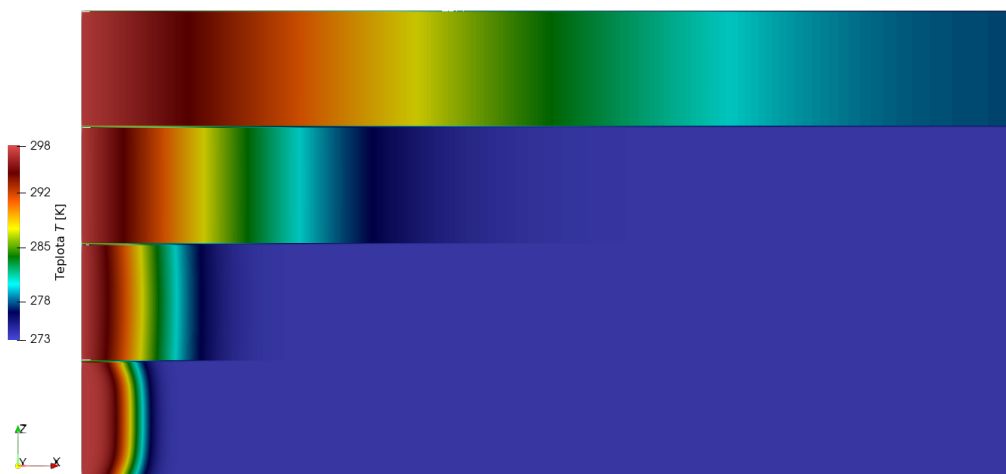
- $\Omega = (0 \text{ m}; 1,0 \text{ m}) \times (0 \text{ m}; 0,5 \text{ m}) \times (0 \text{ m}; 0,5 \text{ m})$,
- $\mathcal{I} = \langle 0 \text{ s}; 0,1 \text{ s} \rangle$,
- $\nu = 1,552 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$,
- $u_{in} = 2 \text{ m s}^{-1}$,
- $T_{in} = 298 \text{ K}$,
- $T_{ini,a} = 273 \text{ K}$,
- $D_i = 2,239 \cdot 10^{-i} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \quad i \in \{1, 2, 3, 4\}$,
- pro $l_0 = 0,5 \text{ m}$ a $u_0 = u_{in}$ dostáváme dle (1.11) $Re \approx 65\,000$.

Počáteční a okrajové podmínky:

- V $\bar{\Omega}$ nastavíme počáteční podmínky dle sekcí 2.3.1 a 2.4.1.
- Na části hranice $\hat{\Gamma}_{in}$ zvolíme vstupní okrajové podmínky popsané v sekcích 2.3.1 a 2.4.1.
- Pro $\hat{\Gamma}_{out}$ volíme odtokové podmínky dle sekcí 2.3.1 a 2.4.1.
- Na $\hat{\Gamma}_w$ použijeme bounce-back okrajové podmínky ze sekcí 2.3.1 a 2.4.1.
- Pro hranice mezi oblastmi předepíšeme bounce-back okrajové podmínky ze sekcí 2.3.1 a 2.4.1.

Parametry LBM:

- $N_x \times N_y \times N_z = 768 \times 384 \times 384$,
- $\nu' = 10^{-6}$, odpovídá $\Delta t \approx 10^{-7} \text{ s}$.



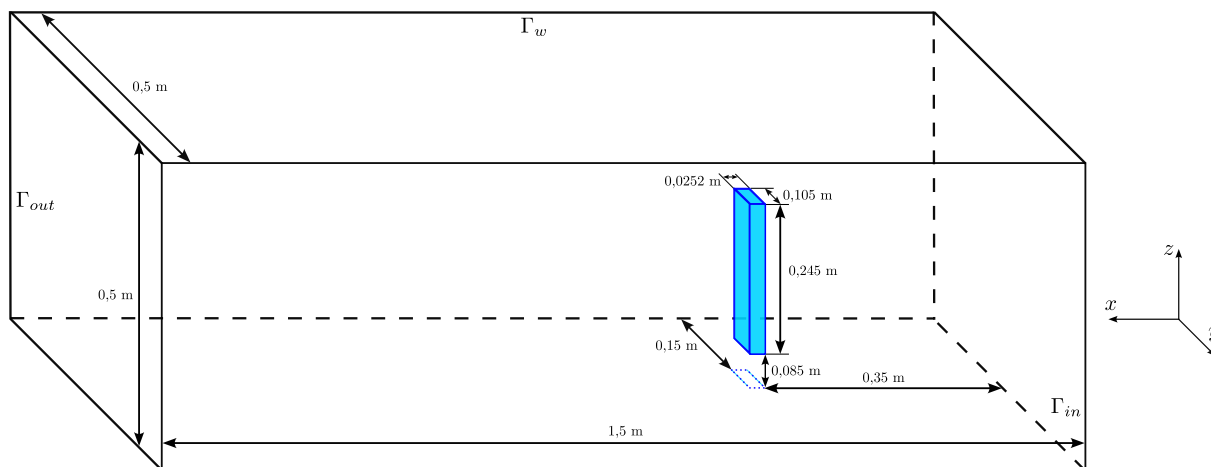
Obrázek 4.2: Průřez výpočetní oblasti znázorňující čtyři oddělené části oblasti s rozdílným difuzním koeficientem D_i pro $i \in \{1, 2, 3, 4\}$ v čase $t = 0,05$ s.

4.2 Testování přestupové okrajové podmínky

V této sekci bude cílem otestovat implementovanou přestupovou okrajovou podmínku definovanou v sekci 2.6.

Budeme uvažovat 3D výpočetní oblast ve tvaru kvádru $\Omega = (0 \text{ m}; 1,5 \text{ m}) \times (0 \text{ m}; 0,5 \text{ m}) \times (0 \text{ m}; 0,5 \text{ m})$. Do ní bude pevně umístěno těleso ve tvaru kvádru Ω_b o rozměrech $0,0252 \text{ m} \times 0,105 \text{ m} \times 0,245 \text{ m}$ s počáteční teplotou $T_{ini,b}$, viz obrázek 4.3.

Při simulacích budeme uvažovat různé hodnoty jak pro koeficient přestupu ω , tak i pro velikost vstupní rychlosti u_{in} . Dále uvažujeme i různé prostorové kroky h . Předmětem zájmu pro nás bude průměrná teplota tělesa Ω_b .



Obrázek 4.3: Schéma výpočetní oblasti pro úlohu 4.2.1.

4.2.1 Formulace úlohy

Úloha 4.2

Parametry úlohy:

- $\Omega = (0 \text{ m}; 1,5 \text{ m}) \times (0 \text{ m}; 0,5 \text{ m}) \times (0 \text{ m}; 0,5 \text{ m})$,
- $\mathcal{I} = \langle 0 \text{ s}; 0,1 \text{ s} \rangle$,
- $\nu = 1,552 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$,
- $u_{in} \in \{1, 4, 8, 12, 16, 20\} \text{ m s}^{-1}$,
- $T_{in} = 298 \text{ K}$,
- $T_{ini,a} = 298 \text{ K}$,
- $T_{ini,b} = 348 \text{ K}$,
- $D_a = 2,239 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$,
- $D_b = 9,700 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$,
- $\omega = 0,05j \text{ kg s}^{-3} \text{ K}^{-1} \quad \forall j \in \{1, 2, \dots, 20\}$,
- pro $l_0 = 0,5 \text{ m}$ a $u_0 = u_{in}$ dostáváme dle (1.11) $\text{Re} \in \langle 32 \text{ 500}; 650 \text{ 000} \rangle$.

Počáteční a okrajové podmínky:

- V $\bar{\Omega}$ nastavíme počáteční podmínky dle sekcí 2.3.1 a 2.4.1.
- Na části hranice $\hat{\Gamma}_{in}$ zvolíme vstupní okrajové podmínky popsané v sekcích 2.3.1 a 2.4.1.
- Pro $\hat{\Gamma}_{out}$ volíme odtokové podmínky dle sekcí 2.3.1 a 2.4.1.
- Na $\hat{\Gamma}_w$ použijeme bounce-back okrajové podmínky ze sekcí 2.3.1 a 2.4.1.
- Pro těleso $\bar{\Omega}_b$ volíme následující okrajové podmínky:
 - Pro NSR schéma volíme na $\bar{\Omega}_b$ bounce-back okrajovou podmínku dle sekce 2.3.1,
 - V ADR schématu použijeme na $\hat{\Gamma}_{b,7}$ přestupovou podmínku, viz sekce 2.4.1.

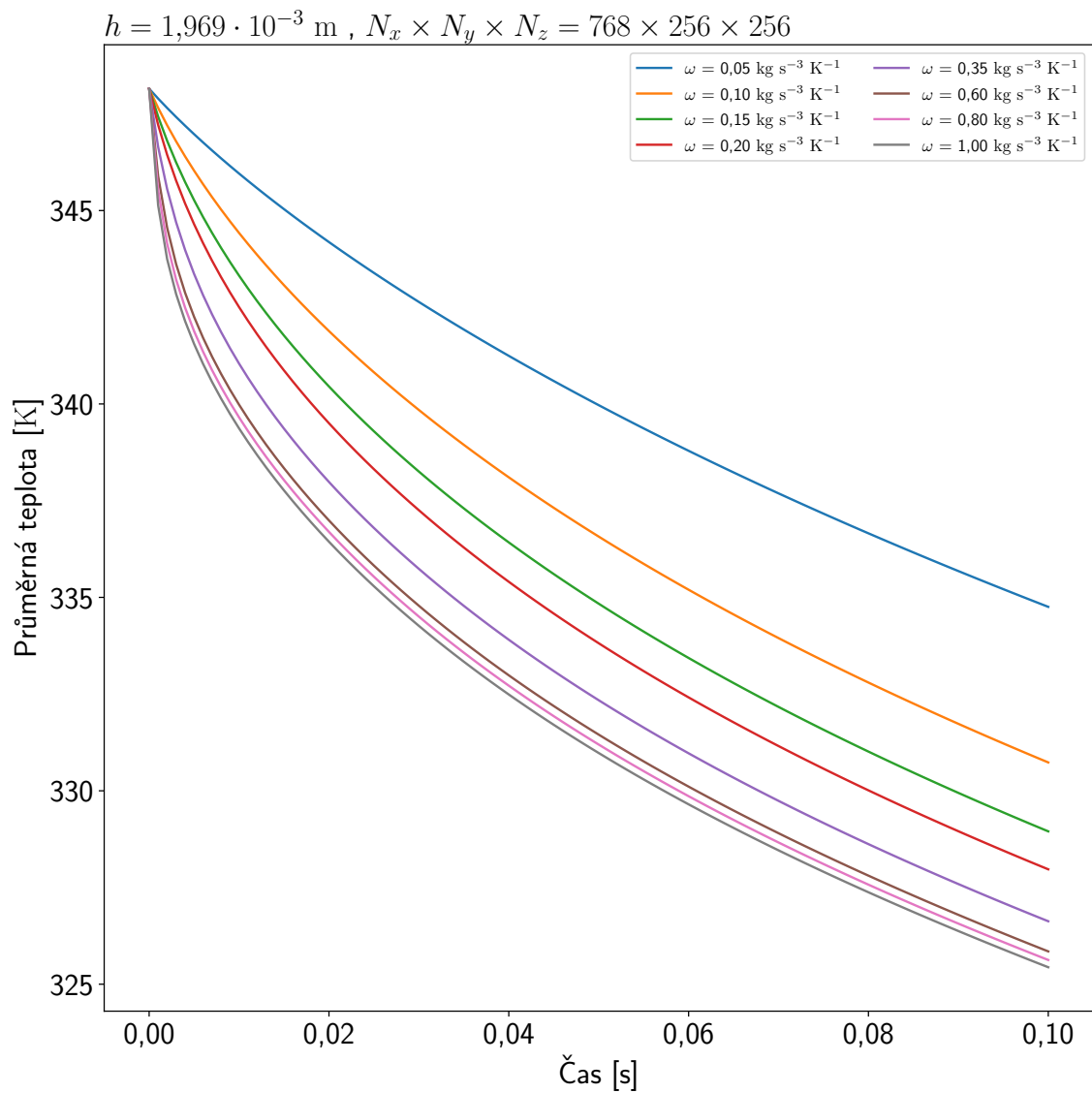
Parametry LBM:

- $N_x \times N_y \times N_z \in \{96i \times 32i \times 32i \mid i \in \{3, 4, \dots, 8\}\}$,
- $\nu' = 10^{-6}$, odpovídá $\Delta t \approx 10^{-7} \text{ s}$.

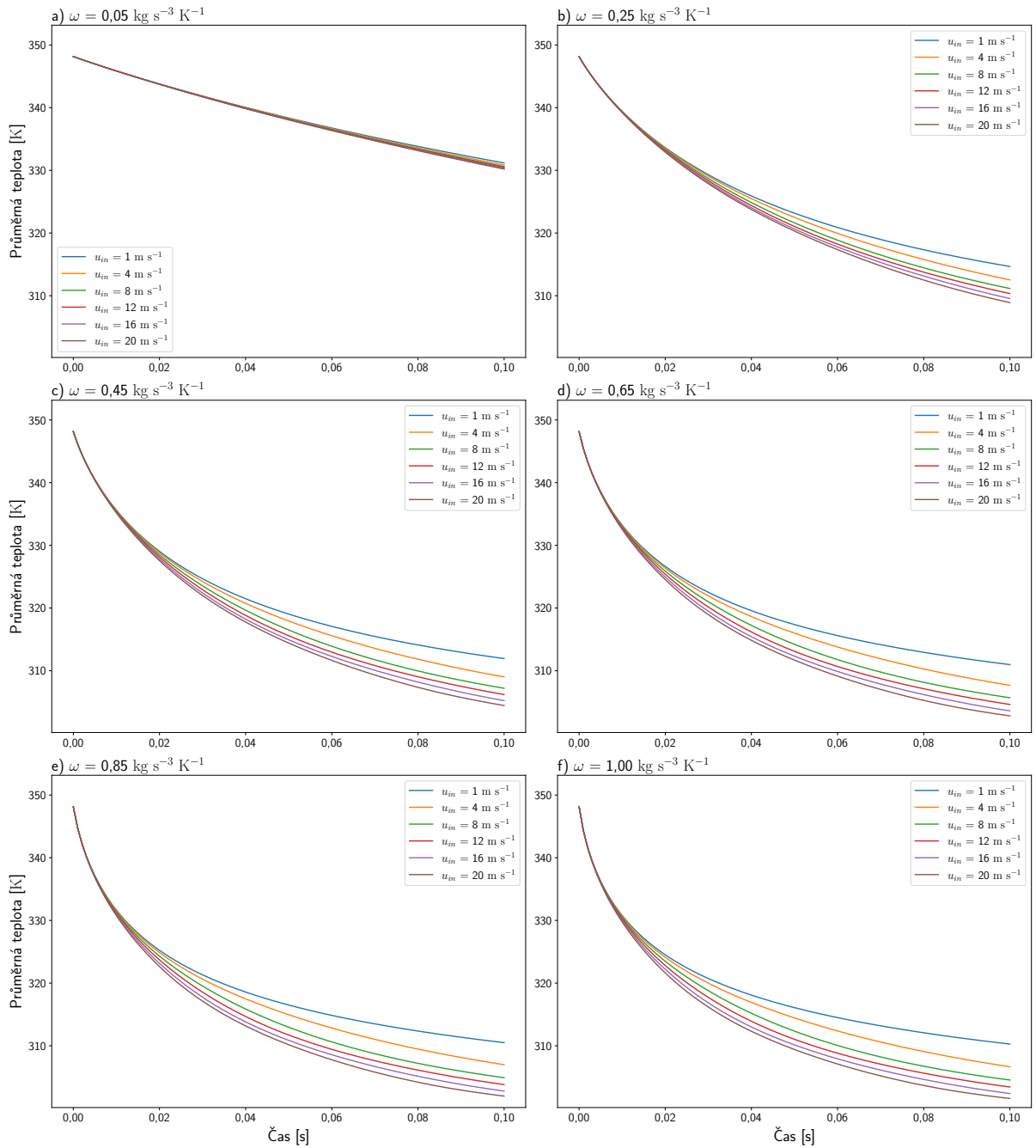
4.2.2 Výsledky úlohy

Úloha 4.2 simuluje nastavení přestupové okrajové podmínky v modelu. Předmětem zkoumání je zde vývoj průměrné teploty T_{mean} v čase t . Na grafu 4.4 pozorujeme závislost průměrné teploty pro různé koeficienty přestupu ω a vstupní rychlost $u_{in} = 1 \text{ m s}^{-1}$. Z grafu je zřejmé, že se zvyšující se hodnotou ω se účinnost chlazení zvyšuje až do určitého limitního stavu. Na obrázku 4.6 je tato situace vyobrazena pro různé hodnoty počáteční rychlosti u_{in} a pro vybrané koeficienty přestupu ω . Lze nahlédnout, že i pro vyšší hodnoty vstupní rychlosti průměrné teploty konvergují.

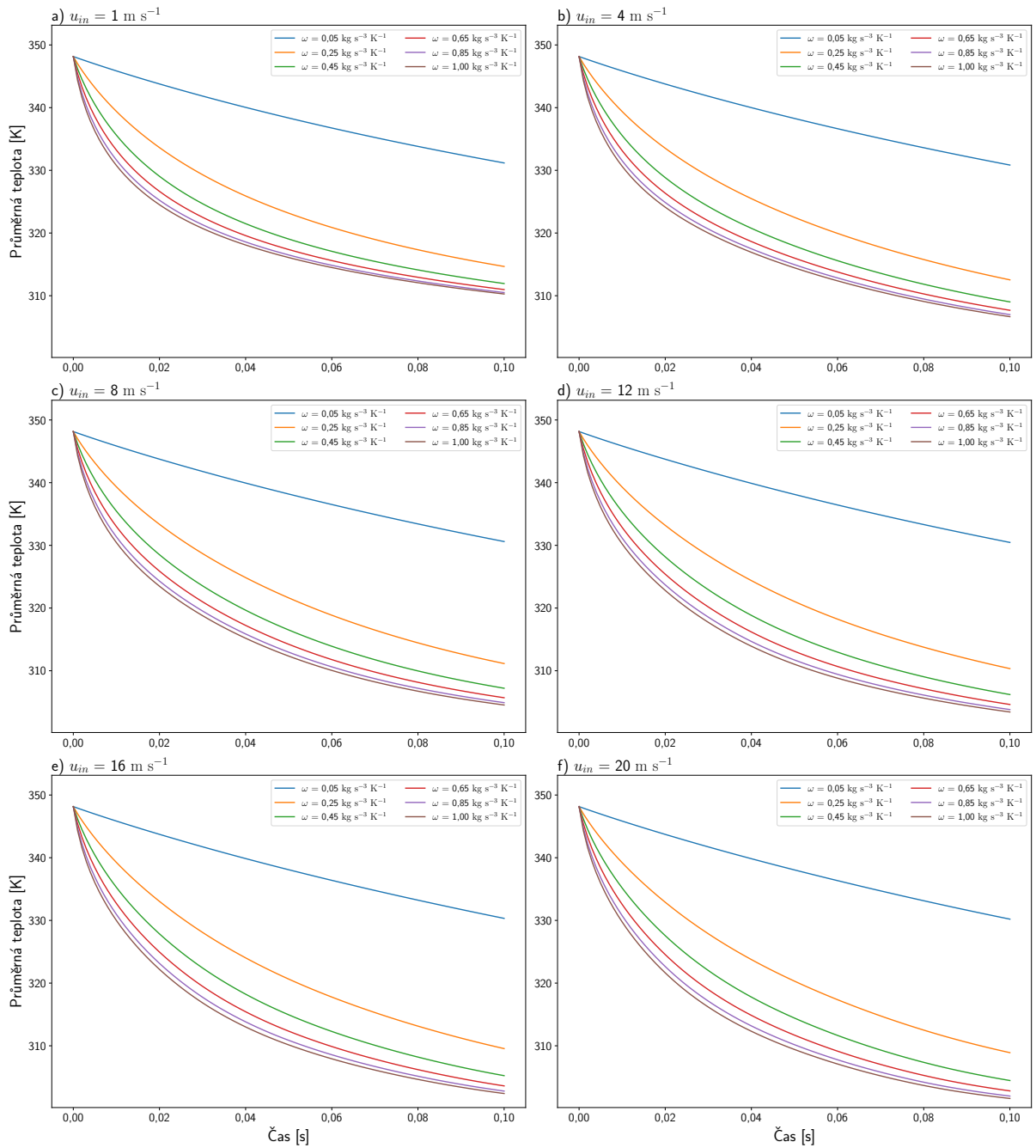
Z obrázku 4.5 lze vyčíst, že pro malé koeficienty přestupu téměř nezávisí na velikosti vstupní rychlosti. Pro hodnoty ω blízké 1 jsou již rozdíly mezi průměrnými teplotami nezanedbatelné, ale i přesto tyto rozdíly nejsou tak markantní v porovnání s rychlostmi na vstupu.



Obrázek 4.4: Graf závislosti průměrné teploty T_{mean} tělesa Ω_b na čase t pro úlohu 4.2 a pro různé hodnoty koeficientu přestupu ω , prostorový krok $h = 1,969 \cdot 10^{-3} \text{ m}$ odpovídající mřížce $768 \times 256 \times 256$, časovému kroku $\Delta t = 2,497 \cdot 10^{-7} \text{ s}$ a velikosti vstupní rychlosti $u_{in} = 1 \text{ m s}^{-1}$.



Obrázek 4.5: Grafy zobrazující závislost průměrné teploty T_{mean} tělesa Ω_b na čase t pro úlohu 4.2 a pro různé velikosti vstupní rychlosti u_{in} . Vyobrazeny jsou grafy pro různé volby koeficientu přestupu ω . Ve všech grafech uvažujeme prostorový krok $h = 1,969 \cdot 10^{-3}$ m odpovídající mřížce $768 \times 256 \times 256$ a časovému kroku $\Delta t = 1,015 \cdot 10^{-7}$ s.



Obrázek 4.6: Grafy zobrazující závislost průměrné teploty T_{mean} tělesa Ω_b na čase t pro úlohu 4.2 a pro různé hodnoty koeficientu přestupu ω . Vyobrazeny jsou grafy pro různé hodnoty vstupní rychlosti u_{in} . Ve všech grafech uvažujeme prostorový krok $h = 1,969 \cdot 10^{-3}$ m odpovídající mřížce $768 \times 256 \times 256$ a časovému kroku $\Delta t = 1,015 \cdot 10^{-7}$ s.

4.3 Zkoumání chyby numerické aproximace teploty

V této sekci budeme zkoumat chování teploty v oblasti okolo překážky při použití přestupové okrajové podmínky popsané v sekci 2.6. V průběhu výzkumu byly pozorovány numerické chyby v oblasti náběhové hrany překážky. Tyto chyby se projeví nesprávnými hodnotami teploty. V rámci této sekce se ve výpočtech zaměříme na zkoumání těchto numerických chyb v teplotě.

Pro potřeby této úlohy zadefinujeme maximální rychlost v oblasti u_{max} , kterou získáme z následujícího vztahu

$$u_{max} = \max \left\{ |\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)| \mid \forall (\mathbf{x}, t) \in \hat{\Omega} \setminus \overline{\hat{\Omega}}_b \times \hat{\mathcal{I}} \right\}. \quad (4.1)$$

Při simulacích budeme hledat minimální teplotu T_{min}

$$T_{min} = \min \left\{ T(\mathbf{x}, t) \mid \forall (\mathbf{x}, t) \in \hat{\Omega} \setminus \overline{\hat{\Omega}}_b \times \hat{\mathcal{I}} \right\} \quad (4.2)$$

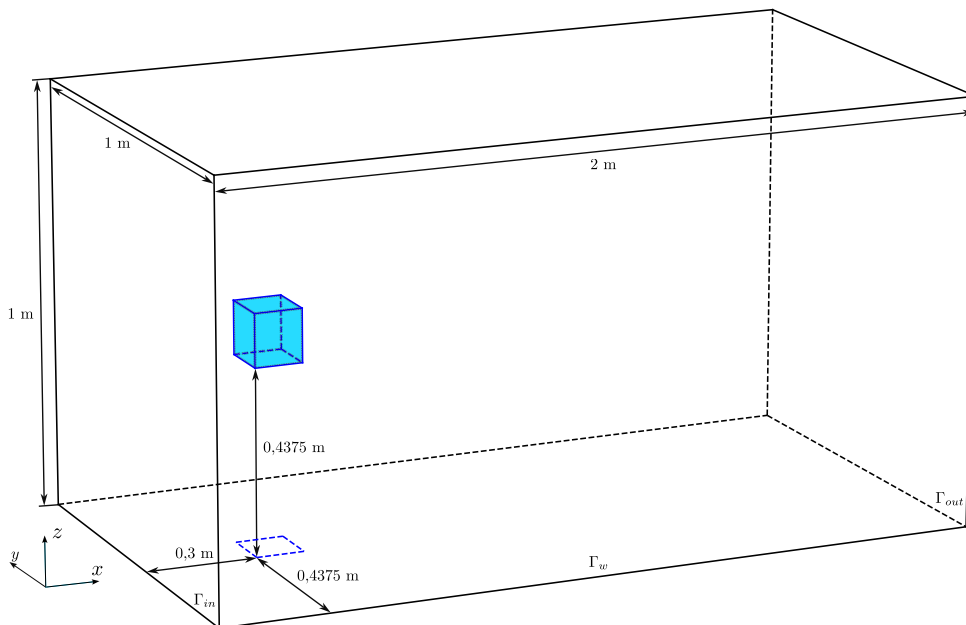
a maximální teplotu T_{max}

$$T_{max} = \max \left\{ T(\mathbf{x}, t) \mid \forall (\mathbf{x}, t) \in \hat{\Omega} \setminus \overline{\hat{\Omega}}_b \times \hat{\mathcal{I}} \right\} \quad (4.3)$$

v celé oblasti a přes celý časový interval. Na základě Péceletova čísla (1.13) budeme v rámci této sekce porovnávat jednotlivé simulace mezi sebou. Konkrétněji nás bude zajímat vliv hodnoty Pe na maximální a minimální teplotu v oblasti. Dále se budeme dívat také na hodnoty teplot pro zjemňující se prostorový, popř. časový krok.

Jako překážku zvolíme krychli o hraně 0,125 m, kterou umístíme dle schématu na obrázku 4.7. Počáteční podmínku pro teplotu zvolíme $T_{ini,a} = T_{ini,b} = 280$ K a stejně zvolíme i teplotu na vstupu oblasti $\hat{\Gamma}_{in}$, tj. $T_{in} = 280$ K.

Nakonec ještě využijeme LBM-MHFEM schéma, abychom na jednom vybraném nastavení úlohy porovnali výsledky s naším LBM-LBM schématem. Poznamenejme, že zmiňované LBM-MHFEM schéma bylo již validováno na reálných datech, viz [7]. V rámci této sekce budeme využívat LBM-MHFEM schéma jako zdroj pro referenční výsledky.



Obrázek 4.7: Schéma výpočetní oblasti pro úlohu 4.3.

4.3.1 Formulace úlohy

Úloha 4.3

Parametry úlohy:

- $\Omega = (0 \text{ m}; 2 \text{ m}) \times (0 \text{ m}; 1 \text{ m}) \times (0 \text{ m}; 1 \text{ m})$,
- $\mathcal{I} = \langle 0 \text{ s}; \frac{4}{u_{in}} \text{ s} \rangle$,
- $\nu = 1,552 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$,
- $T_{in} = 280 \text{ K}$,
- $T_{ini,a} = 280 \text{ K}$,
- $u_{in} \in \{1; 0,9; 0,8; \dots; 0,1; 0,09; 0,08; \dots; 0,01; 0,009; 0,008; \dots; 0,001\} \text{ m s}^{-1}$,
- pro $l_0 = 1 \text{ m}$ a $u_0 = u_{in}$ dostáváme dle (1.11) $Re \in \langle 65; 65\,000 \rangle$.
- $T_{ini,b} = 280 \text{ K}$,
- $D_a \in \{2,239 \cdot 10^{-i} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \mid i \in \{3,4,5\}\}$
- $D_b \in \{9,700 \cdot 10^{-i} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \mid i \in \{3,4,5\}\}$
- $\omega = 0 \text{ kg s}^{-3} \text{ K}^{-1}$,

Počáteční a okrajové podmínky:

- V $\bar{\Omega}$ nastavíme počáteční podmínky dle sekcí 2.3.1 a 2.4.1.
- Na části hranice $\hat{\Gamma}_{in}$ zvolíme vstupní okrajové podmínky popsané v sekcích 2.3.1 a 2.4.1.
- Pro $\hat{\Gamma}_{out}$ volíme odtokové podmínky dle sekcí 2.3.1 a 2.4.1.
- Na $\hat{\Gamma}_w$ použijeme bounce-back okrajové podmínky ze sekcí 2.3.1 a 2.4.1.
- Pro těleso $\bar{\Omega}_b$ volíme následující okrajové podmínky:
 - Pro NSR schéma volíme na $\bar{\Omega}_b$ bounce-back podmínku dle sekce 2.3.1,
 - V ADR schématu použijeme na $\hat{\Gamma}_{b,7}$ přestupovou podmínku, viz sekce 2.4.1.

Parametry LBM:

- $N_x \times N_y \times N_z \in \{64i \times 32i \times 32i \mid i \in \{3, 4, \dots, 14\}\}$,
- $\nu' \in \{10^{-4}; 5 \cdot 10^{-5}; 2,5 \cdot 10^{-5}\}$, odpovídá $\Delta t \approx 10^{-5} \text{ s}$.

4.3.2 Výsledky úlohy

Úloha 4.3 simuluje nastavení přestupové okrajové podmínky v modelu pro různé hodnoty Péceletových čísel, prostorového a časového kroku. Úloha je motivována numerickými chybami vznikajícími v okolí překážky. Vizualizaci těchto chyb lze nalézt na řezu výpočetní oblastí na obrázku 4.9. Předmětem zkoumání je zde vývoj minimální teploty T_{min} a maximální teploty T_{max} v závislosti na zmenšujícím se Péceletově čísle Pe popř. prostorovém kroku h .

Na grafu na obrázku 4.8 lze nahlédnout na závislost maximální velikosti rychlosti u_{max} na hodnotě vstupní rychlosti u_{in} .

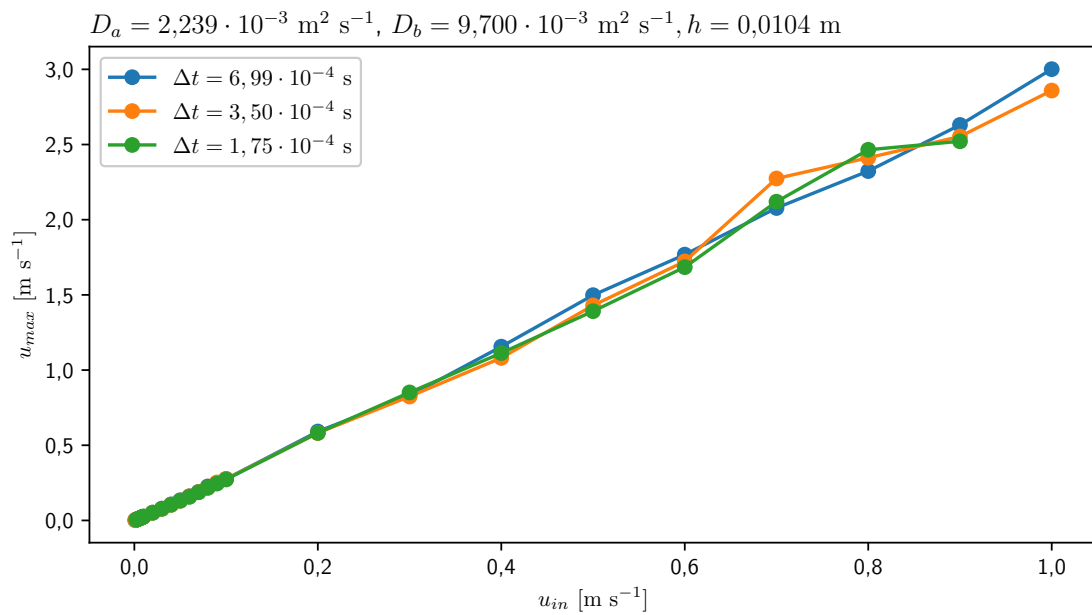
Z grafů na obrázku 4.10 pro difuzní koeficienty $D_a = 2,239 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ a $D_b = 9,700 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ a prostorový krok $h = 0,0104 \text{ m}$ je patrné, že se zmenšující se hodnotou Péceletova čísla se zmenšují také odchylky minimální teploty T_{min} a maximální teploty T_{max} od hodnoty počáteční teploty $T_{ini} = 280 \text{ K}$.

Grafy na obrázku 4.11 ukazují vývoj hodnot minimální teploty T_{min} a maximální teploty T_{max} v oblasti $\hat{\Omega}$ pro úlohu 4.3 v závislosti na hodnotě velikosti vstupní rychlosti u_{in} . Grafy obsahují výsledky pro různé hodnoty difuzních koeficientů D_a, D_b a pro časové kroky $\Delta t \in \{6,99 \cdot 10^{-4} \text{ s}; 3,50 \cdot 10^{-4} \text{ s}\}$. V tabulkách 4.1 a 4.2 nalezneme hodnoty minimální, popř. maximální teploty v oblasti v závislosti na vybraných hodnotách vstupní rychlosti. Pro každou hodnotu je zde uvedena také procentuální odchylka od vstupní teploty $T_{in} = 280 \text{ K}$. Pro zmenšující se hodnoty difuzních koeficientů D_a a D_b v grafech na obrázku 4.11 a tabulkách 4.1 a 4.2 chybí několik výsledků – to proto, že úloha byla pro takové nastavení parametrů příliš nestabilní a výpočet selhal. Z grafů na obrázku 4.11 a tabulek 4.1 až 4.2 lze vyčíst, že pro nejmenší hodnoty difuzních koeficientů $D_a = 2,239 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ a $D_b = 9,700 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ je ADR schéma nejméně stabilní. Z dat je ale také patrné, že pro menší časový krok jsou odchylky od počáteční teploty menší než pro větší časový krok, např. maximální teplota v oblasti pro vstupní rychlost $u_{in} = 0,2 \text{ m s}^{-1}$ je téměř o 57 % vyšší (pro časový krok $\Delta t = 6,99 \cdot 10^{-4} \text{ s}$) a o více než 27 % vyšší (pro časový krok $\Delta t = 3,50 \cdot 10^{-4} \text{ s}$) než počáteční hodnota teploty.

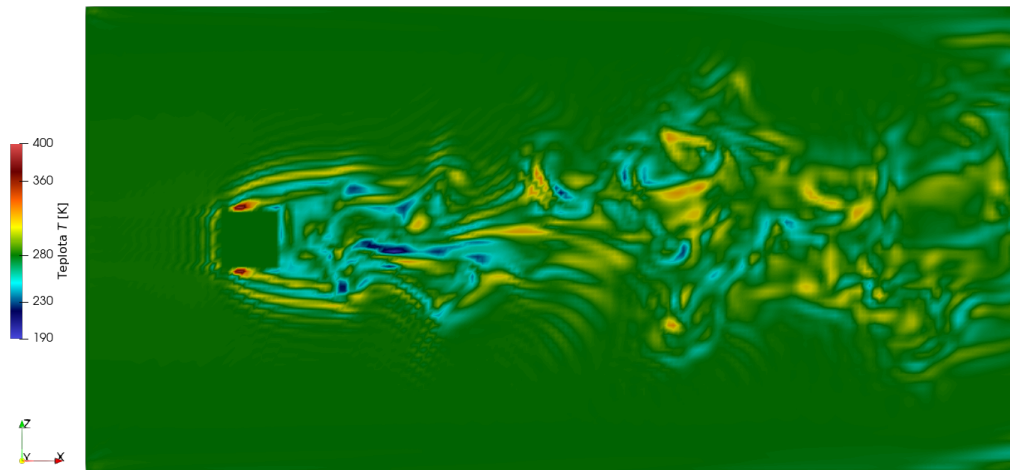
Graf na obrázku 4.12 zobrazuje hodnoty minimální teploty T_{min} a maximální teploty T_{max} v oblasti $\hat{\Omega}$ pro úlohu 4.3 v závislosti na hodnotě prostorového kroku h . Výsledky jsou vyobrazeny pro hodnoty difuzních koeficientů $D_a = 2,239 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ a $D_b = 9,700 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$. Graf obsahuje výsledky pro dva různé parametry $\nu' \in \{10^{-4}, 5 \cdot 10^{-5}\}$. Tyto hodnoty parametru spolu s prostorovým krokem přímo ovlivňují hodnotu časového kroku pomocí vztahu (2.46), tj. $1,60 \cdot 10^{-5} \text{ s} \leq \Delta t \leq 3,50 \cdot 10^{-4} \text{ s}$. Z grafu je zřejmé, že pro zjemňující se prostorový krok h jsou hodnoty minimální T_{min} a maximální T_{max} teploty blíže k počáteční teplotě $T_{ini} = 280 \text{ K}$.

Na řezech oblasti na obrázcích 4.9 a 4.14 je patrné, že v pravé části snímků se vyskytují numerické artefakty způsobené odtokovou okrajovou podmínkou. Z tohoto důvodu je nutné při simulacích uvažovat oblast s větší délkou, aby tyto artefakty nenarušili proudění v blízkosti simulované překážky.

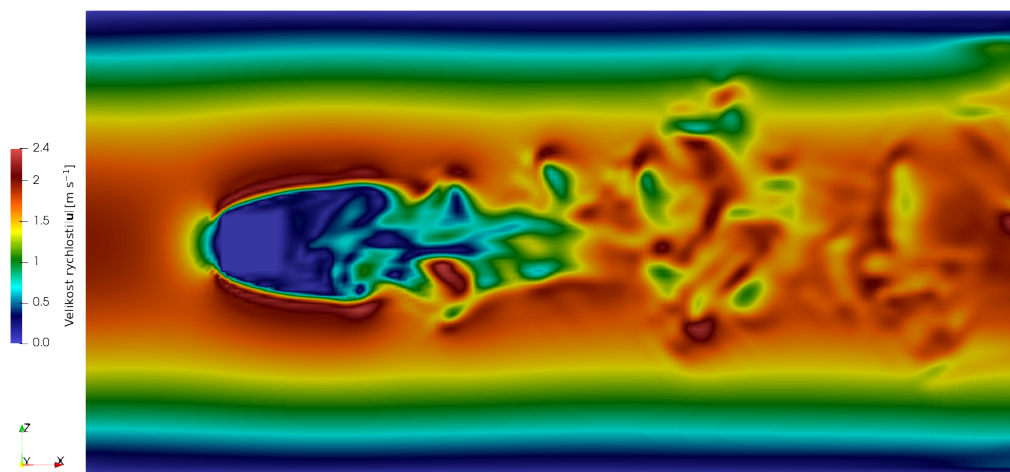
V případě simulace, která byla použita pro porovnání s řešičem *LBM-MHFEM schématu*, byla v LBM použita uniformní mřížka o rozměrech $256 \times 128 \times 128$ (více než 4 000 000 uzlů) odpovídající prostorovému kroku $h = 7,8 \cdot 10^{-3} \text{ m}$. V případě MHFEM řešiče, byla síť neuniformní s celkovým počtem 333 704 uzlů, což odpovídalo prostorovému kroku $h = 1,85 \cdot 10^{-2} \text{ m}$. Parametry simulací byly následující: vstupní rychlost $u_{in} = 1 \text{ m s}^{-1}$, časový krok $\Delta t = 3,50 \cdot 10^{-4} \text{ s}$ a difuzní koeficienty $D_a = 2,239 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ a $D_b = 9,700 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ (v případě MHFEM se simulace počítá bez překážky, tudíž D_b nenastavujeme). Z obrázku 4.14 je patrné, že výsledná teplota získaná MHFEM schématem je o několik řádů blíže k počáteční teplotě $T_{ini} = 280 \text{ K}$ než teplota získaná LBM schématem.



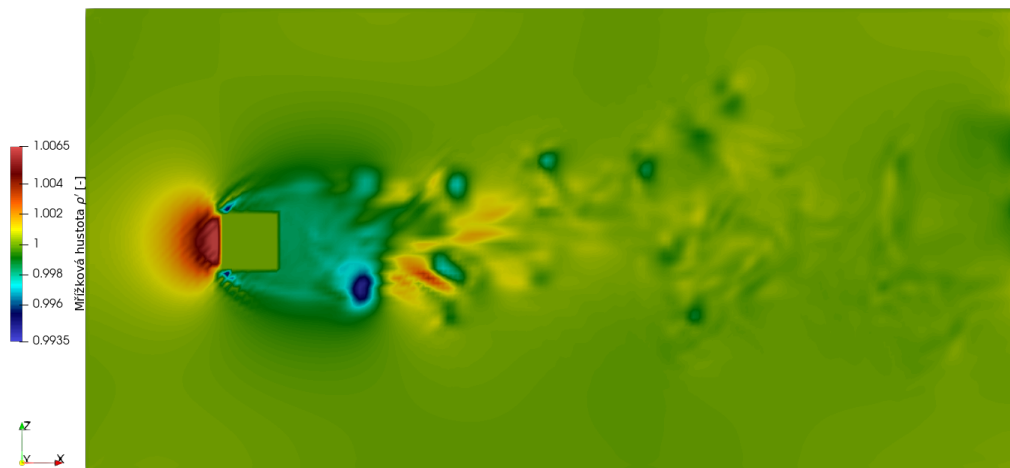
Obrázek 4.8: Grafy zobrazující závislost maximální velikosti rychlosti u_{max} na hodnotě vstupní rychlosti u_{in} pro úlohu 4.3 pro prostorový krok $h = 0,0104 \text{ m}$, hodnoty difuzních koeficientů $D_a = 2,239 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ a $D_b = 9,700 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ a časový krok $\Delta t = 6,99 \cdot 10^{-4} \text{ s}$.



(a) Rozložení teploty T .



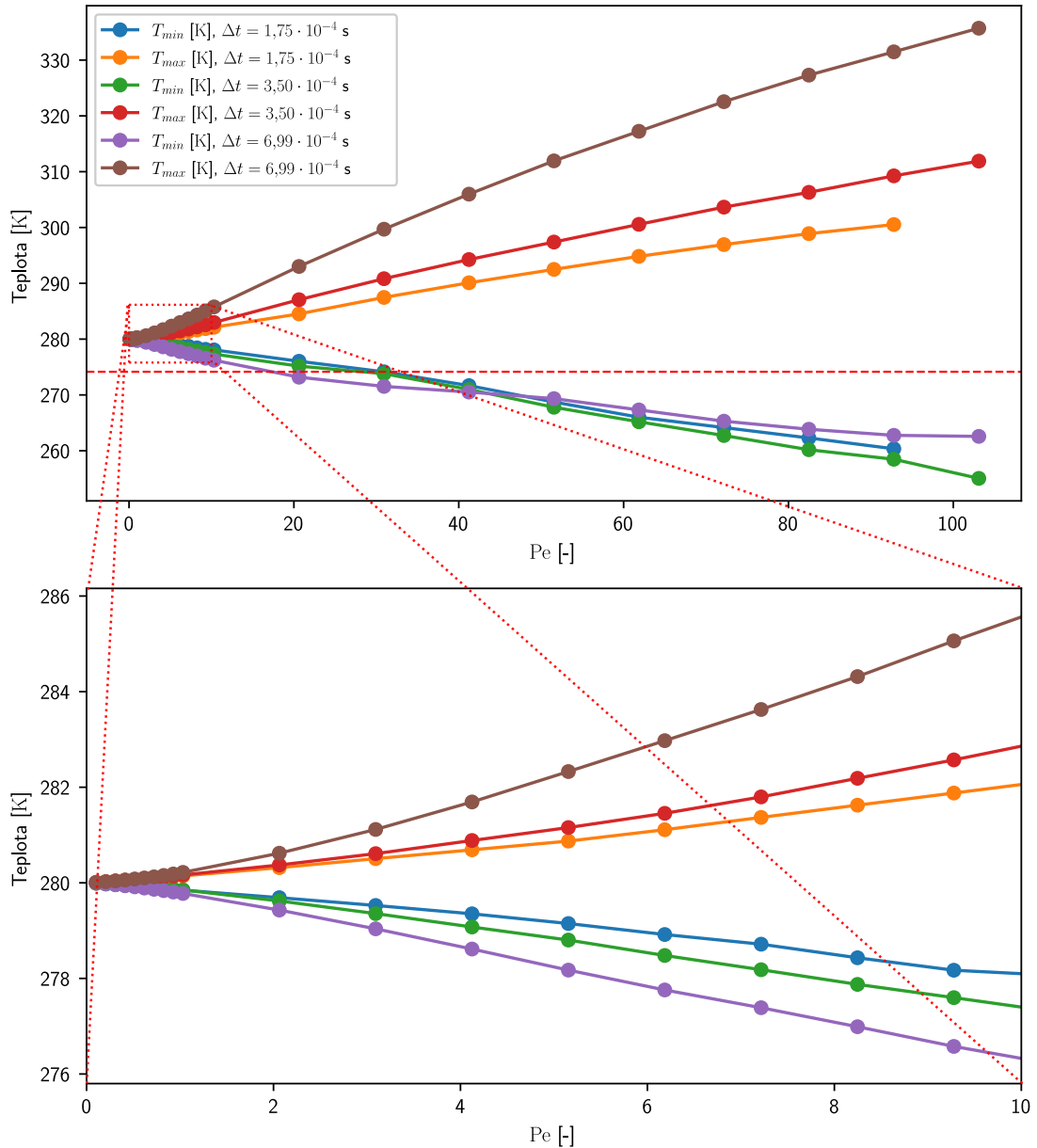
(b) Rozložení velikosti rychlosti $|\mathbf{u}|$.



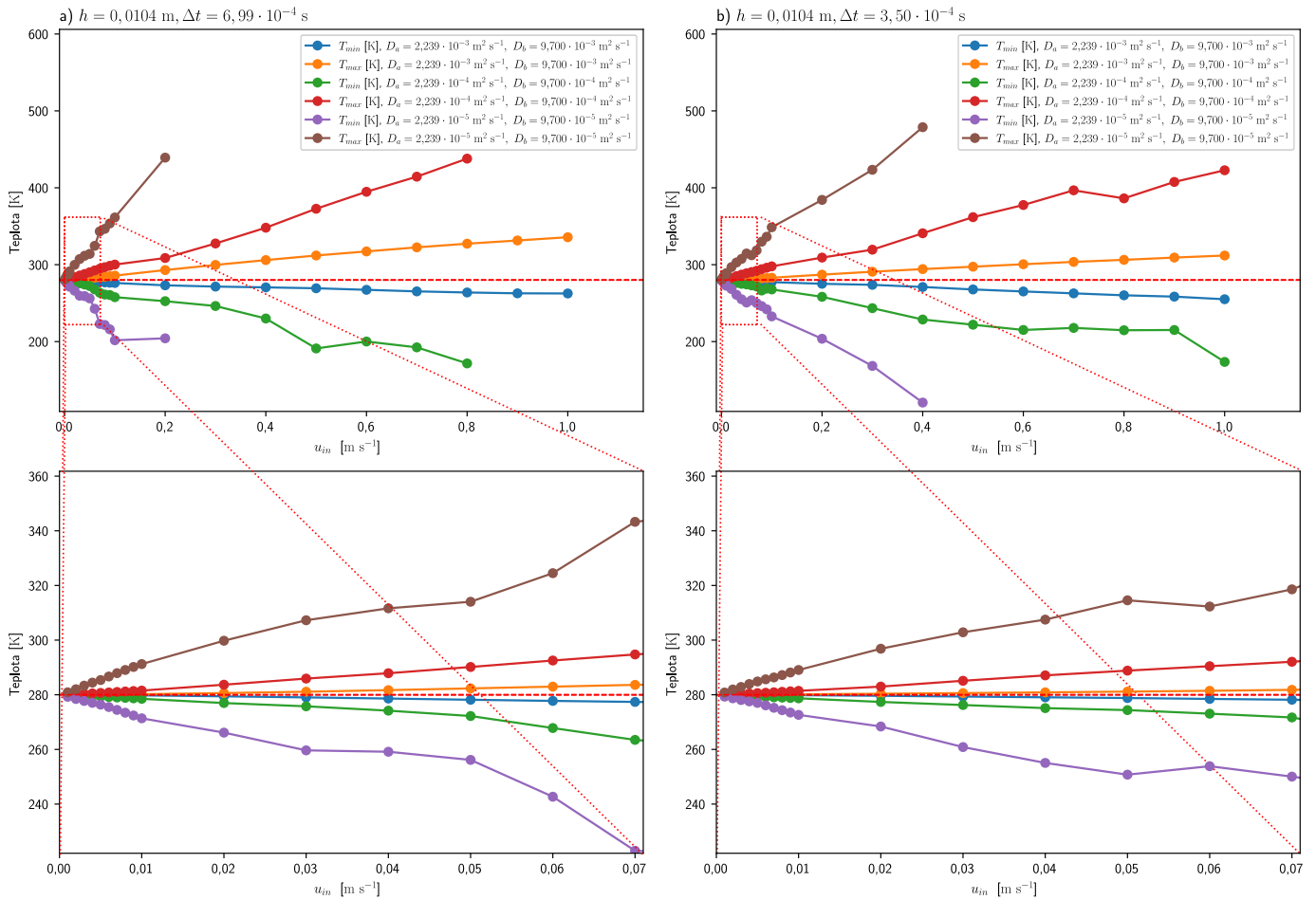
(c) Rozložení mřížkové hustoty ρ' .

Obrázek 4.9: Řez výpočetní oblasti znázorňující rozložení teploty T , velikosti rychlosti $|\mathbf{u}|$ a mřížkové hustoty ρ' pro simulaci s prostorovým krokem $h = 0,0104$ m odpovídajícím mřížce $192 \times 96 \times 96$, časovým krokem $\Delta t = 3,50 \cdot 10^{-4}$ s se vstupní rychlostí $u_{in} = 0,9$ m s $^{-1}$ a difuzní koeficienty $D_a = 2,239 \cdot 10^{-4}$ m 2 s $^{-1}$ a $D_b = 9,700 \cdot 10^{-4}$ m 2 s $^{-1}$ v čase $t = 5$ s. Jsou zde patrné výrazné odchylky od počáteční teploty $T_{ini} = 280$ K.

b) $h = 0,0104 \text{ m}$, $D_a = 2,239 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, $D_b = 9,700 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$



Obrázek 4.10: Grafy zobrazující závislost minimální a maximální teploty na Pécletově čísle Pe pro úlohu 4.3 s různými časovými kroky Δt , pro hodnoty difuzních koeficientů $D_a = 2,239 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ a $D_b = 9,700 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ a prostorový krok $h = 0,0104 \text{ m}$. Dolní graf poskytuje výřez pro hodnoty $Pe \in \langle 0, 10 \rangle$.



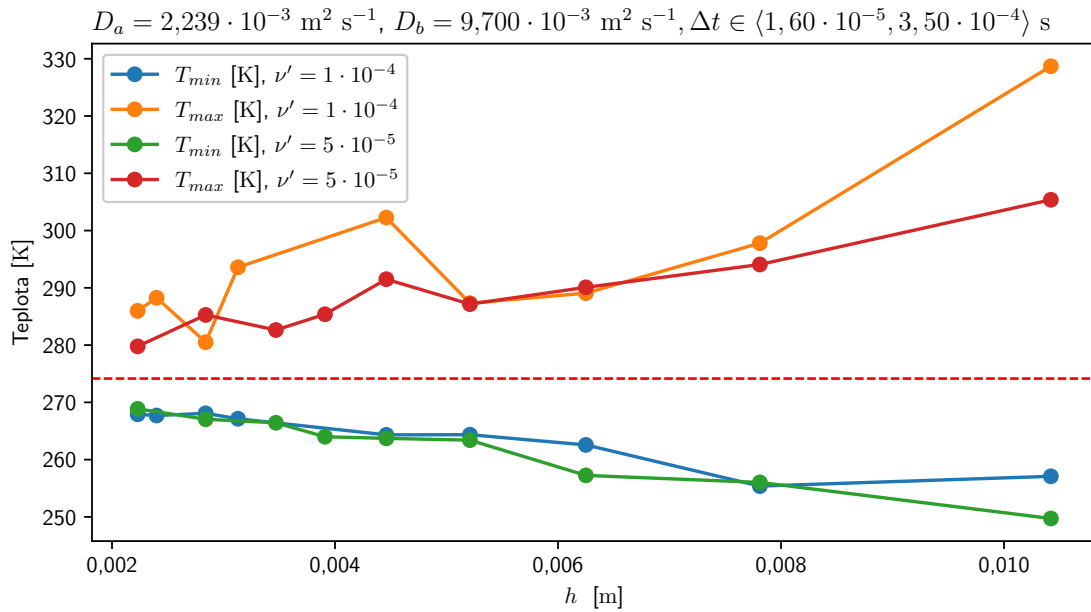
Obrázek 4.11: Grafy zobrazující závislost minimální teploty T_{min} a maximální teploty T_{max} na hodnotě velikosti vstupní rychlosti u_{in} pro úlohu 4.3 pro různé hodnoty difuzních koeficientů D_a a D_b , časový krok $\Delta t = 6,99 \cdot 10^{-4}$ s a prostorový krok $h = 0,0104$ m. Dolní grafy poskytují výřezy pro hodnoty $u_{in} \in \langle 0; 0,07 \rangle$ m s $^{-1}$.

$\Delta t = 6,99 \cdot 10^{-4} \text{ s}, h = 0,0104 \text{ m}$						
$D_a = 2,239 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$		$D_a = 2,239 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$		$D_a = 2,239 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$		
$D_b = 9,700 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$		$D_b = 9,700 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$		$D_b = 9,700 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$		
$u_{in} [\text{m s}^{-1}]$	$T_{min} [\text{K}]$	Odchylka [%]	$T_{min} [\text{K}]$	Odchylka [%]	$T_{min} [\text{K}]$	Odchylka [%]
1	262,57	6,23	–	–	–	–
0,8	263,85	5,77	171,63	38,70	–	–
0,6	267,31	4,53	200,10	28,54	–	–
0,4	270,52	3,39	230,02	17,85	–	–
0,2	273,18	2,44	252,54	9,81	204,23	27,06
0,1	276,22	1,35	257,75	7,95	201,72	27,96
0,05	278,17	0,65	272,22	2,78	256,17	8,51
0,01	279,78	$<10^{-1}$	278,52	0,53	271,38	3,08
0,005	279,92	$<10^{-2}$	279,31	0,25	276,39	1,29
0,001	279,99	$<10^{-2}$	279,89	$<10^{-2}$	279,26	0,26
$u_{in} [\text{m s}^{-1}]$	$T_{max} [\text{K}]$	Odchylka [%]	$T_{max} [\text{K}]$	Odchylka [%]	$T_{max} [\text{K}]$	Odchylka [%]
1	335,71	19,90	–	–	–	–
0,8	327,30	16,89	437,92	56,40	–	–
0,6	317,24	13,30	394,81	41,00	–	–
0,4	305,98	9,28	348,10	24,32	–	–
0,2	293,02	4,65	308,69	10,25	439,21	56,86
0,1	285,78	2,06	300,14	7,19	361,40	29,07
0,05	282,33	0,83	290,17	3,63	314,04	12,16
0,01	280,22	$<10^{-1}$	281,53	0,55	291,23	4,01
0,005	280,08	$<10^{-2}$	280,68	0,24	285,39	1,92
0,001	280,01	$<10^{-2}$	280,10	$<10^{-2}$	280,90	0,32

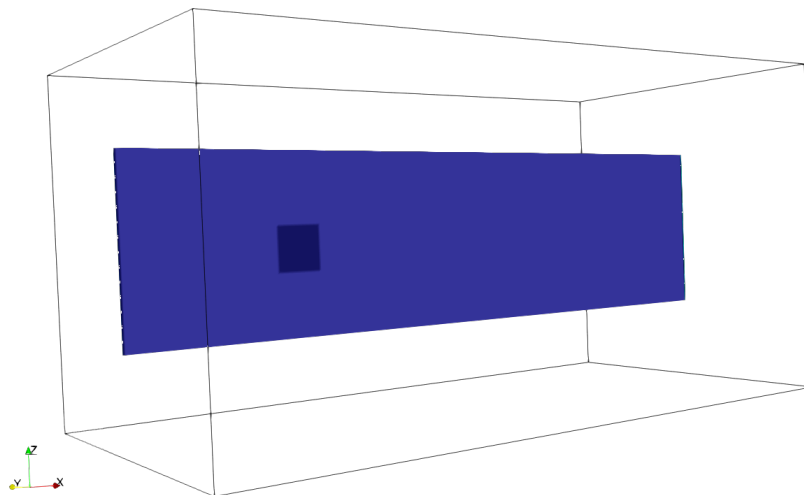
Tabulka 4.1: Tabulka zobrazující hodnoty minimální teploty T_{min} a maximální teploty T_{max} spolu s procentuální odchylkou od počáteční teploty $T_{ini} = 280 \text{ K}$ pro data z grafu na obrázku 4.11 a). Hodnoty jsou vyobrazeny pro různé hodnoty difuzních koeficientů D_a a D_b , časový krok $\Delta t = 6,99 \cdot 10^{-4} \text{ s}$ a prostorový krok $h = 0,0104 \text{ m}$.

$\Delta t = 3,50 \cdot 10^{-4} \text{ s}, h = 0,0104 \text{ m}$						
$D_a = 2,239 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ $D_b = 9,700 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$		$D_a = 2,239 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ $D_b = 9,700 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$		$D_a = 2,239 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ $D_b = 9,700 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$		
$u_{in} [\text{m s}^{-1}]$	$T_{min} [\text{K}]$	Odchylka [%]	$T_{min} [\text{K}]$	Odchylka [%]	$T_{min} [\text{K}]$	Odchylka [%]
1	255,05	8,91	173,58	38,01	–	–
0,8	260,18	7,08	214,74	23,31	–	–
0,6	265,19	5,29	215,10	23,18	–	–
0,4	270,98	3,22	228,69	18,32	120,69	56,90
0,2	275,16	1,73	258,23	7,77	203,69	27,26
0,1	277,32	0,96	267,81	4,36	232,79	16,86
0,05	278,80	0,43	274,39	2,01	250,77	10,44
0,01	279,85	$<10^{-1}$	278,70	0,46	272,65	2,63
0,005	279,94	$<10^{-1}$	279,33	0,24	277,02	1,06
0,001	279,99	$<10^{-2}$	279,89	$<10^{-1}$	279,33	0,24
$u_{in} [\text{m s}^{-1}]$	$T_{max} [\text{K}]$	Odchylka [%]	$T_{max} [\text{K}]$	Odchylka [%]	$T_{max} [\text{K}]$	Odchylka [%]
1	311,89	11,39	422,78	50,99	–	–
0,8	306,30	9,39	386,24	37,94	–	–
0,6	300,56	7,34	377,60	34,86	–	–
0,4	294,26	5,09	340,84	21,73	478,80	71,00
0,2	287,06	2,52	309,23	10,44	384,25	37,23
0,1	282,98	1,07	297,83	6,37	348,66	24,52
0,05	281,16	0,41	288,84	3,16	314,56	12,34
0,01	280,17	$<10^{-1}$	281,43	0,51	289,07	3,24
0,005	280,07	$<10^{-1}$	280,62	0,22	284,86	1,74
0,001	280,01	$<10^{-2}$	280,10	$<10^{-1}$	280,83	0,30

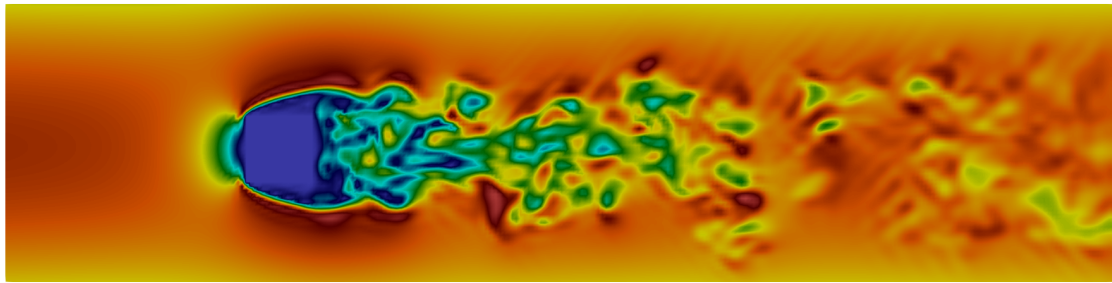
Tabulka 4.2: Tabulka zobrazující hodnoty maximální teploty T_{max} spolu s procentuální odchylkou od počáteční teploty $T_{ini} = 280 \text{ K}$ pro data z grafů 4.11 b). Hodnoty jsou vyobrazeny pro různé hodnoty difuzních koeficientů D_a a D_b a časový krok $\Delta t = 3,50 \cdot 10^{-4} \text{ s}$ a prostorový krok $h = 0,0104 \text{ m}$.



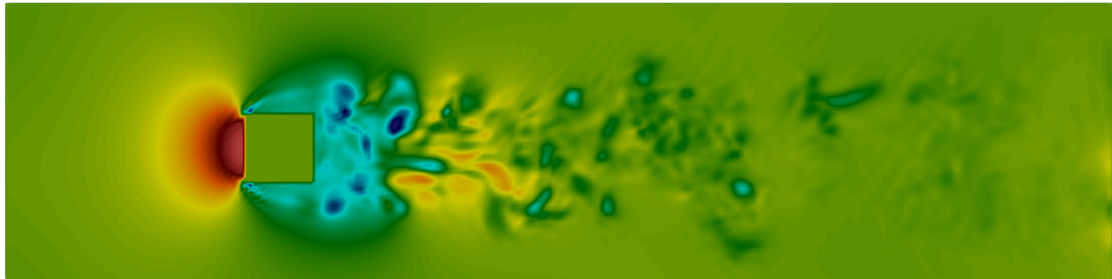
Obrázek 4.12: Grafy zobrazující závislost minimální teploty T_{min} a maximální teploty T_{max} na prostoro-
vém kroku h pro úlohu 4.3 pro velikost vstupní rychlosti $u_{in} = 1 \text{ m s}^{-1}$ a hodnoty difuzních koeficientů
 $D_a = 2,239 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, $D_b = 9,700 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$. Graf obsahuje křivky pro dva různé parametry
 $\nu' \in \{1 \cdot 10^{-4}; 5 \cdot 10^{-5}\}$. Hodnota časového kroku Δt je pro dvojici h a ν' získána ze vztahu (2.46).



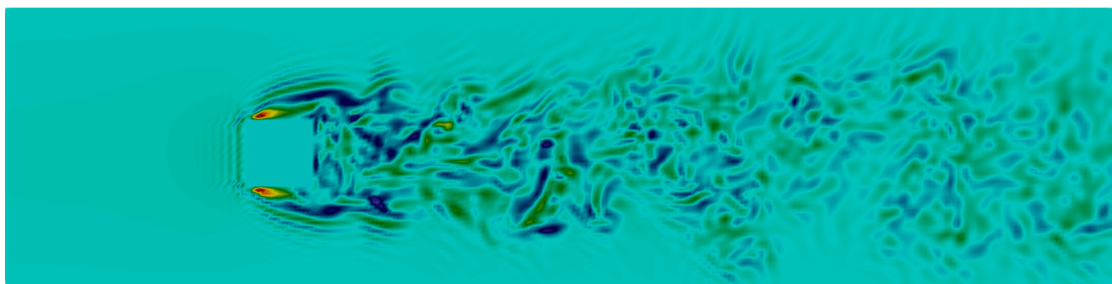
Obrázek 4.13: Znázornění polohy výřezu pro obrázek 4.14.



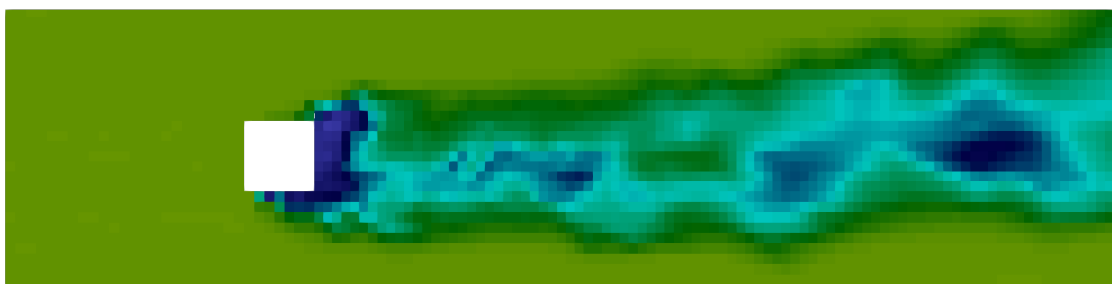
(a) Rozložení velikosti rychlosti $|\mathbf{u}|$.



(b) Rozložení mřížkové hustoty ρ' .



(c) Rozložení teploty T spočtené pomocí LBM.



(d) Rozložení teploty T spočtené pomocí MHFEM.

Obrázek 4.14: Porovnání výsledné teploty vypočtené pomocí schémat LBM-LBM a LBM-MHFEM na řezech výpočetní oblasti v čase $t = 10$ s pro simulaci s LBM prostorovým krokem $h = 7,8 \cdot 10^{-3}$ m, MHFEM prostorovým krokem $h = 1,85 \cdot 10^{-2}$ m, časovým krokem $\Delta t = 3,50 \cdot 10^{-4}$ s, hodnotou vstupní rychlosti $u_{in} = 1$ m s⁻¹ a difuzními koeficienty $D_a = 2,239 \cdot 10^{-3}$ m² s⁻¹ a $D_b = 9,700 \cdot 10^{-3}$ m² s⁻¹. Na obrázku 4.14a je vyobrazeno rychlostní pole a na obrázku 4.14b je zobrazena mřížková hustota oblasti, které jsou totožné pro obě schémata. Řezy jsou vedeny středem oblasti, tedy rovinou $y = 0,5$ m. Z těchto řezů jsou pak prezentovány výřezy na střed oblasti, viz obrázek 4.13.

4.3.3 Shrnutí úlohy

Již od začátku výzkumu bylo bráno v potaz, že explicitní podstata mřížkové Boltzmannovy metody se může negativně projevit na výsledcích řešení ADR schématu. Úloha 4.3 ukazuje vliv explicitního schématu LBM na řešení advekčně-difuzní rovnice. Z výsledků je patrné, že pro malé hodnoty časového i prostorového kroku se odchylky teploty od počáteční hodnoty zmenšují. Totéž je zřejmé i pro malé hodnoty vstupní rychlosti, pro které tato odchylka není téměř pozorovatelná.

Při srovnání s LBM-MHFEM schématem je patrné, že používaný model není optimální. Jedním z možných nápadů na vylepšení modelu je oddělení obou schémat tak, aby NSR i ADR schémata měla rozdílný časový krok. Díky tomuto by bylo každé ze schémat stabilnější, avšak vznikly by další úskalí, která by bylo nutné vyřešit, např. pořadí počítání iterací u schémat s různými časovými kroky.

Dalším možným vylepšením modelu by byla lepší aproximace odtokové okrajové podmínky, což by vedlo k dalšímu snížení nároků na paměť a také přesnějším výsledkům simulací. V LBM je obecně velice obtížné správně a efektivně modelovat okrajové podmínky, proto je toto jedna z nejméně prozkoumávaných částí metody. Jedním z možných směrů jsou momentové okrajové podmínky, které byly v rámci této práce částečně testovány, avšak tyto podmínky byly ještě méně stabilní než zde použitá odtoková okrajová podmínka.

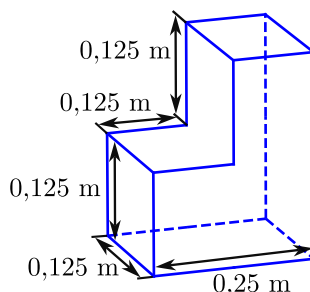
4.4 Experiment CUBI

V této sekci se zaměříme na simulaci připravovaného experimentu ve výzkumném centru SENSE [20], v americkém městě Vicksburg ve státě Mississippi.

Projekt zkoumá vývoj rychlostního a teplotního profilu v oblasti mezní vrstvy okolo překážky, která dostala pracovní název CUBI. Experiment probíhá ve větrném tunelu, jehož část, ve které probíhá simulovaný experiment, je průřezu ve tvaru čtverce o hraně 1 m.

Při implementaci tohoto experimentu v LBM modelu byla na horní stěně Γ_{top} použita symetrická okrajová podmínka definovaná v sekci 2.5. To bylo možné provést z podstaty úlohy. Jelikož je výška překážky v porovnání s výškou tunelu malá, proudění v horní polovině tunelu se stává laminárním a tudíž i pro nás nezajímavým. Velkou výhodou použití této okrajové podmínky je ušetření značné části paměti, což nám umožní dohnout jemnějšího rozlišení.

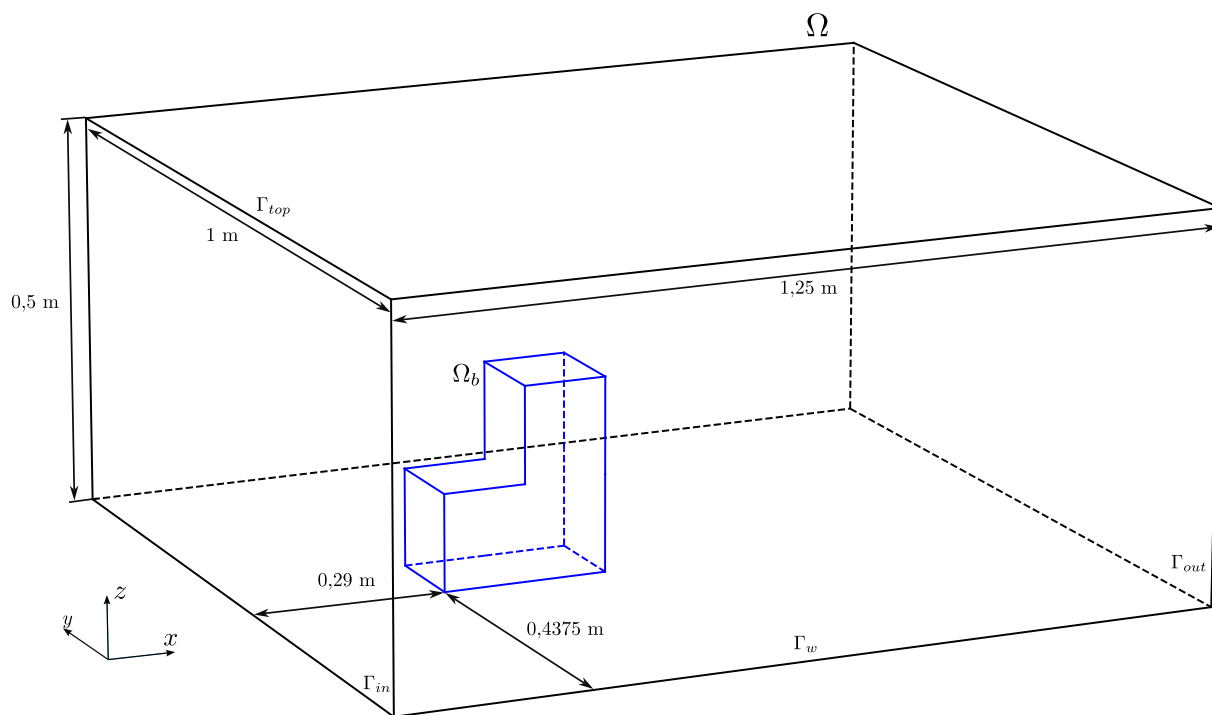
Uvažujme tedy výpočetní oblast Ω o rozměrech $(0 \text{ m}; 1,25 \text{ m}) \times (0 \text{ m}; 1 \text{ m}) \times (0 \text{ m}; 0,5 \text{ m})$. Překážku $\bar{\Omega}_b$ v tomto případě bude tvořit těleso složené ze tří totožných krychlí o hraně 0,125 m sestavených do tvaru písmene L, viz obrázek 4.15.



Obrázek 4.15: Schéma simulované překážky CUBI s vyznačenými rozměry.

Bude nás zajímat rychlostní a teplotní profil těsně nad povrchem dolní stěny výpočetní oblasti Ω . Nastavení výpočetní oblasti pro simulace je znázorněno na obrázku 4.16. Dále se zaměříme také na turbulentní kinetickou energii k a s ní úzce spojenou střední hodnotu rychlosti \bar{u} .

Je zde nutné podotknout, že v této simulaci nebyly použité reálné hodnoty difuzních koeficientů, a to z důvodů diskutovaných v předchozí sekci 4.3. V simulaci bude tak difuze uměle vyšší, díky čemuž je pak schéma pro řešení ADR stabilnější.



Obrázek 4.16: Schéma výpočetní oblasti pro úlohu 4.4.

4.4.1 Formulace úlohy

Úloha 4.4

Parametry úlohy:

- $\Omega = (0 \text{ m}; 1,25 \text{ m}) \times (0 \text{ m}; 1 \text{ m}) \times (0 \text{ m}; 0,5 \text{ m})$,
 - $\mathcal{I} = \langle 0 \text{ s}; 10 \text{ s} \rangle$,
 - $\nu = 1,552 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$,
 - $u_{in} = 1 \text{ m s}^{-1}$,
 - $T_{in} = 280 \text{ K}$,
 - $T_{ini,a} = 280 \text{ K}$,
 - $T_{ini,b} = 280 \text{ K}$,
 - $D_a = 2,239 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$,
 - $D_b = 9,700 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$,
 - $\omega = 0,01 \text{ kg s}^{-3} \text{ K}^{-1}$.
- pro $l_0 = 0,25 \text{ m}$ a $u_0 = u_{in}$ dostáváme dle (1.11) $Re \approx 16\,000$.

Počáteční a okrajové podmínky:

- V $\bar{\Omega}$ nastavíme počáteční podmínky dle sekcí 2.3.1 a 2.4.1.
- Na části hranice $\hat{\Gamma}_{in}$ zvolíme vstupní okrajové podmínky popsané v sekcích 2.3.1 a 2.4.1.
- Pro $\hat{\Gamma}_{out}$ volíme odtokové podmínky dle sekcí 2.3.1 a 2.4.1.
- Na $\hat{\Gamma}_w$ použijeme bounce-back okrajové podmínky ze sekcí 2.3.1 a 2.4.1.
- Na horní stěně $\hat{\Gamma}_{top}$ předepíšeme symetrickou okrajovou podmínku dle sekce 2.5.
- Pro těleso $\bar{\Omega}_b$ volíme následující okrajové podmínky:
 - Pro NSR schéma volíme na $\bar{\Omega}_b$ bounce-back podmínku dle sekce 2.3.1,
 - V ADR schématu použijeme na $\hat{\Gamma}_{b,7}$ přestupovou podmínku, viz sekce 2.4.1.

Parametry LBM:

- $N_x \times N_y \times N_z \in \{40i \times 32i \times 16i \mid i \in \{10, 11, \dots, 25\}\}$,
- $\nu' = 10^{-4}$, odpovídá $\Delta t \approx 10^{-5} \text{ s}$.

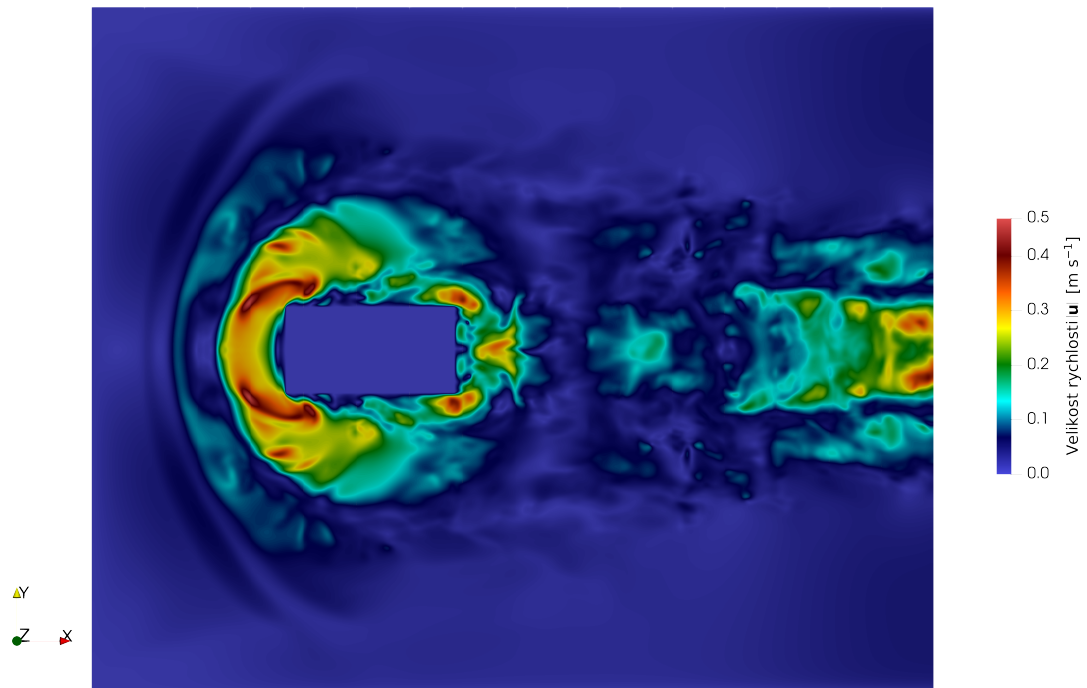
4.4.2 Výsledky úlohy

Simulace na obrázku 4.15 byla spočtena na superpočítači Karolína v Ostravě [19]. Na snímcích je vidět, že na odtokové části Γ_{out} v pravé části snímků jsou výsledky poškozeny numerickými chybami pramenícími z odtokové okrajové podmínky. Z důvodu nedostatku výpočetního času na počítači v Ostravě již nemohla být simulace přepočítána ve stejném rozlišení pro delší oblast, proto bylo rozlišení následně sníženo a oblast prodloužena z 1,25 m na 1,75 m (ve směru osy x).

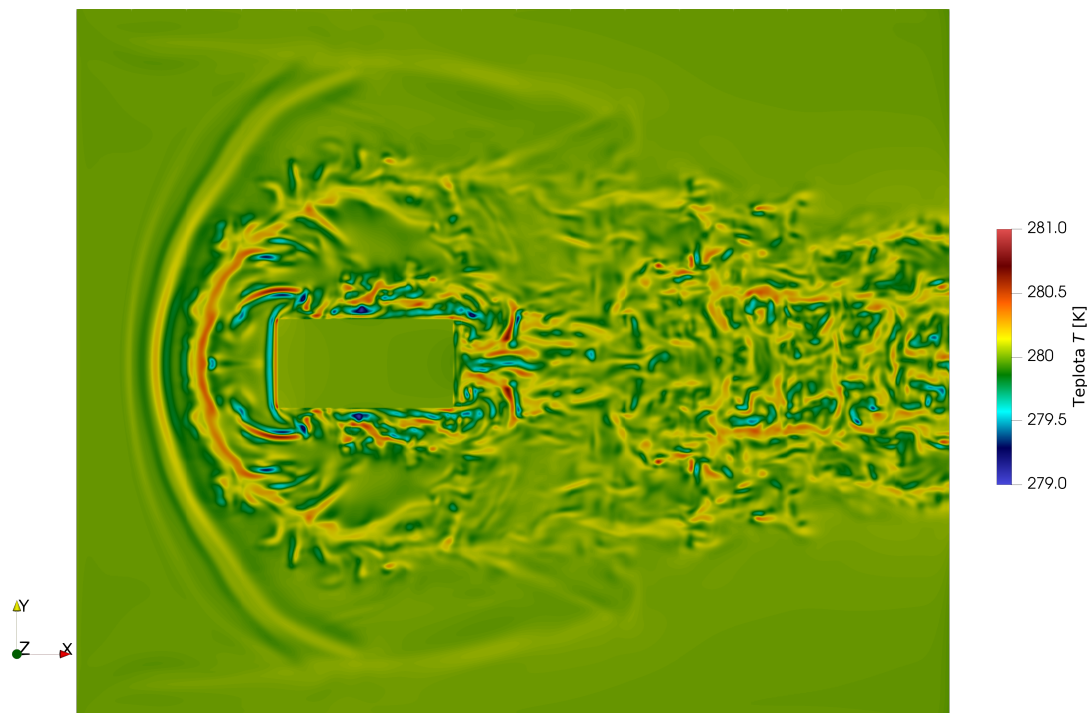
Na obrázcích 4.19 jsou vidět řezy výpočetní oblastí – řez 4.19a zobrazuje hodnotu střední rychlosti, na řezu 4.19b je možné vidět hodnotu fluktuace rychlosti a řez 4.19c vyobrazuje hodnotu turbulentní kinetické energie. V simulaci na obrázku 4.19b V externím zdroji [29] lze nalézt video zobrazující tur-

bulentní kinetickou energii ve 3D. Z důvodu popsaného v předchozím odstavci byla pro tuto simulaci prodloužena délka oblasti na 1,75 m.

V úloze bylo simulováno nastavení oblasti dle připravovaného experimentu. Simulace byla počítána s dodatečnou difuzí, díky které byla úloha stabilnější. Na obrázcích 4.17 a 4.18 je zobrazen pohled na pozemní vrstvu simulované úlohy. Na obrázku 4.17b lze pozorovat fluktuace teploty. Zda-li jsou tyto fluktuace způsobené numerickými chybami nebo se jedná o skutečný jev, nelze bez porovnání s experimentálními daty odpovědět. Na základě předchozí sekce 4.3, diskutující použitelnost LBM-LBM schématu při řešení advekčně-difuzní rovnice s turbulentním prouděním, by se nabízel důvod ke skepsi. Připomeňme ale, že běžně používané CFD řešiče pro nestlačitelné proudění (např. zde zmiňovaný MH-FEM) pracují s konstantní hustotou, kdežto LBM je metodou řešící slabě stlačitelné proudění, což by v některých situacích mohlo vést k výsledkům, které více odrážejí realitu – k tomuto tvrzení však bude nutné porovnat výsledky s experimentálními daty a dále také zapracovat na stabilitě modelu, například zmíněným rozdělením časových kroků LBM-LBM schématu, viz diskuze v podsekcí 4.3.3.

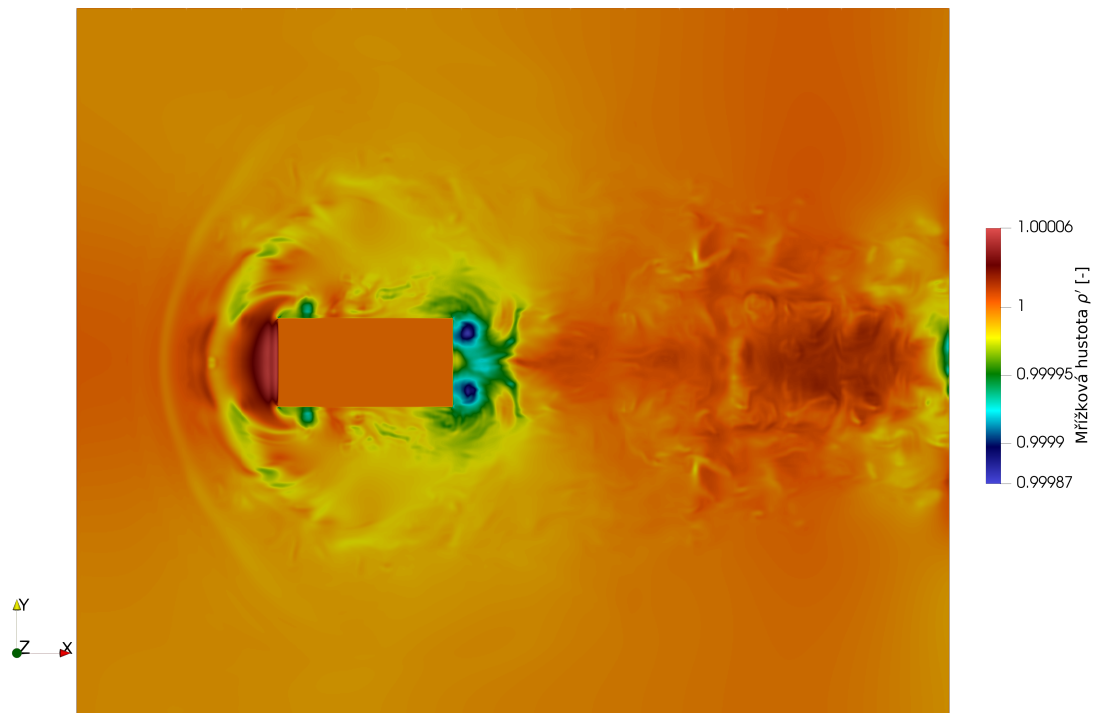


(a) Rozložení velikosti rychlosti $|\mathbf{u}|$.



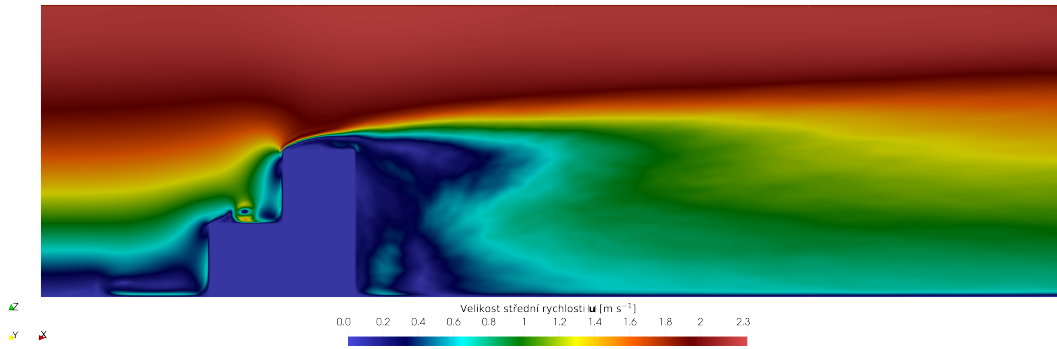
(b) Rozložení teplotního pole T .

Obrázek 4.17: Horní pohled na pozemní vrstvu v simulaci úlohy 4.4 zobrazující rozložení velikosti rychlosti $|\mathbf{u}|$ spolu s rozložení teplotního pole T v čase $t = 1,8$ s, pro mřížku $N_x \times N_y \times N_z = 1000 \times 800 \times 400$ odpovídající prostorovému kroku $h = 1,25 \cdot 10^{-3}$ m a vstupní rychlost $u_{in} = 1 \text{ m s}^{-1}$.

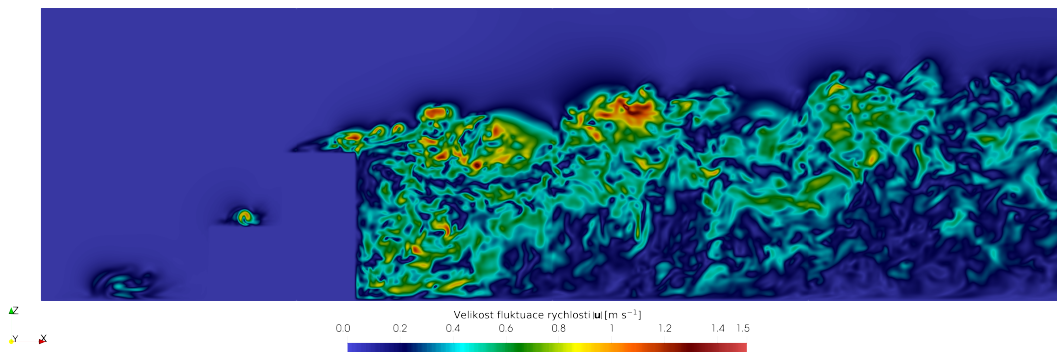


(a) Rozložení mřížkové hustoty ρ' .

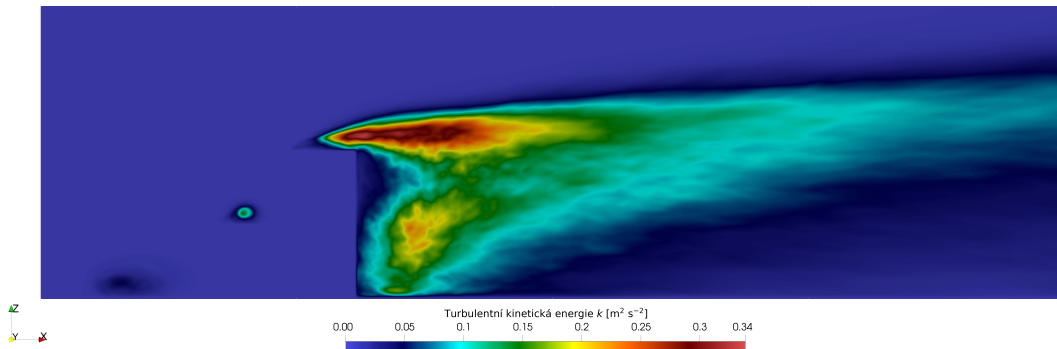
Obrázek 4.18: Horní pohled na pozemní vrstvu v simulaci úlohy 4.4 zobrazující rozložení mřížkové hustoty ρ' v čase $t = 1,8$ s, pro mřížku $N_x \times N_y \times N_z = 1000 \times 800 \times 400$ odpovídající prostorovému kroku $h = 1,25 \cdot 10^{-3}$ m a vstupní rychlost $u_{in} = 1$ m s⁻¹.



(a) Rozložení velikosti střední rychlosti $|\bar{u}|$.



(b) Rozložení velikosti fluktuace rychlosti $|u'|$.



(c) Rozložení turbulentní kinetické energie k .

Obrázek 4.19: Řezy výpočetní oblasti znázorňující rozložení velikosti střední rychlosti $|\bar{u}|$, velikosti fluktuace rychlosti $|u'|$ a turbulentní kinetické energie k pro simulaci s prostorovým krokem $h = 2,23 \cdot 10^{-3}$ m odpovídajícím mřížce $784 \times 448 \times 224$, časovým krokem $\Delta t = 3,20 \cdot 10^{-4}$ s a velikostí vstupní rychlosti $u_{in} = 1 \text{ m s}^{-1}$. Fluktuace a turbulentní kinetická energie jsou na výřezech zachyceny v čase $t = 10$ s.

Závěr

Cílem této práce bylo matematické modelování neizotermálního turbulentního proudění newtonovské nestlačitelné tekutiny pomocí mřížkové Boltzmannovy metody. K numerickým simulacím byl využit kód LBM využívající softwarového balíčku CUDA od společnosti Nvidia, díky kterému bylo umožněno počítání na grafických kartách. Tento kód je napsán v jazyce C++ a již několik let je vyvíjený na KM FJFI ČVUT v Praze.

První kapitola byla věnována zasvěcení čtenáře do matematického modelu, který popisuje rovnice neizotermálního proudění. V této kapitole byly prezentovány rovnice dynamiky tekutin spolu s rovnicí vedení tepla. Dále zde byly popsány vlastnosti turbulentního proudění a formulována zkoumaná úloha.

Druhá kapitola se zaměřovala na samotnou numerickou metodu použitou k simulaci – mřížkovou Boltzmannovu metodu (LBM). V této části byly popsány okrajové podmínky – mezi nimi i přestupová a symetrická okrajová podmínka, které byly v rámci práce implementovány.

Ve třetí kapitole byly popsány datové struktury použité v LBM kódu. Dále zde byly uvedeny poznámky k implementaci na více grafických kartách a podrobně popsána implementace přestupové okrajové podmínky. V rámci této práce bylo v LBM kódu opraveno propojení mezi modelem $D3Q7$ pro ADR a modelem $D3Q27$ řešícím NSR. Kód byl pro účely práce rozšířen o pole pro různé difuzní koeficienty a také byly do kódu úspěšně implementovány přestupová a symetrická okrajová podmínka. Dále byl kód rozšířen o simulaci připravovaného experimentu CUBI.

Ve čtvrté kapitole jsou shrnuty výsledky aplikace mřížkové Boltzmannovy metody na úlohu formulovanou v první kapitole. V první části bylo úspěšně otestováno pole pro prostorově proměnlivý difuzní koeficient. Druhá část se věnovala testování přestupové okrajové podmínky. Ve třetí části byly zkoumány a diskutovány numerické chyby aproximace teploty v ADR schématu a provedeno srovnání s LBM-MHFEM schématem [7]. Z porovnání výsledků s LBM-MHFEM schématem bylo patrné, že model potřebuje další úpravy a vylepšení, aby poskytoval validní výsledky. Na základě dostupných zdrojů zde již byly pokusy o oddělené LBM-LBM schéma, které však bylo oddělené i co se týče časových kroků [12, 17]. Jedním z možných vylepšení modelu by tedy mohlo být oddělení schémat, díky čemuž by NSR i ADR schémata měla každé vlastní časový krok, a tak by byla obě stabilnější. Další možností, jak model vylepšit, by mohla být spolehlivější odtoková okrajová podmínka, díky čemuž by se dále mohly snížit nároky na paměť potřebnou pro simulaci. V poslední části byla LBM použita k simulaci experimentu CUBI.

Implementace difuzního pole i okrajových podmínek byla úspěšná. V rámci této práce se podařilo tyto implementace úspěšně otestovat. Na vybrané úloze bylo provedeno srovnání LBM-LBM schématu s LBM-MHFEM řešičem. Byly objeveny nedostatky LBM-LBM schématu pro řešení advektivně-difuzního schématu plynoucí z explicitní podstaty mřížkové Boltzmannovy metody a navrženy možné směry vylepšení modelu, které by mohly vliv těchto nedostatků zmírnit.

Literatura

- [1] Zou, Q., Hou, S., Chen, S. a Doolen, G. D. „A improved incompressible lattice Boltzmann model for time-independent flows“. *Journal of Statistical Physics*, 81 (1995), s. 35–48.
- [2] Geier, M., Greiner, A. a Korvink, J. G. „Properties of the cascaded lattice Boltzmann automaton“. *International Journal of Modern Physics C*, 18.04 (2007), s. 455–462.
- [3] Geier, M., Schönherr, M., Pasquali, A. a Krafczyk, M. „The cumulant lattice Boltzmann equation in three dimensions: Theory and validation“. *Computers & Mathematics with Applications*, 70.4 (2015), s. 507–547.
- [4] Lienhard IV, J.H. a Lienhard V, J.H. *A Heat Transfer Textbook: Fifth Edition*. Sv. 5. Dover Publications, 2006.
- [5] Landau, L. D. a Lifshitz, E. M. *Fluid Mechanics: Landau and Lifshitz: Course of Theoretical Physics*. Sv. 6, Elsevier, 2013.
- [6] Mei, R., Yu, D., Shyy, W. a Luo, L. S. „Force evaluation in the lattice Boltzmann method involving curved geometry“. *Physical Review E*, 65.4 (2002), s. 041203.
- [7] Fučík, R., Klinkovský, J., Solovský, J., Oberhuber, T. a Mikyška, J. „Multidimensional mixed–hybrid finite element method for compositional two-phase flow in heterogeneous porous media and its parallel implementation on GPU“. *Computer Physics Communications*, 238 (2019), s. 165–180.
- [8] Míka, V. a Neužil, L. *Chemické inženýrství II*. Vysoká škola chemicko-technologická, 1999.
- [9] Fučík, R., Eichler, P., Klinkovský, J., Straka, R. a Oberhuber, T. „Lattice Boltzmann Method Analysis Tool (LBMAT)“. *Numerical Algorithms*, 93.4 (2023), s. 1509–1525.
- [10] Schäfer, M., Turek, S., Durst, F., Krause, E. a Rannacher, R. „Benchmark computations of laminar flow around a cylinder“. *Flow simulation with high-performance computers II*, (1996), s. 547–566.
- [11] Shaughnessy, E.J., Katz, I.M a Schaffer, J.P. *Introduction to fluid mechanics*. Sv. 8. New York: Oxford University Press, 2005.
- [12] Zhang, Z., Kress, M. E. a Schäfer, T. A lattice boltzmann advection diffusion model for ocean oil spill surface transport prediction. *2020 Winter Simulation Conference (WSC)*, (2020), s. 680-691.
- [13] Guo, Z. a Shu, C. *Lattice Boltzmann method and its application in engineering*. Sv. 3. World Scientific, 2013.
- [14] Bird, R.B. a Stewart, W.E. *Transport Phenomena, Revised 2nd Edition*. Sv. 2, John Wiley & Sons, 2006.

- [15] Inamuro, T., Yoshino, M. a Suzuki, K. *An Introduction to the Lattice Boltzmann Method: A Numerical Method for Complex Boundary and Moving Boundary Flows*. Sv. 1. World Scientific, 2022.
- [16] Krüger, T., Kusumaatmaja, H., Kuzmin, A., Shardt, O., Silva, G. a Viggien, E. M. „The lattice Boltzmann method: Principles and Practice“. *Springer International Publishing*, 10 (2017), s. 3–978.
- [17] Huang, H-B., Lu, X-Y., Sukop, M. C. Numerical study of lattice boltzmann methods for a convection–diffusion equation coupled with navier–stokes equations. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 44 (2011), s. 055001.
- [18] Ruzicka, M. C. On dimensionless numbers. *Chemical Engineering Research and Design*, 86 (2008), s. 835-868.
- [19] Karolina, IT4Innovations National Supercomputing Center. Navštíveno: 9. května 2024. URL: <https://www.it4i.cz/en/infrastructure/karolina>.
- [20] ERDC USACE, Výzkumné centrum SENSE, Vicksburg, Mississippi. Navštíveno: 9. května 2024. URL: <https://www.erd.usace.army.mil/>.
- [21] Horák, D. Matematické modelování proudění a obtékání překážek pomocí mřížkové boltzmannovy metody. Bakalářská práce, České vysoké učení technické v Praze, 2022.
- [22] McLean, D. *Understanding aerodynamics: arguing from the real physics*. John Wiley & Sons, 2012.
- [23] Buresti, G. „A note on Stokes’ hypothesis“. *Acta Mechanica*, 226.10 (2015), s. 3555–3559.
- [24] Katz, J. *Race car aerodynamics: designing for speed*. R. Bentley, 1995.
- [25] Schlichting, H., Gersten, K. *Boundary-layer theory*. Sv. 9. Springer, 2017.
- [26] LBM kód při KM FJFI ČVUT v Praze. Navštíveno: 9. května 2024. URL: <https://gitlab.com/tnl-project/tnl-lbm>.
- [27] Template Numerical Library. Navštíveno: 9. května 2024. URL: <https://tnl-project.org/>.
- [28] Yoshida, H., Nagaoka, M. „Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann model for the convection and anisotropic diffusion equation“. *Journal of Computational Physics*, 229.20 (2010), s. 7774–7795.
- [29] Doplňující materiály k diplomové práci. Navštíveno: 9. května 2024. URL: https://github.com/horakdom/diploma_thesis_materials.
- [30] Reynolds, O. „XXIX. An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and of the law of resistance in parallel channels“. *Philosophical Transactions of the Royal society of London*, 174 (1883), s. 935–982.
- [31] Eichler, P. Matematické modelování interakce elastického tělesa s nestlačitelnou tekutinou. Diplomová práce, České vysoké učení technické v Praze, 2018.
- [32] Succi, S. *The Lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond*. Clarendon Press, 2001.
- [33] Pope, S.B. *Turbulent Flows*. Sv. 1, Cambridge University Press, 2000.

- [34] Yoshino, M., Inamuro, T. „Lattice Boltzmann simulations for flow and heat/mass transfer problems in a three-dimensional porous structure“. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 238 (2003), s. 183–198.
- [35] Uruba, V. *Turbulence*. Nakladatelství ČVUT, 2014.