



ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE  
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská



# **Matematické modelování subsonického proudění okolo překážek pomocí metody Lattice–Boltzmann na GPU**

## **Mathematical modelling of subsonic flow around obstacles using Lattice–Boltzmann method on GPU**

Bakalářská práce

Autor: **Pavel Eichler**  
Vedoucí práce: **Ing. Radek Fučík, Ph.D.**  
Konzultant: **Ing. Robert Straka, Ph.D.**  
Akademický rok: 2015/2016



- Zadání práce -

- Zadání práce (zadní strana) -

*Poděkování:*

Chtěl bych zde poděkovat především svému školiteli Ing. Radku Fučíkovi, Ph.D., za ochotu, vstřícnost, obětavost a trpělivost při vedení mé bakalářské práce. Dále děkuji svému konzultantovi Ing. Robertu Strakovi, Ph.D., za cenné rady a poznámky k danému tématu, Ing. Ondřejovi Polívkovi za poskytnuté výsledky pro srovnání výsledků a mé rodině za dosavadní podporu při studiu.

*Čestné prohlášení:*

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

V Praze dne 7. července 2016

Pavel Eichler



*Název práce:*

**Matematické modelování subsonického proudění okolo překážek pomocí metody Lattice–Boltzmann na GPU**

*Autor:* Pavel Eichler

*Obor:* Matematické inženýrství

*Zaměření:* Matematické modelování

*Druh práce:* Bakalářská práce

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

*Konzultant:* Ing. Robert Straka, Ph.D., Department of Heat Engineering and Environment Protection, Faculty of Metal Engineering and Industrial Computer Science, AGH University of Science and Technology in Kraków, Kraków, Polsko

*Abstrakt:*

Tato práce je teoretickým úvodem do numerické metody Lattice–Boltzmann pro simulaci proudění nestlačitelné, Newtonovské tekutiny v izotermálním systému.

Hlavním cílem je uvést čtenáře do základní problematiky týkající se této metody skrze její odvození založeném na diskretizaci Boltzmannovy transportní rovnice a projekci do báze Hermiteových polynomů.

Dalším cílem této práce je popis algoritmu Lattice–Boltzmannovy metody, paralelní implementace v jazyce C/C++ a CUDA a aplikace na dvourozměrný případ proudění mezi dvěma rovnoběžnými rovinami. Získané výsledky ukazují, že Lattice–Boltzmannova metoda poskytuje uspokojivé výsledky ve srovnání s analytickým řešením a řešením založeným na metodě konečných objemů.

*Klíčová slova:* Boltzmannova transportní rovnice, Hagenovo–Poisuilleho proudění, Hermiteovy polynomy, kinetická teorie, Lattice–Boltzmannova metoda, tok tekutiny okolo překážek, 2D simulace proudění tekutiny

*Title:*

**Mathematical modelling of subsonic flow around obstacles using Lattice–Boltzmann method on GPU**

*Author:* Pavel Eichler

*Abstract:*

This work is the theoretical introduction to the numerical Lattice–Boltzmann method for simulation of the incompressible flow of the Newtonian's fluid in isothermal system.

The main goal is to introduce basic problems related to this method through derivation based on the discretization of the Boltzmann equation and on projection into basis of Hermite polynomials.

The last aim of this work is to describe the algorithm of the Lattice–Boltzmann method, parallel implementation in C/C++ and CUDA and application on the two-dimensional flow between two infinite

parallel plates. Obtained results show that Lattice–Boltzmann method provides satisfactory results in comparison with the analytical solutions and with the solutions based on finite volume method.

*Key words:* Boltzmann transport equation, Hagen–Poiseuille flow, Hermite polynomials, kinetic theory, Lattice–Boltzmann method, fluid flow around obstacles, 2D fluid flow simulation







# Obsah

<b>Použité značení</b>	<b>xiii</b>
<b>Úvod</b>	<b>1</b>
<b>1 Popis tekutiny</b>	<b>3</b>
1.1 Makroskopický popis tekutiny . . . . .	3
1.2 Kinetická teorie . . . . .	5
1.2.1 BBGKY hierarchie . . . . .	8
1.2.2 Boltzmannova transportní rovnice . . . . .	10
1.2.3 H-teorém a Maxwelllova–Boltzmannova rovnovážná distribuční funkce . . . . .	17
1.3 Chapmanův–Enskogův asymptotický rozvoj . . . . .	19
1.3.1 Hermiteovy polynomy . . . . .	19
1.3.2 Zavedení bezrozměrných veličin . . . . .	20
1.3.3 Vyjádření distribuční funkce v bázi Hermiteových polynomů . . . . .	21
<b>2 Odvození Lattice–Boltzmannovy metody</b>	<b>29</b>
2.1 Od Boltzmannovy transportní rovnice k rovnici Lattice–Boltzmannově metodě . . . . .	29
2.1.1 Gaussova–Hermiteova kvadraturní formule . . . . .	29
2.1.2 Konečné diference v čase a prostoru . . . . .	32
2.1.3 Analýza Lattice–Boltzmannovy rovnice . . . . .	34
2.2 Lattice Gas Automata . . . . .	37
2.3 Od Lattice Gas Automat k Lattice–Boltzmannově metodě . . . . .	40
<b>3 Implementace Lattice–Boltzmannovy metody</b>	<b>43</b>
3.1 Algoritmus Lattice–Boltzmannovy metody . . . . .	43
3.2 Rychlostní modely Lattice–Boltzmannovy metody . . . . .	45
3.3 Okrajové podmínky . . . . .	47
3.4 Přejít mezi jednotkami na mřížce a fyzikálními jednotkami . . . . .	51
3.5 Implementace Lattice–Boltzmannovy metody v jazyce C++ a CUDA . . . . .	53
<b>4 Numerická analýza Lattice–Boltzmannovy metody</b>	<b>59</b>
4.1 Hagenovo–Poiseuilleho proudění . . . . .	59
4.1.1 Analytické řešení . . . . .	59
4.1.2 Numerická analýza konvergence Lattice–Boltzmannovy metody . . . . .	61
4.1.3 Numerická analýza konvergence Lattice–Boltzmannovy metody pro nižší viskozitu . . . . .	74
4.2 Laminární a nelaminární proudění okolo pevné překážky . . . . .	77
4.2.1 Proudění okolo čtvercové překážky . . . . .	78
4.2.2 Proudění okolo kruhové překážky . . . . .	81

4.2.3 Proudění okolo úsečky . . . . .	84
<b>Závěr</b>	<b>87</b>

# Použité značení

## Latinské symboly

Symbol	Jednotky	Popis	Strana
$Kn$	[-]	Knudsenovo číslo	3
$T$	[K]	Termodynamická teplota	3
$\vec{u}$	[m s <sup>-1</sup> ]	Makroskopická rychlost	3
$\ell_r$	[m]	Střední volná dráha	3
$L_r$	[m]	Charakteristický rozměr systému	3
$\mathbb{T}$	[kg m <sup>-1</sup> s <sup>-2</sup> ]	Tenzor napětí	3
$p$	[kg m <sup>-1</sup> s <sup>-2</sup> ]	Tlak	3
$E$	[m <sup>2</sup> s <sup>-2</sup> ]	Celková vnitřní specifická energie	3
$\vec{g}$	[m s <sup>-2</sup> ]	Vektor zrychlení	3
$\vec{q}$	[kg s <sup>-3</sup> ]	Tepelný tok	3
$\mathbb{Q}$	[kg s <sup>-3</sup> ]	Tenzor toku vnitřní energie	3
$Q$	[m <sup>2</sup> s <sup>-3</sup> ]	Hustota tepelných zdrojů vztažená na jednotku hmotnosti	3
$e$	[m <sup>2</sup> s <sup>-2</sup> ]	Specifická vnitřní energie	3
$\mathbb{S}$	[s <sup>-1</sup> ]	Tenzor rychlosti deformace	4
$\mathbb{D}$	[s <sup>-1</sup> ]	Tenzor rychlosti deformace bez diagonálních prvků	4
$Ma$	[-]	Machovo číslo	4
$u_r$	[m s <sup>-1</sup> ]	Charakteristická rychlost	4
$c_s$	[m s <sup>-1</sup> ]	Rychlost zvuku v tekutině	4
$N$	[-]	Počet částic	5
$m$	[kg]	Hmotnost	4
$V$	[m <sup>3</sup> ]	Prostor souřadnic	4
$\vec{x}$	[m]	Souřadný vektor	5
$\vec{p}$	[kg m s <sup>-1</sup> ]	Vektor hybností	5
$\mathbf{x}$	[m]	Souřadný vektor ve fázovém prostoru	5
$\mathbf{p}$	[kg m s <sup>-1</sup> ]	Vektor hybností ve fázovém prostoru	5
$H$	[kg m <sup>2</sup> s <sup>-2</sup> ]	Hamiltonián	5
$\mathcal{N}$	[-]	Počet systémů tvořící statistický soubor	6
$k_B$	[kg m <sup>2</sup> s <sup>-2</sup> K <sup>-1</sup> ]	Boltzmannova konstanta	6
$f_1, f$	[kg <sup>-3</sup> m <sup>-6</sup> s <sup>-3</sup> ]	Jednočásticová distribuční funkce	7, 15
$f_s$	[kg <sup>-3s</sup> m <sup>-6s</sup> s <sup>-3s</sup> ]	S-částicová distribuční funkce	6
$n$	[m <sup>-3</sup> ]	Hustota částic	7
$U$	[kg m <sup>2</sup> s <sup>-2</sup> ]	Potenciál vnějších sil	8
$\vec{F}$	[kg m s <sup>-2</sup> ]	Vektor vnějších sil	8

$\ell$	[m]	Efektivní vzdálenost binárních srážek	8
$v_r$	[m s <sup>-1</sup> ]	Charakteristická rychlost	10
$I$	[m <sup>-2</sup> s <sup>-1</sup> ]	Tok částic	12
$\tilde{c}$	[m s <sup>-1</sup> ]	Mikroskopická rychlost	13
$b$	[m]	Impaktní parametr	14
$\mathcal{H}$	[kg m <sup>2</sup> s <sup>-2</sup> ]	H funkce	17
$Pr$	[-]	Prandtlovo číslo	18
$c_p$	[m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ]	Měrná tepelná kapacita	15
$\mathcal{H}^{(n)}$		Jednorozměrný Hermiteův polynom	20
$\mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}$		D-rozměrný Hermiteův polynom	20
$T_0$	[K]	Charakteristická teplota	20
$c_0$	[m s <sup>-1</sup> ]	Charakteristická rychlost	20
$\vec{u}$	[-]	Bezrozměrná makroskopická rychlost	20
$l_0$	[m]	Charakteristická délka	20
$\vec{x}$	[-]	Bezrozměrná souřadný vektor	20
$t_0$	[s]	Charakteristický čas	20
$m_0$	[kg]	Charakteristická hmotnost, $m_0 = 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$	20
$\hat{t}$	[-]	Bezrozměrný čas	20
$a_{\vec{\alpha}}^{(n)}$	[-]	N-tý Hermiteův koeficient	21
$f^{(k)}$	[-]	K-tý člen Chapmanova–Enskogova rozvoje distribuční funkce $f$	24
$t_i$	[-]	Pomocná bezrozměrná časová proměnná	24
$a_{\vec{\alpha}}^{(k)(n)}$	[-]	Hermiteův koeficient příslušející k-tému členu Chapmanova–Enskogova rozvoje distribuční funkce $f$	25
$\mathbb{T}^{(k)}$	[-]	Tenzor tlaku při dosazení k-tého členu Chapmanova–Enskogova rozvoje distribuční funkce $f$	27
$q^{(k)}$	[-]	Tepelný tok při dosazení k-tého členu Chapmanova–Enskogova rozvoje distribuční funkce $f$	27
$P(x)$		Polynom	29
$w^i$		Diskrétní váhová funkce	29
$g_i$		Předefinovaná diskrétní distribuční funkce	30
$a^{(eq)(n)}$		N-tý Hermiteův koeficient příslušející rovnovážné distribuční funkci $f^{(eq)}$	30
$\tilde{f}^{(eq)(M)}$		Aproximovaná rovnovážná distribuční funkce $f^{(eq)}$	31
$q_i^{(M)}$		Předefinovaná aproximovaná rovnovážná distribuční funkce $f^{(eq)}$	31
$G(\vec{\xi})$		Záporně vzatý člen Boltzmannovy transportní rovnice zodpovídající za působení vnějších sil	31
$c$	[m s <sup>-1</sup> ]	Fyzikální rychlost zvuku v kapalině	32
$c_z$	[m s <sup>-1</sup> ]	Rychlost, $c_z = c c_s$	32
$\hat{u}$	[-]	Nově zavedená makroskopická rychlost	33
$\mathcal{D}$		Pomocné označení rovnice	33
$\vec{u}$	[-]	Přeškálovaná bezrozměrná makroskopická rychlost	35
$\vec{x}$	[-]	Přeškálovaný bezrozměrný souřadný vektor	35
$\hat{t}$	[-]	Přeškálovaný bezrozměrný čas	35
$\check{p}$	[-]	Přeškálovaný bezrozměrný tlak	35

$P$	[-]	Tlak v nestlačitelné Lattice–Boltzmannově metodě	36
$n_i$	[-]	Booleanovská funkce u Lattice–Gas Automat	37
$C$	[-]	Kolizní operátor Lattice–Gas Automat	37
$\mathbb{L}$	[-]	Mřížkový tenzor	38
$Z$	[-]	Počet sousedních uzlových bodů	39
$f_i^{(neq)}$	[-]	Nerovnovážná část distribuční funkce	40
$\vec{u}_0$	[-]	Počáteční hodnota makroskopické rychlosti	43
$q$	[-]	Počet rychlostí pro diskretizaci rychlostního prostoru	43
$t_B$	[-]	Bezrozměrný čas	51
$\vec{x}_B$	[-]	Bezrozměrný souřadný vektor	51
$\vec{u}_B$	[-]	Bezrozměrná makroskopická rychlost	51
$J$	[-]	Počet uzlů mřížky	52
$J_{iter}$	[-]	Počet iteračních kroků	52
$\vec{u}_{LB}$	[-]	Makroskopická rychlost v mřížkových jednotkách	52
$\vec{x}_{LB}$	[-]	Souřadný vektor v mřížkových jednotkách	53
$h$	[ $m$ ]	Výška kanálu u Hagenovo–Poiseuilleho úlohy	60

---

## Řecké symboly

Symbol	Jednotky	Popis	Strana
$\rho$	[kg m <sup>-3</sup> ]	Hustota	3
$\mu$	[kg m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]	Dynamická viskozita	4
$\lambda$	[kg m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]	Druhý viskózní koeficient	4
$\kappa$	[kg m s <sup>-3</sup> K <sup>-1</sup> ]	Tepelná vodivost	4
$\Xi$	[kg <sup>3</sup> m <sup>3</sup> s <sup>-3</sup> ]	Prostor hybností	5
$\varrho^{(eq)}$	[-]	Hustota fázového prostoru ve stavu rovnováhy	6
$\varrho_s$	[kg <sup>-3s</sup> m <sup>-6s</sup> s <sup>-3s</sup> ]	S-částicová hustota fázového prostoru	7
$\psi$	[kg m <sup>2</sup> s <sup>-2</sup> ]	Potenciál binárních srážek	8
$\tau_U$	[s]	Časový interval	10
$\tau_c$	[s]	Časový interval	11
$\tau_X$	[s]	Časový interval	11
$\Omega$	[kg <sup>-3</sup> m <sup>-6</sup> s <sup>-4</sup> ]	Kolizní operátor	12
$\zeta$	[rad]	Úhel rozptylu	14
$d\sigma$	[rad]	Účinný průřez	14
$d\Omega$	[rad]	Prostorový úhel	14
$\phi$	[rad]	Úhel	14
$\frac{d\sigma}{d\Omega}$	[-]	Diferenciální účinný průřez	14
$\Pi$	[kg m <sup>-1</sup> s <sup>-2</sup> ]	Tenzor tlaku	15
$\varphi$		Kolizní invariant	15
$\alpha$	[m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ]	Tepelná difuzivita	15
$\omega$		Váhová funkce	19
$\tau$	[s]	Relaxační parametr	18
$\hat{\delta}$		Zobecněné Kroneckerovo delta	20
$\theta$	[-]	Bezrozměrná teplota	20
$\vec{\xi}$	[-]	Bezrozměrná mikroskopická rychlost	20
$\delta_{\alpha,\beta}$	[-]	Kroneckerovo delta	22
$\epsilon$	[-]	Parametr Chapmanova–Enskogova rozvoje	24
$\Delta t$		Jeden časový krok v mřížkových jednotkách	32
$\hat{\tau}$	[-]	Nový relaxační parametr	33
$\hat{\rho}$	[-]	Nově zavedená hustota	33
$\check{\rho}$	[-]	Přeškálovaná bezrozměrná hustota	35
$\rho_0$	[-]	Konstantní hodnota hustoty při nestlačitelném proudění / počáteční hodnota hustoty	36
$\nu_B$	[-]	Bezrozměrná kinematická viskozita	52
$\Delta x$	[-]	Vzdálenost mezi uzlovými body	52
$\nu_{LB}$	[-]	Kinematická viskozita v mřížkových jednotkách	52
$\delta_x$	[-]	Škálovací parametr pro přechod k mřížkovým jednotkám	52
$\delta_t$	[-]	Škálovací parametr pro přechod k mřížkovým jednotkám	52
$\Gamma$	[-]	Množina bodů pro diskretizaci výpočetní oblasti	54



## Použitá konvence ve značení

Předpis	Popis
$\vec{a} \cdot \vec{b} = \sum_{i=1}^n a_i b_i$	Skalární součin vektorů $\vec{a}, \vec{b} \in \mathbb{R}^n$
$(\vec{a} \otimes \vec{b})_{ij} = a_i b_j, \quad i, j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$	Působení operátoru $\otimes$ na vektory $\vec{a}, \vec{b} \in \mathbb{R}^n$
$(\nabla c)_i = \frac{\partial c}{\partial x_i}, \quad i \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$	Gradient funkce $c, c = c(\vec{x}) \in \mathbb{R}$
$\nabla \cdot \vec{a} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial a_i}{\partial x_i}$	Divergence vektoru $\vec{a}, \vec{a} = \vec{a}(\vec{x}) \in \mathbb{R}^n$
$(\nabla \cdot \mathbb{A})_i = \sum_{j=1}^n \frac{\partial \mathbb{A}_{ij}}{\partial x_j}, \quad i \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$	Působení operátoru $\nabla$ na tenzorovou funkci $\mathbb{A} = \mathbb{A}(\vec{x}) \in \mathbb{R}^{n,n}$
$(\mathbb{A}\vec{a})_i = \sum_{j=1}^n \mathbb{A}_{ij} a_j, \quad i \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$	Součin tenzoru $\mathbb{A} \in \mathbb{R}^{n,n}$ a vektoru $\vec{a} \in \mathbb{R}^n$
$\ \cdot\ $	Eukleidovská norma
$\vec{v}^2 = \vec{v} \cdot \vec{v}$	Kvadr eukleidovské normy vektoru $\vec{v} \in \mathbb{R}^n$
$\left(\frac{\partial \vec{x}}{\partial t}\right)_i = \frac{\partial x_i}{\partial t}, \quad i \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$	Derivace vektoru $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$ podle skalární proměnné $t \in \mathbb{R}$
$\left(\frac{\partial c}{\partial \vec{x}}\right)_i = \frac{\partial c}{\partial x_i}, \quad i \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$	Derivace skalární funkce $c \in \mathbb{R}$ podle vektoru $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$
$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla$	Materiálová derivace
$\{\cdot, \cdot\}$	Operátor Poissonovy závorky (definice viz strana 1.30)
$ \cdot $	Absolutní hodnota



# Úvod

Simulace proudění tekutin je jedna z intenzivně zkoumaných oblastí numerické matematiky v souvislosti s následným užitím v praxi, protože dané simulace umožňují snížit často nemalé náklady potřebné na experimenty. Toto odvětví, též označované jako CFD<sup>1</sup> zahrnuje v sobě hned několik různých numerických metod většinou založených na diskretizaci parciálních diferenciálních rovnic popisující vývoj kapalin v čase.

Lattice–Boltzmannova metoda je poměrně nová metoda pro simulaci tekutin vyvinutá na přelomu 80. a 90. let dvacátého století z buněčných automat. V pozdějších letech byla tato metoda odvozena z kinetické teorie, přesněji z Boltzmannovy transportní rovnice, čímž byla ukázána nezávislost Lattice–Boltzmannovy metody na předešlých buněčných automatech. Řešením Lattice–Boltzmannovy metody je diskrétní distribuční funkce popisující danou tekutinu a pomocí asymptotických rozvoju této distribuční funkce lze ukázat její vztah k Navierovým–Stokesovým rovnicím popisující makroskopický vývoj tekutin v čase.

S rozvojem hardwaru umožňující paralelní výpočty začalo docházet k většímu rozvoji této metody v důsledku její snadné paralelní implementace. Jeden z dalších aspektů, proč tato metoda přichází v poslední době čím dál více do obliby, je její schopnost simulovat tekutinu v geometricky složitějších oblastech, například v porézním prostředí.

Hlavním cílem této práce je uvést čtenáře do problematiky týkající se odvození Lattice–Boltzmannovy metody z Boltzmannovy transportní rovnice. Dalším cílem této práce je otestovat schopnost Lattice–Boltzmannovy metody simulovat dvourozměrný případ nestlačitelného, izotermálního, laminárního a posléze i nelaminárního (turbulentního) proudění v kanálu porovnáním získaného řešení s analytickým řešením, popřípadě s řešením založeným na metodě konečných objemů.

Koncepce této práce je následující. První kapitola se věnuje problematice popisu vývoje tekutiny v čase. V její první části je čtenáři nastíněn makroskopický popis tekutiny. Následuje kinetická teorie, odvození Boltzmannovy transportní rovnice a ukázání návaznosti jejího řešení na předešlý makroskopický popis. Druhá kapitola se zabývá samotným odvozením Lattice–Boltzmannovy rovnice s následnou numerickou analýzou odvozené rovnice. V její druhé části je nastíněno původní odvození z buněčných automat. Třetí kapitola zahrnuje detaily ohledně algoritmu Lattice–Boltzmannovy metody, okrajových podmínek, přechodu mezi systémem fyzikálních a mřížkových jednotek, které Lattice–Boltzmannova metoda používá, a implementace v jazyce C/C++ a CUDA. Poslední kapitola se sestává z aplikace Lattice–Boltzmannovy metody na Hagenovo–Poiseuilleho proudění.

Součástí této práce je příloha zahrnující zdrojové kódy použité pro simulace vyskytující se v této práci a výsledky daných simulací.

---

<sup>1</sup> Anglická zkratka pro computational fluid dynamics



# Kapitola 1

## Popis tekutiny

### 1.1 Makroskopický popis tekutiny

Jeden ze způsobů jak nahlížet na tekutinu je brát ji jako spojitou strukturu (kontinuum). Důvod, proč se tímto popisem budeme v této kapitole zabývat je ten, že v následujících kapitolách ukážeme, že řešení získané jiným popisem je ekvivalentní s tímto, a tedy nebude záležet na volbě daného popisu tekutiny.

Předpokládejme, že tekutina je spojitě rozprostřená v jistém objemu. Takovou tekutinu lze charakterizovat jejími makroskopickými veličinami, jimiž jsou teplota  $T$  [K], hustota  $\rho$  [ $\text{kg m}^{-3}$ ] a makroskopická rychlost  $\vec{u}$  [ $\text{m s}^{-1}$ ]. Ne pro každou tekutinu je takovýto popis vhodný. Definujme bezrozměrné Knudsenovo číslo

$$Kn = \frac{l_r}{L_r}, \quad (1.1)$$

kde  $l_r$  [m] je střední volná dráha částic a  $L_r$  [m] je tzv. charakteristický rozměr systému. Dá se ukázat, viz [7], že pro tekutinu, jejíž Knudsenovo číslo je dostatečně malé, je makroskopický popis vhodný.

Budou-li vlastnosti tekutiny splňovat předešlé podmínky, pak jí můžeme popsat rovnicemi

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0, \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = -\nabla \cdot \mathbb{T} + \rho \vec{g}, \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} E) = -\nabla \cdot \vec{q} + \rho \vec{g} \cdot \vec{u} + \rho Q - \nabla \cdot (\mathbb{T} \vec{u}), \quad (1.4)$$

kde  $\rho$  je hustota,  $\vec{u}$  je makroskopická rychlost,  $\mathbb{T}$  [ $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}$ ] je tenzor napětí,  $E$  [ $\text{m}^2 \text{s}^{-2}$ ] je celková vnitřní specifická energie,  $\vec{g}$  [ $\text{m s}^{-2}$ ] je zrychlení příslušející vnějším silám,  $\vec{q}$  [ $\text{kg s}^{-3}$ ] je tepelný tok a  $Q$  [ $\text{m}^2 \text{s}^{-3}$ ] je hustota tepelných zdrojů vztažená na jednotku hmotnosti a platí

$$E = e + \frac{1}{2} \|\vec{u}\|^2, \quad (1.5)$$

kde  $e$  [ $\text{m}^2 \text{s}^{-2}$ ] je specifická vnitřní energie. Symbolem  $\|\cdot\|$  v rovnici (1.5) rozumíme eukleidovskou normu. Pro tenzor napětí platí

$$\mathbb{T} = p\mathbb{I} - \mathbb{T}_v, \quad (1.6)$$

kde  $\mathbb{I}$  je jednotkový tenzor a pro  $\mathbb{T}$  za předpokladu Newtonovské tekutiny platí

$$\mathbb{T}_{v,ii} = \lambda \nabla \cdot \vec{u} + 2\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_i}, \quad i \in \{1, 2, 3\}, \quad (1.7)$$

$$\mathbb{T}_{v,ij} = \mathbb{T}_{v,ji} = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad i \neq j, \quad i \in \{1, 2, 3\}, \quad j \in \{1, 2, 3\}, \quad (1.8)$$

kde  $\mu$  [ $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ ] je dynamická viskozita a  $\lambda$  [ $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ ] je tzv. druhý viskózní koeficient. Tenzor napětí můžeme ekvivalentně přepsat do tvaru

$$\mathbb{T}_v = 2\mu\mathbb{S} + \lambda(\nabla \cdot \vec{u})\mathbb{I} = 2\mu\mathbb{D} + \left( \lambda + \frac{2}{3}\mu \right) (\nabla \cdot \vec{u})\mathbb{I}, \quad (1.9)$$

kde  $\mathbb{S}$  je tenzor rychlosti deformace charakterizující změny ve tvaru a objemu elementárního objemu tekutiny,  $\mathbb{D}$  je  $\mathbb{S}$  bez diagonálních prvků, tedy

$$\mathbb{D} = \frac{1}{2} \left[ \nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T \right]. \quad (1.10)$$

Podle Stokesovy hypotézy, viz [2], je  $\lambda = -\frac{2}{3}\mu$  a proto vztah (1.9) přejde na

$$\mathbb{T}_v = 2\mu\mathbb{D}. \quad (1.11)$$

Podle [15] lze tepelný tok charakterizovat rovností

$$\vec{q} = -\kappa \nabla T, \quad (1.12)$$

kde  $\kappa$  [ $\text{kg m s}^{-3} \text{K}^{-1}$ ] je tepelná vodivost a  $T$  [K] teplota. Rovnice (1.2), (1.3), (1.4) a (1.9) dohromady tvoří Navierovy–Stokesovy–Fourierovy rovnice pro popis kontinua. Pokud lze zanedbat tepelnou vodivost a viskozitu, pak Navierovy–Stokesovy–Fourierovy rovnice nazýváme Eulerovými rovnicemi. Navíc pokud variace hustoty jsou malé, tj.

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \rho \approx 0, \quad (1.13)$$

kde  $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla$  je *materiálová derivace*, pak lze danou tekutinu brát za dobrou aproximaci nestlačitelné tekutiny. Rovnice (1.2) pak přejde do tvaru

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (1.14)$$

a rovnice (1.9) do tvaru

$$\mathbb{T} = 2\mu\mathbb{S}. \quad (1.15)$$

Pro izotermální systém získáme ze stavové rovnice, viz [11], vztah pro hustotu a tlak

$$p = c_s^2 \rho. \quad (1.16)$$

Stlačitelnost tekutiny můžeme charakterizovat bezrozměrným *Machovým* číslem

$$Ma = \frac{u_r}{c_s}, \quad (1.17)$$

kde  $u_r$  [ $\text{m s}^{-1}$ ] je charakteristická rychlost a  $c_s$  [ $\text{m s}^{-1}$ ] je rychlost zvuku v tekutině. Obvykle se tekutina považuje za nestlačitelnou při popisu proudění, pokud  $Ma < 0.3$ , viz [7].

## 1.2 Kinetická teorie

Jedním z přístupů, jak odvodit Lattice–Boltzmannovu metodu (LBM), je pomocí statistické fyziky, konkrétně pomocí kinetické teorie. Výhoda tohoto popisu je ta, že oproti mikroskopickému popisu nemusí řešit problém s výpočetní náročností při velkém počtu částic a oproti makroskopickému popisu nebere systém (tekutinu) jako celek, což může být například v případě řídkých plynů příliš velká aproximace. Tento popis, často nazývaný mesoskopický, je jakýmsi mezičlánkem mezi klasickým mikroskopickým popisem, u něhož stav celého systému získáme ze znalosti stavů všech částic, a makroskopickým popisem, u něhož naopak na systém pohlížíme jako na celek a stav systému získáme vyřešením Navierových–Stokesových rovnic. Odvození Lattice–Boltzmannovy rovnice provedeme v trojrozměrném prostoru. Rovnice pro nižší dimenzi lze poté odvodit analogicky.

Předpokládejme systém o  $N$  částicích stejné hmotnosti  $m$  [kg] v objemu  $V$  [m<sup>3</sup>]. Necht'  $\Xi \equiv \mathbb{R}^3$  je prostor hybností. Každá částice má v čase  $t$  souřadnici  $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$  a hybnost  $\vec{p} = (p_1, p_2, p_3)$ . Celkový systém  $N$  částic je poté charakterizován souřadnicí  $(\mathbf{x}, \mathbf{p})$  v  $\mu$ -fázovém prostoru s mírou

$$d\mu(t) = \prod_{i=1}^N d\vec{x}_i(t) d\vec{p}_i(t), \quad (1.18)$$

kde  $\mathbf{x} = (\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N)$  a  $\mathbf{p} = (\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N)$ ,  $d\vec{x} = dx_1 dx_2 dx_3$ .

Celkový stav systému tedy odpovídá jedné souřadnici ve fázovém prostoru. Tento stav se nazývá mikrostav a odpovídá bodu  $(\mathbf{x}, \mathbf{p})$  v  $6N$  dimenzionálním fázovém prostoru. Časový vývoj (označován též jako *fázová trajektorie*) bodu ve fázovém prostoru můžeme určit z Hamiltonových rovnic

$$\frac{\partial \vec{x}_j}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_j}, \quad (1.19)$$

$$\frac{\partial \vec{p}_j}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{x}_j}, \quad (1.20)$$

kde  $H(\mathbf{x}, \mathbf{p})$  je Hamiltonián daného systému,  $j = 1, 2, \dots, N$ , přičemž budeme používat značení

$$\left(\frac{\partial \vec{x}}{\partial t}\right)_i = \frac{\partial x_i}{\partial t}, i \in \{1, 2, 3\}, \quad (1.21)$$

respektive

$$\left(\frac{\partial H}{\partial \vec{x}}\right)_i = \frac{\partial H}{\partial x_i}, i \in \{1, 2, 3\}. \quad (1.22)$$

Makrostav daného systému je stav definovaný stavovými veličinami (např.: teplotou, energií, tlakem, počtem částic). Prostor všech makrostavů systému je mnohem menší, než fázový prostor určený mikrostavy, viz [10], a proto na každý makrostav připadá několik mikrostavů. Statistickým souborem poté nazveme soubor nezávislých identických systémů takových, že každý systém je v daném makrostavu a v jistém mikrostavu. Necht' je statistický soubor tvořen obecně  $\mathcal{N}$  systémy a necht' každý systém je popsán reprezentativním bodem ve fázovém prostoru. Necht' dále  $d\mathcal{N}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$  je rovno počtu reprezentativních bodů v infinitezimálním fázovém objemu v okolí bodu  $(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ .

Definujme hustotu fázového prostoru  $\varrho(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$  jako

$$\varrho(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) d\mu(t) = \lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \frac{d\mathcal{N}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)}{\mathcal{N}}, \quad (1.23)$$

viz [10]. Takto zavedená hustota splňuje

$$\int_{V^N \times \Xi^N} \varrho \, d\mu = 1, \quad (1.24)$$

kde  $V^N \times \Xi^N \subseteq \mathbb{R}^{6N}$ . Pro výpočet střední hodnoty makroskopických veličin nám poslouží vztah, viz [10],

$$\langle A \rangle(t) = \int_{V^N \times \Xi^N} \varrho(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) A(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) \, d\mu(t). \quad (1.25)$$

Hustotou fázového prostoru se zabývá následující *Liouvilleova věta*.

**Tvrzení 1** (Liouvilleova věta)

*Hustota fázového prostoru  $\varrho$  splňuje rovnost  $\frac{d\varrho}{dt} = 0$ .*

Důkaz přechodného tvrzení 1 lze nalézt například v [10]. Liouvilleovu větu lze interpretovat tak, že hustota fázového prostoru se chová jako hustota nestlačitelné tekutiny.

Od statistického souboru odpovídajícímu makrostavu rovnovážného stavu požadujeme aby jeho hustota fázového prostoru byla nezávislá na čase, tj

$$\frac{\partial \varrho^{(eq)}}{\partial t} = 0. \quad (1.26)$$

Liouvilleovu rovnici lze rozepsat do tvaru

$$\frac{d\varrho}{dt} = \frac{\partial \varrho}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial \varrho}{\partial \vec{p}_i} \cdot \frac{\partial \vec{p}_i}{\partial t} + \frac{\partial \varrho}{\partial \vec{x}_i} \cdot \frac{\partial \vec{x}_i}{\partial t} \right) = 0. \quad (1.27)$$

Dosažením (1.19), (1.20) do (1.27) dostaneme

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{\partial \varrho}{\partial \vec{p}_i} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{x}_i} - \frac{\partial \varrho}{\partial \vec{x}_i} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \right], \quad (1.28)$$

Pro jednoduchost značení se zavádí *Poissonovy závorky*.

**Definice 1** (Poissonovy závorky)

*Mějme funkce  $h_1 = h_1(\vec{x}, \vec{p}, t)$ ,  $h_2 = h_2(\vec{x}, \vec{p}, t)$  definované na  $\mu$ -fázovém prostoru. Poté definujme binární operátor na  $\mu$ -fázovém prostoru vztahem*

$$\{h_1, h_2\} = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{\partial h_1}{\partial \vec{x}_i} \cdot \frac{\partial h_2}{\partial \vec{p}_i} - \frac{\partial h_1}{\partial \vec{p}_i} \cdot \frac{\partial h_2}{\partial \vec{x}_i} \right], \quad (1.29)$$

přičemž operátor  $\{\cdot, \cdot\}$  nazveme *Poissonovy závorky*.

Rovnici (1.28) lze pak přepsat pomocí *Poissonových závorek* do tvaru

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} = -\{\varrho, H\} \quad (1.30)$$

Podmínku (1.26) pro rovnováhu můžeme s použitím předchozí rovnice (1.30) přepsat do tvaru

$$\{\varrho^{(eq)}, H\} = 0. \quad (1.31)$$



Jedno z možných řešení předchozí rovnice (1.31) je tvaru

$$\varrho^{(eq)} \propto e^{-\frac{H}{k_B T}}, \quad (1.32)$$

kde  $k_B = 1,38064852 \cdot 10^{-23} \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-2} \text{ K}^{-1}$  je Boltzmannova konstanta. Takto zavedenou hustotu fázového prostoru lze chápat jako N-částicovou distribuční funkci. Ta ale nese v sobě více informací, než k popisu vývoje systému potřebujeme, jelikož předpokládáme, že jsou částice nerozlišitelné, viz [24].

Naším cílem je pomocí níže zavedené jednočásticové distribuční funkce popsat vývoj celého systému, a proto definujeme jednočásticovou distribuční funkci vztahem

$$f_1(\vec{x}_1, \vec{p}_1, t) = N \int_{V^{N-1} \times \Xi^{N-1}} \varrho(\vec{x}_1, \vec{p}_1, \vec{x}_2, \vec{p}_2, \dots, \vec{x}_N, \vec{p}_N, t) \prod_{i=2}^N d\vec{x}_i d\vec{p}_i, \quad (1.33)$$

kde opět  $V^{N-1} \times \Xi^{N-1} \subseteq \mathbb{R}^{6(N-1)}$ . Jednočásticová distribuční funkce nám udává s jakou pravděpodobností nalezneme částici v bodě  $\vec{x}_1$  s hybností  $\vec{p}_1$  v čase  $t$ . Obdobně s-částicovou distribuční funkci lze zavést vztahem

$$f_s(\vec{x}_1, \vec{p}_1, \vec{x}_2, \vec{p}_2, \dots, \vec{x}_s, \vec{p}_s, t) = \frac{N!}{(N-s)!} \int_{V^{N-s} \times \Xi^{N-s}} \varrho(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) \prod_{i=s+1}^N d\vec{x}_i d\vec{p}_i, \quad (1.34)$$

viz [10], kde  $s \leq N$ . Pro jedno-částicovou distribuční funkci dále z rovnice (1.24) vyplývá

$$\int_{\mathbb{R}^{6N}} f_1(\vec{x}, \vec{p}, t) d\vec{x} d\vec{p} = N. \quad (1.35)$$

Pomocí jednočásticové distribuční funkce lze zavést následující makroskopické veličiny, se kterými budeme dále pracovat:

$$n(\vec{x}, t) = \frac{N(\vec{x}, t)}{V} = \int_{\Xi} f_1(\vec{x}, \vec{p}, t) d\vec{p}, \quad (1.36)$$

$$\rho(\vec{x}, t) = m \int_{\Xi} f_1(\vec{x}, \vec{p}, t) d\vec{p}, \quad (1.37)$$

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \frac{1}{\rho(\vec{x}, t)} \int_{\Xi} f_1(\vec{x}, \vec{p}, t) \vec{p} d\vec{p}, \quad (1.38)$$

kde  $n(\vec{x}, t)$  [ $\text{m}^{-3}$ ] označuje objemovou hustotu počtu částic,  $\rho(\vec{x}, t)$  [ $\text{kg m}^{-3}$ ] makroskopickou hustotu tekutiny,  $\vec{u}(\vec{x}, t)$  [ $\text{m s}^{-1}$ ] makroskopickou rychlost dané tekutiny.

Pro další postup při odvozování Boltzmannovy transportní rovnice zavedeme veličinu  $\varrho_s$  jako

$$\varrho_s = \int_{V^{(N-s)} \times \Xi^{(N-s)}} \varrho(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) \prod_{i=s+1}^N d\vec{x}_i d\vec{p}_i. \quad (1.39)$$

Pro s-částicovou distribuční funkci poté máme

$$f_s = \frac{N!}{(N-s)!} \varrho_s. \quad (1.40)$$

Z rovnice (1.39) vyplývá

$$\varrho_N = \varrho. \quad (1.41)$$

### 1.2.1 BBGKY hierarchie

K určení s-částicové hustoty  $\varrho_s$  použijeme *BBGKY hierarchii* (zkratka je odvozena z počátečních písmen jmen autorů Bogouliubov, Born, Green, Kirkwood, Yvon). Uvažujme, že pro počet částic daného systému platí  $N \propto O(10^{23})$ . Pro takto uvažovaný systém lze sestavit Hamiltonián ve tvaru

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N \vec{p}_i^2 + \sum_{i=1}^N U(\vec{x}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \psi(\vec{x}_i - \vec{x}_j), \quad (1.42)$$

kde  $U$  [ $\text{kg m}^2 \text{s}^{-2}$ ] je potenciál vnějších sil, tj.  $\vec{F} = -\nabla U$ , kde  $\vec{F}$  [ $\text{kg m s}^{-2}$ ] je vektor vnějších sil, a  $\psi$  [ $\text{kg m}^2 \text{s}^{-2}$ ] je potenciál binárních srážek. Jiné než binární srážky nebudeme brát v definici Hamiltoniánu (1.42) v úvahu. Dále předpokládejme, že

$$\psi(\vec{x}) = 0 \quad (1.43)$$

pro  $\|\vec{x}\| \gg \ell$ , kde  $\ell$  [ $m$ ] je velikost řádově odpovídající velikosti atomu ( $\ell \sim 10^{-10} m$ ). Hamiltonián z rovnice (1.42) můžeme separovat, tj. rozdělit a rozepsat do tvaru

$$H = H_s + H_{N-s} + H', \quad (1.44)$$

kde

$$H_s = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^s \vec{p}_i^2 + \sum_{i=1}^s U(\vec{x}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^s \sum_{j=1}^s \psi(\vec{x}_i - \vec{x}_j), \quad (1.45)$$

$$H_{N-s} = \frac{1}{2m} \sum_{i=s+1}^N \vec{p}_i^2 + \sum_{i=1+s}^N U(\vec{x}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i=1+s}^N \sum_{j=1+s}^N \psi(\vec{x}_i - \vec{x}_j), \quad (1.46)$$

$$H' = \sum_{i=1}^s \sum_{j=s+1}^N \psi(\vec{x}_i - \vec{x}_j), \quad (1.47)$$

přičemž  $H'$  je ta část Hamiltoniánu, která zahrnuje energii vzájemné interakce.

Zderivujeme-li parciálně s-částicovou distribuční funkci podle času, dostaneme z rovnice (1.40) vztah

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} = \frac{N!}{(N-s)!} \frac{\partial \varrho_s}{\partial t}. \quad (1.48)$$

Dále z rovnice (1.39) plyne

$$\frac{\partial \varrho_s}{\partial t} = \int_{V^{N-s} \times \Xi^{N-s}} \frac{\partial \varrho}{\partial t} \prod_{i=s+1}^N d\vec{x}_i d\vec{p}_i. \quad (1.49)$$

Dosazením vztahu (1.28) do předchozí rovnice (1.49) dostaneme

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} = -\frac{N!}{(N-s)!} \int_{V^{N-s} \times \Xi^{N-s}} \{\varrho, H\} \prod_{i=s+1}^N d\vec{x}_i d\vec{p}_i. \quad (1.50)$$

Pro Poissonovy závorky evidentně platí vztah

$$\{A, B + C\} = \{A, B\} + \{A, C\}, \quad (1.51)$$

kde  $A, B, C$  jsou libovolné funkce od souřadnic  $\vec{x}$ , hybnosti  $\vec{p}$  a času  $t$ , a proto lze rovnici (1.50) rozdělit na součet 3 členů dosazením vztahu (1.44). Podívejme se na tyto tři členy blíže.

Pro člen obsahující  $H_s$  platí

$$\begin{aligned}
& - \int_{V^{N-s} \times \Xi^{N-s}} \{\varrho, H_s\} \prod_{i=s+1}^N d\vec{x}_i d\vec{p}_i = - \int_{V^{N-s} \times \Xi^{N-s}} \left[ \sum_{j=1}^N \frac{\partial \rho}{\partial \vec{x}_j} \cdot \frac{\partial H_s}{\partial \vec{p}_j} - \frac{\partial \rho}{\partial \vec{p}_j} \cdot \frac{\partial H_s}{\partial \vec{x}_j} \right] \prod_{i=s+1}^N d\vec{x}_i d\vec{p}_i = \\
& = - \sum_{j=1}^N \left[ \left( \int_{V^{N-s} \times \Xi^{N-s}} \frac{\partial \rho}{\partial \vec{x}_j} \prod_{i=s+1}^N d\vec{x}_i d\vec{p}_i \right) \cdot \frac{\partial H_s}{\partial \vec{p}_j} - \left( \int_{V^{N-s} \times \Xi^{N-s}} \frac{\partial \rho}{\partial \vec{p}_j} \prod_{i=s+1}^N d\vec{x}_i d\vec{p}_i \right) \cdot \frac{\partial H_s}{\partial \vec{x}_j} \right] = \\
& = - \left\{ \int_{V^{N-s} \times \Xi^{N-s}} \varrho \prod_{i=s+1}^N d\vec{x}_i d\vec{p}_i, H_s \right\} = -\{\varrho_s, H_s\}, \quad (1.52)
\end{aligned}$$

kde druhá rovnost platí díky tomu, že členy  $H_s$  nezávisí na integračních proměnných.

Pro člen obsahující  $H_{N-s}$  dostaneme

$$- \int_{V^{N-s} \times \Xi^{N-s}} \{\varrho, H_{N-s}\} \prod_{i=s+1}^N d\vec{x}_i d\vec{p}_i = \int_{V^{N-s} \times \Xi^{N-s}} \sum_{j=1}^N \left[ \frac{\partial \varrho}{\partial \vec{p}_j} \cdot \frac{\partial H_{N-s}}{\partial \vec{x}_j} - \frac{\partial \varrho}{\partial \vec{x}_j} \cdot \frac{\partial H_{N-s}}{\partial \vec{p}_j} \right] \prod_{i=s+1}^N d\vec{p}_i d\vec{x}_i. \quad (1.53)$$

Dosažením vztahu (1.46) do rovnice (1.53) dostaneme

$$\begin{aligned}
& - \int_{V^{N-s} \times \Xi^{N-s}} \{\varrho, H_{N-s}\} \prod_{i=s+1}^N d\vec{x}_i d\vec{p}_i = \\
& = \int_{V^{N-s} \times \Xi^{N-s}} \sum_{j=1}^N \frac{\partial \varrho}{\partial \vec{p}_j} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}_j} \left( \frac{1}{2m} \sum_{k=s+1}^N \vec{p}_k^2 + \sum_{k=1+s}^N U(\vec{x}_k) + \frac{1}{2} \sum_{k=1+s}^N \sum_{l=1+s}^N \psi(\vec{x}_k - \vec{x}_l) \right) - \\
& - \frac{\partial \varrho}{\partial \vec{x}_j} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}_j} \left( \frac{1}{2m} \sum_{k=s+1}^N \vec{p}_k^2 + \sum_{k=1+s}^N U(\vec{x}_k) + \frac{1}{2} \sum_{k=1+s}^N \sum_{l=1+s}^N \psi(\vec{x}_k - \vec{x}_l) \right) \prod_{i=s+1}^N d\vec{x}_i d\vec{p}_i = \\
& = \int_{V^{N-s} \times \Xi^{N-s}} \left[ \sum_{j=s+1}^N \frac{\partial \varrho}{\partial \vec{p}_j} \cdot \left( \frac{\partial U(\vec{x}_j)}{\partial \vec{x}_j} + \frac{1}{2} \sum_{k=s+1}^N \frac{\partial \psi(\vec{x}_j - \vec{x}_k)}{\partial \vec{x}_j} \right) - \frac{1}{m} \frac{\partial \varrho}{\partial \vec{x}_j} \cdot \vec{p}_j \right] \prod_{i=s+1}^N d\vec{x}_i d\vec{p}_i. \quad (1.54)
\end{aligned}$$

U členu předchozí rovnice (1.54) za posledním rovnítkem je dobré si povšimnout, že součinitelé parciálních derivací hustoty nezávisí na hybnosti nebo na souřadnici a pomocí Greenovy formule lze ukázat, že

$$\int_{V^{N-s} \times \Xi^{N-s}} \{\varrho, H_{N-s}\} \prod_{i=s+1}^N d\vec{x}_i d\vec{p}_i = 0. \quad (1.55)$$

Pro poslední člen obsahující  $H'$  platí

$$\begin{aligned}
& - \int_{V^{N-s} \times \Xi^{N-s}} \{\varrho, H'\} \prod_{i=s+1}^N d\vec{x}_i d\vec{p}_i = \int_{V^{N-s} \times \Xi^{N-s}} \sum_{j=1}^N \left( \frac{\partial \varrho}{\partial \vec{p}_j} \cdot \frac{\partial H'}{\partial \vec{x}_j} - \frac{\partial \varrho}{\partial \vec{x}_j} \cdot \frac{\partial H'}{\partial \vec{p}_j} \right) \prod_{i=s+1}^N d\vec{x}_i d\vec{p}_i = \\
& = \int_{V^{N-s} \times \Xi^{N-s}} \left[ \sum_{k=1}^s \frac{\partial \varrho}{\partial \vec{p}_k} \cdot \sum_{j=s+1}^N \frac{\partial \psi(\vec{x}_k - \vec{x}_j)}{\partial \vec{x}_k} + \sum_{j=s+1}^N \frac{\partial \varrho}{\partial \vec{p}_j} \cdot \sum_{k=1}^s \frac{\partial \psi(\vec{x}_j - \vec{x}_k)}{\partial \vec{x}_j} \right] \prod_{i=s+1}^N d\vec{x}_i d\vec{p}_i, \quad (1.56)
\end{aligned}$$

přičemž člen  $\frac{\partial H'}{\partial \vec{p}_j}$  je roven nule  $\forall j \in \{1, 2, \dots, N\}$  neboť  $H'$  nezávisí na hybnosti. Druhý člen rovnice (1.56) v hranaté závorce je roven nule, což se dá ukázat opět aplikací Greenovy formule, a první člen lze zjednodušit díky symetrii potenciálu  $\psi$  na tvar

$$\begin{aligned}
& - \int_{V^{N-s} \times \Xi^{N-s}} \sum_{k=1}^s \frac{\partial \varrho}{\partial \vec{p}_k} \cdot \sum_{j=s+1}^N \frac{\partial \psi(\vec{x}_k - \vec{x}_j)}{\partial \vec{x}_k} \prod_{i=s+1}^N d\vec{x}_i d\vec{p}_i = \\
& = (N-s) \int_{V^{N-s} \times \Xi^{N-s}} \sum_{k=1}^s \frac{\partial \psi(\vec{x}_k - \vec{x}_{s+1})}{\partial \vec{x}_k} \cdot \frac{\partial \varrho}{\partial \vec{p}_k} \prod_{i=s+1}^N d\vec{x}_i d\vec{p}_i = \\
& = (N-s) \sum_{k=1}^s \int_{V \times \Xi} \frac{\partial \psi(\vec{x}_k - \vec{x}_{s+1})}{\partial \vec{x}_k} \frac{\partial}{\partial \vec{p}_k} \left[ \int_{V^{N-s-1} \times \Xi^{N-s-1}} \varrho \prod_{i=s+2}^N d\vec{x}_i d\vec{p}_i \right] d\vec{x}_{s+1} d\vec{p}_{s+1}. \quad (1.57)
\end{aligned}$$

Z předešlých úprav vyplývá, že rovnici (1.50) lze přepsat do tvaru

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} - \{H_s, f_s\} = \sum_{i=1}^s \int_{V \times \Xi} \frac{\partial \psi(\vec{x}_i - \vec{x}_{s+1})}{\partial \vec{x}_i} \frac{\partial f_{s+1}}{\partial \vec{p}_i} d\vec{x}_{s+1} d\vec{p}_{s+1}. \quad (1.58)$$

Rovnice (1.58) je známá jako BBGKY hierarchie. Člen na levé straně v rovnici (1.58) popisuje šíření částic a člen na pravé straně srážky  $s$  částic s  $N-s$  zbývajícími. Vidíme, že parciální časová derivace funkce  $f_s$  závisí na  $f_{s+1}$ . Tuto závislost se dále pokusíme odstranit tak, abychom získali rovnici, v níž bude vystupovat pouze  $s$ -částicová distribuční funkce  $f_s$ .

## 1.2.2 Boltzmannova transportní rovnice

Naším záměrem v tomto odstavci je získat rovnici obsahující pouze jednočásticovou distribuční funkci. Zaměříme se nyní na první dvě rovnice hierarchie (1.58), tj. pro  $s = 1, 2$ , a rozepíšeme je.

$$\left[ \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial U}{\partial \vec{x}_1} \frac{\partial}{\partial \vec{p}_1} + \frac{\vec{p}_1}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{x}_1} \right] f_1(\vec{x}_1, \vec{p}_1, t) = \int_{V \times \Xi} \frac{\partial \psi(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)}{\partial \vec{x}_1} \frac{\partial f_2(\vec{x}_1, \vec{p}_1, \vec{x}_2, \vec{p}_2, t)}{\partial \vec{p}_1} d\vec{x}_2 d\vec{p}_2, \quad (1.59)$$

$$\begin{aligned}
& \left[ \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial U}{\partial \vec{x}_1} \frac{\partial}{\partial \vec{p}_1} - \frac{\partial U}{\partial \vec{x}_2} \frac{\partial}{\partial \vec{p}_2} + \frac{\vec{p}_1}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{x}_1} + \frac{\vec{p}_2}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{x}_2} - \frac{\partial \psi(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)}{\partial \vec{x}_1} \left( \frac{\partial}{\partial \vec{p}_1} - \frac{\partial}{\partial \vec{p}_2} \right) \right] f_2(\vec{x}_1, \vec{p}_1, \vec{x}_2, \vec{p}_2, t) = \\
& = \int_{V \times \Xi} \left[ \frac{\partial \psi(\vec{x}_1 - \vec{x}_3)}{\partial \vec{x}_1} \frac{\partial}{\partial \vec{p}_1} + \frac{\partial \psi(\vec{x}_2 - \vec{x}_3)}{\partial \vec{x}_2} \frac{\partial}{\partial \vec{p}_2} \right] f_3(\vec{x}_1, \vec{p}_1, \vec{x}_2, \vec{p}_2, \vec{x}_3, \vec{p}_3, t) d\vec{x}_3 d\vec{p}_3. \quad (1.60)
\end{aligned}$$

Všechny členy v hranatých závorkách mají rozměr  $s^{-1}$ , a proto zavedeme následující časové intervaly a provedeme k nim rozměrovou analýzu.

První časový interval označme  $\tau_U$  a zaved' me ho nejprve neformálním, přesto v literatuře [10], [24] se vyskytujícím způsobem, tj.

$$\frac{1}{\tau_U} \propto \frac{\partial U}{\partial \vec{x}} \frac{\partial}{\partial \vec{p}}. \quad (1.61)$$

Časový interval  $\tau_U$  lze chápat jako dobu, během níž dojde ke změně potenciálu  $U$  v rámci charakteristické vzdálenosti  $L$ , tedy, viz [10],

$$\tau_U \approx \frac{L}{v_r}, \quad (1.62)$$

kde  $v_r$  [ $\text{m s}^{-1}$ ] je charakteristická rychlost částic plynu při pokojové teplotě, tj.  $20^\circ\text{C}$ . Vhodnější způsob pro zavedení času  $\tau_U$  by byl

$$\frac{1}{\tau_U} \propto \frac{|\Delta U|}{\|\Delta\vec{x}\| \|\Delta\vec{p}\|}, \quad (1.63)$$

kde  $\Delta$  bereme jako infinitezimální změnu. Díky (1.62) lze  $\tau_U$  udělat libovolně velký. Obdobným, opět neformálním, přesto v literatuře vyskytujícím se způsobem zavedeme i další časového interval  $\tau_c$ ,

$$\frac{1}{\tau_c} \propto \frac{\partial\psi}{\partial\vec{x}} \frac{\partial}{\partial\vec{p}}, \quad (1.64)$$

přičemž  $\tau_c$  nazveme kolizním časovým intervalem, neboť odpovídá přibližně době, během níž probíhá srážka mezi částicemi. Je to doba, během níž se částice nacházejí maximálně v efektivní vzdálenosti  $\ell$ . Formálněji bychom kolizní časový interval měli zavést pomocí následující vztahu

$$\frac{1}{\tau_c} \propto \frac{\|\Delta\psi\|}{\|\Delta\vec{x}\| \|\Delta\vec{p}\|}. \quad (1.65)$$

Předpokládejme, že  $\tau_c$  tvoří nejmenší uvažovaný časový interval, čímž dostáváme, že člen  $\frac{\partial\psi}{\partial\vec{x}}$  má největší vliv a v rovnicích (1.59) a (1.60) udává, jak rychle se bude distribuční funkce měnit.

Nakonec zaved' me *hlavní volný čas*  $\tau_X$  jako časový interval tak, že

$$\frac{1}{\tau_X} \propto \int_{V \times \Xi} \frac{\partial\psi}{\partial\vec{x}} \frac{\partial}{\partial\vec{p}} \left( \frac{f_{s+1}}{f_s} \right) d\vec{x} d\vec{p}. \quad (1.66)$$

Dále platí, viz [10],

$$\tau_X \approx \frac{\tau_c}{n\ell^3}, \quad (1.67)$$

kde  $n = \frac{N}{V}$ . Časový interval  $\tau_X$  charakterizuje časový interval mezi srážkami a pro srážky na krátkou vzdálenost, tj. (1.43), patří, viz [10],

$$\frac{\tau_c}{\tau_X} \ll 1. \quad (1.68)$$

V rovnici (1.59) pro funkci  $f_1$  vystupuje kolizní člen pouze na pravé straně rovnice. Oproti tomu v dalších rovnicích BBGKY hierarchie vystupuje již kolizní člen na obou stranách rovnice a pro řídký plyn je člen na pravé straně v těchto rovnicích mnohem menší, než člen na levé straně díky (1.68). Proto zanedbáme vliv 3, 4, ..., N-té rovnice BBGKY hierarchie a položíme pravou stranu rovnice (1.60) rovnu nule, neboť je úměrná  $n\ell^3$  a předpokládáme, že  $n\ell^3 \ll 1$ . Dále bereme v potaz časové rozdíly delší než  $\tau_c$  a kratší než  $\tau_U$ , čímž lze zanedbat člen obsahující potenciál  $U$ . Dostaneme tak rovnici, viz [24],

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}_1}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{x}_1} + \frac{\vec{p}_2}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{x}_2} - \frac{1}{2} \frac{\partial\psi(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)}{\partial \vec{x}_1} \left[ \frac{\partial}{\partial \vec{p}_1} - \frac{\partial}{\partial \vec{p}_2} \right] \right) f_2 \approx 0. \quad (1.69)$$

Dále se pokusíme upravit tvar kolizního operátoru na pravé straně rovnice (1.59). Víme, že  $\rho_2(\vec{x}_1, \vec{p}_1, \vec{x}_2, \vec{p}_2, t)$  udává pravděpodobnost nalezení jedné částice systému se souřadnicí  $(\vec{x}_1, \vec{p}_1)$  a druhé se souřadnicí  $(\vec{x}_2, \vec{p}_2)$  v čase  $t$ . Budeme-li předpokládat, že jsou částice v dostatečné vzdálenosti, můžeme aproximovat dvou-částicovou distribuční funkci  $f_2$  pomocí jedno-částicové distribuční funkce  $f_1$  tak, že

$$f_2(\vec{x}_1, \vec{p}_1, \vec{x}_2, \vec{p}_2, t) \approx f_1(\vec{x}_1, \vec{p}_1, t) f_1(\vec{x}_2, \vec{p}_2, t), \quad (1.70)$$

pro  $\|\vec{x}_1 - \vec{x}_2\| \gg \ell$ , viz [24]. Naším cílem, viz předpoklad (1.43), je přejít stejným způsobem od dvou-částicové distribuční funkce k jednočásticové distribuční funkci pro  $\|\vec{x}_1 - \vec{x}_2\| \ll \ell$ . Díky zavedeným

časovým intervalům můžeme usoudit z rovnic (1.69) a (1.59), že distribuční funkce  $f_1$  se mění na větším časovém intervalu, než  $f_2$ .

Položme dále

$$\vec{X} = \left( \frac{\vec{x}_1 + \vec{x}_2}{2} \right), \quad (1.71a)$$

$$\vec{x} = \vec{x}_2 - \vec{x}_1, \quad (1.71b)$$

$$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2, \quad (1.71c)$$

$$\vec{p} = \frac{1}{2}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2). \quad (1.71d)$$

Předpokládejme, že  $f_2$  se mění pomaleji vůči souřadnici  $\vec{X}$  než vůči  $\vec{x}$ , tj.

$$\left\| \frac{\partial \hat{f}_2}{\partial \vec{x}} \right\| \gg \left\| \frac{\partial \hat{f}_2}{\partial \vec{X}} \right\|, \quad (1.72)$$

kde  $\hat{f}_2 = \hat{f}_2(\vec{X}, \vec{x}, \vec{P}, \vec{p})$  vznikla z  $f_2$  substitucí (1.71). Z rovnice (1.71b) plyne

$$\frac{\partial \hat{f}_2}{\partial \vec{x}} \approx \frac{\partial f_2}{\partial \vec{x}_2} \approx -\frac{\partial f_2}{\partial \vec{x}_1}. \quad (1.73)$$

Z Liouvilleovy věty díky malým změnám distribuční funkce  $\hat{f}_2$  v souřadnicích  $\vec{X}, \vec{P}$ , dostaneme

$$\frac{\partial \hat{f}_2}{\partial t} \approx 0. \quad (1.74)$$

Z (1.73) a (1.74) dostaneme pro rovnici (1.69) tvar

$$\frac{\partial \psi(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)}{\partial \vec{x}_1} \left( \frac{\partial}{\partial \vec{p}_1} - \frac{\partial}{\partial \vec{p}_2} \right) f_2 = \left( \frac{\vec{p}_1 - \vec{p}_2}{m} \right) \frac{\partial \hat{f}_2}{\partial \vec{x}}. \quad (1.75)$$

Označme pravou stranu rovnice (1.59) symbolem  $\Omega(f_2, f_2)$ , tj.

$$\Omega(f_2, f_2) = \int_{V \times \Xi} \frac{\partial \psi(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)}{\partial \vec{x}_1} \frac{\partial f_2}{\partial \vec{p}_1} d\vec{x}_2 d\vec{p}_2. \quad (1.76)$$

Opět použitím Greenovy formule jako v předchozích případech se dá ukázat, že

$$\int_{V \times \Xi} \frac{\partial \psi(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)}{\partial \vec{x}_1} \frac{\partial f_2}{\partial \vec{p}_2} d\vec{x}_2 d\vec{p}_2 = 0, \quad (1.77)$$

můžeme rovnici (1.76) přepsat na tvar

$$\Omega(f_2, f_2) = \int_{V \times \Xi} \frac{\partial \psi(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)}{\partial \vec{x}_1} \left( \frac{\partial}{\partial \vec{p}_1} - \frac{\partial}{\partial \vec{p}_2} \right) f_2 d\vec{x}_2 d\vec{p}_2 \quad (1.78)$$

a ze vztahu (1.75) máme

$$\Omega(\hat{f}_2, \hat{f}_2) \approx \int_{V \times \Xi} \left( \frac{\vec{p}_1 - \vec{p}_2}{m} \right) \frac{\partial \hat{f}_2}{\partial \vec{x}} d\vec{x} d\vec{p}_2. \quad (1.79)$$

Podotkněme, že v rovnici (1.79) stále předpokládáme, že platí  $\|\vec{x}_1 - \vec{x}_2\| \leq \ell$ .

## Srážky částic

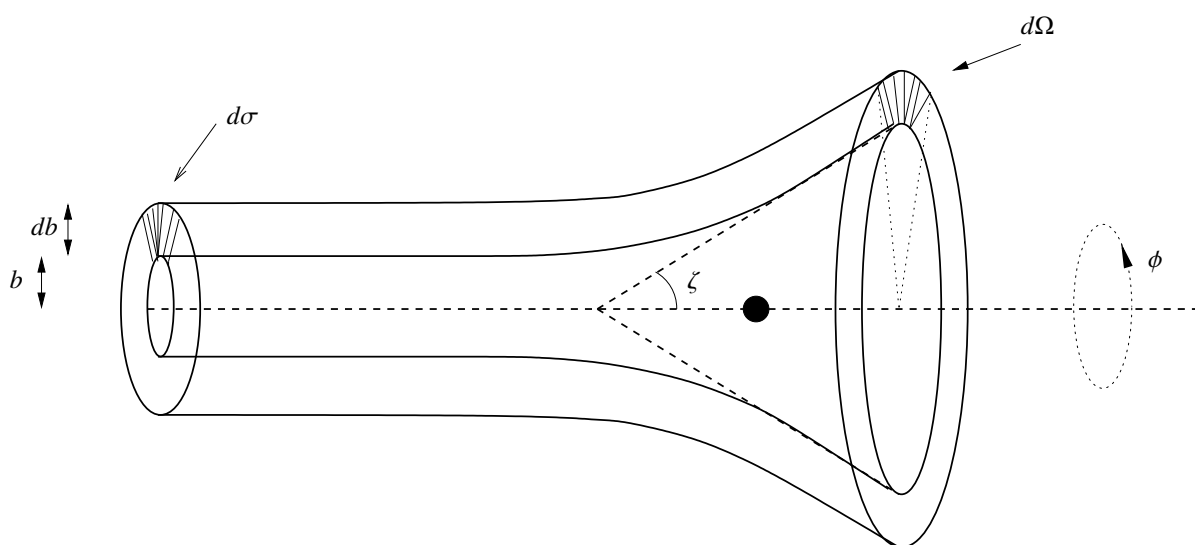
Před odvozením konečné podoby kolizního operátoru Boltzmannovy transportní rovnice  $\Omega(f, f)$  se zaměříme na srážky dvou částic. Uvažujme srážku dvou částic o hybnostech  $\vec{p}_1$  a  $\vec{p}_2$  se stejnou hmotností  $m$ . Vztáhněme naši vztažnou soustavu k částici s hybností  $\vec{p}_1$ . Relativní rychlost druhé částice vůči první je rovna

$$\vec{c} = \vec{c}_2 - \vec{c}_1, \quad (1.80)$$

kde  $\vec{p}_i = m \vec{c}_i$ ,  $i \in \{1, 2\}$ . Předpokládejme, že na částici s hybností  $\vec{p}_1$  dopadají částice s relativní rychlostí  $\vec{c}$  a položme

$$I = \frac{N}{V} \|\vec{c}\|, \quad (1.81)$$

kde  $I$  [ $\text{m}^{-2} \text{s}^{-1}$ ] udává tok částic s relativní rychlostí  $\vec{c}$ . Dále definujme *impaktní parametr*  $b$  [m] a *úhel rozptylu*  $\zeta$  [rad], viz obrázek 1.1.



Obrázek 1.1: Ilustrace rozptylu částic.

Z obrázku 1.1 je vidět, že

$$d\sigma = b db d\phi, \quad (1.82)$$

$$d\Omega = \sin(\zeta) d\zeta d\phi, \quad (1.83)$$

kde  $d\sigma$  se nazývá účinný průřez a  $d\Omega$  je prostorový úhel, do nějž se částice odrazí. Počet částic odražených do  $d\Omega$  za jednotku času je roven  $I d\sigma$ , což lze zapsat jako

$$I \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = I b db d\phi, \quad (1.84)$$

kde  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  nazýváme diferenciální účinný průřez a platí

$$\left| \frac{d\sigma}{d\Omega} \right| = \frac{b}{\sin(\zeta)} \left| \frac{db}{d\zeta} \right|. \quad (1.85)$$

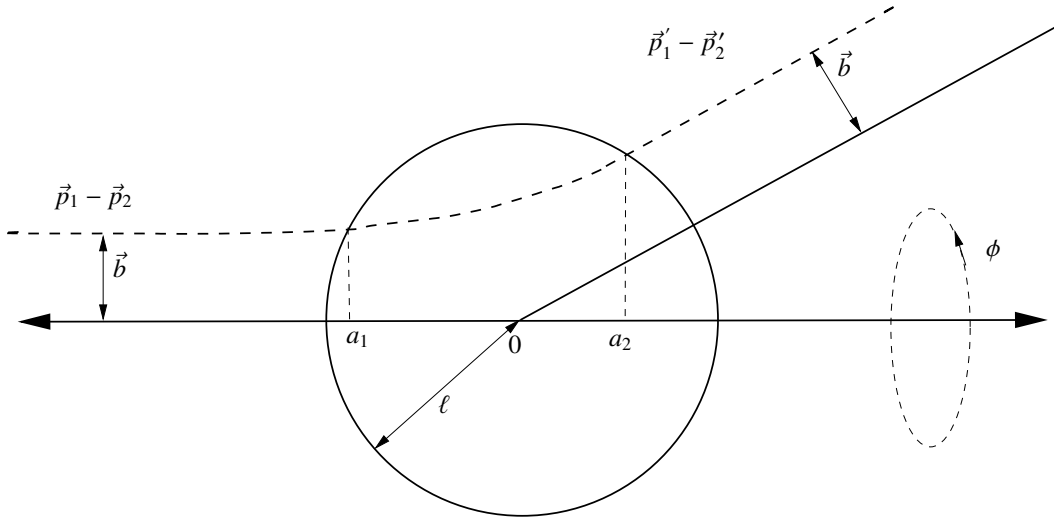
Diferenciální účinný průřez dává do souvislosti impaktní parametr  $b$  a úhel rozptylu  $\zeta$ , které tvoří charakteristické veličiny pro srážky při daném potenciálu  $\psi$ .

Přejdeme nyní k cylindrickým souřadnicím určenými polohou  $a$  na ose ve směru vektoru  $\vec{c}$ , impaktním parametrem  $b$  a úhlem  $\phi$ , viz obrázek 1.2.

Kolizní operátor  $\Omega(f, f)$  tak přejde do tvaru, viz [10],

$$\Omega(\tilde{f}_2, \tilde{f}_2) = \int_{\Xi} d\vec{p}_2 \|\vec{c}_1 - \vec{c}_2\| \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{+\infty} db b \int_{a_1}^{a_2} \frac{\partial \tilde{f}_2}{\partial a}, \quad (1.86)$$

přičemž bychom měli správně v posledním integrálu předchozí rovnice (1.86) integrovat od  $-\infty$  do  $\infty$ , ale díky (1.43) stačí integrovat od  $a_1$  do  $a_2$ , viz obrázek 1.2 a  $\tilde{f}_2$  vznikne z  $f_2$  přechodem k cylindrickým souřadnicím v proměnné  $\vec{x}_2$ .



Obrázek 1.2: Srážka dvou částic.

Rovnici (1.86) lze přepsat do tvaru

$$\Omega(\tilde{f}_2, \tilde{f}_2) = \int_{\Xi} d\vec{p}_2 \|\vec{c}_1 - \vec{c}_2\| \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{+\infty} db b [\tilde{f}_2(\vec{p}'_1, \vec{x}_1, \vec{p}'_2, b, a_2, \phi, t) - \tilde{f}_2(\vec{p}_1, \vec{x}_1, \vec{p}_2, b, a_1, \phi, t)], \quad (1.87)$$

kde  $\vec{p}'$  označuje hybnost po srážce. Pro srážející se částice platí zákon zachování hybnosti, viz [6],

$$\vec{p}'_1 + \vec{p}'_2 = \vec{p}_1 + \vec{p}_2, \quad (1.88)$$

a zákon zachování energie, viz [6], ze kterého plyne

$$(\vec{p}'_1)^2 + (\vec{p}'_2)^2 = (\vec{p}_1)^2 + (\vec{p}_2)^2. \quad (1.89)$$

V posledním kroku zaved'me předpoklad *molekulárního chaosu*, což nám umožní zapsat dvoučásticovou distribuční funkci i za podmínky  $\|\vec{x}_1 - \vec{x}_2\| \leq \ell$  jako

$$f_2(\vec{x}_1, \vec{p}_1, \vec{x}_2, \vec{p}_2, t) \approx f_1(\vec{x}_1, \vec{p}_1, t) f_1(\vec{x}_1, \vec{p}_2, t). \quad (1.90)$$

Všechny funkce  $f_1$  jsou určeny ve stejném bodě prostoru díky předpokladu, že jednočásticová distribuční funkce se nemění na vzdálenost menší než  $\ell$ . Dále přejdeme od hybností k rychlostem. S hybnostmi nebudeme dále již pracovat, neboť předpokládáme, že všechny částice mají stejnou hmotnost a pro jednoduchost ve značení nebudeme rozlišovat mezi funkcemi od hybností a rychlostí.



Konečný tvar Boltzmannovy transportní rovnice má poté podobu

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 c_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + \frac{1}{m} \sum_{i=1}^3 F_i \frac{\partial f}{\partial c_i} = \Omega(f, f) \quad (1.91)$$

kde jsme v předchozí rovnici (1.91) přestali psát dolní index u jednočásticové distribuční funkce, protože v dalším postupu budeme pracovat již pouze s jednočásticovou distribucí, tj.  $f_1 \equiv f$ . Levá strana rovnice (1.91) popisuje pohyb částice v poli vnějších sil s potenciálem  $U$  a pravá strana popisuje binární srážky částic. Poznamenejme ještě, že značení kolizního operátoru se dvěma stejnými argumenty vychází z faktu, že částice mají stejnou distribuční funkci. Kdyby tomu tak nebylo, museli bychom v obecném případě psát kolizní operátor ve tvaru

$$\Omega(f, g) = \int_{\Xi} d\vec{c}_1 \int_0^{+\infty} db \int_0^{2\pi} d\phi \left( g(\vec{x}, \vec{c}_1', t) f(\vec{x}, \vec{c}', t) - g(\vec{x}, \vec{c}_1, t) f(\vec{x}, \vec{c}, t) \right) \|\vec{c}_1' - \vec{c}\| b, \quad (1.92)$$

kde  $f$ , resp.  $g$  jsou distribuční funkce první, resp. druhé částice.

### Kolizní invarianty

Pomocí jednočásticové distribuční funkce lze získat makroskopické veličiny, se kterými budeme dále pracovat:

$$\rho(\vec{x}, t) e(\vec{x}, t) = \frac{m}{2} \int_{\Xi} (\vec{c} - \vec{u}(\vec{x}, t))^2 f_1(\vec{x}, \vec{c}, t) d\vec{c}, \quad (1.93)$$

$$\mathbb{T}_{\alpha, \beta}(\vec{x}, t) = m \int_{\Xi} (\vec{c} - \vec{u}(\vec{x}, t))_{\alpha} (\vec{c} - \vec{u}(\vec{x}, t))_{\beta} f_1(\vec{x}, \vec{c}, t) d\vec{c}, \quad (1.94)$$

$$\Pi_{\alpha, \beta}(\vec{x}, t) = m \int_{\Xi} c_{\alpha} c_{\beta} f_1(\vec{x}, \vec{c}, t) d\vec{c} = \rho(\vec{x}, t) u_{\alpha}(\vec{x}, t) u_{\beta}(\vec{x}, t) + \mathbb{T}_{\alpha, \beta}(\vec{x}, t), \quad (1.95)$$

$$\vec{q}(\vec{x}, t) = \frac{m}{2} \int_{\Xi} \|\vec{c} - \vec{u}(\vec{x}, t)\|^2 (\vec{c} - \vec{u}(\vec{x}, t)) f_1(\vec{x}, \vec{c}, t) d\vec{c}, \quad (1.96)$$

$$\mathbb{Q}_{\alpha, \beta, \gamma}(\vec{x}, \vec{c}) = m \int_{\Xi} f_1(\vec{x}, \vec{c}, t) c_{\alpha} c_{\beta} c_{\gamma} d\vec{c}, \quad (1.97)$$

kde  $\alpha, \beta, \gamma \in \{1, 2, 3\}$ ,  $e$  [ $\text{m}^2 \text{s}^{-2}$ ] označuje specifickou vnitřní energii,  $\mathbb{T}_{\alpha, \beta}$  [ $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}$ ] složky tenzor napětí,  $\Pi_{\alpha, \beta}$  [ $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}$ ] složky tenzoru tlaku,  $\vec{q}$  [ $\text{kg s}^{-3}$ ] tepelný tok a  $\mathbb{Q}_{\alpha, \beta, \gamma}$  [ $\text{kg s}^{-3}$ ] složky tenzoru toku vnitřní energie, viz [7], a platí

$$q_{\alpha} = \frac{1}{2} \sum_{\beta=1}^3 \mathbb{Q}_{\alpha, \beta, \beta}. \quad (1.98)$$

Pro kolizní operátor existuje 5 tzv. kolizních invariantů. Kolizním invariantem nazveme funkci  $\varphi(\vec{c})$ , která splňuje

$$\varphi(\vec{c}) + \varphi(\vec{c}_1) = \varphi(\vec{c}') + \varphi(\vec{c}'_1). \quad (1.99)$$

Pomocí kolizních invariantů lze ukázat, že řešení Boltzmannovy transportní rovnice (1.91) je v souladu s řešením Navierových–Stokesových rovnic. Pro kolizní invarianty platí rovnost, viz [6],

$$\int_{\Xi} \varphi(\vec{c}) \Omega(f(\vec{x}, \vec{c}, t), f(\vec{x}, \vec{c}, t)) d\vec{c} = 0. \quad (1.100)$$

Rovnost (1.100) je splněna pro funkce, viz [25],

$$\varphi(\vec{c}) = K, \quad (1.101a)$$

$$\varphi(\vec{c}) = c_1, \quad (1.101b)$$

$$\varphi(\vec{c}) = c_2, \quad (1.101c)$$

$$\varphi(\vec{c}) = c_3, \quad (1.101d)$$

$$\varphi(\vec{c}) = \vec{c}^2, \quad (1.101e)$$

kde  $\vec{c} = (c_1, c_2, c_3)$  a  $K$  je libovolná konstanta.

Položme  $\frac{1}{m}\vec{F} = \vec{g}$ . Vynásobme nyní rovnici (1.91) kolizním invariantem  $\varphi(\vec{c})$  a zintegrujme ji přes  $\Xi$ , přičemž berme od teď prostor  $\Xi$  jako prostor rychlostí. Tímto dostaneme

$$\int_{\Xi} \varphi(\vec{c}) \left( \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{c} \cdot \nabla f + \vec{g} \cdot \nabla_{\vec{c}} f \right) d\vec{c} = 0, \quad (1.102)$$

kde  $(\nabla_{\vec{c}})_i = \frac{\partial}{\partial c_i}$ ,  $i = 1, 2, 3$ . Předpokládejme, že pravděpodobnost nalezení částice s nekonečnou rychlostí je nulová, tj.

$$\lim_{\|\vec{c}\| \rightarrow +\infty} \varphi(\vec{c}) f(\vec{x}, \vec{c}, t) = 0. \quad (1.103)$$

Pro  $\varphi(\vec{c}) = m$  přejde rovnice (1.102) do tvaru

$$m \int_{\Xi} \left( \frac{\partial}{\partial t} f + \vec{c} \cdot \nabla f + \vec{g} \cdot \nabla_{\vec{c}} f \right) d\vec{c} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0, \quad (1.104)$$

kde jsme využili faktu, že mikroskopická rychlost  $\vec{c}$  komutuje s  $\frac{\partial}{\partial t}$  a s  $\nabla$ , viz [1]. Pro  $\varphi(\vec{c}) = m\vec{c}$  dostaneme rovnici

$$\sum_{i=1}^3 m \int_{\Xi} \left( \frac{\partial}{\partial t} (c_i f) + c_i \vec{c} \cdot \nabla f + c_i \vec{g} \cdot \nabla_{\vec{c}} f \right) d\vec{c} = \frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{u}) + \nabla \cdot \Pi - \rho \vec{g} = 0, \quad (1.105)$$

kde jsme opět využili předpokladu (1.103). Nakonec položme  $\varphi(\vec{c}) = \frac{1}{2}m\vec{c}^2$ . Z rovnice (1.102) poté dostaneme

$$\begin{aligned} \frac{m}{2} \int_{\Xi} \left( \frac{\partial}{\partial t} \vec{c}^2 f + \vec{c}^2 \vec{c} \cdot \nabla f + \vec{c}^2 \vec{g} \cdot \nabla_{\vec{c}} f \right) d\vec{c} = \\ = \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} \int_{\Xi} m\vec{c}^2 f d\vec{c} \right) + \nabla \cdot \left( \frac{1}{2} \int_{\Xi} m\vec{c}^2 f d\vec{c} \right) - \rho \vec{u} \cdot \vec{g} = 0. \end{aligned} \quad (1.106)$$

Rovnice (1.104) je shodná s rovnicí kontinuity (1.2). Dosadíme-li do rovnice (1.105) vztah pro  $\Pi$  z rovnice (1.95), dostaneme

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{u}) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = -\nabla \cdot \mathbb{T} + \rho \vec{g}, \quad (1.107)$$

což je rovnice shodná s rovnicí zákona zachování hybnosti (1.3). Rovnice (1.106) s využitím vztahu (1.96) a (1.5) přejde do tvaru,

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} E) = -\nabla \cdot (\mathbb{T} \vec{u}) - \nabla \cdot \vec{q} + \rho \vec{u} \cdot \vec{g}, \quad (1.108)$$

viz [1]. Předchozí rovnice (1.108) odpovídá rovnici zákonu zachování energie (1.4).

### 1.2.3 H-teorém a Maxwelllova–Boltzmannova rovnovážná distribuční funkce

Pro kinetickou teorii je důležitý pojem termodynamická rovnováha. Tento stav můžeme popsat tak, že v něm zůstávají makroskopické veličiny konstantní. Předpokládejme, že se každá částice může pohybovat ve všech směrech se stejnou pravděpodobností. Ukážeme, že ve stavu rovnováhy je řešením Boltzmannovy transportní rovnice (1.91) Maxwelllova–Boltzmannova distribuční funkce.

Z podmínek pro rovnováhu (1.26), (1.31) a rovnice (1.58) dostáváme, že kolizní operátor v Boltzmannově transportní rovnici (1.91) přejde ve stavu rovnováhy do tvaru  $\Omega(f, f) = 0$ . Rovnice (1.91) má tedy tvar

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 c_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + \frac{1}{m} \sum_{i=1}^3 F_i \frac{\partial f}{\partial c_i} = 0, \quad (1.109)$$

a nulová hodnota kolizního operátoru odpovídá rovnici

$$\int_{\Xi} d\vec{c}_2 \int_0^{+\infty} db \int_0^{2\pi} d\phi \left[ f(\vec{x}, \vec{c}'_1, t) f(\vec{x}, \vec{c}'_2, t) - f(\vec{x}, \vec{c}_1, t) f(\vec{x}, \vec{c}_2, t) \right] \|\vec{c}_1 - \vec{c}_2\| b = 0. \quad (1.110)$$

Omezme se nyní na homogenní systém v tom smyslu, že distribuční funkce  $f$  nebude záviset na poloze  $\vec{x}$ . Pokud navíc nepředpokládáme působení vnějších sil, tj.  $\vec{F} = \vec{0}$ , pak lze rovnici (1.109) psát ve tvaru

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0. \quad (1.111)$$

Aby rovnice (1.110) byla splněna pro libovolnou funkci  $f$ , stačí aby byla splněna podmínka

$$f(\vec{c}'_1) f(\vec{c}'_2) - f(\vec{c}_1) f(\vec{c}_2) = 0. \quad (1.112)$$

Z rovnice (1.111) plyne, že rovnovážná distribuční funkce nezávisí na čase. Otázkou je, zdali je podmínka (1.112) i nutná. S odpovědí na tuto otázku se odvoláme na následující Boltzmannův H-teorém, viz [13].

#### Tvrzení 2 (Boltzmannův H-teorém)

Označme

$$\mathcal{H}(t) = \int_V d\vec{x} \int_{\Xi} d\vec{c} f(\vec{x}, \vec{c}, t) \ln(f(\vec{x}, \vec{c}, t)). \quad (1.113)$$

Poté platí

$$\frac{d\mathcal{H}(t)}{dt} \leq 0 \quad (1.114)$$

a v termodynamické rovnováze nastává rovnost.

Z tvaru funkce  $\mathcal{H}$  v předchozí větě 2 lze vyvodit, že tato funkce, až na konstantu, odpovídá záporně vzaté entropii. Tvrzení je tedy v souladu s faktem, že entropie systému neklesá a v rovnováze nabývá stacionární hodnoty. Časová derivace funkce  $\mathcal{H}$ , viz [27], je tvaru

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{H}(t)}{dt} = \frac{1}{2} \int_V d\vec{x} \int_{\Xi} d\vec{c}_2 \int_{\Xi} d\vec{c}_1 \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \left| \frac{d\sigma}{d\Omega} \right| (\theta, \phi) \|\vec{c}_1 - \vec{c}_2\| & \left( f(\vec{x}, \vec{c}'_1, t) f(\vec{x}, \vec{c}'_2, t) - \right. \\ & \left. - f(\vec{x}, \vec{c}_1, t) f(\vec{x}, \vec{c}_2, t) \right) \left[ \ln \left( \frac{f(\vec{x}, \vec{c}_1, t) f(\vec{x}, \vec{c}_2, t)}{f(\vec{x}, \vec{c}'_1, t) f(\vec{x}, \vec{c}'_2, t)} \right) \right], \quad (1.115) \end{aligned}$$

kde  $\left| \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|$  je velikost diferenciálního účinného průřezu definovaného vztahem (1.85),  $\theta$  a  $\phi$  jsou úhly vyjadřující směry rychlostí  $\vec{c}$  a  $\vec{c}'$ .

Argument integrálu ve tvaru  $(b-a)\ln\left(\frac{a}{b}\right)$ , kde  $a, b > 0$ , je nulový pro  $a = b$  a pro  $a \neq b$  je záporný. Z toho plyne, že pro  $a \neq b$  je integrál (1.115) menší nebo roven nule a rovnost nastává pro  $a = b$ , tj. při rovnováze dané výrazem

$$f(\vec{x}, \vec{c}'_1, t)f(\vec{x}, \vec{c}'_2, t) - f(\vec{x}, \vec{c}_1, t)f(\vec{x}, \vec{c}_2, t) = 0. \quad (1.116)$$

Předchozí podmínka určená rovnicí (1.112) je tedy nutnou podmínkou pro rovnováhu. Necht' nyní funkce  $f^{(eq)}$  splňuje podmínku (1.112), tj.

$$f^{(eq)}(\vec{c}'_1)f^{(eq)}(\vec{c}'_2) = f^{(eq)}(\vec{c}_1)f^{(eq)}(\vec{c}_2). \quad (1.117)$$

Logaritmováním předchozí rovnice (1.117) získáme

$$\ln\left(f^{(eq)}(\vec{c}'_1)\right) + \ln\left(f^{(eq)}(\vec{c}'_2)\right) = \ln\left(f^{(eq)}(\vec{c}_1)\right) + \ln\left(f^{(eq)}(\vec{c}_2)\right), \quad (1.118)$$

což je rovnice ve tvaru (1.99). Funkce  $\ln(f^{(eq)}(\vec{c}))$  je tedy kolizním invariantem. Její tvar budeme hledat ve formě kombinace kolizních invariantů (1.101a), (1.101b), (1.101c), (1.101d) a (1.101e), viz [24]. Nakonec zvolíme konstanty tak, aby  $f^{(eq)}$  byla normovaná a platil vztah pro střední hodnotu energie, viz [24],

$$\langle E \rangle = \frac{3}{2}Nk_B T, \quad (1.119)$$

čímž podle [13] dojdeme k Maxwellově-Boltzmannově rovnovážné distribuční funkci, která má tvar

$$f^{(eq)}(\vec{c}) = \frac{n}{(2\pi\frac{k_B}{m}T)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{m\|\vec{c} - \vec{u}\|^2}{2k_B T}\right), \quad (1.120)$$

kde  $\vec{u}$  je makroskopická rychlost.

Vyřešit Boltzmannovu transportní rovnici (1.91) v obecném případě není snadné. V roce 1954 Bhatnagar, Gross a Krook navrhli tzv. BGK-aproximaci kolizního operátoru ve tvaru:

$$\Omega(f, f) \approx \Omega_{BGK} = -\frac{1}{\tau}(f - f^{(eq)}), \quad (1.121)$$

kde  $\tau$  [s] je časový parametr určující, jak rychle spěje systém do rovnováhy. Tato aproximace plyne z toho, že systém spěje vlivem srážek do stavu termodynamické rovnováhy.

Lze ověřit, že aproximace (1.121) je v souladu se zákony zachování hmoty, hybnosti, energie a H-teoremem, viz [6]. Srážky jsou charakterizovány pomocí parametru  $\tau$  [s], který se nazývá relaxační čas a odpovídá střední hodnotě času mezi jednotlivými srážkami.

Definujme Prandtlovo číslo vztahem

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} = \frac{c_p \mu}{\kappa}, \quad (1.122)$$

kde  $\nu$  [ $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ] je kinematická viskozita,  $\alpha$  [ $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ] tepelná difuzivita,  $c_p$  [ $\text{m}^2 \text{s}^{-2} \text{K}^{-1}$ ] měrná tepelná kapacita při stálém tlaku,  $\mu$  [ $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ ] dynamická viskozita a  $\kappa$  [ $\text{kg m s}^{-3} \text{K}^{-1}$ ] je tepelná vodivost. Prandtlovo číslo udává poměr mezi výměnou hybností a energií. Z kinetické teorie plynů vyplývá pro monoatomický plyn, že Prandtlovo číslo je rovno 2/3, oproti tomu z Boltzmannovy transportní rovnice s BGK aproximací lze ukázat, že Prandtlovo číslo pro monoatomický plyn je rovno 1, viz [7]. Proto byly navrženy jiné aproximace kolizního operátoru, při nichž se Prandtlovo číslo neliší od původní hodnoty.

### 1.3 Chapmanův–Enskogův asymptotický rozvoj

Proto, abychom mohli z řešení Boltzmannovy transportní rovnice (1.91) určit explicitní vztah pro tenzor napětí a tepelný tok tekutiny, z čehož dále odvodíme tvar kinematické viskozity a tepelné vodivosti, provedeme tzv. Chapmanův–Enskogův asymptotický rozvoj distribuční funkce  $f$ . Tento rozvoj je ve tvaru

$$f = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n f^{(n)}, \quad (1.123)$$

kde  $f^{(n)}$  označuje  $n$ -tý člen asymptotického rozvoje funkce  $f$  a  $\epsilon \propto Kn$ ,  $\epsilon > 0$ , přičemž připomeňme, že  $Kn$  je Knudsenovo číslo definované rovnicí (1.1). S pomocí tohoto rozvoje přejdeme od Boltzmannovy transportní rovnice k Navierovým–Stokesovým rovnicím a srovnáním podoby tlakového tenzoru a tenzoru napětí získáme tvar kinematické viskozity  $\nu$  a tepelné vodivosti  $\kappa$ .

Obecně lze tento rozvoj provést pro izotermální i neizotermální systém, viz [25]. Pro další postup předpokládejme Boltzmannovu transportní rovnici (1.91) s kolizním operátorem ve tvaru BGK-approximace (1.121). Distribuční funkce je explicitně závislá na čase. Provedeme-li rozvoj tvaru (1.123), pak funkce  $f^{(n)}$ ,  $n \geq 0$ , jsou již pouze implicitně závislé na čase prostřednictvím hustoty  $\rho$ , rychlosti  $\vec{u}$  a teploty  $T$ , viz [27], tedy nejsou nejobecnější řešení Boltzmannovy transportní rovnice (1.91). Na číslo  $\epsilon$ , jakožto parametr rozvoje, můžeme, dle [27], nahlížet dvěma způsoby:

1. Chapmanův–Enskogův rozvoj bereme jako rozvoj do mocninné řady a požadujeme, aby  $|\epsilon| \ll 1$ .
2. Číslo  $\epsilon$  bereme pouze jako parametr, přičemž na konci odvozování pokládáme jeho hodnotu rovnu jedné.

Při druhém způsobu bychom pak mohli formálně psát

$$f = f^{(0)} + f^{(1)} + f^{(2)} + \dots, \quad (1.124)$$

přičemž

$$\begin{aligned} f^{(0)} &\approx O(1), \\ f^{(1)} &\approx O(\epsilon), \\ f^{(2)} &\approx O(\epsilon^2). \end{aligned}$$

Náš další postup je převzatý z [14], liší se od klasického Chapmanova–Enskogova rozvoje, který je uveden například v [27], a jeho hlavní myšlenka je založena na projekci Boltzmannovy transportní rovnice (1.91) s BGK aproximací ve tvaru (1.121) do báze Hermiteových polynomů. Jelikož lze další postup provést v obecné dimenzi, označme symbolem  $D$  dimenzi prostorů  $\Xi$  a  $V \equiv \mathbb{R}^D$ .

#### 1.3.1 Hermiteovy polynomy

Hermiteovými polynomy rozumíme třídu lineárně nezávislých ortogonálních polynomů Hilbertova prostoru. Skalární součin

$$\langle f, g \rangle = \int_{\mathbb{R}^D} \omega(\vec{x}) f(\vec{x}) g(\vec{x}) d\vec{x} \quad (1.125)$$

je určen tzv. váhovou funkcí, která je obecně pro Hermiteovy polynomy tvaru

$$\omega(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}} \exp\left[-\frac{\vec{x}^2}{2}\right]. \quad (1.126)$$

Hermiteovy polynomy tvoří ortogonální bázi Hilbertova prostoru se skalárním součinem (1.125).

Pro  $D = 1$  se pomocí funkce  $\omega$  (1.126) definují jednorozměrné Hermiteovy polynomy  $\mathcal{H}^{(n)}(x)$  tak, že

$$\mathcal{H}^{(n)}(x) = (-1)^n \frac{1}{\omega(x)} \frac{d^n}{dx^n} \omega(x), \quad (1.127)$$

kde  $n$  značí řád polynomu, viz [19]. Uved' me prvních několik Hermiteových polynomů:

$$\mathcal{H}^{(0)}(x) = 1, \quad (1.128)$$

$$\mathcal{H}^{(1)}(x) = x, \quad (1.129)$$

$$\mathcal{H}^{(2)}(x) = x^2 - 1, \quad (1.130)$$

$$\mathcal{H}^{(3)}(x) = x^3 - 3x, \quad (1.131)$$

$$\mathcal{H}^{(4)}(x) = x^4 - 6x^2 + 3. \quad (1.132)$$

Definici D-dimenzionálního Hermiteova polynomu lze psát ve tvaru

$$\mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}(\vec{x}) = \mathcal{H}_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}^{(n)}(\vec{x}) = (-1)^n \frac{1}{\omega(\vec{x})} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_1}} \dots \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_n}} \omega(\vec{x}), \quad \vec{x} \in \mathbb{R}, \quad (1.133)$$

kde  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n \in \{1, 2, \dots, D\}$ . Uved' me opět prvních několik Hermiteových polynomů:

$$\mathcal{H}^{(0)} = 1, \quad (1.134)$$

$$\mathcal{H}_{\alpha}^{(1)} = x_{\alpha}, \quad (1.135)$$

$$\mathcal{H}_{\alpha_1, \alpha_2}^{(2)} = x_{\alpha_1} x_{\alpha_2} - \delta_{\alpha_1, \alpha_2}, \quad (1.136)$$

$$\mathcal{H}_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3}^{(3)} = x_{\alpha_1} x_{\alpha_2} x_{\alpha_3} - (\delta_{\alpha_1, \alpha_2} x_{\alpha_3} + \delta_{\alpha_1, \alpha_3} x_{\alpha_2} + \delta_{\alpha_2, \alpha_3} x_{\alpha_1}). \quad (1.137)$$

Lze ukázat, viz [23], že Hermiteovy polynomy splňují rovnost

$$\int_{\mathbb{R}^D} \omega(\vec{x}) \mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(m)}(\vec{x}) \mathcal{H}_{\vec{\beta}}^{(n)}(\vec{x}) d\vec{x} = \delta_{m,n} \tilde{\delta}_{\vec{\alpha}, \vec{\beta}}, \quad (1.138)$$

kde  $m, n \in \mathbb{N}$ . Pro  $\vec{\alpha}, \vec{\beta}$  platí,  $\vec{\alpha} = \{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m\}$ ,  $\vec{\beta} = \{\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n\}$  a  $\tilde{\delta}_{\vec{\alpha}, \vec{\beta}} = 1$  pokud  $\vec{\beta}$  je nějakou permutací  $\vec{\alpha}$ , jinak  $\tilde{\delta}_{\vec{\alpha}, \vec{\beta}} = 0$ .

### 1.3.2 Zavedení bezrozměrných veličin

Pro další postup je třeba přejít k bezrozměrným jednotkám, neboť budeme chtít vyjádřit distribuční funkci  $f$  v bázi Hermiteových polynomů. K tomu budeme potřebovat zavést následující bezrozměrné veličiny:

$$\theta = \frac{T}{T_0}, \quad \vec{\xi} = \frac{\vec{c}}{c_0}, \quad \vec{u} = \frac{\vec{u}}{c_0}, \quad \vec{x} = \frac{\vec{x}}{l_0}, \quad \tilde{t} = \frac{t}{t_0}, \quad c_0 = \sqrt{\frac{k_B T_0}{m_0}}, \quad \tilde{\rho} = \frac{\rho}{\rho_r}, \quad (1.139)$$

kde  $T$  [K] je teplota,  $T_0$  [K] je charakteristická teplota,  $m_0 = 1,66 \cdot 10^{-27}$  kg je jednotková molekulární hmotnost,  $c_0$  [m s<sup>-1</sup>] je rychlost zvuku v plynu o teplotě  $T_0$  obsahujícího molekuly o hmotnosti  $m_0$ ,  $l_0$  [m] je charakteristická délka,  $t_0$  [s] je charakteristický čas takový, že  $l_0 = c_0 t_0$  a  $\rho_r$  [kg m<sup>-3</sup>] je charakteristická hustota tekutiny. Protože předpokládáme, že všechny částice mají stejnou hmotnost  $m$ , tak

po přeskálování zmizí rozdíl mezi hustotou částic  $n$  a makroskopickou hustotou  $\rho$ , proto dále nebudeme tyto pojmy rozlišovat a budeme používat ve značení pro oba pojmy symbol  $\rho$ . Z (1.139) dostaneme

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial \tilde{t}}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} = \frac{1}{t_0} \frac{\partial}{\partial \tilde{t}}, \quad (1.140)$$

$$\nabla = \frac{1}{l_0} \tilde{\nabla}. \quad (1.141)$$

Dosažením předchozích výrazů do (1.91) dostaneme Boltzmannovu transportní rovnici ve tvaru

$$\frac{1}{t_0} \frac{\partial f}{\partial \tilde{t}} + \frac{\vec{c}}{l_0} \tilde{\nabla} f = -\frac{1}{\tau} (f - f^{(eq)}), \quad (1.142)$$

S využitím (1.139) lze rovnici (1.142) upravit na tvar

$$\frac{\partial f}{\partial \tilde{t}} + \vec{\xi} \tilde{\nabla} f = -\frac{1}{\tilde{\tau}} (f - f^{(eq)}), \quad (1.143)$$

kde  $\tilde{\tau} = \frac{\tau}{t_0}$ . Rovnice pro rovnovážné rozdělení (1.120) přejde do tvaru

$$f^{(eq)} = \frac{\tilde{\rho}}{(2\pi\theta)^{\frac{D}{2}}} \exp\left[-\frac{\|\vec{\xi} - \vec{u}\|^2}{2\theta}\right]. \quad (1.144)$$

Poznamenejme, že nejen rovnice (1.91), ale i momenty rychlostí

$$\rho(\vec{x}, t) = \int_{\Xi} f(\vec{x}, \vec{c}, t) d\vec{c} \rightarrow \tilde{\rho}(\vec{x}, t) = \int_{\Xi} f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi}, \quad (1.145)$$

$$\rho(\vec{x}, t) \vec{u}(\vec{x}, t) = \int_{\Xi} \vec{c} f(\vec{x}, \vec{c}, t) d\vec{c} \rightarrow \tilde{\rho}(\vec{x}, t) \vec{u}(\vec{x}, t) = \int_{\Xi} \vec{\xi} f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi}, \quad (1.146)$$

$$2\rho(\vec{x}, t) e(\vec{x}, t) + \rho(\vec{x}, t) \vec{u}^2(\vec{x}, t) = \int_{\Xi} c^2 f(\vec{x}, \vec{c}, t) d\vec{c} \rightarrow 2\tilde{\rho}(\vec{x}, t) e(\vec{x}, t) + \tilde{\rho}(\vec{x}, t) (\vec{u})^2(\vec{x}, t) = \int_{\Xi} (\vec{\xi})^2 f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi} \quad (1.147)$$

si zachovávají svou podobu při přechodu k bezrozměrným jednotkám. V dalším postupu budeme pracovat se zavedenými bezrozměrnými veličinami a pro jednoduchost vynecháme vlnovku nad danými symboly.

### 1.3.3 Vyjádření distribuční funkce v bázi Hermiteových polynomů

Předpokládejme, že rozdělovací funkci  $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$  vyjádříme ve tvaru

$$f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = \omega(\vec{\xi}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\vec{\alpha}=1}^D a_{\vec{\alpha}}^{(n)}(\vec{x}, t) \mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}(\vec{\xi}), \quad (1.148)$$

kde  $\mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}$  je Hermiteův polynom  $n$ -tého řádu definovaný vztahem (1.133) a pro sumu přes vektor  $\vec{\alpha}$  platí

$$\sum_{\vec{\alpha}=1}^D = \sum_{\alpha_1=1}^D \sum_{\alpha_2=1}^D \cdots \sum_{\alpha_n=1}^D. \quad (1.149)$$

Tento rozvoj lze provést, pokud  $\omega^{-\frac{1}{2}}f$  je kvadraticky integrabilní funkce, viz [22]. Pro tzv. Hermiteovy koeficienty  $a_{\vec{\alpha}}^{(n)}(\vec{x}, t)$  platí

$$a_{\vec{\alpha}}^{(n)}(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^D} f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}(\vec{\xi}) d\vec{\xi}, \quad (1.150)$$

což vyplývá z ortogonality Hermiteových polynomů. Hermiteovy koeficienty plně určují rozdělovací funkci  $f$ . Prvních několik Hermiteových koeficientů pro distribuční funkci  $f$  je tvaru:

$$a^{(0)} = \rho, \quad (1.151a)$$

$$a_{\alpha}^{(1)} = \rho u_{\alpha}, \quad (1.151b)$$

$$a_{\alpha, \beta}^{(2)} = \mathbb{T}_{\alpha, \beta} + \rho(u_{\alpha} u_{\beta} - \delta_{\alpha, \beta}), \quad (1.151c)$$

$$a_{\alpha, \beta, \gamma}^{(3)} = \mathbb{Q}_{\alpha, \beta, \gamma} + u_{\alpha} a_{\beta, \gamma}^{(2)} + u_{\beta} a_{\alpha, \gamma}^{(2)} + u_{\gamma} a_{\alpha, \beta}^{(2)} + (1 - D)\rho u_{\alpha} u_{\beta} u_{\gamma}, \quad (1.151d)$$

kde  $\alpha, \beta, \gamma \in \{1, 2, \dots, D\}$ .

Z předchozích rovnic (1.151) je patrné, že rychlostní momenty  $n$ -tého řádu jsou určeny pouze koeficienty do  $n$ -tého řádu, tj. koeficienty vyššího řádu než  $n$  nemají na tyto momenty vliv, viz [23].

Pro aproximaci Boltzmannovy transportní rovnice (1.91) předpokládejme, že celá rozdělovací funkce leží v prostoru tvořeném Hermiteovými polynomy do řádu  $M$ , tedy  $a^{(n)} = 0$  pro  $n > M$  a položeme

$$\tilde{f}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = \omega(\vec{\xi}) \sum_{n=0}^M \sum_{\vec{\alpha}=1}^D \frac{1}{n!} a_{\vec{\alpha}}^{(n)}(\vec{x}, t) \mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}(\vec{\xi}), \quad (1.152)$$

kde  $M$  udává řád aproximace.

## Odvození hydrodynamických rovnic z aproximované rovnovážné distribuční funkce

Zaměříme se nyní na to jaký vliv má volba  $M$  na přesnost předchozí aproximace distribuční funkce. Podívejme se na rozvoj Maxwellovy–Boltzmannovy distribuční funkce do báze Hermiteových polynomů. Rozvoj je tvaru

$$f^{(eq)}(\vec{\xi}) = \omega(\vec{\xi}) \sum_{n=0}^M \frac{1}{n!} \sum_{\vec{\alpha}=1}^D a_{\vec{\alpha}}^{(eq)(n)} \mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}(\vec{\xi}), \quad (1.153)$$

přičemž pro Hermiteovy koeficienty příslušející funkci  $f^{(eq)}$  platí

$$a_{\vec{\alpha}}^{(eq)(n)}(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^D} f^{(eq)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}(\vec{\xi}) d\vec{\xi}. \quad (1.154)$$

První čtyři Hermiteovy koeficienty příslušející funkci  $f^{(eq)}$  mají tvar

$$a^{(eq)(0)}(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^D} f^{(eq)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \mathcal{H}^{(0)}(\vec{\xi}) d\vec{\xi} = \rho(\vec{x}, t), \quad (1.155a)$$

$$a_{\alpha}^{(eq)(1)}(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^D} f^{(eq)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \mathcal{H}_{\alpha}^{(1)}(\vec{\xi}) d\vec{\xi} = \rho(\vec{x}, t) u_{\alpha}(\vec{x}, t), \quad (1.155b)$$

$$a_{\alpha, \beta}^{(eq)(2)}(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^D} f^{(eq)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \mathcal{H}_{\alpha, \beta}^{(2)}(\vec{\xi}) d\vec{\xi} = \rho(\vec{x}, t) u_{\alpha}(\vec{x}, t) u_{\beta}(\vec{x}, t) + \rho(\vec{x}, t) [\theta - 1] \delta_{\alpha, \beta}, \quad (1.155c)$$



$$a_{\alpha,\beta,\gamma}^{(eq)(3)}(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^D} f^{(eq)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \mathcal{H}_{\alpha,\beta,\gamma}^{(3)}(\vec{\xi}) d\vec{\xi} = \rho(\vec{x}, t) [u_\alpha(\vec{x}, t) u_\beta(\vec{x}, t) u_\gamma(\vec{x}, t) + (\theta - 1) \delta_{\alpha,\beta} u_\gamma(\vec{x}, t)], \quad (1.155d)$$

kde  $\alpha, \beta, \gamma \in \{1, 2, \dots, D\}$ . Při výpočtu vztahů (1.155) je dobré si povšimnout vztahu

$$f^{(eq)} = \frac{\rho}{(\theta)^{\frac{D}{2}}} \omega\left(\frac{\vec{\xi} - \vec{u}}{\sqrt{\theta}}\right), \quad (1.156)$$

kde  $\omega$  je váhová funkce definovaná vztahem (1.126).

Vynásobme Boltzmannovu transportní rovnici (1.91) s BGK aproximací Hermiteovým polynomem  $\mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}$  a integrujme ji přes rychlostní prostor  $\Xi$ . Dostaneme tak rovnici tvaru

$$\int_{\Xi} \frac{\partial f}{\partial t} \mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} d\vec{\xi} + \int_{\Xi} \sum_{i=1}^D \xi_i \frac{\partial}{\partial x_i} f \mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} d\vec{\xi} + \int_{\Xi} \sum_{i=1}^D g_i \frac{\partial f}{\partial \xi_i} \mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} d\vec{\xi} = -\frac{1}{\tau} \int_{\Xi} (f - f^{(eq)}) \mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} d\vec{\xi}. \quad (1.157)$$

Pro první člen na levé straně rovnice (1.157) platí

$$\int_{\Xi} \frac{\partial}{\partial t} f \mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} d\vec{\xi} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Xi} f \mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} d\vec{\xi} = \frac{\partial}{\partial t} a_{\vec{\alpha}}^{(n)}, \quad (1.158)$$

a pro druhý člen platí

$$\int_{\Xi} \sum_{i=1}^D \xi_i \frac{\partial}{\partial x_i} f \mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} d\vec{\xi} = \sum_{i=1}^D \frac{\partial}{\partial x_i} (a_{i;\vec{\alpha}}^{(n+1)} + a_{\vec{\alpha};i}^{(n-1)}), \quad (1.159)$$

přičemž jsme využili značení

$$\mathcal{H}_{\vec{\alpha};i}^{(n-1)} = \frac{\partial}{\partial \xi_i} \mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}, \quad (1.160a)$$

$$\mathcal{H}_{i;\vec{\alpha}}^{(n)} = \mathcal{H}_{(i,\vec{\alpha})}^{(n)}. \quad (1.160b)$$

Třetí člen na levé straně rovnice (1.157) upravíme na tvar

$$\int_{\Xi} \sum_{i=1}^D g_i \frac{\partial f}{\partial \xi_i} \mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} d\vec{\xi} = -\sum_{i=1}^D g_i \int_{\Xi} f \frac{\partial}{\partial \xi_i} \mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} d\vec{\xi} = -\sum_{i=1}^D g_i a_{\vec{\alpha};i}^{(n-1)}, \quad (1.161)$$

přičemž jsem opět využili (1.160) a vlastnosti, že distribuční funkce  $\lim_{\|\vec{\xi}\| \rightarrow \infty} f(\cdot, \vec{\xi}, \cdot) = 0$ . Boltzmannova transportní rovnice přejde do tvaru

$$\frac{\partial}{\partial t} a_{\vec{\alpha}}^{(n)} + \sum_{i=1}^D \frac{\partial}{\partial x_i} (a_{i;\vec{\alpha}}^{(n+1)} + a_{\vec{\alpha};i}^{(n-1)}) - \sum_{i=1}^D g_i a_{\vec{\alpha};i}^{(n-1)} = -\frac{1}{\tau} \int_{\Xi} (f - f^{(eq)}) \mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)} d\vec{\xi}. \quad (1.162)$$

Položíme-li v předchozí rovnici (1.162) za  $f = f^{(eq)}$ , pak pro  $n = 0$  získáme rovnici

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0, \quad (1.163)$$

a pro  $n = 1$

$$\frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} + \nabla(\rho \theta \mathbb{I} + \rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = \rho \vec{g}, \quad (1.164)$$

což jsou Eulerovy rovnice zachování hmoty (1.2) a hybnosti (1.3) uvedené v kapitole 1. Dále položíme  $n = 2$  a z dané rovnice vezmeme pouze diagonální prvky, získáme tak rovnici

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho (u_j)^2 + \rho(\theta - 1)) + \sum_{i=1}^D \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i (u_j)^2 + \rho(\theta - 1)(u_i + 2\delta_{i,j} u_j) + 2\rho\delta_{i,j} u_j) - \sum_{i=1}^D 2\rho g_i u_j \delta_{i,j} = 0, \quad (1.165)$$

kde  $j = 1..D$ . Vynásobme předchozí rovnice (1.165)  $\frac{1}{2}$  a sečtěme je. Tím získáme rovnici

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e) - \vec{u} \cdot \nabla(\rho\theta) + \left(\frac{D+2}{2}\right) \nabla \cdot (\rho\theta\vec{u}) = 0, \quad (1.166)$$

což je rovnice zákona zachování energie. Formálně jsem tedy získali Eulerovy rovnice pro stlačitelnou tekutinu.

### Odvození viskozity a tepelné vodivosti z aproximované distribuční funkce

Předchozí rovnice jsme získali volbou  $f = f^{(eq)}$ . V dalším postupu budeme předpokládat, že distribuční funkci  $f$  můžeme psát ve tvaru

$$f = f^{(0)} + f^{(1)}Kn + f^{(2)}Kn^2 + O(Kn^3), \quad (1.167)$$

tj. volíme  $\epsilon = Kn$  v Chapmanově–Enskogově rozvoji distribuční funkce popsaným rovnicí (1.123).

Funkce  $f^{(k)}$ ,  $k \in \mathbb{N}_0$ , nejsou explicitně závislé na čase. Díky tomu platí

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{\alpha=1}^D \frac{\partial f}{\partial u_\alpha} \frac{\partial u_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} \quad (1.168)$$

a dále

$$\frac{\partial f}{\partial \rho} = \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \rho} + Kn \frac{\partial f^{(1)}}{\partial \rho} + O(Kn^2), \quad (1.169)$$

$$\frac{\partial f}{\partial u_\alpha} = \frac{\partial f^{(0)}}{\partial u_\alpha} + Kn \frac{\partial f^{(1)}}{\partial u_\alpha} + O(Kn^2), \quad (1.170)$$

$$\frac{\partial f}{\partial \theta} = \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \theta} + Kn \frac{\partial f^{(1)}}{\partial \theta} + O(Kn^2). \quad (1.171)$$

Od rozvoje  $\frac{\partial f}{\partial \rho}$ ,  $\frac{\partial f}{\partial u_\alpha}$  a  $\frac{\partial f}{\partial \theta}$  požadujeme, aby v každém řádu  $Kn$  splňoval zákony zachování (1.2), (1.3) a (1.4). Z této podmínky vyplývá, viz [27, p. 146], že

$$\frac{\partial f}{\partial t} = Kn \frac{\partial^{(0)}}{\partial t} f^{(0)} + Kn^2 \left( \frac{\partial^{(0)}}{\partial t} f^{(1)} + \frac{\partial^{(1)}}{\partial t} f^{(0)} \right) + O(Kn^3), \quad (1.172)$$

kde

$$\frac{\partial}{\partial t} = Kn \frac{\partial^{(0)}}{\partial t} + Kn^2 \frac{\partial^{(1)}}{\partial t} + O(Kn^3). \quad (1.173)$$

Předchozí rozvoj (1.173) partiální časové derivace není nic jiného, než substituce. Zaved' me časové proměnné

$$t_i = Kn^i t, \quad i \in \mathbb{N}. \quad (1.174)$$

Tyto proměnné zavádíme, abychom mohli od sebe odlišit procesy jako jsou advekce a difuze. Pro ty nám stačí  $i = 1, 2$ . Lze nahlédnout, že substitucí z předchozího vztahu (1.174) dostaneme vztah 1.173.

Pro prostorový gradient postačí vzít rozvoj pouze do prvního řádu v  $Kn$ , proto položíme

$$\nabla = Kn\nabla^{(0)}, \quad (1.175)$$

viz [27]. Pro rychlostní gradient vezmeme též rozvoj do prvního řádu  $Kn$ , a proto položíme, viz [1],

$$\nabla_{\vec{\xi}} = Kn\nabla_{\vec{\xi}}^{(0)}. \quad (1.176)$$

BGK kolizní operátor je po dosazení (1.167) do (1.121) tvaru

$$\Omega(f, f) = -\frac{1}{\tau} \left( Knf^{(1)} + Kn^2f^{(2)} + O(Kn^3) \right). \quad (1.177)$$

Separujme nyní členy Boltzmannovy transportní rovnice (1.143) s dosazeným rozvojem (1.167) podle řádu Knudsenova čísla. Dá se ukázat, viz [22], že porovnáním členů se stejným řádem Knudsenova čísla platí vztah

$$f^{(k+1)} = -\tau \left[ \sum_{m=0}^k \frac{\partial^{(k)}}{\partial t^{(k)}} f^{(m)} + \vec{\xi} \cdot \nabla^{(0)} f^{(k)} + \vec{g} \cdot \nabla_{\vec{\xi}}^{(0)} f^{(k)} \right]. \quad (1.178)$$

Nechť dále  $a_{\vec{\alpha}}^{(k)(n)}$  je Hermiteův koeficient příslušející funkci  $f^{(k)}$ , tj

$$a_{\vec{\alpha}}^{(k)(n)} = \int_{\Xi} f^{(k)}(\vec{\xi}) \mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}(\vec{\xi}) d\vec{\xi}. \quad (1.179)$$

Konkrétně pro  $k = 0$  máme rovnici

$$f^{(1)} = -\tau \left[ \frac{\partial}{\partial t} f^{(0)} + \vec{\xi} \cdot \nabla f^{(0)} + \vec{g} \cdot \nabla_{\vec{\xi}} f^{(0)} \right], \quad (1.180)$$

přičemž jsme přestali psát horní indexy u rozvoju prostorového a rychlostního operátoru nabla a ztotožnili jsme  $\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial^{(0)}}{\partial t}$ . Provedeme-li projekci předchozí rovnice (1.180) do báze Hermiteových polynomů  $\mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}$ , dostaneme rovnici

$$a_{\vec{\alpha}}^{(1)(n)} = -\tau \left[ \frac{\partial a_{\vec{\alpha}}^{(0)(n)}}{\partial t} + \sum_{i=1}^D \frac{\partial}{\partial x_i} \left( a_{i;\vec{\alpha}}^{(0)(n+1)} + a_{\vec{\alpha};i}^{(0)(n-1)} \right) - \sum_{i=1}^D g_i a_{\vec{\alpha};i}^{(0)(n-1)} \right]. \quad (1.181)$$

Pro určení tvaru  $\frac{\partial a_{\vec{\alpha}}^{(0)(n)}}{\partial t}$  přepíšeme časovou derivaci podle zachovávajících se veličin, viz [1]. Tímto dostaneme

$$\frac{\partial}{\partial t} a_{\vec{\alpha}}^{(0)(n)} = -\frac{\partial a_{\vec{\alpha}}^{(0)(n)}}{\partial \rho} \nabla \cdot (\rho \vec{u}) + \frac{\partial a_{\vec{\alpha}}^{(0)(n)}}{\partial (\rho \vec{u})} \cdot (\rho \vec{g} - \nabla \cdot (\rho \theta \mathbb{I} + \rho \vec{u} \otimes \vec{u})) + \frac{\partial a_{\vec{\alpha}}^{(0)(n)}}{\partial (\rho e)} \left( (\vec{u} \cdot \nabla) \rho \theta - \left( \frac{D+2}{2} \right) \nabla \cdot (\rho \theta \vec{u}) \right), \quad (1.182)$$

přičemž byly použity vztahy (1.163), (1.164) a (1.166) pro Eulerovy rovnice. Podobu členu  $a^{(0)(n)}$  již známe pro  $n = 0, 1, 2, 3..$  Můžeme tedy určit derivace v (1.182).

$$\frac{\partial a^{(0)(0)}}{\partial \rho} = 1, \quad (1.183a)$$

$$\frac{\partial a_{\alpha}^{(0)(1)}}{\partial \rho} = 0, \quad (1.183b)$$

$$\frac{\partial a_{\alpha\beta}^{(0)(2)}}{\partial \rho} = -u_{\alpha} u_{\beta} - \delta_{\alpha,\beta}, \quad (1.183c)$$

$$\frac{\partial a_{\alpha,\beta,\gamma}^{(0)(3)}}{\partial \rho} = -2u_{\alpha} u_{\beta} u_{\gamma} - \theta (\delta_{\alpha,\beta} u_{\gamma} + \delta_{\alpha,\gamma} u_{\beta} + \delta_{\beta,\gamma} u_{\alpha}), \quad (1.183d)$$

$$\frac{\partial a^{(0)(0)}}{\partial(\rho u_{\alpha})} = 0, \quad (1.183e)$$

$$\frac{\partial a_{\alpha}^{(0)(1)}}{\partial(\rho u_{\beta})} = \delta_{\alpha,\beta}, \quad (1.183f)$$

$$\frac{\partial a_{\alpha,\beta}^{(0)(2)}}{\partial(\rho u_{\gamma})} = \delta_{\alpha,\gamma} u_{\beta} + \delta_{\beta,\gamma} u_{\alpha}, \quad (1.183g)$$

$$\frac{\partial a_{\alpha,\beta,\gamma}^{(0)(3)}}{\partial(\rho u_{\iota})} = u_{\alpha} u_{\beta} \delta_{\gamma,\iota} + u_{\alpha} u_{\gamma} \delta_{\beta,\iota} + u_{\beta} u_{\gamma} \delta_{\alpha,\iota}, \quad (1.183h)$$

$$\frac{\partial a^{(0)(0)}}{\partial(\rho e)} = 0, \quad (1.183i)$$

$$\frac{\partial a_{\alpha}^{(0)(1)}}{\partial(\rho e)} = 0, \quad (1.183j)$$

$$\frac{\partial a_{\alpha,\beta}^{(0)(2)}}{\partial(\rho e)} = \frac{2}{D} \delta_{\alpha,\beta}, \quad (1.183k)$$

$$\frac{\partial a_{\alpha,\beta,\gamma}^{(0)(3)}}{\partial(\rho e)} = \frac{2}{D} (\delta_{\alpha,\beta} u_{\gamma} + \delta_{\alpha,\gamma} u_{\beta} + \delta_{\beta,\gamma} u_{\alpha}), \quad (1.183l)$$

kde  $\alpha, \beta, \gamma, \iota \in \{1, 2, \dots, D\}$ . Ze znalosti předchozích Hermiteových koeficientů (1.183) lze s využitím rovnice (1.181) dopočítat podobu  $a_{\vec{\alpha}}^{(1)(n)}$ . Dostáváme tedy

$$a^{(1)(0)} = a_{\alpha}^{(1)(1)} = 0, \quad (1.184a)$$

$$a_{\alpha,\beta}^{(1)(2)} = -\tau \rho \theta \Lambda_{\alpha,\beta}, \quad (1.184b)$$

$$a_{\alpha,\beta,\gamma}^{(1)(3)} = -\tau \rho \theta (\Lambda_{\alpha,\beta} u_{\gamma} + \Lambda_{\alpha,\gamma} u_{\beta} + \Lambda_{\beta,\gamma} u_{\alpha}) + \left( \delta_{\alpha,\beta} \frac{\partial \theta}{\partial x_{\gamma}} + \delta_{\alpha,\gamma} \frac{\partial \theta}{\partial x_{\beta}} + \delta_{\beta,\gamma} \frac{\partial \theta}{\partial x_{\alpha}} \right), \quad (1.184c)$$

přičemž

$$\Lambda_{\alpha,\beta} = \frac{\partial u_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} + \frac{\partial u_{\beta}}{\partial x_{\alpha}} - \delta_{\alpha,\beta} \frac{2}{D} \sum_{\gamma=1}^D \frac{\partial u_{\gamma}}{\partial x_{\gamma}}. \quad (1.185)$$

Jak již bylo uvedeno na začátku této kapitoly, naším cílem je určit tvar viskozity a tepelné vodivosti. Proto se podívejme na tvar tenzoru napětí  $\mathbb{T}$  a na tepelný tok  $\vec{q}$ . Při dosazení (1.167) do vzorců pro tenzor napětí (1.94) a tepelnou vodivost (1.96) můžeme psát

$$\mathbb{T} = \mathbb{T}^{(0)} + \mathbb{T}^{(1)}, \quad (1.186)$$

$$\vec{q} = \vec{q}^{(0)} + \vec{q}^{(1)}, \quad (1.187)$$

přičemž  $\mathbb{T}^{(k)}$ , resp  $\vec{q}^{(k)}$  znamená, že jsme do vzorce pro tenzor tlaku (1.94), resp. tepelný tok (1.96) dosadili  $k$ -tý člen asymptotického rozvoje funkce  $f$  a  $\epsilon$  v rozvoji jsme položili rovno jedné. Pro tenzor napětí platí

$$\begin{aligned} \mathbb{T}_{\alpha\beta}^{(n)}(\vec{x}, t) &= \int_{\Xi} (\vec{\xi} - \vec{u}(\vec{x}, t))_{\alpha} (\vec{\xi} - \vec{u}(\vec{x}, t))_{\beta} f^{(n)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi} = \\ &= \int_{\Xi} (\xi_{\alpha}\xi_{\beta} - \xi_{\alpha}u_{\beta}(\vec{x}, t) - u_{\alpha}(\vec{x}, t)\xi_{\beta} - u_{\alpha}(\vec{x}, t)u_{\beta}(\vec{x}, t)) f^{(n)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi} = \\ &= \int_{\Xi} (\mathcal{H}_{\alpha,\beta}^{(2)} - \mathcal{H}_{\alpha}^{(1)}u_{\beta}(\vec{x}, t) - \mathcal{H}_{\beta}^{(1)}u_{\alpha}(\vec{x}, t) + \delta_{\alpha,\beta}\mathcal{H}^{(0)} + u_{\alpha}(\vec{x}, t)u_{\beta}(\vec{x}, t)\mathcal{H}^{(0)}) f^{(n)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi} = \\ &= a_{\alpha,\beta}^{(n)(2)}(\vec{x}, t) + \delta_{\alpha,\beta}a^{(n)(0)}(\vec{x}, t) - u_{\beta}(\vec{x}, t)a_{\alpha}^{(n)(1)}(\vec{x}, t) - u_{\alpha}(\vec{x}, t)a_{\beta}^{(n)(1)}(\vec{x}, t) + u_{\alpha}(\vec{x}, t)u_{\beta}(\vec{x}, t)a^{(n)(0)}(\vec{x}, t), \end{aligned} \quad (1.188)$$

kde  $\alpha, \beta \in \{1, 2, \dots, D\}$ . Pro tepelný tok obdobným postupem dostaneme

$$\begin{aligned} q_{\alpha}^{(n)}(\vec{x}, t) &= \frac{1}{2} \int_{\Xi} (\vec{\xi} - \vec{u}(\vec{x}, t))_{\alpha} \left( \sum_{\beta=1}^D (\xi_{\beta} - u_{\beta}(\vec{x}, t))^2 \right) f^{(n)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi} = \\ &= \frac{1}{2} \int_{\Xi} \sum_{\beta=1}^D [\mathcal{H}_{\alpha,\beta,\beta}^{(3)} - 2\mathcal{H}_{\alpha,\beta}^{(2)}u_{\beta}(\vec{x}, t) - \mathcal{H}_{\beta,\beta}^{(2)}u_{\alpha}(\vec{x}, t) + \mathcal{H}_{\alpha}^{(1)}u_{\beta}(\vec{x}, t)u_{\beta}(\vec{x}, t) + 2\mathcal{H}_{\beta}^{(1)}u_{\alpha}(\vec{x}, t)u_{\beta}(\vec{x}, t) - \\ &\quad - \mathcal{H}^{(0)}(u_{\alpha}(\vec{x}, t)u_{\beta}(\vec{x}, t)u_{\beta}(\vec{x}, t) + (D+2)u_{\alpha})] f^{(n)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi}. \end{aligned} \quad (1.189)$$

Položíme-li  $n = 0$  dostaneme

$$\vec{q}^{(0)}(\vec{x}, t) = 0, \quad (1.190)$$

$$\mathbb{T}_{\alpha,\beta}^{(0)}(\vec{x}, t) = \rho\theta\delta_{\alpha,\beta}, \quad \forall \vec{x} \in V. \quad (1.191)$$

Pro  $n = 1$  dostaneme

$$q_{\alpha}^{(1)}(\vec{x}, t) = \frac{1}{2} (a_{\alpha,\beta,\beta}^{(1)(3)} - 2u_{\beta}a_{\alpha,\beta}^{(1)(2)}) = -\tau\rho\theta \left( \frac{D+2}{2} \right) \frac{\partial\theta}{\partial x_{\alpha}}, \quad (1.192)$$

$$\mathbb{T}_{\alpha,\beta}^{(1)}(\vec{x}, t) = \int_{\Xi} \mathcal{H}_{\alpha,\beta}^{(2)} f^{(1)} d\vec{\xi} = -\tau\rho\theta\Lambda_{\alpha,\beta}, \quad \forall \vec{x} \in V. \quad (1.193)$$

Srovnáme-li podobu získaného tenzoru napětí (1.193) a tenzoru napětí z rovnice (1.8) a totéž provedeme s vektorem tepelného toku, tj. srovnáme tvar rovnice (1.192) a (1.12), získáme vztahy pro dynamickou

viskozitu, tepelnou vodivost a tlak:

$$\mu = \rho\theta\tau, \tag{1.194}$$

$$\kappa = \rho\theta\tau \left( \frac{D+2}{2} \right), \tag{1.195}$$

$$p = \rho\theta. \tag{1.196}$$

## Kapitola 2

# Odvození Lattice–Boltzmannovy metody

### 2.1 Od Boltzmannovy transportní rovnice k rovnici Lattice–Boltzmannově metodě

Pro odvození Lattice–Boltzmannovy rovnice vyjdeme z rovnice (1.143). Boltzmannova transportní rovnice je pak tvaru

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \nabla f = -\frac{1}{\tau}(f - f^{(eq)}), \quad (2.1)$$

což je bezrozměrná Boltzmannova transportní rovnice s BGK aproximací kolizního operátoru bez vnějších sil. Samotný proces odvození rozdělíme do dvou kroků. V prvním kroku přejdeme z prostoru spojitých rychlostí do prostoru diskretních rychlostí. Ve druhém kroku budeme diskretizovat získanou rovnici pomocí konečných diferencí v čase a prostoru.

#### 2.1.1 Gaussova–Hermiteova kvadrurní formule

V průběhu diskretizace rychlostního prostoru budeme potřebovat aproximovat integrál ve tvaru

$$\int_{\mathbb{R}} \omega(x) P(x) dx,$$

kde  $P(x)$  je polynom a  $\omega$  je váhová funkce. Pro výpočet tohoto integrálu můžeme provést následující aproximaci

$$\int_{-\infty}^{\infty} \omega(x) P(x) dx = \sum_{i=1}^M w^i P(x_i), \quad (2.2)$$

kde  $P(x)$  je polynom stupně nejvýše  $2M - 1$  a  $\omega(x)$  je váhová funkce, která nemění na  $\mathbb{R}$  znaménko. Bude-li  $\omega(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$ , pak body  $x_i, i = 1, \dots, M$ , odpovídají kořenům Hermiteova polynomu stupně  $M$  a pro váhy  $w^i$  platí, viz [17],

$$w^i = \frac{M!}{[M\mathcal{H}^{(M-1)}(x_i)]^2}. \quad (2.3)$$

Pro další postup při odvozování diskretního tvaru Boltzmannovy transportní rovnice potřebujeme nalézt body  $\vec{\xi}^1, \vec{\xi}^2, \dots, \vec{\xi}^d \in \mathbb{R}^D$  a k nim  $w^1, \dots, w^d \in \mathbb{R}, d \in \mathbb{N}$  tak, abychom mohli dostatečně dobře aproximovat integrál (1.150) pomocí Gaussova kvadrurního vzorce pro ortogonální polynomy, viz [19],

$$\int_{\mathbb{R}^D} \omega(\vec{\xi}) f(\vec{\xi}) d\vec{\xi} = \sum_{i=1}^d w^i f(\vec{\xi}^i). \quad (2.4)$$

Podle [19] víme, že pomocí Gaussovy–Hermiteovy kvadraturní formule lze aproximovat jednorozměrný integrál. Proto předchozí integrál (2.4) převedeme na jednorozměrný tak, že využijeme vztahu

$$\omega(\vec{x}) = \prod_{i=1}^D \omega(x_i), \quad (2.5)$$

který plyne rovnou z definice (1.126), a faktu, že vícerozměrný Hermiteův polynom můžeme napsat též jako součin jednorozměrných polynomů, viz [4]. Uvažujme aproximaci distribuční funkce ve tvaru (1.152), pak lze nahlédnout, že  $\tilde{f}\mathcal{H}^{(n)}/\omega$  jsou polynomy řádu nejvýše  $2M$  při  $n \leq M$ , a proto volíme  $d$  tak, aby stupeň přesnosti Gaussovy–Hermiteovy kvadraturní formule byl větší nebo roven  $2M$ . Poté můžeme psát rovnici (1.150) jako

$$a^{(n)}(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^D} \omega(\vec{\xi}) \frac{\tilde{f}(\vec{x}, \vec{\xi}, t)}{\omega(\vec{\xi})} \mathcal{H}^{(n)}(\vec{\xi}) d\vec{\xi} = \sum_{i=1}^d \frac{w^i \tilde{f}(\vec{x}, \vec{\xi}_i, t) \mathcal{H}^{(n)}(\vec{\xi}_i)}{\omega(\vec{\xi}_i)}. \quad (2.6)$$

Makroskopické veličiny pro tekutinu pak získáme ze vztahů

$$\rho(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^d \frac{w^i \tilde{f}(\vec{x}, \vec{\xi}_i, t)}{\omega(\vec{\xi}_i)}, \quad (2.7a)$$

$$\rho(\vec{x}, t) \vec{u}(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^d \frac{w^i \tilde{f}(\vec{x}, \vec{\xi}_i, t) \vec{\xi}_i}{\omega(\vec{\xi}_i)}, \quad (2.7b)$$

$$2\rho(\vec{x}, t) e(\vec{x}, t) + \rho(\vec{x}, t) \vec{u}^2(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^d \frac{w^i \tilde{f}(\vec{x}, \vec{\xi}_i, t) \xi_i^2}{\omega(\vec{\xi}_i)}, \quad \forall \vec{x} \in \mathbb{R}^D, t \in \mathbb{R}. \quad (2.7c)$$

Definujeme-li navíc funkci  $g_i$ ,

$$g_i(\vec{x}, t) = g(\vec{x}, \vec{\xi}_i, t) = \frac{w^i \tilde{f}(\vec{x}, \vec{\xi}_i, t)}{\omega(\vec{\xi}_i)}, \quad (2.8)$$

dostanou předchozí vzorce podobu

$$\rho(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^d g_i(\vec{x}, t), \quad (2.9a)$$

$$\rho(\vec{x}, t) \vec{u}(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^d g_i(\vec{x}, t) \vec{\xi}_i, \quad (2.9b)$$

$$2\rho(\vec{x}, t) e(\vec{x}, t) + \rho(\vec{x}, t) \vec{u}^2(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^d g_i(\vec{x}, t) \xi_i^2, \quad \forall \vec{x} \in \mathbb{R}^D, t \in \mathbb{R}, \quad (2.9c)$$

což je diskrétní forma vzorců (1.145), (1.146) a (1.147) vzhledem k prostoru rychlostí.

Zaměříme se nyní na funkci  $f^{(eq)}$ . Její vyjádření v bázi Hermiteových polynomů je, viz rovnice (1.153) a (1.154),

$$f^{(eq)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = \omega(\vec{\xi}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\vec{\alpha}=1}^D a_{\vec{\alpha}}^{(eq)(n)}(\vec{x}, t) \mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}(\vec{\xi}), \quad (2.10)$$

kde

$$a_{\vec{\alpha}}^{(eq)(n)}(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^D} f^{(eq)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}(\vec{\xi}) d\vec{\xi}. \quad (2.11)$$



Uved' me ještě jednou, viz (1.155), prvních několik Hermiteových koeficientů příslušejících funkci  $f^{(eq)}$ .

$$a^{(eq)(0)} = \rho, \quad (2.12a)$$

$$a_{\alpha}^{(eq)(1)} = \rho u_{\alpha}, \quad (2.12b)$$

$$a_{\alpha,\beta}^{(eq)(2)} = \rho u_{\alpha} u_{\beta} + \rho (\theta - 1) \delta_{\alpha,\beta}, \quad (2.12c)$$

$$a_{\alpha,\beta,\gamma}^{(eq)(3)} = \rho u_{\alpha} u_{\beta} u_{\gamma} + \rho (\theta - 1) \delta_{\alpha,\beta} u_{\gamma}, \quad (2.12d)$$

kde  $\alpha, \beta, \gamma \in \{1, 2, \dots, D\}$ . Funkce  $f^{(eq)}$  má obecně nenulové Hermiteovy koeficienty všech řádů, viz [23], a proto budeme uvažovat projekci této funkce do prostoru, ve kterém leží  $\tilde{f}$ , tj. položíme  $a^{(eq)(n)} = 0$  pro  $\forall n > M$ , čímž dostáváme

$$\tilde{f}^{(eq)(M)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = \omega(\vec{\xi}) \sum_{n=0}^M \frac{1}{n!} \sum_{\vec{\alpha}=1}^D a_{\vec{\alpha}}^{(eq)}(\vec{x}, t) \mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}(\vec{\xi}). \quad (2.13)$$

Volbou  $M=3$  dostáváme

$$\tilde{f}^{(eq)(3)}(\vec{\xi}) = \omega(\vec{\xi}) \rho \left( 1 + \vec{\xi} \cdot \vec{u} + \frac{(\vec{\xi}^2 - D)(\theta - 1)}{2} + \frac{\vec{\xi} \cdot \vec{u}}{2} - \frac{\vec{u}^2}{2} + \frac{\vec{\xi} \cdot \vec{u}}{6} \left[ (\vec{\xi} \cdot \vec{u}) - 3\vec{u}^2 + 3(\theta - 1)(\vec{\xi}^2 - D - 2) \right] \right) \quad (2.14)$$

Definujme funkci  $g_i^{(M)}$ ,

$$g_i^{(M)} = g^{(M)}(\vec{x}, \vec{\xi}_i, t) = \frac{w^i \tilde{f}^{(eq)}(\vec{x}, \vec{\xi}_i, t)}{\omega(\vec{\xi}_i)}. \quad (2.15)$$

Boltzmannova transportní rovnice (1.91) poté přejde do tvaru

$$\frac{\partial g_i}{\partial t} + \vec{\xi}_i \cdot \nabla g_i = -\frac{1}{\tau} (g_i - g_i^{(M)}), \quad (2.16)$$

kde  $i \in \{1, 2, \dots, d\}$ . Pro příklad uved' me tvar  $g_i^{(M)}$  pro  $M = 2$

$$g_i^{(2)} = w^i \rho \left[ 1 + \frac{(\xi_i^2 - D)(\theta - 1)}{2} + \xi_i \cdot \vec{u} + \frac{1}{2} (\xi_i \cdot \vec{u}) - \frac{\vec{u}^2}{2} \right]. \quad (2.17)$$

Při předchozím postupu jsme předpokládali, že člen  $\frac{1}{m} \sum_{i=1}^D F_i \frac{\partial f}{\partial \xi_i} = 0$ . To však obecně neplatí. Mějme Boltzmannovu transportní rovnici ve tvaru (1.91) s BGK aproximací kolizního operátoru a označme

$$G(\vec{\xi}) = -\vec{g} \cdot \nabla_{\vec{\xi}} f(\vec{\xi}), \quad (2.18)$$

kde  $\vec{g} = \frac{1}{m} \vec{F}$ . Tento člen obsahuje derivaci podle  $\vec{\xi}$ , a proto ho nemůžeme vyjádřit v bázi Hermiteových polynomů přímo. Dá se ale ukázat, viz [23], že pro  $G(\vec{\xi})$  platí

$$G(\vec{\xi}) \approx G^{(M)}(\vec{\xi}) = \omega(\vec{\xi}) \sum_{n=1}^M \frac{1}{n!} \vec{g} \cdot \sum_{\vec{\alpha}=1}^D a_{\vec{\alpha}}^{(n-1)} \mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(n)}(\vec{\xi}). \quad (2.19)$$

Pro  $M = 3$  dostáváme

$$G(\vec{\xi}) \approx G^{(3)}(\vec{\xi}) = \omega(\vec{\xi}) \rho \left( \vec{g} \cdot \vec{\xi} + (\vec{g} \cdot \vec{\xi})(\vec{u} \cdot \vec{\xi}) - \vec{g} \cdot \vec{u} + \frac{1}{2\rho} \sum_{\vec{\alpha}=1}^D a_{\vec{\alpha}}^{(2)} \left[ (\vec{g} \cdot \vec{\xi}) \mathcal{H}_{\vec{\alpha}}^{(2)}(\vec{\xi}) - \vec{g} \cdot \vec{\xi} \right] \right), \quad (2.20)$$

viz [23]. Boltzmannova transportní rovnice je poté tvaru

$$\frac{\partial g_i}{\partial t} + \vec{\xi}_i \nabla g_i = -\frac{1}{\tau}(g_i - g_i^{(M)}) + G(\vec{\xi}_i), \quad (2.21)$$

kde  $i \in \{1, 2, \dots, D\}$ .

Při projekci Maxwellovy-Boltzmannovy rovnovážné distribuční funkce (1.144) se zanedbává část úměrná bezrozměrnému Machovu číslu  $Ma$  definovanému vztahem (1.17), tj.

$$Ma = \frac{u_r}{c_s}, \quad (2.22)$$

kde  $u_r$  [ $\text{m s}^{-1}$ ] je charakteristická rychlost a  $c_s$  [ $\text{m s}^{-1}$ ] je rychlost zvuku. Z tohoto důvodu lze toto odvození použít pouze pro  $Ma \ll 1$ . Jiný přístup, jímž se tomuto omezení lze vyhnout, je založen na tom, že neprovedeme rozvoj kolem absolutní rovnováhy, ale kolem lokální rovnováhy, což je podstatou tzv. Galerkinovy projekce do prostoru 13 momentů rozdělovací funkce, viz [25]. Pro vektory  $\vec{\xi}^1, \vec{\xi}^2, \dots, \vec{\xi}^d$  platí, že nejsou obecně ekvidistantně rozdělené, a proto nám nebudou definovat pravidelnou mřížku. Z tohoto důvodu musíme přeskálovat rovnice (1.126), (1.127) a (1.152) rychlostí  $c_s$ , čímž zaručíme následné ekvidistantní rozdělení vektorů  $\vec{\xi}^1, \dots, \vec{\xi}^d$ . V aplikacích, v nichž hraje rychlost zvuku podstatnou roli, se neškáluje výrazem  $c_s$  ale výrazem  $c_z = c_s c$ , kde  $c$  je fyzikální rychlost zvuku, viz [26]. Rychlost  $c_s$  lze mimo jiné také chápat jako rychlost, kterou se šíří informace mezi mřížkovými body. Rovnice (1.126), (1.127) a (1.152) mají po přeskálování tvar

$$\tilde{\omega}(\vec{\xi}) = \frac{1}{(2\pi c_s^2)^{\frac{D}{2}}} \exp\left[-\frac{\vec{\xi}^2}{2 c_s^2}\right], \quad (2.23)$$

$$\tilde{\mathcal{H}}^{(n)}(\vec{\xi}) = (-c_s)^{2n} \frac{1}{\omega(\vec{\xi})} \frac{d^n}{d\vec{\xi}} \omega(\vec{\xi}), \quad (2.24)$$

$$\tilde{f}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = \omega(\vec{\xi}) \sum_{n=0}^N \frac{1}{n! c_s^{2n}} \sum_{\vec{\alpha}=1}^D \tilde{a}_{\vec{\alpha}}(\vec{x}, t) \tilde{\mathcal{H}}_{\vec{\alpha}}^{(n)}(\vec{\xi}). \quad (2.25)$$

Pro tlak  $p$ , kinematickou viskozitu  $\nu$  a tepelnou vodivost  $\kappa$  poté

$$p = c_s^2 \theta \rho, \quad (2.26)$$

$$\nu = c_s^2 \theta \tau, \quad (2.27)$$

$$\kappa = \rho c_s^2 \theta \tau \left(\frac{D+2}{2}\right). \quad (2.28)$$

### 2.1.2 Konečné diference v čase a prostoru

Posledním krokem v odvození diskrétní Lattice-Boltzmannovy rovnice je použití metody konečných diferencí v prostoru a čase pro diskretizaci rovnice

$$\frac{\partial g_i(\vec{x}, t)}{\partial t} + \vec{\xi}_i \nabla g_i(\vec{x}, t) = -\frac{1}{\tau} (g_i(\vec{x}, t) - g_i^{(eq)}(\vec{x}, t)), \quad (2.29)$$

kde  $g_i^{(eq)}(\vec{x}, t) = g_i^M(\vec{x}, t) + \tau G(\vec{x}, \vec{\xi}_i, t)$ .

Přepíšme rovnici (2.29) do tvaru

$$\frac{D g_i(\vec{x}, t)}{Dt} = -\frac{1}{\tau} (g_i(\vec{x}, t) - g_i^{(eq)}(\vec{x}, t)). \quad (2.30)$$

Zintegrováním rovnice (2.30) přes časový interval  $(0, \Delta t)$  dostaneme

$$g_i(\vec{x} + \vec{\xi}_i \Delta t, t + \Delta t) - g_i(\vec{x}, t) = -\frac{1}{\tau} \int_0^{\Delta t} g_i(\vec{x} + \vec{\xi}_i h, t + h) - g_i^{(eq)}(\vec{x} + \vec{\xi}_i h, t + h) dh. \quad (2.31)$$

Integrál v rovnici (2.31) aproximujme pomocí lichoběžníkového pravidla [14], tj.

$$g_i(\vec{x} + \vec{\xi}_i \Delta t, t + \Delta t) - g_i(\vec{x}, t) = -\frac{\Delta t}{2\tau} \left[ g_i(\vec{x} + \vec{\xi}_i \Delta t, t + \Delta t) - g_i^{(eq)}(\vec{x} + \vec{\xi}_i \Delta t, t + \Delta t) + g_i(\vec{x}, t) - g_i^{(eq)}(\vec{x}, t) + O(\Delta t^2) \right]. \quad (2.32)$$

Rovnice (2.32) představuje implicitní aproximaci druhého řádu. Dále definujme, viz [14],

$$\hat{g}_i(\vec{x}, t) = g_i(\vec{x}, t) + \frac{\Delta t}{2\tau} \left( g_i(\vec{x}, t) - g_i^{(eq)}(\vec{x}, t) \right). \quad (2.33)$$

Konečná podoba Lattice–Boltzmannovy rovnice je tvaru

$$\hat{g}_i(\vec{x} + \vec{\xi}_i \Delta t, t + \Delta t) - \hat{g}_i(\vec{x}, t) = -\frac{\Delta t}{\hat{\tau}} \left( \hat{g}_i(\vec{x}, t) - g_i^{(M)}(\rho(\vec{x}, t), \vec{u}(\vec{x}, t)) \right) + \left( 1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) G_i(\rho(\vec{x}, t), \vec{u}(\vec{x}, t)), \quad \forall \vec{x} \in \mathbb{R}, \forall t \in \mathbb{R}, \quad (2.34)$$

kde

$$\hat{\tau} = \tau + \frac{\Delta t}{2} \quad (2.35)$$

a  $g_i^{(M)}$  je definováno rovnicí (2.15).

Zavedením nového relaxačního parametru  $\hat{\tau}$  se změní vztah pro viskozitu (1.195) dané kapaliny, tj.

$$\nu = c_s^2 \theta \left( \hat{\tau} - \frac{\Delta t}{2} \right). \quad (2.36)$$

Obdobně se změní i tvar pro koeficient tepelné vodivosti,

$$\kappa = c_s^4 \rho \theta \left( \hat{\tau} - \frac{\Delta t}{2} \right), \quad (2.37)$$

viz [14]. Po zavedení nové distribuční funkce  $\hat{g}_i$  bychom měli ověřit platnost vztahů (2.9).

Pro hustotu dostáváme

$$\hat{\rho} = \sum_{i=1}^d \hat{g}_i = \sum_{i=1}^d g_i + \frac{1}{2\tau} \sum_{i=1}^d \left[ g_i - g_i^{(eq)} \right] = \sum_{i=1}^d g_i = \rho, \quad (2.38)$$

přičemž jsme využili faktu, že

$$\sum_{i=1}^d g_i = \sum_{i=1}^d g_i^{(M)}, \quad (2.39)$$

což plyne přímo ze tvaru  $g_i^{(M)}$  a

$$\sum_{i=1}^d G(\vec{\xi}_i) = 0, \quad (2.40)$$

viz [14]. Pro hybnost dostaneme

$$\rho \vec{u} = \sum_{i=1}^d \vec{\xi}_i \hat{g}_i = \rho \vec{u} - \frac{1}{2} \rho \vec{g}. \quad (2.41)$$

Z rovnice (2.41) vidíme, že makroskopickou rychlost získáme ze vztahu

$$\vec{u} = \vec{u} + \frac{1}{2} \vec{g}. \quad (2.42)$$

### 2.1.3 Analýza Lattice–Boltzmannovy rovnice

V kapitole 1.3 jsme ukázali, že řešení získané z Boltzmannovy transportní rovnice (1.91) je ekvivalentní s Navierovými–Stokesovými rovnicemi z kapitoly 1 a poté jsme pomocí Chapmanova–Enskogova asymptotického rozvoje určili vztah pro makroskopické konstanty, jimiž byly viskozita a tepelná vodivost. V předchozí kapitole jsme odvodili Lattice–Boltzmannovu rovnici (2.34). Proved' me nyní opět Chapmanův–Enskogův rozvoj pro již diskrétní distribuční funkci a podívejme se na vztah řešení Lattice–Boltzmannovy rovnice (2.34) s hydrodynamickými rovnicemi z kapitoly 1.

Pro jednoduchost neuvažujme působení vnějších sil, tj. Lattice–Boltzmannovu rovnici lze psát ve tvaru

$$f_i(\vec{x} + \vec{\xi}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\vec{x}, t) - \frac{\Delta t}{\tau} (f_i(\vec{x}, t) - f_i^{(eq)}(\vec{x}, t)), \quad (2.43)$$

kde  $i \in \{1, 2, \dots, d\}$ , přičemž jsme použili značení vyskytující se ve většině dostupné literatury, tj.

$$f_i = \hat{g}_i, \quad (2.44a)$$

$$f_i^{(eq)} = g_i^{(M)}. \quad (2.44b)$$

Proved' me Taylorův rozvoj levé strany rovnice (2.43) v okolí bodu  $(\vec{x}, t)$ . Dostaneme

$$\begin{aligned} f_i(\vec{x} + \vec{\xi}_i \Delta t, t + \Delta t) &= f_i(\vec{x}, t) + \frac{\partial f_i}{\partial t}(\vec{x}, t) \Delta t + \sum_{\alpha=1}^D \vec{\xi}_{i,\alpha} \frac{\partial f_i}{\partial x_\alpha}(\vec{x}, t) \Delta t + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f_i}{\partial t^2}(\vec{x}, t) \Delta t^2 + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^D \sum_{\beta=1}^D \vec{\xi}_{i,\alpha} \vec{\xi}_{i,\beta} \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_\alpha \partial x_\beta}(\vec{x}, t) \Delta t^2 + \sum_{\alpha=1}^D \vec{\xi}_{i,\alpha} \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_\alpha \partial t}(\vec{x}, t) \Delta t^2 + O(\Delta t^3). \end{aligned} \quad (2.45)$$

Dosad' me předchozí rovnici (2.45) do rovnice (2.43) a vydělme ji  $\Delta t$ . Dostaneme

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \sum_{\alpha=1}^D \vec{\xi}_{i,\alpha} \frac{\partial f_i}{\partial x_\alpha} + \frac{1}{\tau} (f_i - f_i^{(eq)}) + \Delta t \left( \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f_i}{\partial t^2} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^D \sum_{\beta=1}^D \vec{\xi}_{i,\alpha} \vec{\xi}_{i,\beta} \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} + \sum_{\alpha=1}^D \vec{\xi}_{i,\alpha} \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_\alpha \partial t} \right) + O(\Delta t^2) = 0. \quad (2.46)$$

Z předchozí rovnice (2.46) dostáváme

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = - \sum_{\alpha=1}^D \vec{\xi}_{i,\alpha} \frac{\partial f_i}{\partial x_\alpha} - \frac{1}{\tau} (f_i - f_i^{(eq)}) + O(\Delta t). \quad (2.47)$$

Z toho dostáváme

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f_i}{\partial t \partial x_\beta} &= \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_\beta \partial t} = \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left( - \sum_{\alpha=1}^D \vec{\xi}_{i,\alpha} \frac{\partial f_i}{\partial x_\alpha} - \frac{1}{\tau} (f_i - f_i^{(eq)}) + O(\Delta t) \right) = \\ &= - \sum_{\alpha=1}^D \vec{\xi}_{i,\alpha} \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} - \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial x_\beta} (f_i - f_i^{(eq)}) + O(\Delta t), \end{aligned} \quad (2.48)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f_i}{\partial t^2} &= \frac{\partial}{\partial t} \left( - \sum_{\alpha=1}^D \vec{\xi}_{i,\alpha} \frac{\partial f_i}{\partial x_\alpha} - \frac{1}{\tau} (f_i - f_i^{(eq)}) + O(\Delta t) \right) = \\ &= - \sum_{\alpha=1}^D \vec{\xi}_{i,\alpha} \frac{\partial^2 f_i}{\partial t \partial x_\alpha} - \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial t} (f_i - f_i^{(eq)}) + O(\Delta t) = \\ &= \sum_{\alpha=1}^D \sum_{\beta=1}^D \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} + \frac{1}{\tau} \sum_{\alpha=1}^D \vec{\xi}_{i,\alpha} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (f_i - f_i^{(eq)}) - \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial t} (f_i - f_i^{(eq)}) + O(\Delta t). \end{aligned} \quad (2.49)$$

Označme dále

$$\Pi_{\alpha,\beta} = \sum_{i=1}^d \vec{\xi}_{i,\alpha} \vec{\xi}_{i,\beta} f_i, \quad (2.50)$$

$$\mathcal{D}_i = \frac{\partial f_i}{\partial t} + \sum_{\alpha=1}^D \vec{\xi}_{i,\alpha} \frac{\partial f_i}{\partial x_\alpha} + \frac{1}{\tau} (f_i - f_i^{(eq)}) - \frac{\Delta t}{2\tau} \frac{\partial}{\partial t} (f_i - f_i^{(eq)}) + \sum_{\alpha=1}^D \vec{\xi}_{i,\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (f_i - f_i^{(eq)}) + \mathcal{O}(\Delta t^3) = 0. \quad (2.51)$$

Vynásobíme-li předchozí rovnici (2.51) postupně prvním a druhým kolizním invariantem, tj.

$$\varphi_1(\vec{\xi}) = 1, \quad (2.52a)$$

$$\varphi_2(\vec{\xi}) = \vec{\xi} \quad (2.52b)$$

a sečteme-li ji přes  $i$ , dostaneme

$$\sum_{i=1}^d \mathcal{D}_i = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{\alpha=1}^D \frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial x_\alpha} = 0, \quad (2.53a)$$

$$\sum_{i=1}^d \mathcal{D}_i \vec{\xi}_{i,\alpha} = \frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\beta} (\Pi_{\alpha,\beta}) - \frac{\Delta t}{2\tau} \frac{\partial}{\partial x_\beta} (\Pi_{\alpha,\beta} - \Pi_{\alpha,\beta}^{(0)}) + \mathcal{O}(\Delta t^2), \quad (2.53b)$$

kde  $\Pi_{\alpha,\beta}^{(0)} = \sum_{i=1}^d \vec{\xi}_{i,\alpha} \vec{\xi}_{i,\beta} f_i^{(eq)}$ . Nyní proved' me rozvoj distribuční funkce jako v rovnici (1.123). Dosazením tohoto rozvoje do rovnice (2.53b) dostaneme

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^d \mathcal{D}_i \vec{\xi}_{i,\alpha} &= \frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\beta} (\Pi_{\alpha,\beta}^{(0)} + \epsilon \Pi_{\alpha,\beta}^{(1)}) - \frac{\Delta t}{2\tau} \frac{\partial}{\partial x_\beta} (\Pi_{\alpha,\beta}^{(0)} + \epsilon \Pi_{\alpha,\beta}^{(1)} - \Pi_{\alpha,\beta}^{(0)}) + \mathcal{O}(\Delta t^2) + \mathcal{O}(\epsilon^2) = \\ &= \frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left( \Pi_{\alpha,\beta}^{(0)} + \epsilon \left( 1 - \frac{\Delta t}{2\tau} \right) \Pi_{\alpha,\beta}^{(1)} \right) + \mathcal{O}(\Delta t^2) + \mathcal{O}(\epsilon^2) = 0. \end{aligned} \quad (2.54)$$

Naším cílem bude simulovat nestlačitelnou tekutinu, tj.

$$\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha} = 0, \quad \alpha = 1, \dots, D. \quad (2.55)$$

Z rovnice (2.53a) lze odvodit jaké se dopouštíme chyby, když použijeme klasickou Lattice–Boltzmannovu metodu pro simulaci nestlačitelné tekutiny. Přepíšme rovnici (2.53a) do tvaru

$$\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha} = \frac{1}{\rho} \left( u_\alpha \frac{\partial \rho}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial \rho}{\partial t} \right), \quad \alpha = 1, \dots, D. \quad (2.56)$$

Pro tlak platí  $p = c_s^2 \rho$ . Dosazením rovnosti pro tlak do předchozí rovnice (2.56) máme

$$\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha} = \frac{1}{\rho} \left( u_\alpha \frac{\partial p}{c_s^2 \partial x_\alpha} - \frac{1}{c_s^2} \frac{\partial p}{\partial t} \right), \quad \alpha = 1, \dots, D. \quad (2.57)$$

Přeškálujeme nyní veličiny vyskytující se v předchozí rovnici (2.57) pomocí charakteristických veličin, tj.

$$\vec{u} = \frac{\vec{u}}{u_r}, \quad \vec{x} = \frac{\vec{x}}{L_r}, \quad \check{t} = t \frac{u_r}{L_r}, \quad \check{\rho} = \frac{\rho}{\rho_r}, \quad \check{p} = p \frac{1}{\rho_r u_r^2}, \quad (2.58)$$

kde  $u_r$  je charakteristická rychlost,  $L_r$  je charakteristická délka, viz kapitola 1, a  $\rho_r$  je charakteristická hustota tekutiny. Poté rovnice (2.57) přejde do tvaru

$$\frac{\partial \check{u}_\alpha}{\partial \check{x}_\alpha} + \frac{1}{\check{\rho}} \frac{u_r^2}{c_s^2} \left( \frac{\partial \check{p}}{\partial \check{t}} + \check{u}_\alpha \frac{\partial \check{p}}{\partial \check{x}_\alpha} \right) = 0. \quad (2.59)$$

Předchozí rovnici (2.59) lze přepsat na tvar

$$\frac{\partial \check{u}_\alpha}{\partial \check{x}_\alpha} + O(Ma^2) = 0. \quad (2.60)$$

Obdobným způsobem bychom postupovali i u rovnice (2.53b) a dostali bychom, viz [25],

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u_\beta \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial p}{\partial x_\alpha} = \nu \frac{\partial^2 u_\alpha}{\partial x_\beta \partial x_\beta} + O(\Delta t^2) + O(\epsilon^2) + O(Ma^2). \quad (2.61)$$

Z rovnice (2.60) je patrné, že při simulaci nestlačitelné tekutiny Lattice–Boltzmannovou metodou se dopouštíme chyby úměrné druhé mocnině Machova čísla. Z tohoto důvodu v roce 1957 navrhl He a Luo [29] modifikaci Lattice–Boltzmannovy metody tak, abychom při odvozování rovnice kontinuity z Lattice–Boltzmannovy rovnice již nedostali chybu úměrnou  $O(Ma^2)$ . Předpokládejme, že máme konstantní hustotu  $\rho_0$ . Pro hustotu  $\rho$  poté platí

$$\rho = \rho_0 + \delta\rho, \quad (2.62)$$

kde  $\delta\rho$  označuje variace hustoty od hustoty  $\rho_0$ . Dosadíme-li vztah pro hustotu (2.62) do rovnice pro rovnovážnou distribuční funkci (2.17) dostaneme výraz

$$f_i^{(eq)} = w_i \left[ \rho + \rho_0 \left( \frac{\vec{\xi}_i \cdot \vec{v}}{c_s^2} + \frac{1}{2c_s^4} (\vec{\xi}_i \cdot \vec{u})^2 - \frac{\|\vec{u}\|^2}{2c_s^2} \right) \right], \quad (2.63)$$

přičemž jsem zanedbali členy úměrné  $O(Ma^3)$ . Vzorec pro napočítání makroskopické rychlosti  $\vec{u}$  (2.41) přejde poté do tvaru

$$\vec{u} = \frac{1}{\rho_0} \sum_{i=1}^d \vec{\xi}_i f_i. \quad (2.64)$$

Po provedení této modifikace lze opět pomocí Chapmanova–Enskogova asymptotického rozvoje ukázat, viz [16], že

$$\frac{1}{c_s^2} \frac{\partial P}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{u} = 0, \quad (2.65a)$$

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\nabla P + \nu \nabla^2 \vec{u} + O(Ma^3), \quad (2.65b)$$

kde  $P = \frac{c_s^2 \rho}{\rho_0}$  je tlak a  $\nu = \frac{\mu}{\rho_0}$  je kinematická viskozita, což plyne z Chapmanova–Enskogova rozvoje.

Pro stacionární případ platí  $\frac{\partial P}{\partial t} = 0$  a rovnice kontinuity odvozená z Chapmanova–Enskogova asymptotického rozvoje má přesný tvar rovnice kontinuity pro nestlačitelné proudění, tj.

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0. \quad (2.66)$$

Ze získané rovnice pro zákon zachování hybnosti je patrné, že při simulaci nestlačitelného proudění se budeme dopouštět chyby úměrné  $O(Ma^3)$ . Poznamenejme, že předchozí poznatky platí pro stacionární případ. Pro nestacionární případ bychom se dopouštěli celkové chyby úměrné  $O(Ma^2)$ , neboť  $\rho = \rho_0 + O(Ma^2)$ , viz [29]. Předchozí modifikaci Lattice–Boltzmannovy metody budeme nazývat nestlačitelnou Lattice–Boltzmannovou metodou.

## 2.2 Lattice Gas Automata

Metoda Lattice Gas Automata (LGA) jakožto předchůdce LBM používá k řešení dvoudimenzionálních Navierových–Stokesových rovnic pro proudění tekutiny částice, které osidlují uzlové body pravidelné mřížky. V každém bodě mřížky může být nejvýše jedna částice. Tyto částice mají stejnou hmotnost  $m$  (v aplikacích se hodnota hmotnosti nastavuje na 1, proto bude v dalších vzorcích vynechána). Pohyb a srážky částic se řídí podle pravidel, které zaručují zachování hmoty, hybnosti a energie.

První LGA model zavedený v roce 1973 je označován HPP podle prvních písmen jmen jeho autorů (Hardy, Pomeau, de Pazzis), viz [27]. HPP má čtvercovou mřížku. Každá částice má v tomto modelu čtyři možné rychlosti

$$\begin{aligned}\vec{\xi}_1^T &= (c, 0), \\ \vec{\xi}_2^T &= (0, c), \\ \vec{\xi}_3^T &= (-c, 0), \\ \vec{\xi}_4^T &= (0, -c),\end{aligned}$$

kde  $c$  reprezentuje tzv. mřížkovou rychlost a platí  $c = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ , kde  $\Delta x$  je vzdálenost mezi sousedními body mřížky a  $\Delta t$  je časový krok. Ve většině případech se  $\Delta x$  a  $\Delta t$  nastaví na 1. Dále lze snadno nahlédnout, že rychlosti splňují

$$\sum_{i=1}^4 \vec{\xi}_i = \vec{0} \quad (2.67)$$

a

$$\sum_{i=1}^4 \xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta} = 2\delta_{\alpha,\beta}, \quad \alpha, \beta \in \{1, 2\}. \quad (2.68)$$

Samotný pohyb částice se dá popsat rovnicí

$$n_i(\vec{x} + \vec{\xi}_i \Delta t, t + \Delta t) = n_i(\vec{x}, t) + C_i(n(\vec{x}, t)), \quad (2.69)$$

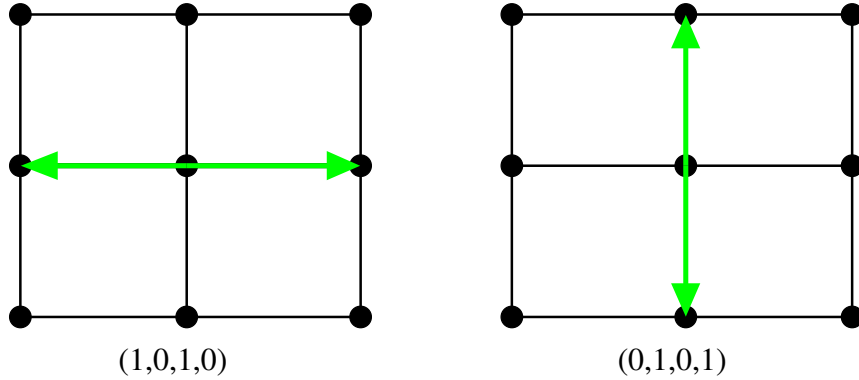
kde  $i = 1, \dots, 4$ , a funkce  $n_i(\vec{x}, t)$  nabývá hodnot 1 nebo 0 podle toho, zda se na uzlovém bodě o souřadnici  $\vec{x}$  v čase  $t$  vyskytuje částice s rychlostí  $\vec{\xi}_i$  nebo ne. Symbol  $C_i$  reprezentuje kolizní operátor, podle něhož se řídí srážky. Pokud dojde například mezi dvěma částicemi k čelní srážce, kolizní operátor zajistí, že výsledné rychlosti budou kolmé na vstupní. V HPP nemůže k jiným než čelním srážkám docházet a tak mohou nastat pouze dvě možnosti konfigurace vzájemných rychlostí na uzlovém bodě  $(1, 0, 1, 0)$  a  $(0, 1, 0, 1)$ , viz obrázek 2.1.

Proto kolizní operátor můžeme psát ve tvaru

$$C_i(n(\vec{x}, t)) = n_{i\oplus 1} n_{i\oplus 3} (1 - n_i) (1 - n_{i\oplus 2}) - n_i n_{i\oplus 2} (1 - n_{i\oplus 1}) (1 - n_{i\oplus 3}), \quad (2.70)$$

kde  $i\oplus k$  značí  $(i+k) \bmod 4$  pokud  $(i+k)$  je různé od 4, jinak  $(i+k)$ , kde  $k \in \{1, 2, 3\}$ . To odpovídá tomu, že pokud budou obsazeny pozice  $(i, i+2)$ , tak  $n_i$  nabude 0 a pokud budou obsazeny pozice  $(i+1, i+3)$ , tak  $n_i$  nabude 1. Z tvaru kolizního operátoru lze vyvodit, že srážky jsou striktně lokální (nový stav na uzlovém bodě závisí pouze na jeho okolních uzlových bodech),

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^4 C_i &= 0, \\ \sum_{i=1}^4 \vec{\xi}_i C_i &= \vec{0}.\end{aligned}$$



Obrázek 2.1: Možné konfigurace na mížce HPP.

Samotný algoritmus HPP lze rozepsat do dvou kroků:

$$\begin{aligned} \text{Kolize:} & & n'_i &= n_i(\vec{x}, t) + C_i(n(\vec{x}, t)) \\ \text{Šíření:} & & n_i(\vec{x} + \vec{\xi}_i \Delta t, t + \Delta t) &= n'_i(\vec{x}, t). \end{aligned}$$

K tomu, abychom z HPP získali hydrodynamické rovnice, potřebujeme dostatečnou izotropii *mřížkového tenzoru*. Mřížkový tenzor  $n$ -tého řádu definujeme jako

$$\mathbb{L}_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n} = \sum_{i=1}^4 \vec{\xi}_{i, \alpha_1} \vec{\xi}_{i, \alpha_2} \dots \vec{\xi}_{i, \alpha_n}. \quad (2.71)$$

O tenzoru  $\mathbb{T}$   $n$ -tého řádu prohlásíme, že je izotropní, pokud je invariantní vůči libovolné ortogonální transformaci. Z definice izotropního tenzoru plyne, že neexistuje izotropní tenzor prvního řádu, izotropní tenzor druhého řádu je úměrný  $\delta_{\alpha, \beta}$ , izotropní tenzor třetího řádu je úměrný Levi-Civitovu symbolu  $\epsilon_{\alpha, \beta, \gamma}$  a izotropní tenzor čtvrtého řádu je úměrný rovnou třem funkcím  $\delta_{\alpha, \beta} \delta_{\gamma, \delta}$ ,  $\delta_{\alpha, \gamma} \delta_{\beta, \delta}$ ,  $\delta_{\alpha, \delta} \delta_{\beta, \gamma}$ , proto izotropní tenzor čtvrtého řádu můžeme vyjádřit jako jejich libovolnou kombinaci. Důkaz těchto tvrzení lze nalézt např. v [9]. Mřížkový tenzor pro HPP druhého řádu splňuje

$$\mathbb{L}_{\alpha, \beta} = \sum_{i=1}^4 \vec{\xi}_{i, \alpha} \vec{\xi}_{i, \beta} = 2\delta_{\alpha, \beta}, \quad (2.72)$$

a je tedy izotropní. Mřížkový tenzor čtvrtého řádu je dán rovnicí

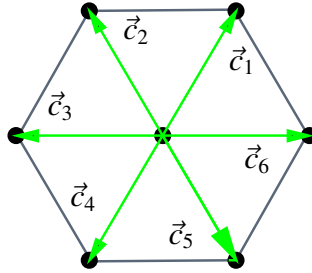
$$\mathbb{L}_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} = \sum_{i=1}^4 \vec{\xi}_{i, \alpha} \vec{\xi}_{i, \beta} \vec{\xi}_{i, \gamma} \vec{\xi}_{i, \delta}, \quad (2.73)$$

kde  $\alpha, \beta, \gamma \in \{1, 2\}$ . Rozepíšeme-li tuto sumu, pak snadno z tvaru rychlostí nahlédneme, že

$$\mathbb{L}_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} = 2\tilde{\delta}_{\alpha, \beta, \gamma, \delta},$$

kde  $\tilde{\delta}_{\alpha, \beta, \gamma, \delta}$  je zobecněné Kroneckerovo delta. To je ovšem neizotropní tenzor. K tomu, abychom ukázali, že řešení LGA je ekvivalentní s Navierovými–Stokesovými rovnicemi je zapotřebí, aby byl předchozí tenzor izotropní, viz [5].





Obrázek 2.2: FHP mřížka.

Z tohoto důvodu se zavedl nový model FHP (Frisch, Hasslacher, Pomeau) s mřížkou složenou z rovnostranných trojúhelníků, viz obrázek 2.2, která je invariantní vůči diskretním transformacím zachovávajících trojúhelníkovou mřížku (diskretní rotace o  $\frac{\pi}{3}$ , diskretní translace a zrcadlení). Každá částice této mřížky může mít rychlost

$$\vec{\xi}_i = c \left( \cos \frac{\pi i}{3}, \sin \frac{\pi i}{3} \right)^T, \quad i = 1, \dots, 6. \quad (2.74)$$

Definujeme nyní střední hodnotu funkce  $n_i$  jako

$$f_i(\vec{x}, t) = \langle n_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\vec{x}'} n_i(\vec{x}', t), \quad (2.75)$$

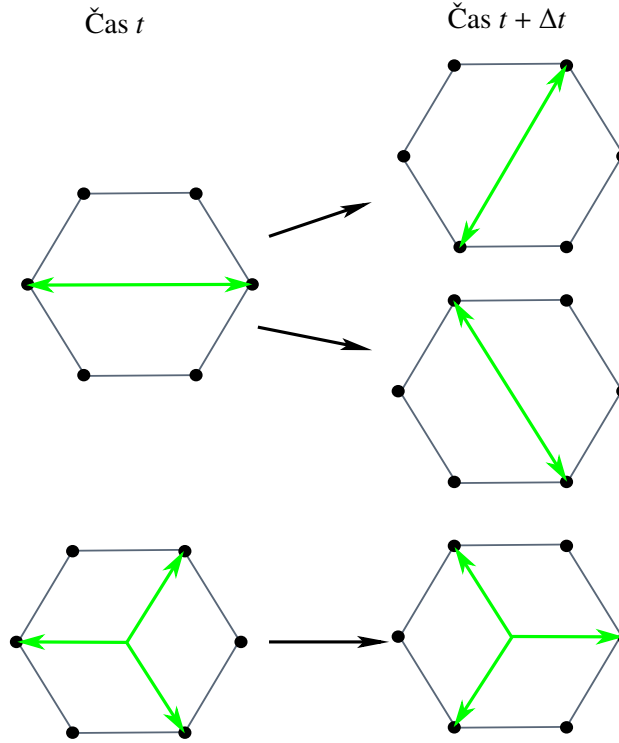
kde  $\vec{x}'$  reprezentuje souřadnice sousedních uzlů uzlu se souřadnicí  $\vec{x}$  a  $Z$  označuje počet sousedních uzlů. Střední hodnota nám umožňuje vypočítat charakteristické proměnné pro tekutinu, jimiž jsou hustota  $\rho$  a rychlost  $\vec{u}$  následujícími vztahy:

$$\rho(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^6 f_i(\vec{x}, t), \quad (2.76)$$

$$\rho(\vec{x}, t) \vec{u}(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^6 \xi_i f_i(\vec{x}, t). \quad (2.77)$$

Změnou tvaru mřížky samozřejmě dojde i ke změně pravidel, podle nichž se řídí srážky. Podle typů srážek, které mohou nastat, dělíme dále FHP na FHP-I (dochází pouze k pseudonáhodným binárním srážkám a tříčásticovým srážkám), FHP-II (přidání částic s nulovou rychlostí) a FHP-III (všechny typy srážek řídících se zákony zachování hmotnosti a momentu), viz [5]. Podle pravidel pro srážky, viz obrázek 3.3, se dá odvodit kolizní operátor. Tvary dalších kolizních operátorů se odvodí obdobně jako u HPP.

Jednou z velkých výhod LGA je možnost paralelního výpočtu nového stavu. Další výhodou je to, že LGA je nepodmíněně stabilní díky její reprezentaci stavů pomocí 1 nebo 0. To však může v některých případech vést k výskytu neočekávaných výsledků. Model FHP není kvůli Fermiho–Diracově distribuční funkci Galileovsky invariantní, viz [27]. Další nevýhodou je výskyt statistického „šumu“ a nemožnost použití pro simulaci tekutiny s malým Reynoldsovým číslem. Tyto nevýhody byly jedny z důvodů přechodu k LBM, který bude popsán v následující sekci.



Obrázek 2.3: Průběh srážek u FHP. Vlevo stav před srážkou, vpravo stav po srážce.

## 2.3 Od Lattice Gas Automat k Lattice–Boltzmannově metodě

Zaměříme se nyní na přechod od LGA k LBM. Základem tohoto přechodu je opuštění booleanovské funkce  $n_i$  a její nahrazení distribuční funkcí  $f_i$ . Poté z rovnice (2.69) získáme

$$f_i(\vec{x} + \vec{\xi}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t) = \Omega_i(f(\vec{x}, t)), \quad (2.78)$$

kde  $\Omega_i(f(\vec{x}, t)) = \langle C_i(n) \rangle \approx C_i(f(\vec{x}, t))$ , přičemž rozsah  $i$  závisí na diskretizaci rychlosti na dané mřížce. Necht' dále  $d$  označuje počet rychlostí dané mřížky. V roce 1989 Higuera a Jimenez, viz [27], navrhli

$$f_i = f_i^{(eq)} + f_i^{(neq)}, \quad (2.79)$$

kde  $f_i^{(eq)}$  je rozvinutá Fermiho–Diracova distribuční funkce a  $f_i^{(neq)}$  je nerovnovážná část  $f_i$ . Rozvojem kolizního operátoru okolo  $f_i^{(eq)}$  získáme následující vztah

$$\Omega_i(f) \approx \Omega(f^{(eq)}) + \sum_{j=1}^d \frac{\partial \Omega_i}{\partial f_j} (f_j - f_j^{(eq)}) = \sum_{j=1}^d K_{ij} (f_j - f_j^{(eq)}), \quad (2.80)$$

kde  $i \in 1, \dots, d$  a  $K_{ij}$  jsou složky kolizní matice  $\mathbb{K}$ . Tato matice byla dále aproximována, viz [8], až na tvar  $\mathbb{K} = \frac{1}{\tau} \mathbb{I}$ , kde  $\mathbb{I}$  je jednotková matice. Kolizní operátor nabývá stejného tvaru jako u BGK aproximace kolizního operátoru Boltzmannovy transportní rovnice (1.121). Rozdělovací funkce v rovnováze je při tomto modelu již plně nezávislá na předchozích modelech pro LGA, viz [7], a předpokládáme, že již není Fermiho–Diracovou ale Maxwellovou–Boltzmannovou rozdělovací funkcí a požadujeme, aby zachovávala hmotnost a hybnost.

Shrneme-li předchozí postup, tak jsme opustili booleanovské proměnné a přešli ke spojitě rozdělovací funkci, linearizovali kolizní operátor a nahradili ho BGK aproximací kolizního operátoru a přešli od

Fermiho–Diracovy k Maxwellově–Boltzmannově rozdělovací funkci, čímž jsem získali novou metodu nezávislou na LGA, kterou nazýváme Lattice–Boltzmannova metoda.



## Kapitola 3

# Implementace Lattice–Boltzmannovy metody

### 3.1 Algoritmus Lattice–Boltzmannovy metody

V předchozí kapitole jsme odvodili Lattice–Boltzmannovu metodu jak z Boltzmannovy transportní rovnice (1.91), tak z Lattice Gas Automat. V této kapitole se zaměříme na samotnou implementaci. Algoritmus Lattice–Boltzmannovy metody je odvozený od algoritmu Lattice Gas Automata, kterým jsme se zabývali již v předešlé kapitole 2.2. Samotný algoritmus můžeme rozdělit do několika kroků.

Prvním krokem je inicializace počátečních podmínek. Existuje několik různých způsobů, jak se vypořádat s počátečními podmínkami. Volba počátečních podmínek závisí na dané úloze a může mít vliv na přesnost, stabilitu a konvergenci LBM, viz [7]. Jedním ze způsobů, jak nastavit distribuční funkci, je *rovnovážné schéma*, kdy distribuční funkci položíme rovnu rovnovážné distribuční funkci  $f^{(eq)}$ , která se napočítá z na počátku zadaných makroskopických veličin  $\rho_0$  a  $\vec{u}_0$ , tj.

$$f_i(\vec{x}, t_0) = f^{(eq)}(\rho_0, \vec{u}_0), i = 0, 1, 2, \dots, q - 1, \forall \vec{x}, \quad (3.1)$$

kde  $q$  značí počet různých směrů (rychlostí), které jsme použili k diskretizaci rychlostního prostoru. Další typy počátečních podmínek nebudeme v tuto chvíli zmiňovat. Lze je však nalézt v [7].

Druhým krokem v LBM algoritmu je kolizní krok, během něhož dojde k napočítání kolizního členu Lattice–Boltzmannovy rovnice (2.34). K tomu, abychom mohli provést kolizní krok je třeba napočítat rovnovážnou distribuční funkci pro každý bod mřížky. Její tvar se odvíjí od druhu mřížky, tj. druhu rychlostního modelu LBM. Těmito modely se budeme zabývat později. Dále víme, že k napočítání rovnovážné distribuční funkce potřebujeme znát makroskopické veličiny, jimiž jsou hustota  $\rho(\vec{x}, t)$  a makroskopická rychlost  $\vec{u}(\vec{x}, t)$ . Pro celistvost této sekce uved’me znovu vzorce, ze kterých tyto makroskopické veličiny získáme.

$$\rho(\vec{x}, t) = \sum_{i=0}^{q-1} f_i(\vec{x}, t), \quad (3.2)$$

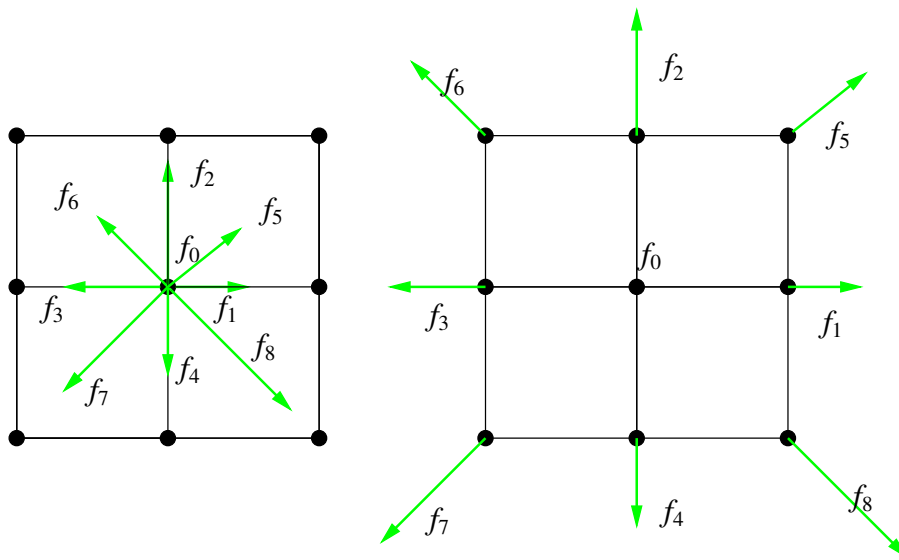
$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \frac{1}{\rho} \sum_{i=0}^{q-1} \vec{\xi}_i f_i(\vec{x}, t). \quad (3.3)$$

Ze znalosti makroskopických veličin a tedy i rovnovážné distribuční funkce můžeme přejít k samotnému koliznímu kroku, který lze reprezentovat rovnicí

$$\hat{f}_i(\vec{x}, t) = f_i(\vec{x}, t) - \frac{1}{\tau} \left( f_i(\vec{x}, t) - f_i^{(eq)}(\vec{x}, t) \right), i = 0, 1, 2, \dots, q - 1, \quad (3.4)$$

příčemž distribuční funkce  $\hat{f}$  slouží pouze jako pomocná proměnná.

Ve třetím kroku dojde k propagaci distribuční funkce v rámci uzlových bodů. Tento krok lze dobře graficky znázornit. Budeme-li v 2-rozměrném prostoru s 9 možnými rychlostmi, můžeme kolizní krok znázornit pomocí obrázku 3.1. V následující sekci 3.2 zavedeme značení pro rychlostní modely Lattice–Boltzmannovy metody a obrázek 3.1 bude odpovídat rychlostnímu modelu označenému D2Q9.



Obrázek 3.1: Krok šíření u Lattice–Boltzmannovy metody s 9 stupni volnosti.

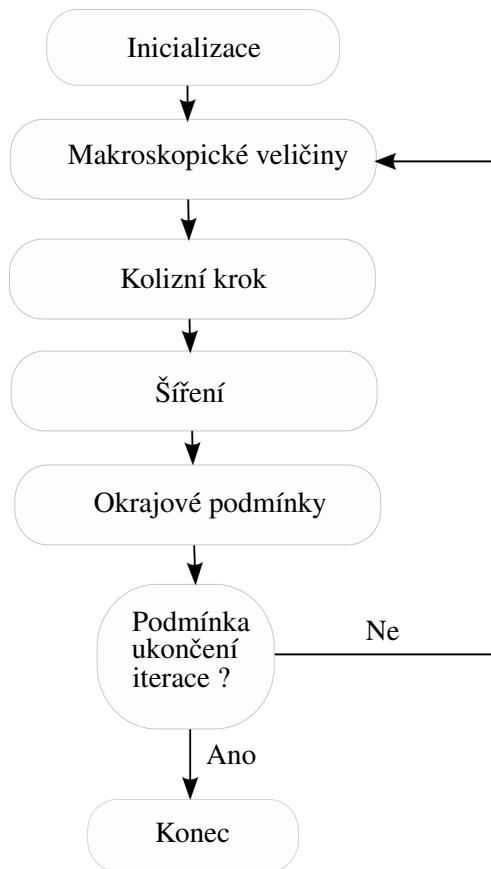
Matematicky lze třetí krok interpretovat rovnicí

$$f_i(\vec{x} + \vec{\xi}_i \Delta t, t + \Delta t) = \hat{f}_i(\vec{x}, t), \quad (3.5)$$

kde  $\Delta t$  značí časový krok.

Poslední, tj. čtvrtý krok LBM algoritmu zahrnuje aplikaci hraničních podmínek. V některých případech může tento krok předcházet i krok šíření, budeme-li například aplikovat *periodickou* hraniční podmínku. Různými typy hraničních podmínek se budeme zabývat později.

Po provedení čtvrtého kroku zkontrolujeme, zda nenastala jedna z podmínek pro ukončení běhu algoritmu. Při nesplnění těchto podmínek přejdeme zpět na krok 2. Kompletní algoritmus lze znázornit pomocí diagramu zobrazeném na obrázku 3.3.



Obrázek 3.2: Schéma algoritmu LBM.

## 3.2 Rychlostní modely Lattice–Boltzmannovy metody

Při aplikaci Lattice–Boltzmannovy metody je třeba zvolit příslušný rychlostní model, tj. počet rychlostí, kterými budeme diskretizovat rychlostní prostor a dimenzi, na které se budeme pohybovat. V literatuře se setkáváme se značením  $DdQq$ , kde  $q, d$  jsou konstanty udávající po řadě počet rychlostí pro diskretizaci a dimenzi prostoru. Například  $D2Q5$  je 2-dimenzionální prostor s 5 různými rychlostmi. Hlavním důvodem, proč se tímto zabýváme je ten, že volba mřížky má vliv na volbu konstant v LBM, jimiž jsou například váhy v rovnovážné distribuční funkci nebo mřížková rychlost zvuku  $c_s$ .

Podívejme se nyní blíže na některé konkrétní modely. Pro jednoduchost se nejprve podívejme na model  $D1Q3$ . Z předchozího víme, jak získat příslušné váhy a konstantu  $c_s$ . Směry rychlostí odpovídají kořenům jednorozměrného Hermiteova polynomu řádu 3, tj.

$$\mathcal{H}^{(3)}(x) = x^3 - 3x = x(x - \sqrt{3})(x + \sqrt{3}). \quad (3.6)$$

Kořeny tohoto polynomu jsou  $x_0 = 0, x_1 = \sqrt{3}, x_2 = -\sqrt{3}$ . Příslušející váhy získáme ze vzorce (2.3).

Jednotlivé váhy jsou rovny

$$w_0 = \frac{2}{3}, \quad (3.7)$$

$$w_1 = \frac{1}{6}, \quad (3.8)$$

$$w_2 = \frac{1}{6}. \quad (3.9)$$

Z kořenů Hermiteova polynomu vidíme, že pro tento model platí

$$c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}. \quad (3.10)$$

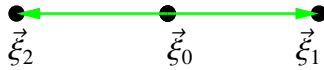
Mikroskopické rychlosti jsou po přeškálování výrazem  $c_s$  rovny

$$\xi_0 = 0, \quad (3.11)$$

$$\xi_1 = 1, \quad (3.12)$$

$$\xi_2 = -1. \quad (3.13)$$

Graficky lze tento model znázornit pomocí obrázku 3.3. Pro jednodimenzionální případ se často ještě



Obrázek 3.3: Mřížka D2Q3.

vyskytuje v literatuře model  $D1Q5$ , přičemž příslušné konstanty se získají obdobně.

Pro dvoudimenzionální případ se zaměříme na model  $D2Q9$ , který později použijeme pro simulaci proudění tekutiny. Směry rychlostí získáme opět jako kořeny dvoudimenzionálního Hermiteova polynomu řádu 9. Pro výpočet směrů a vah využijeme toho, že váhová funkce (1.126) a Hermiteovy polynomy lze zapsat jako součin jednorozměrných vah a Hermiteových polynomů. Z toho dostáváme, že složky diskretních rychlostí se budou skládat z kořenů jednorozměrného polynomu řádu 3 a k tomu získáme váhy jako příslušné násobky jednorozměrných vah z předešlého příkladu. Pro mřížkovou rychlost opět platí

$$c_s = \frac{1}{\sqrt{3}} \quad (3.14)$$

a jednotlivé mikroskopické rychlosti jsou po přeškálování rovny

$$\vec{\xi}_0 = (0,0), \quad (3.15)$$

$$\vec{\xi}_1 = (1,0), \quad (3.16)$$

$$\vec{\xi}_2 = (0,1), \quad (3.17)$$

$$\vec{\xi}_3 = (-1,0), \quad (3.18)$$

$$\vec{\xi}_4 = (0, -1), \quad (3.19)$$

$$\vec{\xi}_5 = (1,1), \quad (3.20)$$

$$\vec{\xi}_6 = (1, -1), \quad (3.21)$$

$$\vec{\xi}_7 = (-1, -1), \quad (3.22)$$

$$\vec{\xi}_8 = (1, -1). \quad (3.23)$$



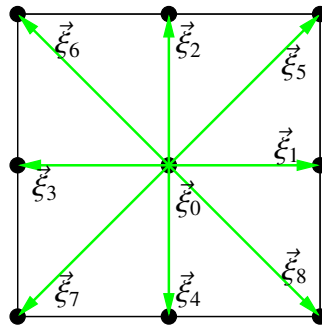
Pro váhy dostáváme

$$w_0 = w_{0,(D1Q3)}^2 = \frac{4}{9}, \quad (3.24)$$

$$w_i = w_{0,(D1Q3)} w_{1,(D1Q3)} = \frac{1}{9}, \quad i = 1,2,3,4, \quad (3.25)$$

$$w_i = w_{1,(D1Q3)} w_{1,(D1Q3)} = \frac{1}{36}, \quad i = 5,6,7,8. \quad (3.26)$$

Pro lepší názornost opět uveďme obrázek 3.4 znázorňující tvar mřížky.



Obrázek 3.4: Mřížka D2Q9.

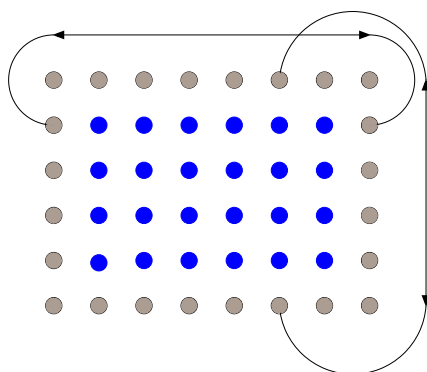
Stejným způsobem bychom postupovali například i u modelu  $D3Q27$ . V literatuře se můžeme dále setkat s modely  $D2Q7$ ,  $D3Q15$ ,  $D3Q19$  a pod. Přehled příslušejících vah a rychlostí lze nalézt v [7].

### 3.3 Okrajové podmínky

Jedna z intenzivně zkoumaných částí Lattice–Boltzmannovy metody je část týkající se okrajových podmínek. Důvodem, proč je této partii věnována taková pozornost, je vliv okrajových podmínek na přesnost a stabilitu výpočtu. Podívejme se na některé typy okrajových podmínek a jejich implementace blíže.

#### Periodická okrajová podmínka

Tato podmínka spočívá na periodicitě hranic naší zkoumané oblasti, tj. to, co vyteče na jedné straně, vteče na druhé straně a naopak, viz obrázek 3.5. V případě, kdy použijeme tuto podmínku v dvourozměrném modelu na vertikální část hranic, dostaneme nekonečný dutý válec. Aplikujeme-li tuto podmínku na celou hranici lze chápat oblast jako dutý toroid.

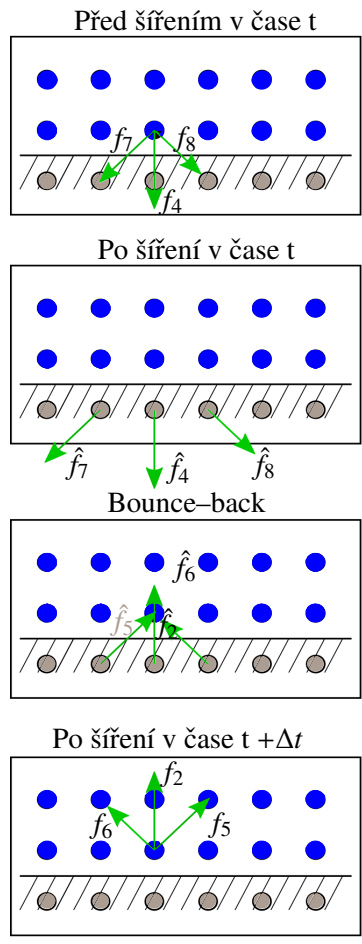


Obrázek 3.5: Periodická okrajová podmínka.

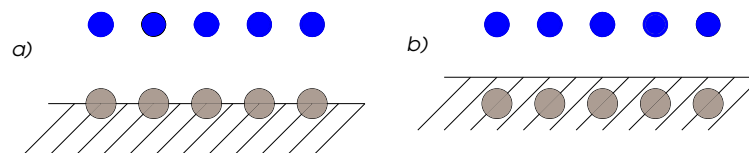
### „Bounce-back“ okrajová podmínka

Tato okrajová podmínka je podmínka tzv. zpětného odrazu. Její výhodou je její snadná implementace. Popíšme průběh této podmínky na spodní horizontální hranici oblasti modelu  $D2Q9$ . Rozdělme podmínku do 4 kroků, viz obrázek 3.6. Z obrázku 3.6 je patrné, že ve druhém kroku po provedení šíření jsou v Lattice–Boltzmannově metodě některé hodnoty distribučních funkcí neznámé. Jejich hodnoty získáme tak, že jim přiřadíme hodnoty distribucí k nim opačných. Například na dolní horizontální hranici modelu  $D2Q9$  přiřadíme neznámé distribuci  $f_2$  hodnotu  $f_4$ ,  $f_5$  hodnotu  $f_7$  a  $f_6$  hodnotu  $f_8$ , viz obrázek 3.6.

Existuje několik modifikací na tuto metodu okrajových podmínek. Liší se převážně v tom, kde se uvažuje přítomnost samotné hranice. Klasický „Bounce-back“ předpokládá přítomnost hranice přímo na uzlovém bodě, oproti tomu „half-way bounce-back“ předpokládá přítomnost hranice mezi uzlovými body, viz obrázek 3.7.



Obrázek 3.6: Ilustrace *Half-way bounce-back* okrajové podmínky.



Obrázek 3.7: a) Klasický „Bounce-back“, b) „half-way bounce-back“.

## Neumanova okrajová podmínka

Neumanova okrajová podmínka předepisuje hodnotu rychlosti na hranici. Necht' rychlost na hranici je rovna  $\vec{u}_0$ . Ilustrujme tuto podmínku například na horní hranici oblasti modelu  $D2Q9$ . Předpokládejme rychlost na hranici ve tvaru

$$\vec{u}_0 = \begin{bmatrix} u_{x,0} \\ u_{y,0} \end{bmatrix}. \quad (3.27)$$

Po provedení šíření v LBM algoritmu jsou neznámé hodnoty distribučních funkcí  $f_4, f_7, f_8$  a díky tomu neznáme ani hodnotu hustoty  $\rho$ . Pro hustotu máme vzorec (3.2), tj.

$$\rho = \sum_{i=0}^8 f_i. \quad (3.28)$$

Pro makroskopickou rychlost máme vztah (3.3), tedy

$$\vec{u}_0 = \frac{1}{\rho} \sum_{i=0}^8 \vec{\xi}_i f_i, \quad (3.29)$$

z čehož získáme rovnice

$$\rho u_{x,0} = f_1 - f_3 + f_5 - f_6 - f_7 + f_8, \quad (3.30)$$

$$\rho u_{y,0} = f_2 - f_4 + f_5 + f_6 - f_7 - f_8. \quad (3.31)$$

Nyní máme tři rovnice pro celkem čtyři neznámé. Jako čtvrtá rovnice nám poslouží rovnice

$$f_2 - f_2^{(eq)} = f_4 - f_4^{(eq)}, \quad (3.32)$$

kteřou navrhl Zou a He v [28] a spočívá na faktu, že uvažujeme „*bounce-back*“ pro nerovnovážnou část distribuční funkce. Z předchozích rovnic tak dostaneme neznámé veličiny

$$\rho = \frac{1}{1 - u_{y,0}} [f_0 + f_1 + f_3 + 2(f_4 + f_7 + f_8)], \quad (3.33a)$$

$$f_2 = f_4 + \frac{2}{3}\rho u_{y,0}, \quad (3.33b)$$

$$f_5 = f_7 - \frac{1}{2}(f_1 - f_3) + \frac{1}{2}\rho u_{x,0} + \frac{1}{2}\rho u_{y,0}, \quad (3.33c)$$

$$f_6 = f_8 + \frac{1}{2}(f_1 - f_3) - \frac{1}{2}\rho u_{x,0} + \frac{1}{2}\rho u_{y,0}. \quad (3.33d)$$

Poznamenejme ještě, že na uzlové body, které se nacházejí v rozích oblasti musíme aplikovat předchozí podmínku v jiné formě, protože např. v dolním levém rohu oblasti známe pouze hodnoty  $f_3, f_4, f_7$ .

## Dirichletova okrajová podmínka

Dirichletova okrajová podmínka spočívá na předepsání tlaku, resp. hustoty na okraji oblasti. Oproti předchozímu případu se nenastaví na okraji oblasti pevná hodnota rychlosti, ale tlaku. Předpokládáme-li

navíc, že tečná složka rychlosti k okraji oblasti je nulová, dostaneme obdobné rovnice jako u Neumanovy okrajové podmínky. Pro horní horizontální hranici jsou tyto rovnice tvaru

$$u_{y,0} = \frac{f_0 + f_1 + f_3 + 2(f_2 + f_5 + f_4)}{\rho_0} - 1, \quad (3.34)$$

$$f_4 = f_2 - \frac{2}{3}\rho_0 u_{y,0}, \quad (3.35)$$

$$f_7 = f_5 + \frac{1}{2}(f_1 - f_3) - \frac{1}{6}\rho_0 u_{y,0}, \quad (3.36)$$

$$f_8 = f_6 - \frac{1}{2}(f_1 - f_3) - \frac{1}{6}\rho_0 u_{y,0}, \quad (3.37)$$

kde  $\rho_0$  je námi zadaná hustota (tlak). Další úpravy hraničních podmínek zlepšující stabilitu a přesnost lze nalézt například v [7].

### 3.4 Přechod mezi jednotkami na mřížce a fyzikálními jednotkami

K tomu, abychom mohli použít Lattice–Boltzmannovu metodu pro simulaci daného fyzikálního problému je třeba přejít od fyzikálních jednotek k *mřížkovým* jednotkám. V průběhu odvozování Lattice–Boltzmannovy metody jsme se potřebovali odprostit od fyzikálních jednotek a přejít k bezrozměrným veličinám, abychom mohli provést rozvoj distribuční funkce do báze Hermiteových polynomů. Postup, který zde naznačíme, je převzatý z [12] a popíšeme ho ve dvou fázích.

V první fázi přejdeme z fyzikální soustavy jednotek (F) k bezrozměrné soustavě jednotek (B), která je nezávislá na parametrech Lattice–Boltzmannovy metody. Ve druhé fázi přejdeme od bezrozměrné soustavy jednotek k *mřížkové soustavě* jednotek (LB). Propojení mezi jednotlivými soustavami jednotek je zajištěno skrze bezrozměrná čísla. Při řešení Navierových–Stokesových rovnic pro nestlačitelnou tekutinu zajišťuje propojení Reynoldsovo číslo.

Při přechodu od (F) k (B) přeškálujeme jednotky délky pomocí referenční délky  $l_0$  [m] a referenčního času  $t_0$  [s]. Hodnoty těchto referenčních veličin volíme podle dané fyzikální úlohy. Nejčastěji volíme  $l_0$  jako délku tělesa vnořeného do simulované tekutiny nebo jako rozměr simulované oblasti. Charakteristický čas poté nejčastěji odvozujeme od zvolené charakteristické rychlosti  $\vec{u}_0$ , kterou může být například maximální nebo průměrná rychlost tekutiny v dané oblasti. Od (B) k (LB) přejdeme pomocí škálovacích parametrů  $\delta_x$  [-] a  $\delta_t$  [-]. Konkrétní volbou těchto parametrů se budeme zabývat později.

Při přechodu od (F) k (B) zavedeme veličiny  $t_B$  [-],

$$t_B = \frac{t}{t_0} \quad (3.38)$$

a  $\vec{x}_B$  [-],

$$\vec{x}_B = \frac{1}{l_0}\vec{x}, \quad (3.39)$$

kde  $\vec{x}$  je souřadnicový vektor. Z rovnic (3.38), (3.39) získáme následující vztahy

$$\vec{u} = \frac{l_0}{t_0}\vec{u}_B, \quad (3.40)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{1}{t_0}\frac{\partial}{\partial t_B}, \quad (3.41)$$

$$\nabla = \frac{1}{l_0}\nabla_B, \quad (3.42)$$

kde  $\nabla_B$  je gradient v bezrozměrných prostorových souřadnicích. Bezrozměrné Reynoldsovo číslo je rovno

$$Re = \frac{l_0^2}{t_0 \nu}. \quad (3.43)$$

Při přechodu od (F) k (B) chceme, aby byla zachována velikost Reynoldsova čísla (3.43).

Při volbě stejných referenčních veličin v soustavě (B) jako v soustavě (F) budou tyto referenční veličiny rovny jedné. Reynoldsovo číslo poté přejde do tvaru

$$Re = \frac{1}{\nu_B}, \quad (3.44)$$

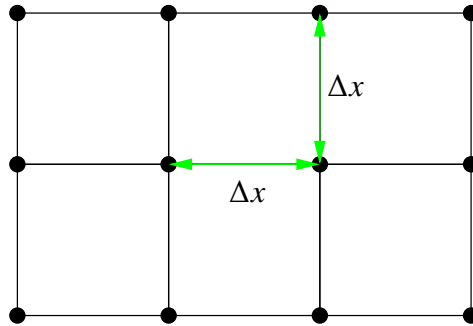
kde  $\nu_B [-]$  je přeškálovaná kinematická viskozita,

$$\nu_B = \frac{t_0}{l_0^2} \nu. \quad (3.45)$$

Nyní se zaměříme na volbu škálovacích parametrů  $\delta_x$  a  $\delta_t$ .  $\delta_x$  volme jako

$$\delta_x = \frac{\Delta x}{J - 1}, \quad (3.46)$$

kde  $J$  je počet mřížkových bodů dělících charakteristickou délku  $l_0$  a  $\Delta x$  je vzdálenost mezi jednotlivými uzlovými body v mřížce, viz obrázek 3.8. V našem případě bude vždy  $\Delta x = 1$ , díky přeškálování parametrem  $c_s$ .



Obrázek 3.8: D2Q9 mřížka.

$\delta_t$  položme

$$\delta_t = \frac{\Delta t}{J_{iter}}, \quad (3.47)$$

kde  $J_{iter}$  je počet iteračních kroků pro dosažení času  $t_0$  a  $\Delta t$  označuje dobu jednoho iteračního kroku. V našem případě bude opět  $\Delta t = 1$ . Pro mřížkové jednotky se v dostupné literatuře používá značení  $lu$  a  $ts$ , kde  $lu$  odpovídá vzdálenosti mezi uzlovými body, tj.  $\Delta x = 1 lu$ , a  $ts$  je doba jednoho iteračního kroku, tj.  $\Delta t = 1 ts$ . Další veličiny přejdou v soustavě (LB) do tvaru

$$\vec{u}_{LB} = \frac{\delta_t}{\delta_x} \vec{u}_B, \quad (3.48)$$

$$\nu_{LB} = \frac{\delta_t}{\delta_x^2} \frac{1}{Re}. \quad (3.49)$$

Pokud bychom vynechali mezikrok s bezrozměrnými veličinami, při přechodu mezi fyzikálními a mřížkovými jednotkami, dostali bychom následující vztahy.

$$\begin{aligned} t &= t_B t_0 \\ t_B &= t_{LB} \delta_t \end{aligned} \implies t = t_{LB} t_0 \delta_t, \quad (3.50a)$$

$$\begin{aligned} \vec{x} &= \vec{x}_B l_0 \\ \vec{x}_B &= \vec{x}_{LB} \delta_x \end{aligned} \implies \vec{x} = \vec{x}_{LB} l_0 \delta_x, \quad (3.50b)$$

$$\begin{aligned} \vec{u} &= \vec{u}_B \frac{l_0}{t_0} \\ \vec{u}_B &= \vec{u}_{LB} \frac{\delta_x}{\delta_t} \end{aligned} \implies \vec{u} = \vec{u}_{LB} \frac{l_0}{t_0} \frac{\delta_x}{\delta_t}, \quad (3.50c)$$

$$\begin{aligned} \nu &= \nu_B \frac{l_0^2}{t_0} \\ \nu_B &= \nu_{LB} \frac{\delta_x^2}{\delta_t} \end{aligned} \implies \nu = \nu_{LB} \frac{l_0^2}{t_0} \frac{\delta_x^2}{\delta_t}, \quad (3.50d)$$

Otázkou stále zůstává, jak přesně volit  $\delta_x$ , resp.  $\delta_t$ . Naším cílem je zajistit co největší stabilitu Lattice–Boltzmannovy metody. První požadavek, který budeme klást je, aby charakteristická rychlost  $u_{0,LB}$  nebyla větší než rychlost zvuku  $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}$ , tj.

$$\delta_t < \frac{1}{\sqrt{3}} \delta_x. \quad (3.51)$$

Během odvozování LBM jsme dále narazili na požadavek, aby Machovo číslo  $Ma$  a Knudsenovo číslo  $Kn$  bylo menší než jedna. Proto, aby byly splněny předchozí podmínky položeme, viz [12],

$$\delta t \propto \delta_x^2. \quad (3.52)$$

Pro úplnost nakonec poznamenejme, že přechod od mřížkových jednotek k fyzikálním jednotkám je pouhou inverzí vztahů (3.50).

### 3.5 Implementace Lattice–Boltzmannovy metody v jazyce C++ a CUDA

V této části kapitoly týkající se Lattice–Boltzmannovy metody se budeme blíže věnovat paralelní implementaci této metody v jazyce C++ a CUDA. Podotkneme, že inspirací pro paralelní implementaci Lattice–Boltzmannovy metody na grafické kartě s CUDA architekturou byl kód a ochotné konzultace poskytnuté Ing. Robertem Strakou, Ph.D. CUDA<sup>1</sup> je hardwarová a softwarová architektura vyvinutá společností Nvidia umožňující spouštět programy napsané například v jazycích C/C++ na grafických kartách s touto architekturou. Konkrétně se budeme v této části zabývat reprezentací mřížky pro efektivitu následného paralelního výpočtu na grafické kartě a implementací vybraných částí algoritmu popsanych v části 3.1 pro dvourozměrný případ.

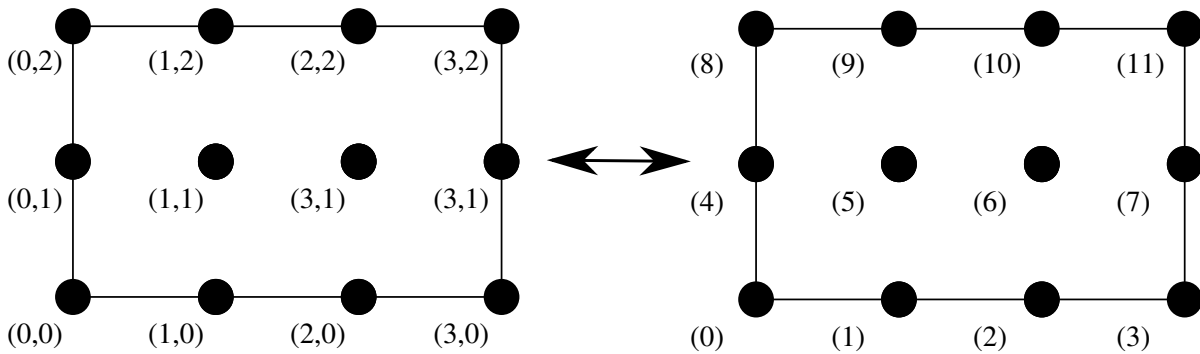
<sup>1</sup> Anglická zkratka pro Compute Unified Device Architecture

Oblast, ve které budeme simulovat vývoj dané tekutiny v čase, je diskretizována pomocí mřížky, tj. pomocí množiny bodů  $\Gamma$ . Dále se zabýváme případem, kdy pro diskretizaci byla použita mřížka typu D2Q9. Pro jiné typy mřížky je následující postup analogický.

Dvourozměrnou mřížku lze implementovat jako jednorozměrnou datovou strukturu provedením transformace

$$x_{ij} \longleftrightarrow i + j \cdot L_s, \quad (3.53)$$

kde  $i, j \in \mathbb{Z}_+$ , jsou souřadnice bodu v mřížce,  $x_{ij} \in \Gamma$  a  $L_s$  je šířka mřížky. Tato transformace je znázorněna na obrázku 3.9. Každý uzlový bod mřížky obsahuje hodnoty diskrétní distribuční funkce  $f_i$  (9 hodnot pro



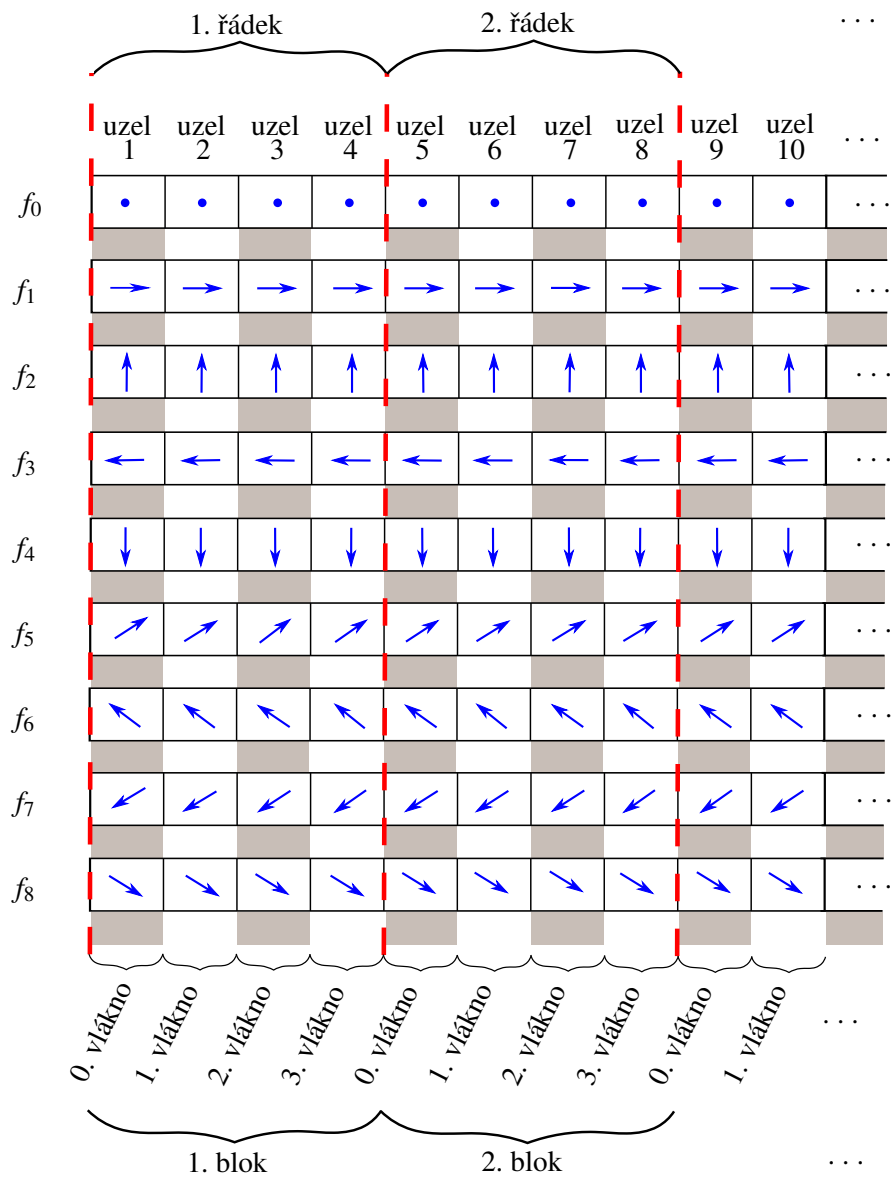
Obrázek 3.9: Ilustrace transformace popsané rovnicí (3.53).

D2Q9), složky vektoru makroskopické rychlosti  $\vec{u}$  (2 složky) a hodnotu makroskopické hustoty  $\rho$ .

Z hlediska následné paralelní implementace a přístupu do paměti, je výhodné uchovávat hodnoty distribuční funkce pomocí datových struktur schématicky znázorněných pomocí obrázku 3.10. Důvod, proč je výhodné takto uchovávat hodnoty distribuční funkce, spočívá v práci s různými druhy pamětí na grafické kartě, viz [18]. Při výpočtech na grafické kartě s CUDA architekturou lze pracovat současně s několika druhy pamětí současně. Hlavní rozdíl mezi nimi je v rychlosti čtení a zápisu a ve velikosti. Pro paralelní výpočet používáme vždy jistý počet *bloků* a v rámci každého bloku jistý počet *vláken*. Tyto bloky a vlákna tvoří jakousi síť současně běžících procesů, viz obrázek 3.11. Poznamenejme, že pro optimální výpočet se doporučuje používat nejméně 32 vláken a každý jiný počet vláken by měl být dělitelný 32, viz [20].

Jednotlivá vlákna v rámci každého bloku mohou mimo jiné spolu komunikovat prostřednictvím *sdílené* paměti. Nevýhodou této paměti je její malá velikost, a proto nemůže být tato paměť použita pro uchování celé mřížky. Jednotlivé bloky mohou spolu komunikovat prostřednictvím *globální* paměti. Tato paměť je většinou už dostatečná pro uchování celé mřížky, ale přístup k ní a zápis do ní je časově náročnější než u sdílené paměti, viz [20].





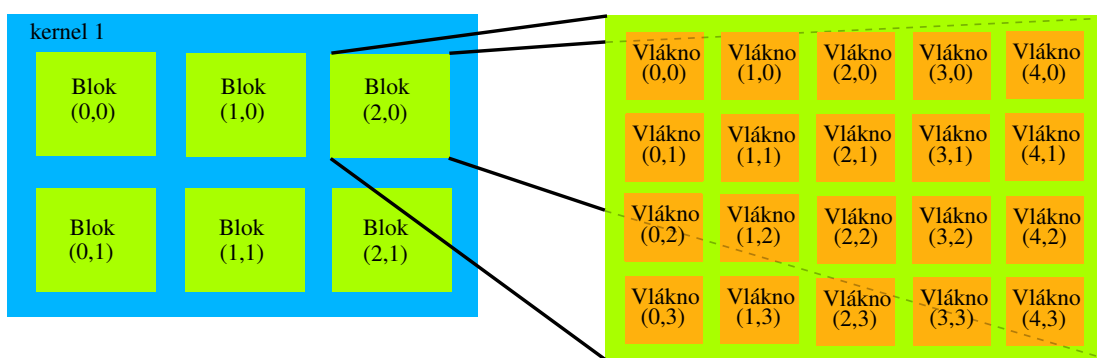
Obrázek 3.10: Schématické znázornění datové reprezentace distribuční funkce pro rychlostní model D2Q9.

Nyní se zaměříme na implementaci jednotlivých kroků algoritmu Lattice–Boltzmannovy metody. V první fázi inicializace alokujeme proměnné na procesoru a na grafické kartě. Následuje provedení inicializace distribučních funkcí a dalších proměnných. Hlavní cyklus Lattice–Boltzmannovy metody nese v sobě *kernelovou* funkci, pomocí níž je zprostředkován paralelní výpočet na grafické kartě. Tato funkce provede postupně všechny hlavní kroky algoritmu Lattice–Boltzmannovy metody. Bylo by možné mít v rámci hlavního cyklu více takovýchto funkcí, které by prováděly například kolizní krok a krok šíření zvlášť. Ukazuje se však, že tento postup nemusí být optimální, viz [3]. Kernelová funkce má obecně tvar

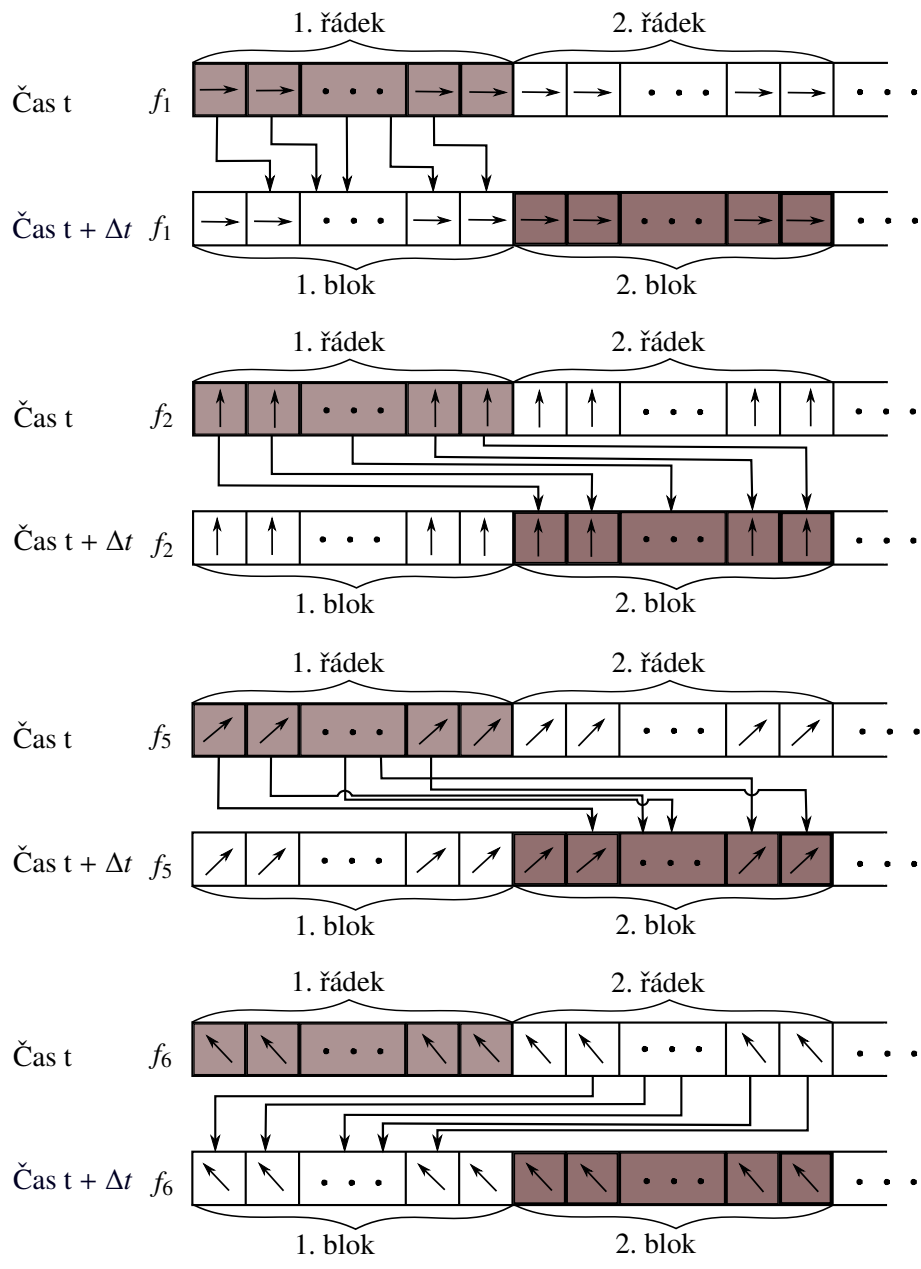
```
__global__ void kernelova_funkce(parametry_funkce){telo_funkce}.
```

Kvalifikátor **\_\_global\_\_** označuje, že je tato funkce volána procesorem a je provedena na grafické kartě. Volání kernelové funkce je ve tvaru

```
kernelova_funkce << pocet_bloku, pocet_vlaken, velikost_sdilene_pameti >> (parametry_funkce).
```



Obrázek 3.11: Schématické znázornění paralelní sítě procesů.



Obrázek 3.12: Schématické znázornění implementace kroku šíření. Znázornění šíření pro distribuční funkce  $f_3, f_4, f_7$  a  $f_8$  bylo vynecháno, protože je pouze inverzním případem pro pořadí šíření distribučních funkcí  $f_1, f_2, f_5$  a  $f_6$ . Širší část uprostřed řádků reprezentuje zbylé uzly daného řádku. Šíření na okraji bloků závisí na zvolených okrajových podmínkách, proto bylo toto znázornění vynecháno. Distribuční funkce, které jsou v rámci šíření zapsány do řádku stejné barvy, nemohou efektivně využít sdílenou paměť při šíření.

Při výpočtu makroskopických veličin, hraničních podmínek a kolizního kroku nebudeme se sdílenou pamětí pracovat a tedy samotná implementace je podobná implementaci na procesoru.

Zajímavější je část týkající se kroku šíření. Při výpočtu používáme dvě stejné struktury pro uchování hodnot distribuční funkce, abychom se při kroku šíření vyvarovali problému s přepisem dat potřebných k dalším výpočtům, protože řešení tohoto problému by mělo za následek zvýšení časové náročnosti výpočtu a samotná simulace tekutiny by pak byla časově neefektivní. V tomto kroku budeme již používat zmíněnou sdílenou paměť, pomocí níž mohou jednotlivá vlákna mezi sebou komunikovat, což bude mít za následek urychlení výpočtu. Implementaci ilustrujme opět pomocí obrázku 3.12. Je patrné, že sdílenou paměť využijeme tam, kde v rámci šíření neopustíme daný blok. To nastává pouze u šíření distribučních funkcí  $f_1$  a  $f_3$ .

Další detaily paralelní implementace lze nalézt například v [3] nebo v příloženém kódu.

## Kapitola 4

# Numerická analýza Lattice–Boltzmannovy metody

### 4.1 Hagenovo–Poiseuilleho proudění

Aplikujeme nyní naše znalosti získané v předešlých kapitolách na řešení Hagenovo–Poiseuilleho proudění. Tento problém popisuje stacionární případ nestlačitelného proudění v izotermálním systému. Důvodem, proč se touto úlohou zabýváme je ten, že lze odvodit analytické řešení Navierových–Stokesových rovnic, což využijeme k otestování Lattice–Boltzmannovy metody a určení jejího experimentálního řádu konvergence.

#### 4.1.1 Analytické řešení

Budeme uvažovat dvourozměrný případ, který popisuje proudění mezi nekonečnými rovnoběžnými rovinami. Z makroskopického hlediska lze tuto úlohu popsat pomocí Eulerových rovnic pro nestlačitelnou tekutinu, viz kapitola 1,

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} = 0, \quad (4.1)$$

$$u_y = 0, \quad (4.2)$$

$$-\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} = 0, \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = 0, \quad (4.4)$$

kde  $\vec{u} = (u_x, u_y)$  je makroskopická rychlost,  $p$  je tlak a  $\mu$  je dynamická viskozita. Dále předpokládejme, že  $u = u(x)$ ,  $p = p(x)$ , viz obrázek 4.1. Přepíšme rovnici (4.3) do tvaru

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \mu \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2}. \quad (4.5)$$

Předchozí rovnice (4.5) je rovnicí konstant, neboť pro libovolné dvě funkce  $f = f(x)$ ,  $g = g(y)$  nastane rovnost

$$f(x) = g(y), \quad (4.6)$$

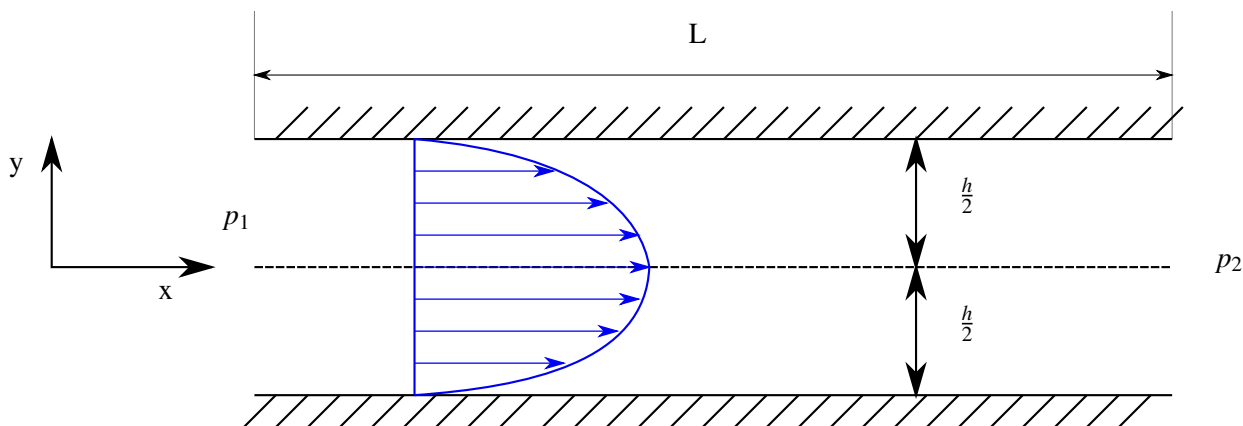
pokud jsou  $f$  i  $g$  konstantní funkce. Z toho plyne

$$p = C_1 x + C_2, \quad (4.7)$$

kde  $C_1, C_2 \in \mathbb{R}$  jsou konstanty. Předpokládáme-li, že na vstupu a výstupu do oblasti jsou tlaky  $p_1$  a  $p_2$ , kde  $p_1 > p_2$ , viz obrázek 4.1, dostaneme

$$p = p_1 - \frac{\Delta p x}{L}, \quad (4.8)$$

kde  $L$  je vzdálenost od vstupu k výstupu, viz obrázek 4.1 a  $\Delta p = p_1 - p_2$ .



Obrázek 4.1: Hagen–Poiseuilleho úloha.

Dále řešíme pravou stranu rovnice (4.3), tj.

$$\mu \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} = C_1 = -\frac{\Delta p}{L}. \quad (4.9)$$

Úpravami dostaneme

$$\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} = -\frac{\Delta p}{\mu L}, \quad (4.10a)$$

$$\frac{\partial u_x}{\partial y} = -\frac{\Delta p}{\mu L} y + C_3, \quad (4.10b)$$

$$u_x = -\frac{\Delta p}{\mu L} y^2 + C_3 y + C_4, \quad (4.10c)$$

kde  $C_3, C_4$  jsou konstanty. Předpokládáme-li navíc, že rychlost na hranicích rovnoběžnými s osou  $x$  je nulová, viz obrázek 4.1, tj.

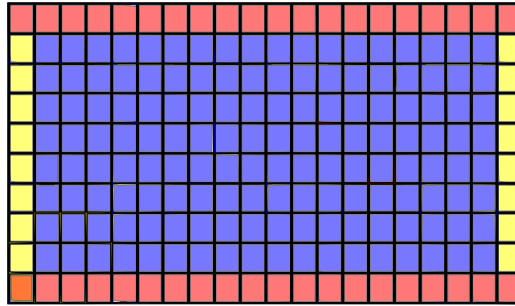
$$u_x\left(\frac{h}{2}\right) = u_x\left(-\frac{h}{2}\right) = 0, \quad (4.11)$$

pak rovnice (4.10c) přejde do tvaru

$$u_x(y) = \frac{\Delta p}{2\mu L} \left[ \frac{h^2}{4} - y^2 \right], \quad y \in \left\langle -\frac{h}{2}, \frac{h}{2} \right\rangle \quad (4.12)$$

a tedy řešení má očekávaný parabolický profil, viz obrázek 4.1, přičemž největší rychlost je evidentně pro bod  $y = 0$ , tedy

$$u_{max} = u_x(0) = \frac{\Delta p}{2\mu L} \frac{h^2}{4}. \quad (4.13)$$



Obrázek 4.2: Způsob nastavení mřížky. Modrá barva odpovídá oblasti s tekutinou, červená značí výskyt pevných překážek, žlutá odpovídá periodické okrajové podmínce. Uzly mřížky jsou lokalizovány uprostřed čtverečků.

#### 4.1.2 Numerická analýza konvergence Lattice–Boltzmannovy metody

Pro porovnání řešení získaného Lattice–Boltzmannovou metodou jsme v této práci použili několik různých nastavení počátečních podmínek. Typ mřížky, kterou budeme v této části používat pro Lattice–Boltzmannovu metodu je znázorněn na obrázku 4.2. Lattice–Boltzmannova metoda byla implementována paralelně v jazyce C++ a CUDA zprostředkovávající výpočet na grafických kartách. Některé detaily paralelní implementace byly komentovány v sekci 3.5. Výpočty v této práci byly provedeny celkem na 4 různých grafických kartách a jednom procesoru, viz tabulka 4.1, pro porovnání početní náročnosti a efektivity paralelizace.

Označení	Název	Počet jader
CPU	Intel Core i7-3630QM	4
GPU_1	NVIDIA GeForce GT 640M	384
GPU_2	NVIDIA GeForce GTX 590	1024
GPU_3	NVIDIA Tesla K20c	2496
GPU_4	NVIDIA Tesla K40c	2880

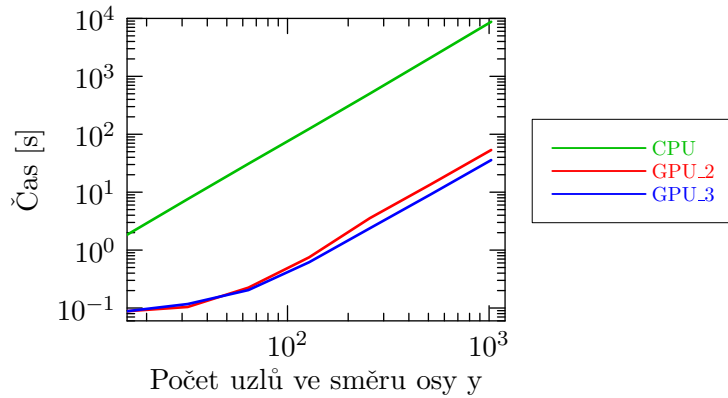
Tabulka 4.1: Seznam použitých hardwarových zařízení pro výpočty.

Jedním z důvodů paralelní implementace je zkrácení výpočetního času. Pro názornost srovnáme časovou náročnost výpočtů v závislosti na zvolené mřížce. Z obrázku 4.3 s nastavením parametrů<sup>1</sup> je patrné, že paralelní výpočty na grafických kartách mohou být přibližně 100 krát až 500 krát rychlejší v závislosti na zvolené grafické kartě.

Podívejme se dále na srovnání numerického řešení získaného LBM a analytického odvozeného v sekci 4.1.1. Jako první uvažujme tekutinu s Reynoldsovým číslem  $Re = 10$ , poháněnou silou se zrychlením  $g = 9,81 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ , což je hodnota odpovídající gravitačnímu zrychlení, v oblasti  $\Theta = (0, 2\ell_0) \times (0, \ell_0)$ , kde  $\ell_0 = 2 \text{ m}$ , a viskozitou  $\nu = 0,990454 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  určenou ze vztahu (3.43). Položíme-li ve vzorci (4.12)  $\Delta p = \rho g L$ , dostaneme analytické řešení ve tvaru

$$u_x(y) = \frac{g}{2\nu} \left[ \frac{h^2}{4} - y^2 \right]. \quad (4.14)$$

<sup>1</sup> $\nu = 0,990454 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}, Re = 10, \ell_0 = 2 \text{ m}$



Obrázek 4.3: Srovnání časové náročnosti v závislosti na dané mřížce při konstantním počtu iterací.

Provedeme-li dále transformaci souřadnic, tak, aby  $u_x(0) = u_x(L) = 0$ , tj.  $y' = y + \frac{h}{2}$ ,  $x' = x$ , přejde vztah (4.14) do tvaru

$$u_{x'}(y') = \frac{g}{2\nu} \left[ \frac{h^2}{4} - \left( y' - \frac{h}{2} \right)^2 \right]. \quad (4.15)$$

Pro jednoduchost přestaneme dále psát čárky nad nově zavedenými souřadnicemi. Přejdeme-li dále do systému mřížkových jednotek, lze předchozí vzorec (4.15) psát ve tvaru

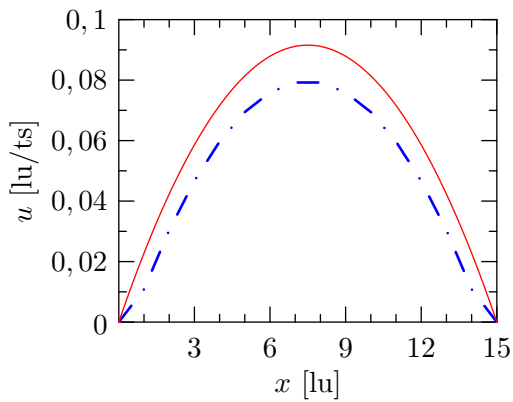
$$u_{x,LB}(y) = \frac{g_{LB}}{2\nu_{LB}} \left[ \frac{h_{LB}^2}{4} - \left( y_{LB} - \frac{h_{LB}}{2} \right)^2 \right], \quad (4.16)$$

kde dolní indexy LB značí jednotky v mřížkových jednotkách.

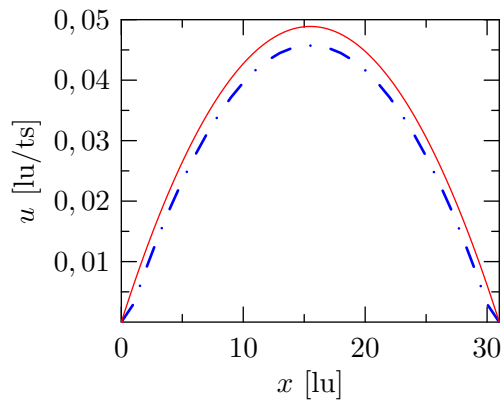
Srovnáme tedy numerické a analytické řešení.



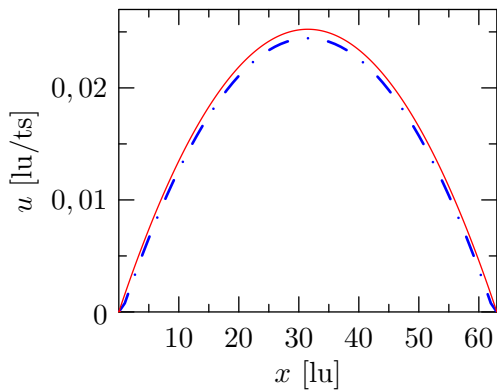
(a) Řez mřížky o rozměru 16x32.



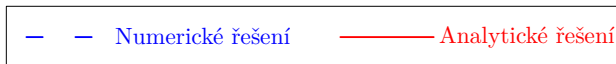
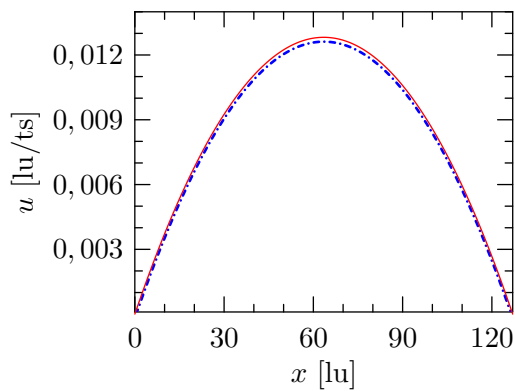
(b) Řez mřížky o rozměru 32x64.



(c) Řez mřížky o rozměru 64x128.



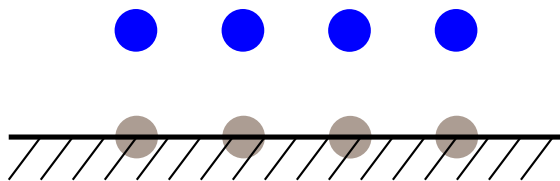
(d) Řez mřížky o rozměru 128x256.



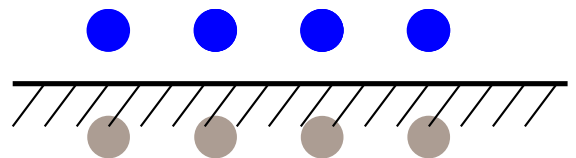
Obrázek 4.4: Porovnání rychlostního profilu v řezu pro různé mřížky s analytickým řešením.

Z obrázku 4.4 je zřejmá chyba numerického řešení. Důvodem je použití Bounce-back okrajové podmínky na okrajích dané oblasti. Uvažujme proto přítomnost stěny mezi uzlovými body, namísto v uzlových bodech, viz kapitola 3.3. Tato změna odpovídá jiné volbě hranice oblasti, viz obrázek 4.5. Upravíme-li podle toho dané analytické řešení, snížíme chybu numerického řešení, viz tabulka 4.2.

a) Lokalizace hranice na uzlových bodech



b) Lokalizace hranice mezi uzlovými body



Obrázek 4.5: Schématické znázornění volby hranic oblasti. Modře jsou znázorněny uzly tekutiny, šedou barvou hraniční uzly oblasti.

Mřížka	Analytické řešení s úpravou		Analytické řešení bez úpravy	
	$\ u_{num} - u_{an}\ _{L1}$	$\ u_{num} - u_{an}\ _{L2}$	$\ u_{num} - u_{an}\ _{L1}$	$\ u_{num} - u_{an}\ _{L2}$
16×32	$1,18679 \cdot 10^{-4}$	$1,26874 \cdot 10^{-4}$	$1,19267 \cdot 10^{-2}$	$1,19268 \cdot 10^{-2}$
32×64	$1,58946 \cdot 10^{-5}$	$1,64158 \cdot 10^{-5}$	$3,11903 \cdot 10^{-3}$	$3,11903 \cdot 10^{-3}$
64×128	$2,05305 \cdot 10^{-6}$	$2,08590 \cdot 10^{-6}$	$7,96814 \cdot 10^{-4}$	$7,96814 \cdot 10^{-4}$
128×256	$2,60770 \cdot 10^{-7}$	$2,62832 \cdot 10^{-7}$	$1,99747 \cdot 10^{-4}$	$2,00537 \cdot 10^{-4}$
256×512	$3,28461 \cdot 10^{-8}$	$3,30951 \cdot 10^{-8}$	$5,03993 \cdot 10^{-5}$	$5,04984 \cdot 10^{-5}$
512×1024	$4,12334 \cdot 10^{-9}$	$4,13142 \cdot 10^{-9}$	$1,26578 \cdot 10^{-5}$	$1,26701 \cdot 10^{-5}$
1024×2048	$5,18349 \cdot 10^{-10}$	$5,18856 \cdot 10^{-10}$	$3,17167 \cdot 10^{-6}$	$3,17322 \cdot 10^{-6}$

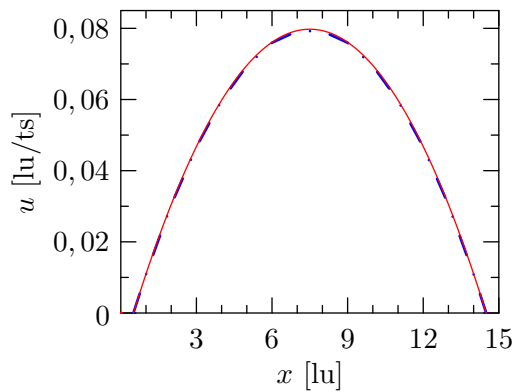
Tabulka 4.2: Srovnání chyb numerického řešení před a po úpravě analytického řešení.

Z tabulky 4.2 a obrázku 4.6 je patrné, že námi zavedená korekce analytického řešení vede k menším absolutním chybám, proto ji budeme nadále používat. Hodnoty chyb v předchozí tabulce 4.2 jsou určeny porovnáním hodnot x-ové složky rychlosti analytického řešení a x-ové složky rychlosti numerického řešení v řezu danou oblastí rovnoběžném s osou y pomocí vztahů

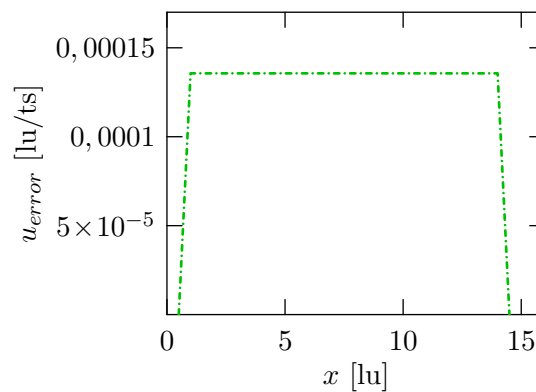
$$\|u_{num} - u_{an}\|_{L_k} = \left( \sum_{i=1}^{N_p} \|u_{num,i} - u_{an,i}\|^k \right)^{\frac{1}{k}}, \quad (4.17)$$

kde  $u_{num}$  je získané numerické řešení,  $u_{an}$  je analytické řešení,  $N_p$  je počet bodů v daném řezu, v němž porovnáváme dané hodnoty a  $k \in 1,2$ . Předchozí hodnoty chyb jsou určeny po ustálení proudění, tj. chyba se dále v čase nemění, viz obrázek 4.7 a obrázek 4.8.

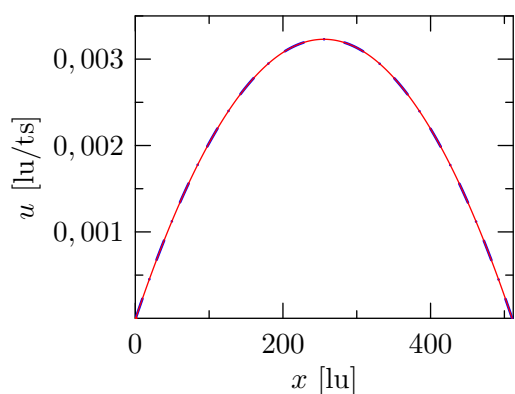
Dále srovnáme výsledky získané na grafické kartě GPU\_2 a grafické kartě GPU\_3 při použití jednoduché a dvojité přesnosti. Pro srovnání jsme použili stejné parametry tekutiny jako v předchozím odstavci.



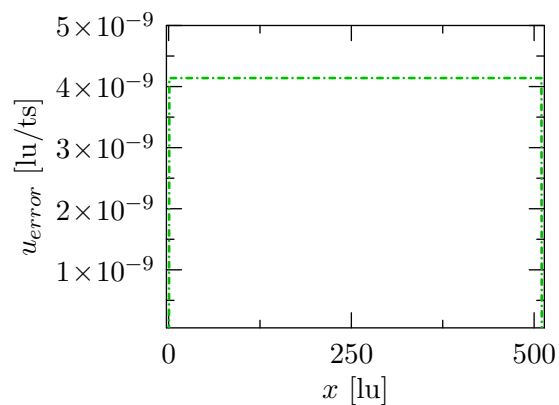
(a) Řešení v řezu mřížky o rozměru 16x32.



(b) Rozložení absolutní chyby v řezu.



(c) Řešení v řezu mřížky o rozměru 512x1024.

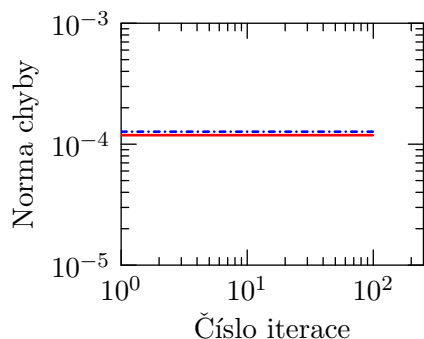


(d) Rozložení absolutní chyby v řezu.

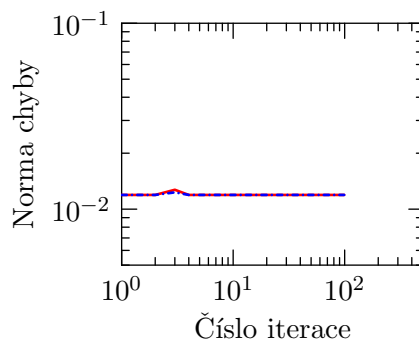


Obrázek 4.6: Porovnání rychlostního profilu v řezu kolmém na směr šíření pro různé mřížky s analytickým řešením.

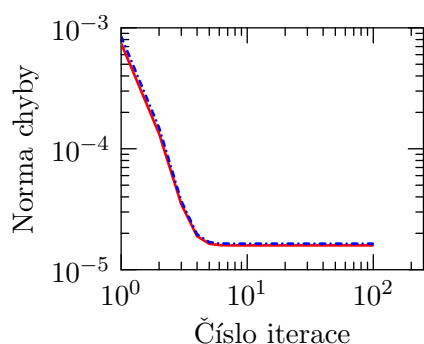
(a) Velikost chyby, 16 uzlů, s úpravou.



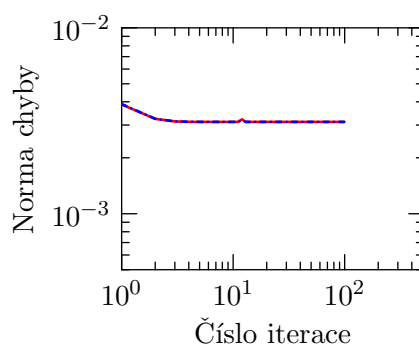
(b) Velikost chyby, 16 uzlů, bez úpravy.



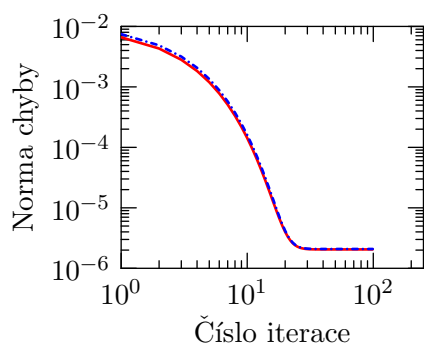
(c) Velikost chyby, 32 uzlů, s úpravou.



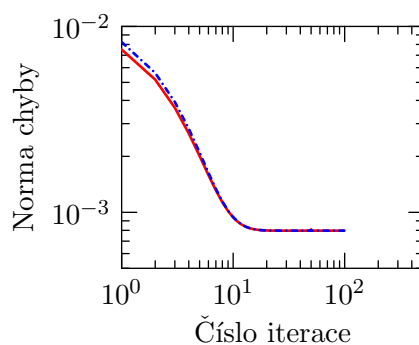
(d) Velikost chyby, 32 uzlů, bez úpravy.



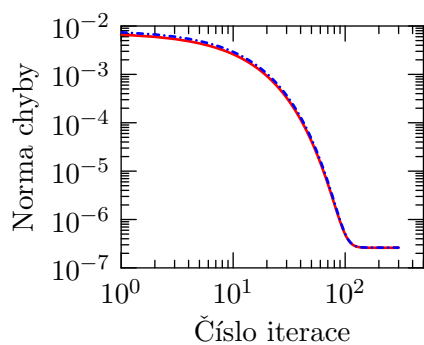
(e) Velikost chyby, 64 uzlů, s úpravou.



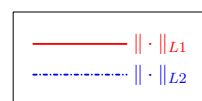
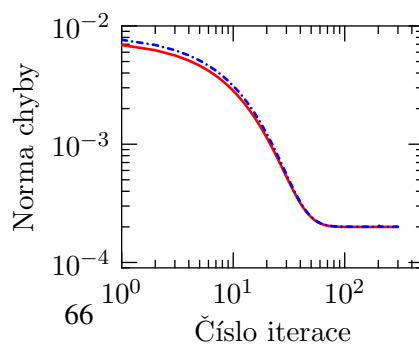
(f) Velikost chyby, 64 uzlů, bez úpravy.



(g) Velikost chyby, 128 uzlů, s úpravou.

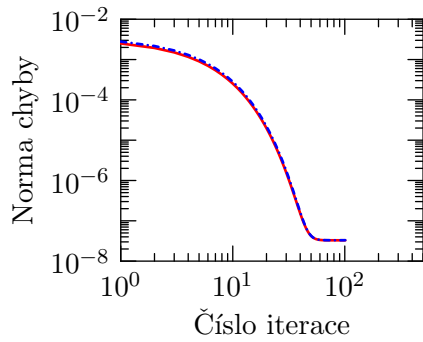


(h) Velikost chyby, 128 uzlů, bez úpravy.

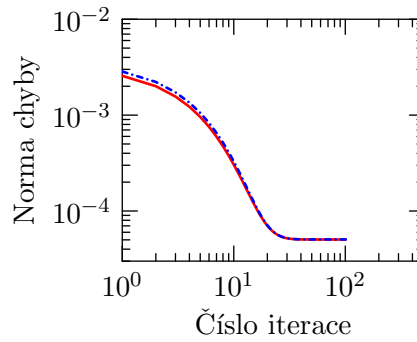


Obrázek 4.7: Porovnání vývoje absolutních chyb numerického řešení před a po úpravě počítané v  $L_1$  a  $L_2$  normě pro proudění s  $Re = 10$ ,  $\nu = 0,990454 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ .

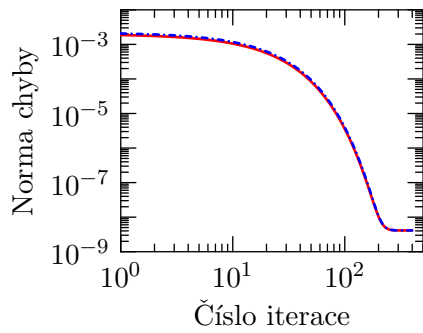
(a) Velikost chyby, 256 uzlů, s úpravou.



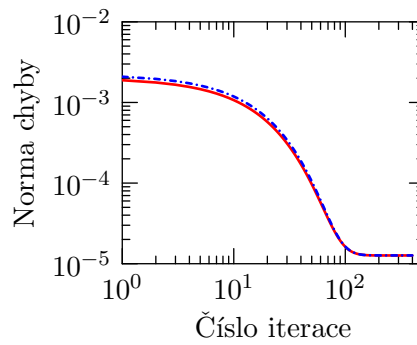
(b) Velikost chyby, 256 uzlů, bez úpravy.



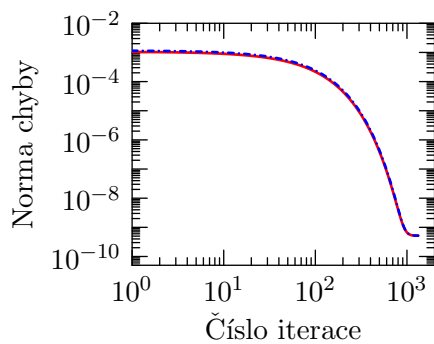
(c) Velikost chyby, 512 uzlů, s úpravou.



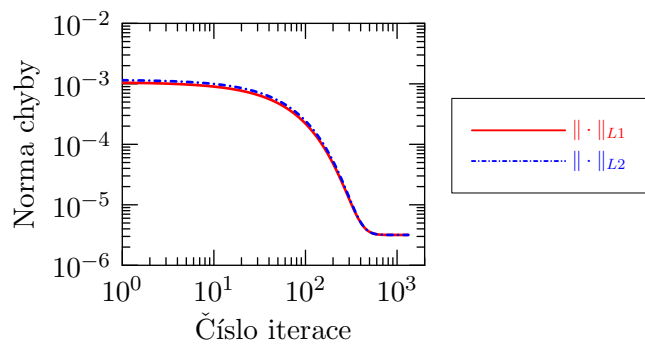
(d) Velikost chyby, 512 uzlů, bez úpravy.



(e) Velikost chyby, 1024 uzlů, s úpravou.



(f) Velikost chyby, 1024 uzlů, bez úpravy.



Obrázek 4.8: Porovnání vývoje absolutních chyb numerického řešení před a po úpravě počítané v  $L_1$  a  $L_2$  normě pro proudění s  $Re = 10$ ,  $\nu = 0,990454 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ .

Mřížka	Přesnost	$\ u_{num} - u_{an}\ _{L_1}$	$\ u_{num} - u_{an}\ _{L_2}$	MLUPS
$16 \times 32$	jednoduchá	$1,19379 \cdot 10^{-4}$	$1,27622 \cdot 10^{-4}$	114,641
	dvojitá	$1,18679 \cdot 10^{-4}$	$1,26874 \cdot 10^{-4}$	466,283
$32 \times 64$	jednoduchá	$1,71435 \cdot 10^{-5}$	$1,74295 \cdot 10^{-5}$	1223,81
	dvojitá	$1,58946 \cdot 10^{-5}$	$1,64159 \cdot 10^{-5}$	583,822
$64 \times 128$	jednoduchá	$5,95703 \cdot 10^{-6}$	$6,27988 \cdot 10^{-6}$	1384,190
	dvojitá	$2,05306 \cdot 10^{-6}$	$2,08591 \cdot 10^{-6}$	1485,154
$128 \times 256$	jednoduchá	$1,30795 \cdot 10^{-5}$	$1,46104 \cdot 10^{-5}$	1393,620
	dvojitá	$2,60776 \cdot 10^{-7}$	$2,62838 \cdot 10^{-7}$	431,395
$256 \times 512$	jednoduchá	$3,66909 \cdot 10^{-5}$	$4,01636 \cdot 10^{-5}$	272,262
	dvojitá	$3,28595 \cdot 10^{-8}$	$3,29886 \cdot 10^{-8}$	2112,078
$512 \times 1024$	jednoduchá	————	————	————
	dvojitá	$4,12580 \cdot 10^{-9}$	$4,13389 \cdot 10^{-9}$	69,845
$1024 \times 2048$	jednoduchá	————	————	————
	dvojitá	$5,18715 \cdot 10^{-10}$	$5,19223 \cdot 10^{-10}$	391,635
$2048 \times 4096$	jednoduchá	————	————	————
	dvojitá	$6,91592 \cdot 10^{-11}$	$6,92060 \cdot 10^{-11}$	21,783

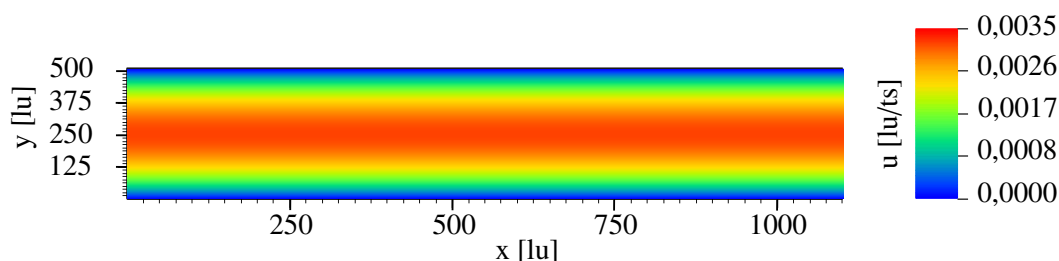
Tabulka 4.3: Srovnání jednoduché a dvojitě přesnosti na GPU\_2.

Mřížka	Přesnost	$\ u_{num} - u_{an}\ _{L_1}$	$\ u_{num} - u_{an}\ _{L_2}$	MLUPS
16 × 32	jednoduchá	$1,27346 \cdot 10^{-4}$	$1,31816 \cdot 10^{-4}$	45,824
	dvojitá	$1,26591 \cdot 10^{-4}$	$1,31036 \cdot 10^{-4}$	45,824
32 × 64	jednoduchá	$1,71436 \cdot 10^{-5}$	$1,74296 \cdot 10^{-5}$	345,512
	dvojitá	$1,64073 \cdot 10^{-5}$	$1,66785 \cdot 10^{-5}$	181,346
64 × 128	jednoduchá	$6,04731 \cdot 10^{-6}$	$6,32596 \cdot 10^{-6}$	1229,467
	dvojitá	$2,08564 \cdot 10^{-6}$	$2,10239 \cdot 10^{-6}$	425,663
128 × 256	jednoduchá	$1,31811 \cdot 10^{-5}$	$1,46658 \cdot 10^{-5}$	1821,097
	dvojitá	$2,62824 \cdot 10^{-7}$	$2,63865 \cdot 10^{-7}$	696,186
256 × 512	jednoduchá	$3,68346 \cdot 10^{-5}$	$4,02420 \cdot 10^{-5}$	2004,156
	dvojitá	$3,29840 \cdot 10^{-8}$	$3,30490 \cdot 10^{-8}$	627,902
512 × 1024	jednoduchá	————	————	————
	dvojitá	$4,13141 \cdot 10^{-9}$	$4,13546 \cdot 10^{-9}$	118,639
1024 × 2048	jednoduchá	————	————	————
	dvojitá	$5,18609 \cdot 10^{-10}$	$5,18863 \cdot 10^{-10}$	787,88
2048 × 4096	jednoduchá	————	————	————
	dvojitá	$6,91593 \cdot 10^{-11}$	$6,92061 \cdot 10^{-11}$	863,56

Tabulka 4.4: Srovnání jednoduché a dvojitě přesnosti na GPU\_4.

V tabulce 4.3 a 4.4 jsou uvedeny absolutní chyby numerického řešení získané porovnáním hodnot v řezu kolmém na osu  $x$  užitím vztahu 4.17. Jednoduchá přesnost byla použita k napočítání řešení pouze do rozměru mřížky  $256 \times 512$ , protože při větší mřížce měly chyby způsobené aritmetikou již značný vliv na přesnost daného řešení, viz obrázek 4.10. Hodnoty uvedené v tabulce 4.3 a 4.4 dále využijeme k výpočtu experimentálního řádu konvergence zvoleného typu Lattice–Boltzmannovy metody.

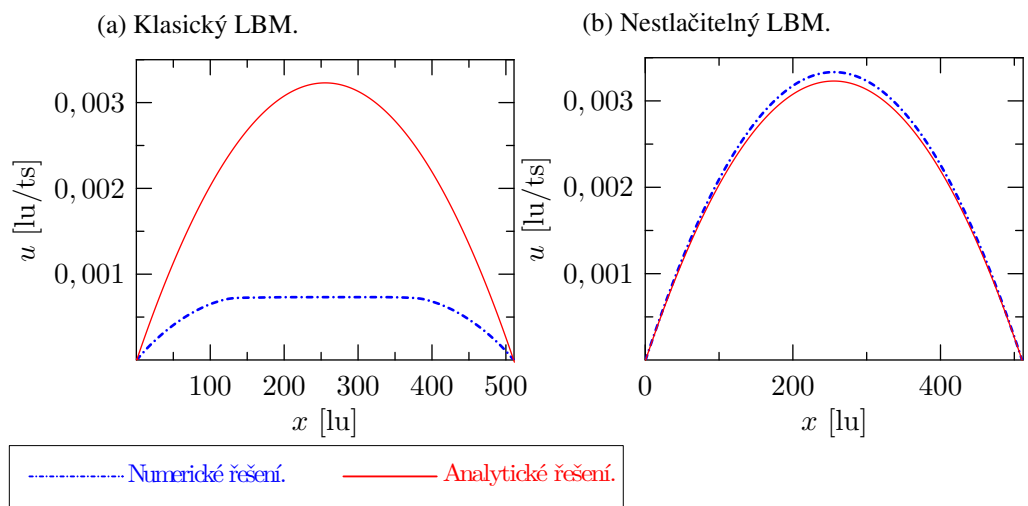
V tabulce 4.5 jsou uvedené experimentální řády konvergence napočítané z dat uvedených v tabulce 4.3 a 4.4. Při použití nestlačitelné LBM víme z podkapitoly 2.1.3, že chyba, které se dopouštíme při simulaci nestlačitelné tekutiny je úměrná třetí mocnině Machova čísla  $Ma$ . Jelikož jsme vždy hodnoty mřížkové rychlosti při přechodu z hrubší mřížky na jemnější zmenšili, lze očekávat, že experimentální řád konvergence bude třetího řádu, což odpovídá naměřeným datům, viz tabulka 4.5. Předchozí srovnání numerického řešení získaného Lattice–Boltzmannovou metodou a analytického řešení pochází z řezu dvourozměrného řešení kolmého na osu  $x$ . Pro názornost uveďme obrázek 4.9 znázorňující rozložení velikosti rychlosti tekutiny v oblasti diskretizované mřížkou o velikosti  $512 \times 1024$ .



Obrázek 4.9: Rozložení velikosti rychlosti tekutiny o viskozitě  $\nu = 0,990454 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  s Reynoldsovým číslem  $Re = 10$  v oblasti  $(0, 2\ell_0) \times (0, \ell_0)$ ,  $\ell_0 = 2 \text{ m}$  diskretizované mřížkou o rozměrech  $512 \times 1024$ .

V předchozím nastavení parametrů jsme uvažovali případ, kdy maximální rychlost nabývala hodnoty  $u_{max} \doteq 5 \text{ m s}^{-1}$ . Podívejme se na obdobná nastavení, ale berme hodnoty maximální makroskopické rychlosti postupně rovny  $u_{max} = 0,5 \text{ m s}^{-1}$ ,  $u_{max} = 50 \text{ m s}^{-1}$ ,  $u_{max} = 500 \text{ m s}^{-1}$ . Při této volbě maximálních hodnot makroskopických rychlostí dostaneme následující hodnoty chyb a k nim příslušející řády konvergence.





Obrázek 4.10: Srovnání numerického a analytického řešení při použití jednoduché přesnosti pro mřížku  $512 \times 1024$ .

Krok	GPU_2				GPU_4			
	Jednoduchá přesnost		Dvojitá přesnost		Jednoduchá přesnost		Dvojitá přesnost	
	eoc <sub>1</sub>	eoc <sub>2</sub>	eoc <sub>1</sub>	eoc <sub>2</sub>	eoc <sub>1</sub>	eoc <sub>2</sub>	eoc <sub>1</sub>	eoc <sub>2</sub>
16 → 32	2,80	2,87	2,90	2,95	2,89	2,92	2,95	2,97
32 → 64	1,52	1,47	2,95	2,98	1,50	1,46	2,98	2,99
64 → 128	-1,13	-1,22	2,98	2,99	-1,12	0,30	2,99	2,99
128 → 256	-1,49	-1,46	2,99	2,99	-1,48	-1,46	2,99	2,99
256 → 512	—	—	2,99	3,00	—	—	3,00	3,00
512 → 1024	—	—	2,99	2,99	—	—	2,99	2,99
1024 → 2048	—	—	2,91	2,91	—	—	2,90	2,90

Tabulka 4.5: Srovnání chyb numerického řešení před a po úpravě analytického řešení. Červeně označené hodnoty eoc odpovídají výsledkům simulací s nedostatečnou přesností.

Mřížka	$u_{max} = 0,5 \text{ m s}^{-1}$	$u_{max} = 50 \text{ m s}^{-1}$	$u_{max} = 500 \text{ m s}^{-1}$
	$\ u_{num} - u_{an}\ _{L_1}$	$\ u_{num} - u_{an}\ _{L_1}$	$\ u_{num} - u_{an}\ _{L_1}$
16 × 32	$1,53672 \cdot 10^{-5}$	$1,53635 \cdot 10^{-3}$	$1,53635 \cdot 10^{-2}$
32 × 64	$1,80469 \cdot 10^{-6}$	$1,80469 \cdot 10^{-4}$	$1,80469 \cdot 10^{-3}$
64 × 128	$2,18747 \cdot 10^{-7}$	$2,18654 \cdot 10^{-5}$	$2,18654 \cdot 10^{-4}$
128 × 256	$2,69081 \cdot 10^{-8}$	$2,69081 \cdot 10^{-6}$	$2,69081 \cdot 10^{-5}$
256 × 512	$3,33740 \cdot 10^{-9}$	$3,33734 \cdot 10^{-7}$	$3,33734 \cdot 10^{-6}$
512 × 1024	$4,15647 \cdot 10^{-10}$	$4,15866 \cdot 10^{-8}$	$4,15549 \cdot 10^{-7}$

Tabulka 4.6: Srovnání chyb rychlosti v  $L_1$  normě.

	$u_{max} = 0,5 \text{ m s}^{-1}$	$u_{max} = 50 \text{ m s}^{-1}$	$u_{max} = 500 \text{ m s}^{-1}$
Krok	eoc <sub>1</sub>	eoc <sub>1</sub>	eoc <sub>1</sub>
16 → 32	6,13	3,09	3,09
32 → 64	2,98	3,05	3,06
64 → 128	2,99	3,02	3,02
128 → 256	2,99	3,01	3,01
256 → 512	3,00	3,01	3,01

Tabulka 4.7: Experimentální řád konvergence pro různé rychlosti počítaný v  $L_1$  normě.

	$u_{max} = 0,5 \text{ m s}^{-1}$	$u_{max} = 50 \text{ m s}^{-1}$	$u_{max} = 500 \text{ m s}^{-1}$
Mřížka	$\ u_{num} - u_{an}\ _{L_2}$	$\ u_{num} - u_{an}\ _{L_2}$	$\ u_{num} - u_{an}\ _{L_2}$
16 × 32	$1,59027 \cdot 10^{-5}$	$1,59027 \cdot 10^{-3}$	$1,59027 \cdot 10^{-2}$
32 × 64	$1,83452 \cdot 10^{-6}$	$1,83452 \cdot 10^{-4}$	$1,83452 \cdot 10^{-3}$
64 × 128	$2,20555 \cdot 10^{-7}$	$2,20410 \cdot 10^{-5}$	$2,20410 \cdot 10^{-4}$
128 × 256	$2,70147 \cdot 10^{-8}$	$2,70147 \cdot 10^{-6}$	$2,70147 \cdot 10^{-5}$
256 × 512	$3,34397 \cdot 10^{-9}$	$3,34390 \cdot 10^{-7}$	$3,34391 \cdot 10^{-6}$
512 × 1024	$4,16055 \cdot 10^{-10}$	$4,16274 \cdot 10^{-8}$	$4,15956 \cdot 10^{-7}$

Tabulka 4.8: Srovnání chyb rychlosti v  $L_2$  normě.

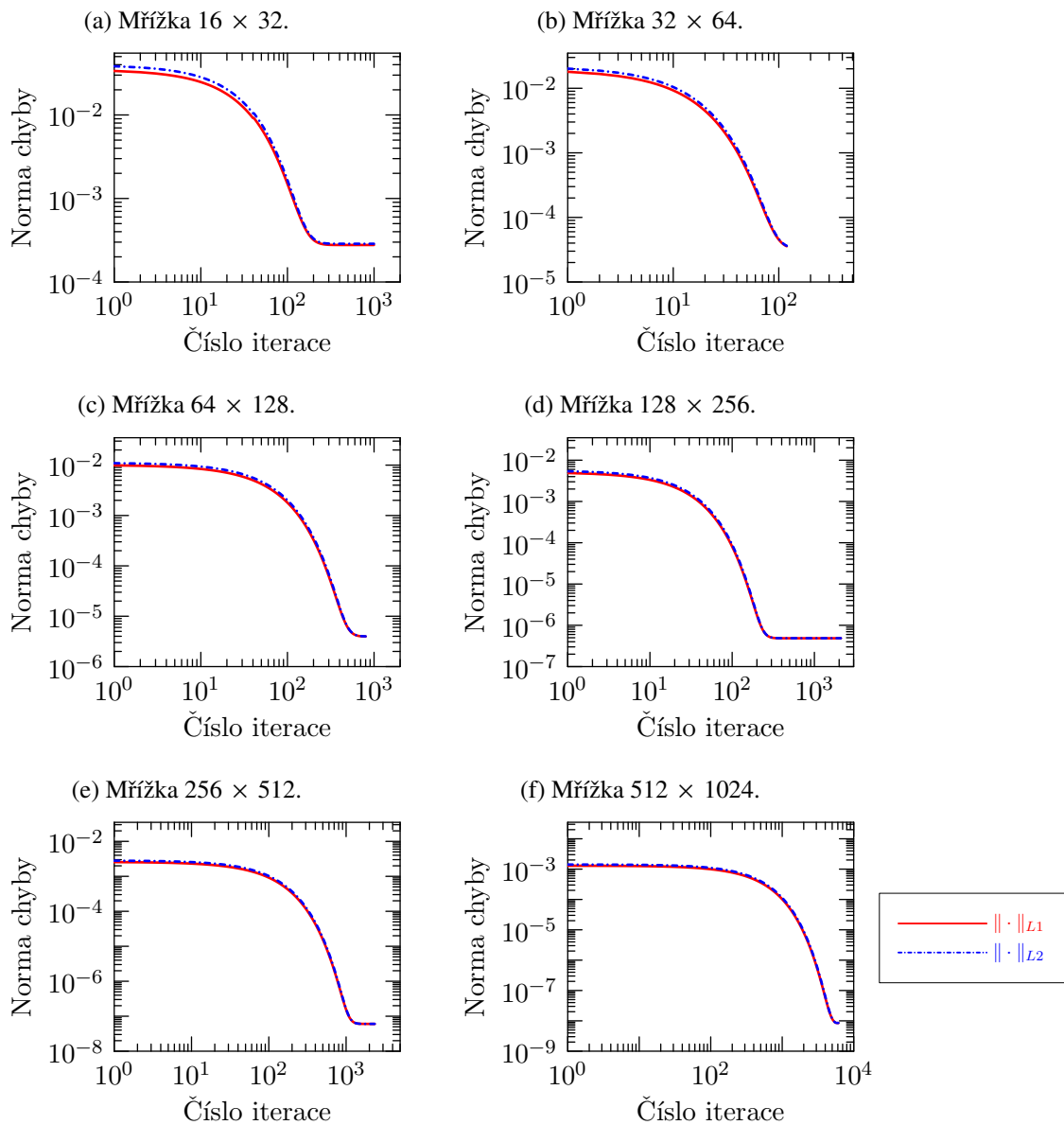
	$u_{max} = 0,5 \text{ m s}^{-1}$	$u_{max} = 50 \text{ m s}^{-1}$	$u_{max} = 500 \text{ m s}^{-1}$
Krok	eoc <sub>2</sub>	eoc <sub>2</sub>	eoc <sub>2</sub>
16 → 32	2,97	3,12	3,12
32 → 64	2,99	3,06	3,06
64 → 128	2,99	3,03	3,03
128 → 256	3,00	3,01	3,01
256 → 512	3,00	3,01	3,01

Tabulka 4.9: Experimentální řád konvergence pro různé rychlosti počítaný v  $L_2$  normě.

V tabulce 4.7 a 4.9 jsou uvedené experimentální řády konvergence z dat uvedených v tabulce 4.6 a 4.8. Hodnoty experimentálního řádu konvergence jsou opět přibližně 3.

#### 4.1.3 Numerická analýza konvergence Lattice–Boltzmannovy metody pro nižší viskozitu

Výsledky v předchozí sekci byly získané pro tekutinu o viskozitě  $\nu = 0,990454 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ , což je o šest řádů vyšší hodnota než je například viskozita vody. Vzhledem k budoucím aplikacím bychom však potřebovali simulovat tekutinu s hodnotami viskozity v okolí  $10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ . Položme dále  $\ell_0 = 1 \text{ cm}$ ,  $Re = 1500$ ,  $\nu = 2,7 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ . Ze vztahu (2.36) pro relaxační parametr  $\tau$  je zřejmé, že se zvětšujícím se Reynoldsovým číslem se bude hodnota relaxačního parametru  $\tau$  blížit k  $\frac{1}{2}$ . To bude mít za následek, že systém bude pomaleji spět do stavu rovnováhy, a tudíž budeme potřebovat větší počet iterací k dosažení ustáleného proudění, viz obrázek 4.11.



Obrázek 4.11: Vývoj absolutních chyb numerického řešení počítané v  $L_1$  a  $L_2$  normě pro případ proudění s  $Re = 1500$ ,  $\nu = 2,7 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ .

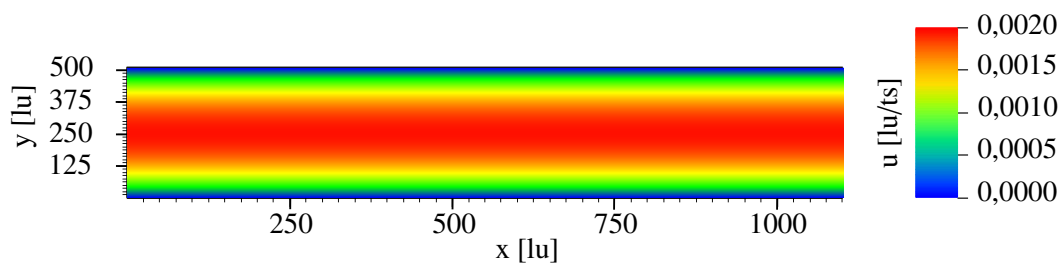
Mřížka	$\ u_{num} - u_{an}\ _{L_1}$	$\ u_{num} - u_{an}\ _{L_2}$
$16 \times 32$	$2,77275 \cdot 10^{-4}$	$2,87007 \cdot 10^{-4}$
$32 \times 64$	$3,57423 \cdot 10^{-5}$	$3,63664 \cdot 10^{-5}$
$64 \times 128$	$3,95757 \cdot 10^{-6}$	$3,98936 \cdot 10^{-6}$
$128 \times 256$	$4,85633 \cdot 10^{-7}$	$4,87556 \cdot 10^{-7}$
$256 \times 512$	$6,02779 \cdot 10^{-8}$	$6,03964 \cdot 10^{-8}$
$512 \times 1024$	$8,49769 \cdot 10^{-9}$	$8,51787 \cdot 10^{-9}$

Tabulka 4.10: Absolutní chyba numerického řešení v  $L_1$  a  $L_2$  normě po ustálení řešení.

krok	eoc <sub>1</sub>	eoc <sub>2</sub>
16 → 32	2,96	2,98
32 → 64	3,17	3,19
64 → 128	3,03	3,03
128 → 256	3,01	3,01
256 → 512	2,83	2,82

Tabulka 4.11: Experimentální řád konvergence pro hodnotu viskozity rovnu  $\nu = 2,7 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ .

Z hodnot chyb po ustálení proudění, viz obrázek 4.11, uvedených v tabulce 4.10 určíme opět experimentální řád konvergence. Z tabulky 4.11 je vidět, že i při nižších hodnotách viskozity je zvolený model Lattice–Boltzmannovy metody třetího řádu přesnosti v prostoru. Protože předchází výsledky Lattice–Boltzmannovy metody pro tekutinu o viskozitě  $\nu = 2,7 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  byly opět porovnány s analytickým řešením v řezu dvourozměrného řešení, uveďme obrázek 4.12 znázorňující rozložení velikosti rychlosti tekutiny v oblasti diskretizované mřížkou o velikosti  $512 \times 1024$ .



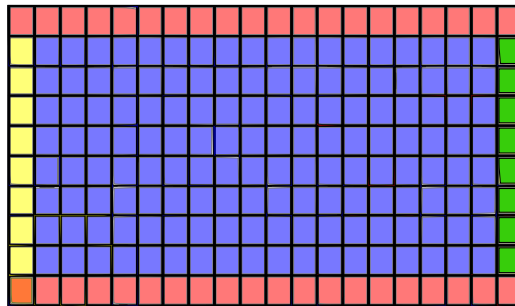
Obrázek 4.12: Rozložení velikosti rychlosti tekutiny o viskozitě  $\nu = 2,7 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  s Reynoldsovým číslem  $Re = 1500$  v oblasti  $(0, 2\ell_0) \times (0, \ell_0)$ ,  $\ell_0 = 1 \text{ cm}$  diskretizované mřížkou o rozměrech  $512 \times 1024$ .

Závěrem lze v této části říci, že při daných volbách parametrů se Lattice–Boltzmannova metoda chová jako metoda třetího řádu, čímž jsme experimentálně odvodili výsledek získaný v kapitole 2.1.3.

## 4.2 Laminární a nelaminární proudění okolo pevné překážky

V této části se budeme zabývat aplikací Lattice–Boltzmannovy metody na proudění tekutiny okolo pevné překážky umístěné mezi dvěma rovnoběžnými rovinami. Inspirací pro tuto úlohu nám bude článek [21], v němž autoři M. Schäfer a S. Turek shrnuli případy laminárního a nelaminárního (turbulentního) proudění okolo čtvercové a kruhové překážky. Mimo proudění okolo čtvercové překážky, sekce 4.2.1, a kruhové překážky, sekce 4.2.2, budeme ještě zkoumat vývoj rychlostního profilu tekutiny při proudění okolo úsečky, sekce 4.2.3. Stejně jako při předchozích případech budeme používat k numerické simulaci nestlačitelnou variantu Lattice–Boltzmannovy metody odvozené v kapitole 2.1.3. Řešení získané Lattice–Boltzmannovou metodou dále porovnáme s řešeními založených na metodě konečných objemů, které byly získány pomocí open source programu OpenFoam. Tyto výsledky zpracoval pomocí OpenFoam a povolil jejich použití v rámci této práce Ing. Ondřej Polívka. Časový krok pro řešení metody konečných objemů byl pro srovnání zvolen  $10^{-5}$ s.

Oproti předchozímu textu použijeme ale obecně jiný tvar oblasti pro Lattice–Boltzmannovu metodu, viz obrázek 4.13.

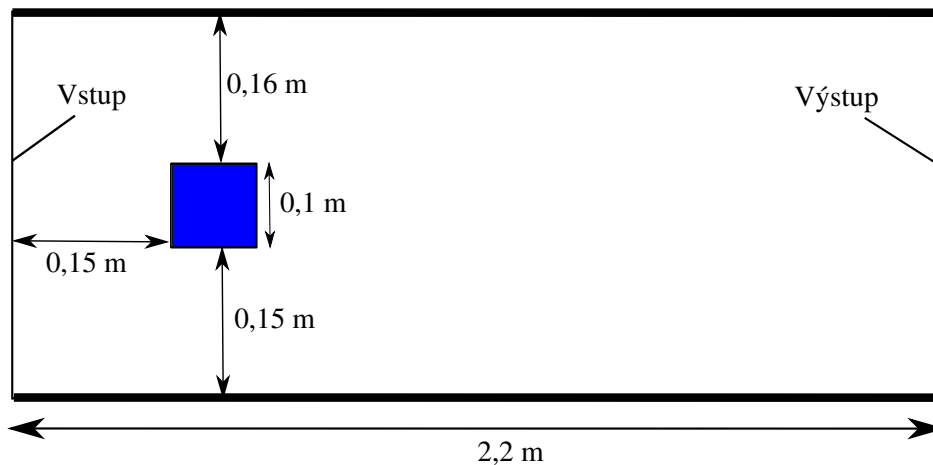


Obrázek 4.13: Způsob nastavení diskretizace oblasti pro Lattice–Boltzmannovu metodu. Modrá pole odpovídají části s tekutinou, červená barva označuje část se stěnou, žlutá odpovídá vstupní okrajové podmínce, zelená barva odpovídá okrajové podmínce na výstupu.

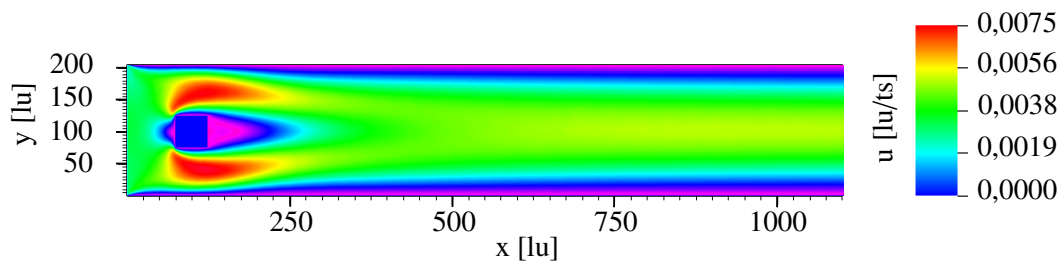
Změna se konkrétně týká typu okrajových podmínek na vstupu a výstupu. Tok tekutiny nebudeme dále předepisovat pomocí zrychlení, ale pomocí hodnoty makroskopické rychlosti na vstupu a výstupu. Při laminárním i nelaminárním proudění použijeme pro nastavení Lattice–Boltzmannovy metody hodnotu viskozity v mřížkových jednotkách rovnu  $\nu_{LB} = 0,01$  a pro diskretizaci charakteristické délky  $\ell_0$  použijeme 205 uzlových bodů.

## 4.2.1 Proudění okolo čtvercové překážky

Jako první se zabýváme případem proudění okolo čtvercové překážky. Tvar oblasti, viz obrázek 4.14 pro výpočet je převzat z článku [21]. Pro tuto úlohu použijeme následující nastavení parametrů.  $\nu = 0,01 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $Re = 82$ ,  $\ell_0 = 0,41 \text{ m}$  pro laminární proudění a  $\nu = 0,01 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $Re = 410$ ,  $\ell_0 = 0,41 \text{ m}$  pro nelaminární proudění.



Obrázek 4.14: Tvar oblasti pro čtvercovou překážku.

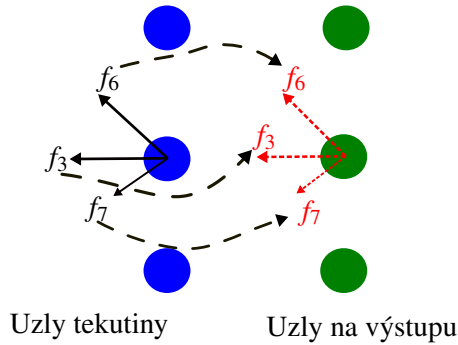


Obrázek 4.15: Prostorové rozložení rychlosti při laminárním proudění okolo čtvercové překážky v čase 1,6 s.

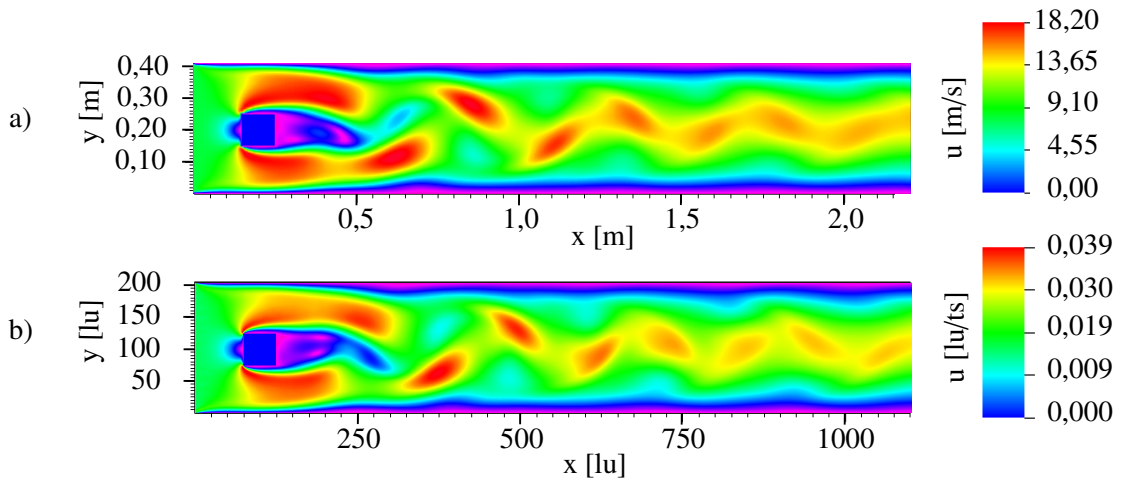
Případ ustáleného laminárního proudění nebudeme srovnávat s řešením založeným na metodě konečných objemů, protože řešení pro ustálené laminární proudění jsme již otestovali v předchozí části 4.1. Při srovnání Lattice-Boltzmannovy metody a metody konečných objemů pro nelaminární proudění je důležitý typ zvolených okrajových podmínek na vstupu a výstupu. Na vstupu je předepsána pevná hodnota průměrné rychlosti tekutiny určená ze zadaných veličin. Dále otestujeme různé typy okrajových podmínek na výstupu.

Jedna z možných podmínek, kterou lze na výstupu aplikovat je založená na předepsání neznámých hodnot distribuční funkce po provedení šíření pomocí hodnot v předcházejících uzlech, viz obrázek 4.16. Při použití této okrajové podmínky na výstupu dostaneme řešení uvedené na obrázku 4.17.





Obrázek 4.16: Schéma okrajové podmínky na výstupu. Neznámé distribuční funkce jsou získány z distribučních funkcí předešlých uzlů.

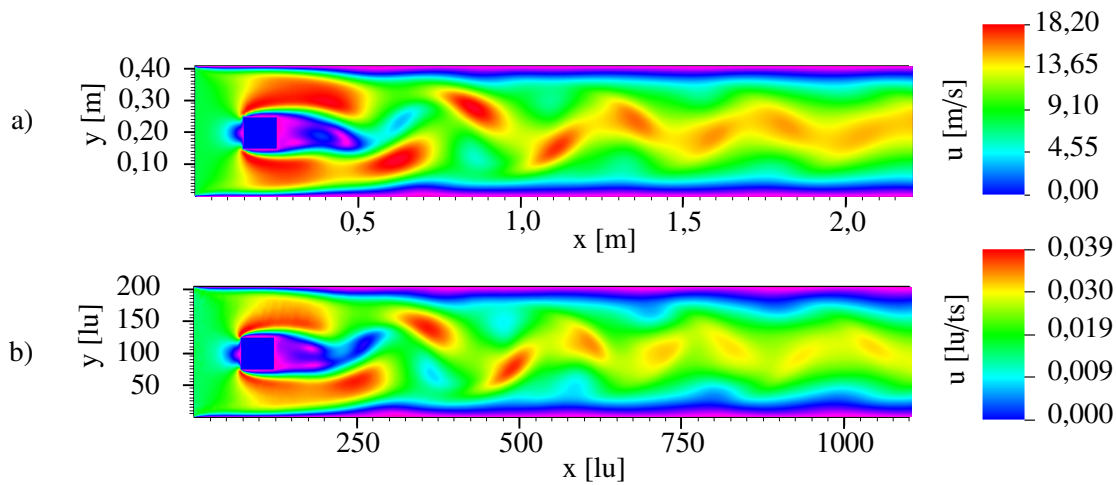


Obrázek 4.17: Srovnání prostorového rozložení velikosti rychlosti pro a) metodu konečných prvků a b) Lattice–Boltzmannovu metodu v čase 10 s. Rozměry obrázků a barevná škála jsou voleny tak, že odpovídají fyzikální interpretaci LBM jednotek.

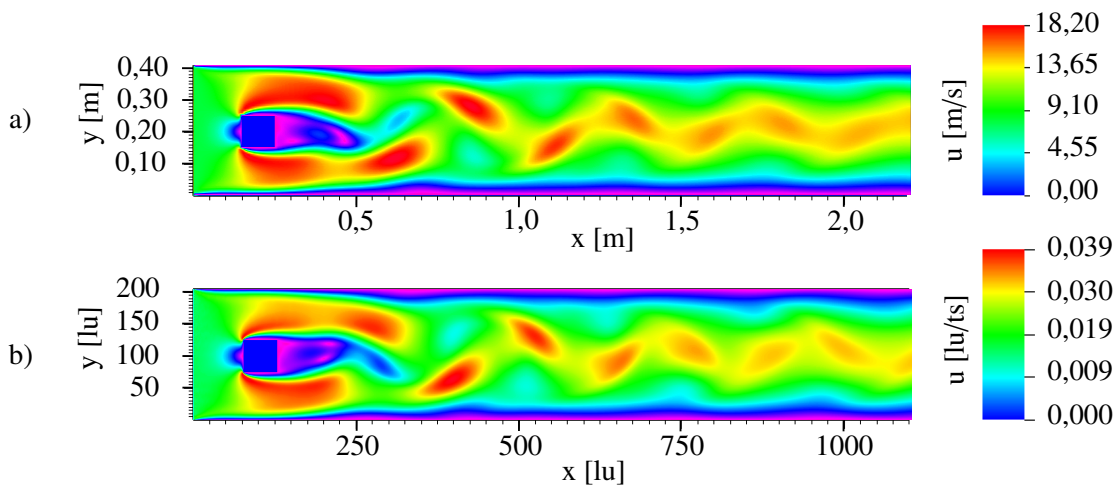
Jiný možný způsob jak získat neznámé distribuční funkce na výstupu je přiřadit jim hodnoty rovnovážné distribuční funkce v odpovídajících směrech získaných z hodnot hustoty v předešlých uzlech a absolutní hodnoty rychlosti v předešlých uzlech, tj.

$$f_i(\vec{x}, t) = f_i^{(eq)}(\rho(\vec{x} + \vec{\xi}_3 \Delta t), \vec{u}(\vec{x} + \vec{\xi}_3 \Delta t)), \quad (4.18)$$

kde  $\vec{x}$  je bod na výstupu,  $\tilde{u}_\alpha = |u_\alpha|$  pro  $\alpha = 1, 2$  a  $i \in \{3, 6, 7\}$ . Při použití této okrajové podmínky dostaneme výsledky uvedené v obrázku 4.18, které opět srovnáme s řešením získaným metodou konečných objemů.



Obrázek 4.18: Srovnání prostorového rozložení velikosti rychlosti pro a) metodu konečných prvků a b) Lattice–Boltzmannovu metodu v čase 10 s s rovnovážnou okrajovou podmínkou na výstupu. Rozměry obrázků a barevná škála jsou voleny tak, že odpovídají fyzikální interpretaci LBM jednotek.



Obrázek 4.19: Srovnání prostorového rozložení velikosti rychlosti pro a) metodu konečných prvků a b) Lattice–Boltzmannovu metodu v čase 10 s s rovnovážnou okrajovou podmínkou na výstupu a počáteční podmínkou ustáleného proudění. Rozměry obrázků a barevná škála jsou voleny tak, že odpovídají fyzikální interpretaci LBM jednotek.

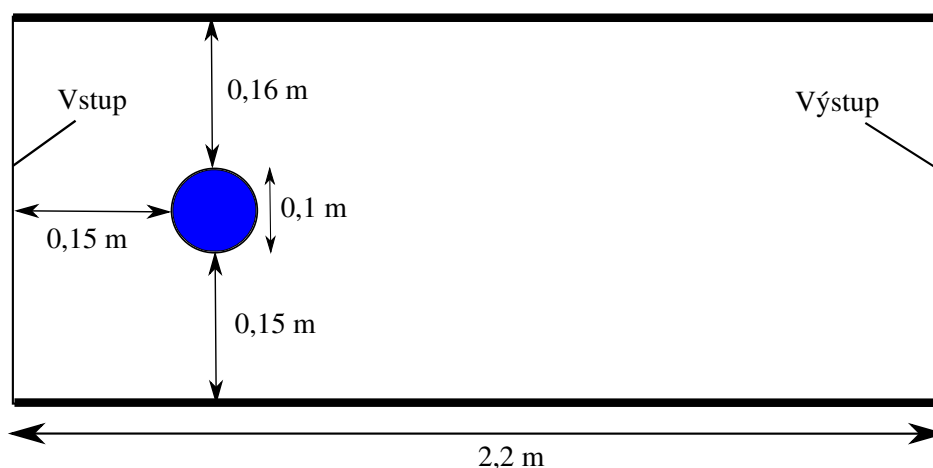
Z předešlých srovnání 4.17, 4.18 je patrné, že řešení s oběma typy okrajových podmínek poskytují přibližně stejný vývoj rychlosti, ale obě dvě řešení jsou v čase „posunutá“. Důvody tohoto jevu jsou jak okrajové podmínky, tak počáteční nastavení hodnot distribučních funkcí.

Další, co lze v počátečním nastavení Lattice–Boltzmannovy metody měnit jsou tedy samotné počáteční hodnoty distribučních funkcí. Přiřadíme-li distribučním funkcím v čase 0 hodnoty distribučních funkcí v příslušejících uzlech odpovídající ustálenému proudění bez přítomnosti překážky, získáme řešení na obrázku 4.19. Poznamenejme, že na obrázcích 4.17, 4.18 a 4.19 rychlost  $18,20 \text{ m s}^{-1}$  odpovídá rychlosti v mřížkových jednotkách  $0,039 \text{ lu ts}^{-1}$ .

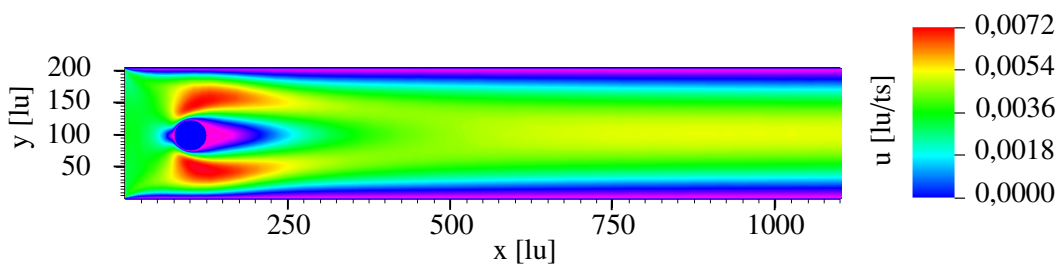
Ze srovnání na obrázku 4.19 lze nahlédnout, že při použití předchozí počáteční podmínky je řešení Lattice–Boltzmannovy metody stále odlišné od řešení získaném metodou konečných objemů.

#### 4.2.2 Proudění okolo kruhové překážky

Pro tuto simulaci použijme stejné nastavení parametrů pro tekutinu jako při simulaci čtvercové překážky. Zkoumaná oblast je zobrazena na obrázku 4.20. Pro tuto úlohu použijeme následující nastavení parametrů.  $\nu = 0,01 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $Re = 82$ ,  $\ell_0 = 0,41 \text{ m}$  pro laminární proudění a  $\nu = 0,01 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $Re = 410$ ,  $\ell_0 = 0,41 \text{ m}$  pro nelaminární proudění.

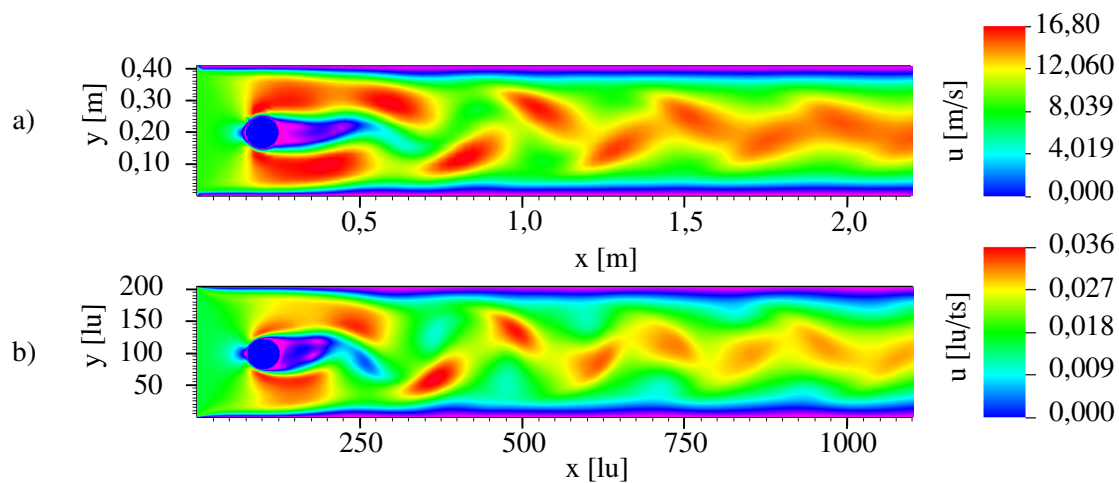


Obrázek 4.20: Tvar oblasti pro kruhovou překážku.

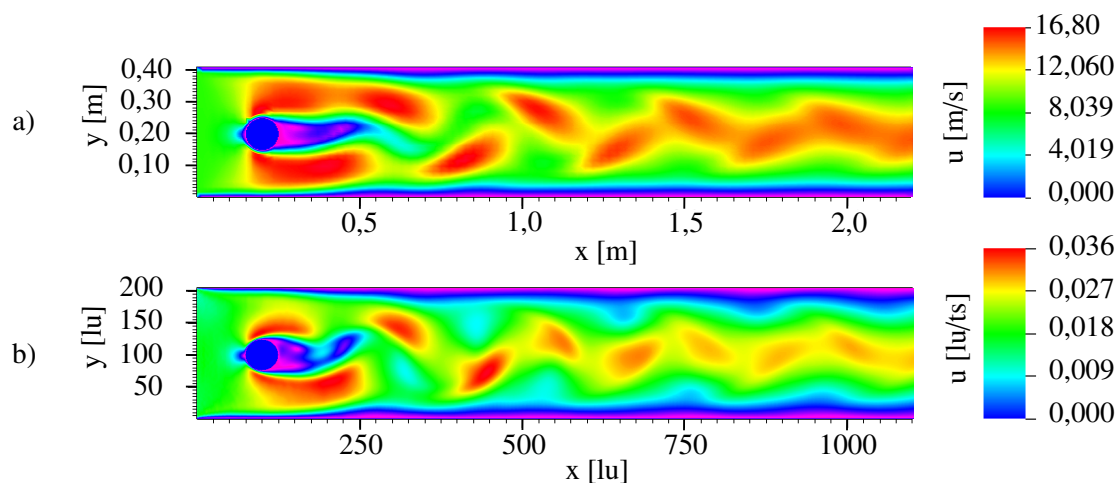


Obrázek 4.21: Prostorové rozložení velikosti rychlosti při laminárním proudění okolo kruhové překážky v čase 1,6 s.

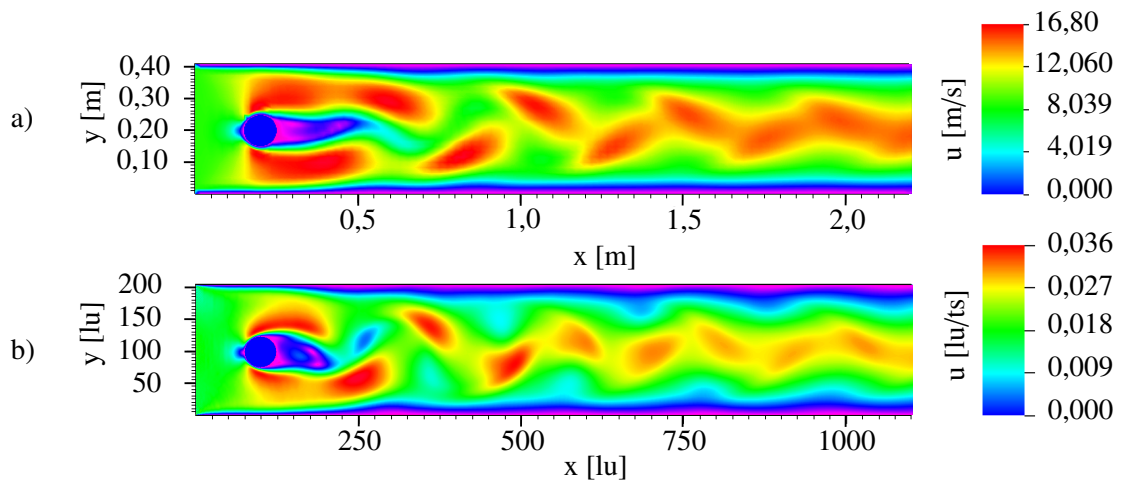
Laminární případ proudění opět nebudeme srovnávat s metodou konečných objemů, uvedeme pouze výsledky obtékání překážky. V případě nelaminárního proudění můžeme opět srovnat výsledky založené na okrajových podmínkách diskutovaných dříve v části 4.2.1 s řešením metody konečných objemů. Opět poznamenejme, že na obrázcích 4.22, 4.23 a 4.24 rychlost  $16,80 \text{ m s}^{-1}$  odpovídá rychlosti v mřížkových jednotkách  $0,036 \text{ lu ts}^{-1}$ .



Obrázek 4.22: Srovnání prostorového rozložení velikosti rychlosti pro a) metodu konečných prvků a b) Lattice–Boltzmannovu metodu v čase 60 s klasickou okrajovou podmínkou na výstupu. Rozměry obrázků a barevná škála jsou voleny tak, že odpovídají fyzikální interpretaci LBM jednotek.



Obrázek 4.23: Srovnání prostorového rozložení velikosti rychlosti pro a) metodu konečných prvků a b) Lattice–Boltzmannovu metodu v čase 60 s rovnovážnou okrajovou podmínkou na výstupu. Rozměry obrázků a barevná škála jsou voleny tak, že odpovídají fyzikální interpretaci LBM jednotek.

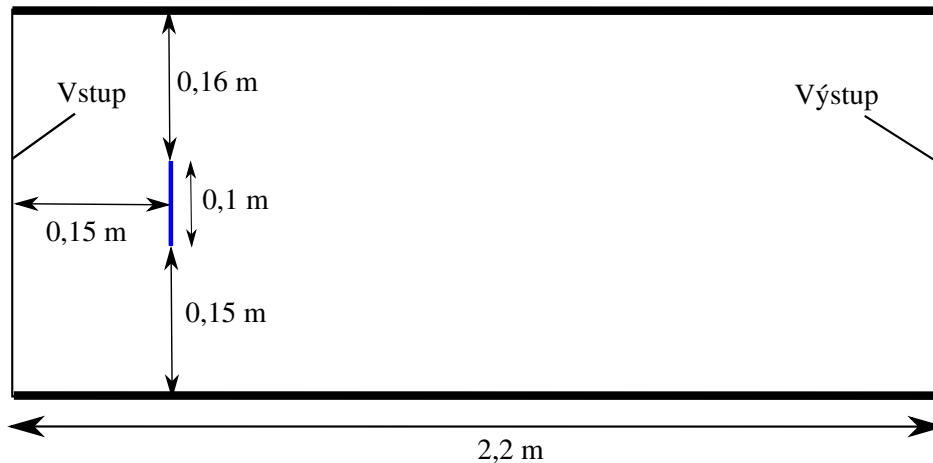


Obrázek 4.24: Srovnání prostorového rozložení velikosti rychlosti pro a) metodu konečných prvků a b) Lattice–Boltzmannovu metodu v čase 60 s rovnovážnou okrajovou podmínkou na výstupu a počáteční podmínkou ustáleného proudění. Rozměry obrázků a barevná škála jsou voleny tak, že odpovídají fyzikální interpretaci LBM jednotek.

Z výsledků je patrné, že řešení založené na Lattice–Boltzmannově metodě a metodě konečných objemů poskytují srovnatelná řešení co se týče výsledného rychlostního profilu proudění. Z toho lze usoudit, že Lattice–Boltzmannova metoda poskytuje uspokojivé výsledky v problematice nelaminárního proudění.

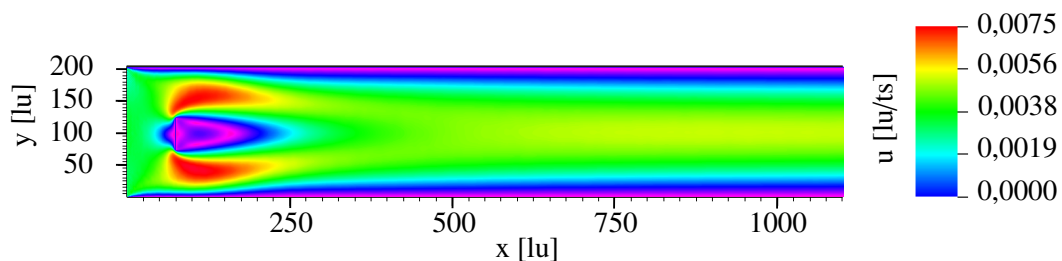
### 4.2.3 Proudění okolo úsečky

Pro simulaci proudění okolo úsečky použijeme opět stejné nastavení parametrů pro tekutinu jako v předešlých příkladech. Zkoumaná oblast je zobrazena na obrázku 4.25. Pro tuto úlohu použijeme následující nastavení parametrů.  $\nu = 0,01 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $Re = 82$ ,  $\ell_0 = 0,41 \text{ m}$  pro laminární proudění a  $\nu = 0,01 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $Re = 410$ ,  $\ell_0 = 0,41 \text{ m}$  pro nelaminární proudění.

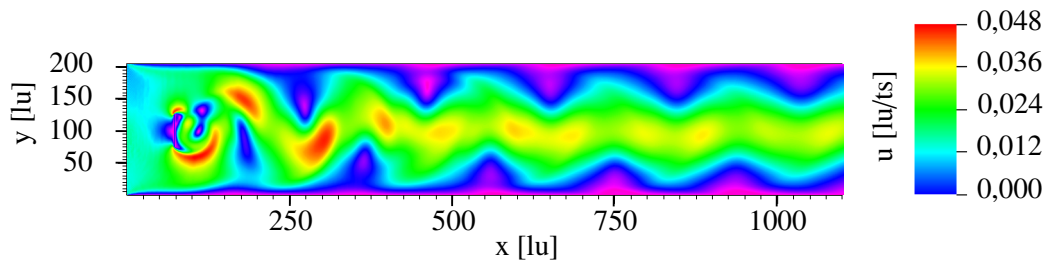


Obrázek 4.25: Tvar oblasti pro překážku ve tvaru úsečky.

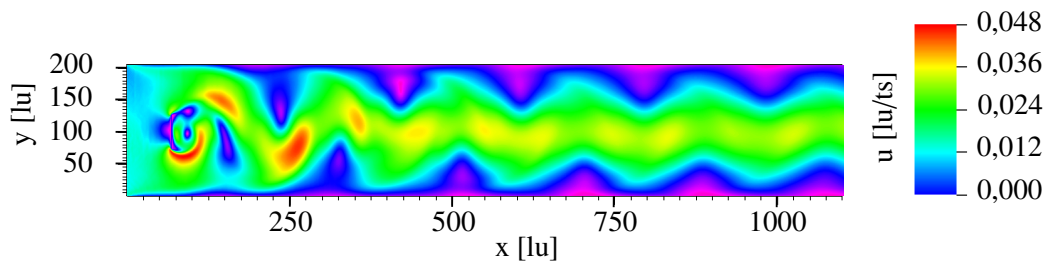
Zde uvedeme pouze výsledky pro laminární a nelaminární (turbulentní) proudění získané Lattice-Boltzmannovou metodou v různých časech.



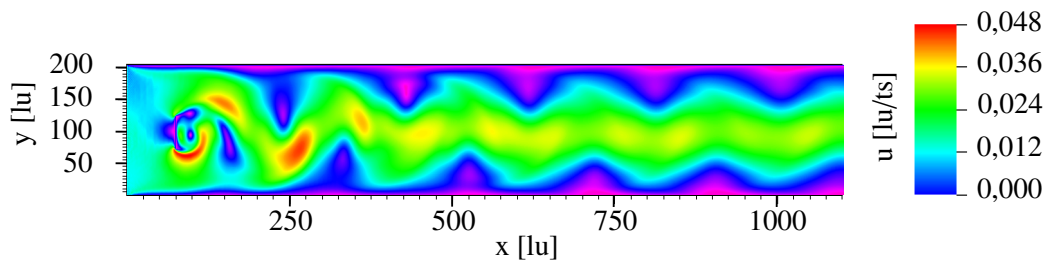
Obrázek 4.26: Prostorové rozložení velikosti rychlosti při laminárním proudění okolo úsečky v čase 1,3 s.



Obrázek 4.27: Prostorové rozložení velikosti rychlosti při nelaminárním proudění okolo úsečky v čase 40 s.



Obrázek 4.28: Prostorové rozložení velikosti rychlosti při nelaminárním proudění okolo úsečky v čase 50 s.



Obrázek 4.29: Prostorové rozložení velikosti rychlosti při nelaminárním proudění okolo úsečky v čase 60 s.





# Závěr

Cílem této práce bylo získat základní znalosti o Lattice–Boltzmannově metodě a problematice s ní spojené.

Čtenářovi byl v předchozím textu nastíněn jeden ze způsobů odvození Lattice–Boltzmannovy metody z kinetické teorie prostřednictvím Boltzmannovy transportní rovnice a následné projekce distribuční funkce do báze Hermiteových polynomů. Druhá část této práce byla věnována aplikaci nabytých znalostí na problematiku proudění Newtonovské nestlačitelné tekutiny v izotermálním systému ve dvourozměrném prostoru. Řešení bylo následně porovnáno v případě Hagenovo–Poiseuilleho proudění se známým analytickým řešením, z čehož byl posléze určen experimentální řád konvergence Lattice–Boltzmannovy metody. Při řešení nelaminárního proudění okolo překážek bylo získané řešení porovnáno s výsledky poskytnutými Ing. Ondřejem Polívkou získanými pomocí metody konečných objemů.

Ze získaných výsledků lze usoudit, že Lattice–Boltzmannova metoda poskytuje uspokojivé výsledky v porovnání s přesným analytickým řešením a řešením založeným na metodě konečných objemů. Veškeré představené výsledky pro Lattice–Boltzmannovu metodu byly vypočítané pomocí programu obsahující paralelní implementaci Lattice–Boltzmannovy metody, což značně přispělo k urychlení výpočtů.

Pokračování této práce bude spočívat v rozšíření znalostí o moderní varianty Lattice–Boltzmannovy metody, kterými jsou například MRT LBM, kde se vyskytuje více relaxačních parametrů, popřípadě o metodu kaskádovou a "Cumulant LBM". Dále bude naším záměrem rozšířit simulace do třírozměrného prostoru a zahrnout do simulací Newtonovské a stlačitelné proudění. Hlavním cílem do budoucna je poté zahrnout do jedné z možných variant Lattice–Boltzmannovy metody interakci mezi tekutinou a pohyblivou překážkou.



# Literatura

- [1] Pietro Asinari. *Multi-Scale Analysis of Heat and Mass Transfer in Mini/Micro-Structures*. PhD thesis, Department of Energy Engineering, Univeristy of "Politecnico di Torino", 2005.
- [2] Guido Buresti. A note on Stokes' hypothesis. *Acta Mechanica*, 226(10):3555–3559, 2015.
- [3] Nicolas Delbosc, Jonathan L. Summers, AI Khan, Nik Kapur, and Cath J. Noakes. Optimized implementation of the Lattice Boltzmann Method on a graphics processing unit towards real-time fluid simulation. *Computers & Mathematics with Applications*, 67(2):462–475, 2014.
- [4] Michel O. Devile and Thomas B. Gatski. *Mathematical modeling for complex fluids and flows*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [5] Uriel Frisch, Dominique d'Humieres, Brosl Hasslacher, Pierre Lallemand, Yves Pomeau, Jean-Pierre Rivet, et al. Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions. *Complex systems*, 1(4):649–707, 1987.
- [6] Gilberto M. Kremer. *An introduction to the Boltzmann equation and transport processes in gases*. Springer Science & Business Media, 2010.
- [7] Zhaoli Guo and Chang Shu. *Lattice Boltzmann method and its applications in engineering*. World Scientific, 2013.
- [8] Xiaoyi He and Li-Shi Luo. Lattice Boltzmann model for the incompressible Navier–Stokes equation. *Journal of statistical Physics*, 88(3-4):927–944, 1997.
- [9] Harold Jeffreys. *Cartesian tensors*. Cambridge university press, 1965.
- [10] Mehran Kardar. Statistical Mechanics of Particles, Lecture Notes, 2015. Volně přístupné na adrese <http://web.mit.edu/8.333/www/lectures/>.
- [11] Jonas Latt. *Hydrodynamic limit of lattice Boltzmann equations*. PhD thesis, University of Geneva, 2007.
- [12] Jonas Latt. Choice of units in lattice Boltzmann simulations. *Volně přístupné na adrese [http://lbmethod.org/\\_media/howtos:lbunits.pdf](http://lbmethod.org/_media/howtos:lbunits.pdf)*, 2008.
- [13] Richard L. Liboff. *Kinetic theory: classical, quantum, and relativistic descriptions*. Springer Science & Business Media, 2003.
- [14] Orestis Malaspinas, N. Fietier, and M. Deville. Lattice Boltzmann method for the simulation of viscoelastic fluid flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 165(23):1637–1653, 2010.
- [15] František Maršík. *Termodynamika kontinua*. Academia Praha, 1999.

- [16] Paul J. Dellar. Incompressible limits of lattice Boltzmann equations using multiple relaxation times. *Journal of Computational Physics*, 190(2):351–370, 2003.
- [17] William H. Press. *Numerical recipes 3rd edition: The art of scientific computing*. Cambridge university press, 2007.
- [18] Zhangrong Qin, Haiyan Liu, Liuliu Mo, and Yuanyuan Li. Implementation and Optimization of Lattice Boltzmann Method for Fluid Flow on GPU with CUDA. *International Journal of Digital Content Technology & its Applications*, 6(13), 2012.
- [19] Alfio Quarteroni, Riccardo Sacco, and Fausto Saleri. *Numerical mathematics*, volume 37. Springer Science & Business Media, 2010.
- [20] Jason Sanders and Edward Kandrot. *CUDA by example: an introduction to general-purpose GPU programming*. Addison-Wesley Professional, 2010.
- [21] Michael Schäfer, Stefan Turek, Franz Durst, Egon Krause, and Rolf Rannacher. *Benchmark computations of laminar flow around a cylinder*. Springer, 1996.
- [22] Xiaowen Shan and Xiaoyi He. Discretization of the velocity space in the solution of the Boltzmann equation. *Physical Review Letters*, 80(1):65, 1998.
- [23] Xiaowen Shan, Xue-Feng Yuan, and Hudong Chen. Kinetic theory representation of hydrodynamics: a way beyond the Navier–Stokes equation. *Journal of Fluid Mechanics*, 550:413–441, 2006.
- [24] David Tong. Lectures on Classical Dynamics, 2015. Volně přístupné na adrese <http://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/dynamics.html>.
- [25] Jonas Tölke. *Gitter-Boltzmann-Verfahren zur Simulation von Zweiphasenstromungen*. PhD thesis, Lehrstuhl Bauinformatik. TU München, München, 2001.
- [26] Erlend M. Viggen. The lattice Boltzmann method with applications in acoustics. *Master's Thesis, NTNU Trondheim, Norway*, 2009.
- [27] Dieter A. Wolf-Gladrow. *Lattice-gas cellular automata and lattice Boltzmann models: An Introduction*. Number 1725. Springer Science & Business Media, 2000.
- [28] Qisu Zou and Xiaoyi He. On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model. *Physics of Fluids (1994-present)*, 9(6):1591–1598, 1997.
- [29] Qisu Zou, Shuling Hou, Shiyi Chen, and Gary D. Doolen. A improved incompressible lattice Boltzmann model for time-independent flows. *Journal of Statistical Physics*, 81(1-2):35–48, 1995.