

Západočeská univerzita v Plzni
Fakulta aplikovaných věd
Katedra mechaniky



BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Modelování proudění reálné tekutiny s volnou hladinou pomocí lattice Boltzmannovy metody

PLZEŇ, 2014

Iveta Študentová

Prohlášení

Předkládám tímto k posouzení a obhajobě bakalářskou práci zpracovanou na závěr bakalářského studia na Fakultě aplikovaných věd Západočeské univerzity v Plzni.

Prohlašuji, že jsem bakalářskou práci vypracovala samostatně a výhradně s použitím odborné literatury a pramenů, jejichž úplný seznam je její součástí.

V Plzni dne 30. května 2014

.....
vlastnoruční podpis

Poděkování

Ráda bych poděkovala panu Ing. Mgr. Ondřeji Bublíkovi, vedoucímu mé bakalářské práce, za jeho cenné rady, trpělivost a čas, který mi při vedení práce věnoval. Rovněž bych chtěla poděkovat panu Doc. Ing. Janu Vimmrovi, Ph.D, konzultantovi této práce, za jeho vstřícnost a odborný dohled během psaní práce. Dále děkuji své rodině za podporu během dosavadního studia.

Abstrakt

Záměrem této práce bylo pochopit a osvojit si základní principy moderní lattice Boltzmannovy metody, která se v současné době používá vedle klasických metod pro numerickou simulaci proudění nestlačitelných tekutin, a dále pak implementovat tuto metodu ve výpočtovém prostředí MATLAB pro numerické řešení nestlačitelné vazké tekutiny s volnou hladinou ve 2D výpočtových oblastech. Pomocí vyvinutého softwaru byly v této práci numericky řešeny tři jednoduché testovací úlohy: pád kapky tekutiny na pevné dno a na volnou hladinu, protržení vodní hráze a gravitační lití tekutiny do formy.

Klíčová slova: lattice Boltzmannova metoda, volná hladina, 2D proudění, mezoskopický model, Eulerův přístup, Navierovy - Stokesovy rovnice

Abstract

The aim of this work was to understand and learn basic principles of a modern lattice Boltzmann method and to implement this method for a numerical solution of incompressible viscous free surface fluid flow in 2D areas in the computational environment MATLAB. These days, the lattice Boltzmann method is used to simulate incompressible fluid flow as well as classical methods. The developed software was used to solve three simple test cases in this work: a fall of a droplet on a solid surface and on a free surface, dam break and a gravity casting.

Keywords: lattice Boltzmann method, free surface, 2D fluid flow, mesoscopic model, Eulerian approach, Navier - Stokes equations

Obsah

Úvod	1
1 Historický vývoj metody	3
1.1 Buněčné automaty	3
1.2 „Lattice gas automatta“ model	4
1.3 Lattice Boltzmannův model	4
1.4 Lattice Bhatnagarův-Grossův-Krookův model	5
2 Princip lattice Boltzmannovy metody	6
2.1 Algoritmus implementace LBM	11
2.2 Single-/Multiple - relaxation time	12
2.3 Okrajové podmínky	15
2.3.1 Periodické okrajové podmínky	15
2.3.2 „Bounce-back“ stěny	15
2.3.3 Hladká stěna	15
2.3.4 Von Neumannovy okrajové podmínky	16
2.3.5 Dirichletovy okrajové podmínky	16
2.4 Převod mezi fyzikálním a lattice Boltzmannovým systémem (parametrizace)	18
2.4.1 Fyzikální systém	18
2.4.2 Bezrozměrný systém	19
2.4.3 Lattice Boltzmannův systém	19
2.4.4 Z lattice Boltzmannova systému zpět do fyzikálního systému	21
3 Odvození Navierových-Stokesových rovnic z diskrétní lattice Boltzmannovy rovnice	22
4 Modelování pohybu volné hladiny	28
4.1 Způsoby řešení modelu pohybu volné hladiny	28
4.2 Modelování pohybu volné hladiny lattice Boltzmannovo metodou	29
5 Numerické výsledky	33
5.1 Pád kapky na pevné dno	34
5.2 Pád kapky na volnou hladinu	37
5.3 Protržení vodní hráze	39
5.4 Gravitační lití zvoleného materiálu do formy	41

Závěr	43
Literatura	45

Úvod

Modelování proudění tekutin má v dnešní době mnoho praktických využití, ať už v průmyslu, lékařství nebo ve výzkumu. Z průmyslových aplikací lze zmínit například vakuové lití či vstřikování různých materiálů do forem, proudění potrubím anebo aerodynamické zkoušky obtékání těles ke zjišťování odporu vzduchu. Výhodou numerických simulací je mimo jiné výrazná úspora finančních prostředků při vývoji nových přístrojů či technologií tím, že jsou nejprve provedeny předběžné počítačové testy, které jsou následně ověřovány experimentálně.

Lattice Boltzmannova (LB) metoda je poměrně nová metoda ve výpočtové dynamice tekutin (CFD, z angl. „Computational Fluid Dynamics“). Výpočtová dynamika tekutin se zabývá vývojem a studiem numerických metod pro simulace proudění tekutin včetně přenosu tepla a hmoty. Parciální diferenciální rovnice popisující matematický model odpovídajícího problému proudění tekutin jsou zde řešeny numerickým přístupem. To znamená, že v uvažované výpočtové oblasti je vytvořena výpočetní síť tvořená konečným počtem buněk a v každé buňce této sítě jsou určeny charakteristické veličiny popisující proudové pole, jako je například rychlost, tlak, hustota nebo teplota. Mezi základní diskretizační metody určené pro numerické řešení proudění tekutin patří metoda konečných diferencí, metoda konečných objemů a metoda konečných prvků.

Zatímco většina klasických numerických metod pro proudění nestlačitelných vazkých tekutin počítá přímo s makroskopickými proměnnými vystupujícími v Navierových - Stokesových rovnicích a rovnici kontinuity, LB metoda využívá mezoskopický model proudění. Mezoskopický model se vyznačuje tím, že jsou sledovány jednotlivé částice tekutiny, ale na rozdíl od mikroskopického modelu jsou Newtonovy pohybové zákony použity pouze na pravděpodobnostní funkce vyskytující se částic tekutiny. Mikroskopický model využívá Lagrangeova popisu proudění. To znamená, že sleduje tekutinu z hlediska pohybu jednotlivých částic a na každou tuto částici jsou uplatněny Newtonovy pohybové zákony. Makroskopický model zpravidla využívá Eulerův popis proudění. Ten je charakterizován tím, že se na tekutinu pohlíží jako na kontinuum, na které lze následně aplikovat základní zákony zachování hmotnosti, hybnosti a celkové energie. Makroskopický model proudění nestlačitelných vazkých tekutin popisuje systém rovnic tvořený rovnicí kontinuity (1) a Navierovými-Stokesovými rovnicemi (2)

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla(\mathbf{u}) = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (2)$$

kde ρ popisuje hustotu tekutiny, \mathbf{u} vyjadřuje vektor okamžité rychlosti proudění, ν označuje kinematickou viskozitu tekutiny, p je tlak a t je čas.

Pohyb částic v tekutině vyjádřené mezoskopickým modelem proudění popisuje Boltzmannova rovnice, jejíž tvar je podle [23]

$$\partial_t f + \mathbf{e} \cdot \nabla f = \Omega(f), \quad (3)$$

kde f je pravděpodobnostní distribuční funkce, \mathbf{e} je vektor mikroskopické rychlosti částice a $\Omega(f)$ je kolizní člen.

Hlavním cílem této bakalářské práce je vytvoření matematického modelu nestlačitelné vazké tekutiny s volnou hladinou založeného na Boltzmannově rovnici a jeho implementace ve výpočtovém prostředí MATLAB. Pomocí vyvinutého softwaru je následně numericky řešena úloha gravitačního lití dané tekutiny do formy.

Předložená práce je členěna do následujících kapitol. V první kapitole je zmíněn historický vývoj lattice Boltzmannovy metody, z jakých modelů se postupně vyvinula a jaké jsou její výhody oproti klasickým metodám pro řešení proudění tekutin. Ve druhé kapitole je vysvětlen princip lattice Boltzmannovy metody, algoritmus pro modelování proudění tekutiny tímto přístupem a typy okrajových podmínek. Ve třetí kapitole je popsáno odvození Navierových - Stokesových rovnic z diskrétní lattice Boltzmannovy rovnice a ve čtvrté kapitole je popsána úprava lattice Boltzmannovy metody pro modelování proudění nestlačitelné vazké tekutiny s volnou hladinou. V páté kapitole jsou vyhodnoceny dosažené numerické výsledky řešených testovacích příkladů, kterými jsou pád kapky tekutiny na pevné dno a na volnou hladinu, protržení vodní hráze a gravitační lití materiálu do formy.

Kapitola 1

Historický vývoj metody

V této kapitole budou chronologicky popsány metody, ze kterých se postupem času vyvinula lattice Boltzmannova metoda. Nejprve bude uvedeno několik základních informací o buněčných automatech, ze kterých postupně vznikl „lattice gas automatta“ model. Následovat budou lattice Boltzmannův model a lattice Bhatnagarův-Grossův-Krookův model.

1.1 Buněčné automaty

Ve 40. letech 20. století navrhl John von Neumann spolu se Stanislawem Ulamem buněčný automat (CA, z angl. „Cellular Automatta“). Tento automat sloužil k modelování dynamického systému, který dokázal produkovat vlastní kopie [14]. Výpočet probíhal v diskrétním čase a prostoru, který byl rozčleněn na pravidelnou mřížku. Každé buňce byl na počátku výpočtu přidělen počáteční stav a tento stav byl během každého iteračního kroku aktualizován dle určitých pravidel. Stav i - té buňky mřížky byl popsán funkcí Φ_i , která byla závislá jednak na poloze pozorované buňky r_i , a jednak na čase t . Stav buňky v následujícím iteračním kroku $t + 1$ byl určen podle současného stavu pozorované buňky $\Phi(r_i, t)$ a stavů okolních buněk $\Phi(r_i + \delta_j, t)$ v čase t , kde $j = 1, \dots, N$, když N označuje počet okolních buněk té pozorované [31], [1], [27], neboli

$$\Phi_i(r_i, t + 1) = R_i(\Phi(r_i, t), \Phi(r_i + \delta_1, t), \dots, \Phi(r_i + \delta_N, t)), \quad (1.1)$$

kde R_i vyjadřuje funkční závislost nového stavu pozorované i - té buňky na aktuálních stavech okolních buněk a té buňky samotné. Tento model počítal v booleanovských proměnných a byl paralelní, což znamená, že výpočet časového vývoje stavů jednotlivých buněk probíhal v každém časovém kroku ve všech buňkách sítě současně. Prvotním záměrem von Neumanna k sestavení buněčného automatu bylo namodelovat vývoj buněk živé hmoty či organismu, a tak spojit biologické procesy s matematickou teorií. Od té doby se ale pole využití CA rozšířilo. Pomocí buněčných automatů je možno modelovat dynamické systémy, jako je například proudění tekutin, různé výpočetní mechanismy, například paralelní výpočty v hardwaru, nebo sestavovat některé fyzikální modely jako jsou modely popisující vývoj živých organismů.

1.2 „Lattice gas automatta“ model

Na základě myšlenky buněčných automatů navrhli v roce 1986 Uriel Frisch, Brosl Hasslacher, Yves Pomeau a Stephen Wolfram „lattice gas automatta“ (LGA) model simulující zjednodušenou molekulární dynamiku [23]. Princip tohoto modelu spočíval v tom, že myšlené částice mající určitou hybnost se pohybovaly v diskrétních časových krocích po dvourozměrné trojúhelníkové síti. V jednotlivých bodech mřížky se mohlo v jednom kroku současně nacházet až šest částic, proto byl tento model označen jako šestirychlostní model. Pohyb částic LGA modelu byl popsán vývoovou rovnicí s booleanovskými proměnnými, jejíž tvar je podle [23]

$$n_\alpha(x_i + \mathbf{e}_\alpha, t + 1) = n_\alpha(x_i, t) + C_\alpha(\{n_\beta\}), \quad (1.2)$$

kde $n_\alpha(x_i, t) \in \{0, 1\}$ je číslo částice booleanovského typu a $C_\alpha(n) \in \{-1, 0, 1\}$ představuje kolizní operátor. Každá částice má soubor vektorů přípustných rychlostí \mathbf{e}_α

$$\mathbf{e}_\alpha = \left(\cos \left[(\alpha - 1) \frac{\pi}{3} \right], \sin \left[(\alpha - 1) \frac{\pi}{3} \right] \right), \alpha = 1, 2, \dots, 6.$$

Indexy $\alpha, \beta \in \{1, 2, \dots, q\}$ v rovnici (1.2) vyjadřují směry vektorů diskrétních rychlostí, kde q označuje jejich celkový počet v souboru. Pohyb částic lze vypočítat ve dvou krocích, a to kolizním a propagačním kroku.

Z vlastností LGA lze zmínit například dodržování zákonů zachování, simulace dynamiky tekutin pomocí zjednodušeného modelu bezrozměrných částic s využitím základní symetrie modelu.

Tento model měl ale také své nedostatky, jako například statistický šum, velké fluktuace uvnitř systému a byl funkční jen pro nízká Reynoldsova čísla. Ladění parametrů modelu bylo kvůli výpočtům v booleanovských proměnných obtížné. A také stavová rovnice pro šestirychlostní model nebyla fyzikální kvůli závislosti na \mathbf{u}^2 , viz [23].

1.3 Lattice Boltzmannův model

Lattice Boltzmannova rovnice (LBE, z angl. „Lattice Boltzmann Equation“) byla odvozena z vývojové rovnice „lattice gas automatta“ modelu (1.2) [23], [24]. Hlavním cílem lattice Boltzmannova modelu byla snaha odstranit některé nedostatky LGA modelu.

Lattice Boltzmannův model vychází ze zjednodušené Boltzmannovy rovnice a lze jej použít k simulaci proudění tekutin. Rovnice popisující časový vývoj pohybu podle tohoto modelu má tvar [36]

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \delta t, t + \delta t) = f_\alpha(\mathbf{x}, t) + \Omega(f_\alpha), \quad (1.3)$$

kde $\Omega(f_\alpha)$ je kolizní operátor a f_α jsou pravděpodobnostní funkce výskytu částic tekutiny. Indexy α označují jednotlivé směry vektorů mikroskopických rychlostí, jejichž celkový počet v souboru rychlostí je dán typem rychlostního modelu, viz kapitola 2.

Distribuční (pravděpodobnostní) funkce $f(\mathbf{x}, \mathbf{e}, t)$ je statistická veličina popisující pravděpodobnost výskytu částice s danou rychlostí \mathbf{e} v určitém místě \mathbf{x} v daném čase t .

V lattice Boltzmannovo modelu došlo k odstranění některých nedostatků LGA modelu. Nahrazením booleanovských proměnných pravděpodobnostními funkcemi byl odstraněn statistický

šum a usnadněna úprava parametrů modelu. Dále byly například eliminovány fluktuace uvnitř systému a nefyzikálnost stavové rovnice, která má v tomto případě tvar

$$P = c_s^2 \rho. \quad (1.4)$$

Také numerická efektivita výpočtů při použití lattice Boltzmannovy rovnice je ve srovnání s LGA modelem za daných podmínek vyšší, viz [23].

1.4 Lattice Bhatnagarův-Grossův-Krookův model

Dalším zjednodušením lattice Boltzmannova modelu byla Bhatnagarova-Grossova-Krookova aproximace kolizního členu výrazem [23], [3]

$$\Omega(f_\alpha) = -\frac{1}{\tau} [f_\alpha - f_\alpha^{(eq)}], \quad (1.5)$$

kde τ představuje relaxační čas. Tento parametr popisuje dobu potřebnou k uvedení distribuční funkce f zpět do své rovnovážné polohy f^{eq} . Model s tímto kolizním členem byl pojmenován, po jeho autorech, lattice Bhatnagarův-Grossův-Krookův (LBGK) model. Vztah pro výpočet rovnovážné distribuční funkce je vyjádřen podle [23] jako

$$f_\alpha^{(eq)} = w_\alpha \rho [1 + A(\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}) + B(\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2 + C\mathbf{u}^2], \quad (1.6)$$

kde hodnoty váhových funkcí w_α a konstant A, B, C se mohou vypočítat ze zákonů zachování. Vývojovou rovnici LBE modelu (1.3) lze upravit použitím LBGK kolizního členu (1.5) do následujícího tvaru, čímž je vyjádřena rovnice popisující časový vývoj pohybu podle LBGK modelu

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \delta t, t + \delta t) = f_\alpha(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} [f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{(eq)}(\mathbf{x}, t)]. \quad (1.7)$$

Kapitola 2

Princip lattice Boltzmannovy metody

Lattice Boltzmannova metoda (LBM) je založena na principu buněčných automatů [31]. Obě tyto metody lze použít pro simulaci proudění tekutin. LBM zároveň ale také vychází z diskretizace Boltzmannovy rovnice.

Spojitou Boltzmannovu rovnici, která popisuje pohyb jednotlivých částic tekutiny, lze převést na diskrétní lattice Boltzmannovu rovnici. A to tak, že fyzikální prostor je rozdělen pomocí bodů v síti a rychlostní prostor je aproximován soubory vektorů mikroskopických rychlostí [17]. Neuspořádaně se pohybující mikroskopické částice uvnitř kapaliny jsou nahrazeny fiktivními částicemi, které se již pohybují jen v určitých směrech daných typem mřížky.

Časovou závislost pohybu částic tekutiny v každém bodu sítě popisuje vývojová lattice Boltzmannova rovnice (1.3)

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \delta t, t + \delta t) = f_\alpha(\mathbf{x}, t) + \Omega(f_\alpha),$$

kde f_α je pravděpodobnostní distribuční funkce výskytu částic tekutiny a \mathbf{e}_α jsou vektory mikroskopických rychlostí směřující z bodu sítě v místě \mathbf{x} a v čase t do sousedních bodů podle obr. 2.1 pro rychlostní model $D2Q9$. $\Omega(f_\alpha)$ se nazývá kolizní člen a popisuje tendenci částic navracet se zpět do svého rovnovážného stavu. Pro lattice Bhatnagarův-Grossův-Krookův (LBGK) model má, jak víme z předchozí kapitoly, tvar

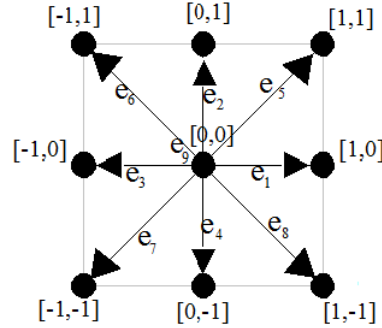
$$\Omega(f_\alpha) = -\frac{1}{\tau} \left[f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{(eq)}(\mathbf{x}, t) \right],$$

kde $f_\alpha^{(eq)}$ je rovnovážná distribuční funkce a f_α je nerovnovážná distribuční funkce. Nerovnovážnou distribuční funkci lze považovat za malou výchylku distribuční funkce ze svého rovnovážného stavu. V každém bodu sítě pro každou distribuční funkci existuje lokální rovnovážná distribuční funkce, která lineárně závisí na makroskopické rychlosti \mathbf{u} a hustotě proudící tekutiny ρ , viz dále rovnice (2.3). Parametr τ je relaxační čas, který závisí na viskozitě tekutiny podle rovnice [11]

$$v = c_s^2 \delta t \left(\tau - \frac{1}{2} \right), \quad (2.1)$$

kde c_s je rychlost zvuku. Koefficienty α označují směry vektorů mikroskopických rychlostí kolem bodu sítě. Pro model $D2Q9$, kde $D2$ znamená dvourozměrný a $Q9$ označuje model s devíti vektory

mikroskopických rychlostí, vypadají směry těchto rychlostí podle obr. 2.1 (e_α pro $\alpha = 1, 2, \dots, 8$ označuje směry vektorů rychlostí a $e_9 = 0$ označuje samotnou částici v klidu), viz [17]. Hodnoty



Obrázek 2.1: Rychlostní model $D2Q9$.

mikroskopických rychlostí pro model $D2Q9$ lze vyjádřit podle [13]

$$\mathbf{e}_\alpha = \begin{cases} (0, 0) & \alpha = 9, \\ \left(\cos\left(\frac{(\alpha-1)\pi}{2}\right), \sin\left(\frac{(\alpha-1)\pi}{2}\right) \right) c & \alpha = 1, 2, 3, 4, \\ \left(\cos\left(\frac{(2\alpha-9)\pi}{4}\right), \sin\left(\frac{(2\alpha-9)\pi}{4}\right) \right) \sqrt{2}c & \alpha = 5, 6, 7, 8, \end{cases} \quad (2.2)$$

kde c je mřížková rychlost daná podílem mřížkové délky δx ku mřížkovému časovému kroku δt . Rovnice pro rovnovážnou distribuční funkci má podle [13] tvar

$$f_\alpha^{(eq)}(\mathbf{x}, t) = w_\alpha \rho \left(1 + \frac{\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right), \quad (2.3)$$

kde \mathbf{u} a ρ jsou makroskopické proměnné, konkrétně rychlost a hustota tekutiny a w_α je váhová funkce. Hodnoty váhové funkce pro $D2Q9$ model jsou podle [13] následující

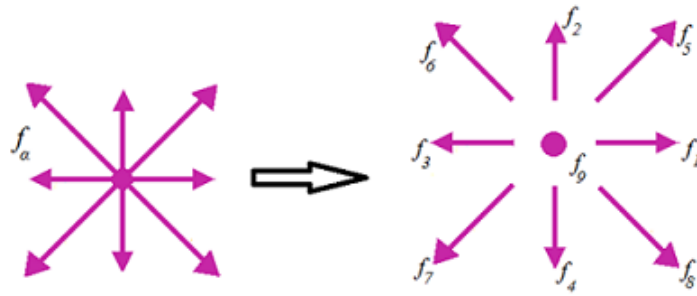
$$w_\alpha = \begin{cases} \frac{4}{9} & \alpha = 9, \\ \frac{1}{9} & \alpha = 1, 2, 3, 4, \\ \frac{1}{36} & \alpha = 5, 6, 7, 8. \end{cases} \quad (2.4)$$

Pravděpodobnostní distribuční funkci v každém bodu sítě lze pro rychlostní model $D2Q9$ zobrazit viz obr. 2.2.

Výpočet lattice Boltzmannovy rovnice (1.3) se provádí ve dvou krocích, kolizním a propagačním kroku [36].

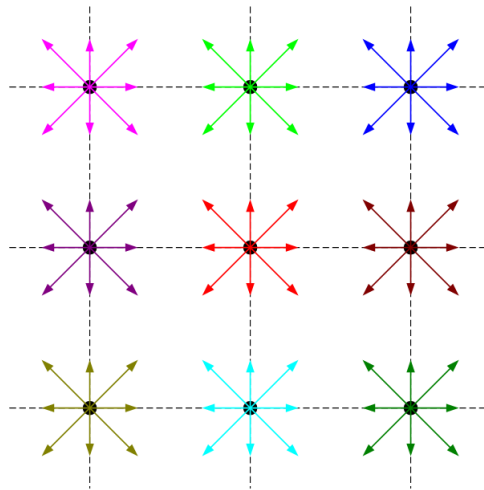
1. Kolizní krok: popisuje srážky částic v jednotlivých bodech sítě. Probíhá ve všech bodech sítě současně a je dán rovnicí

$$\hat{f}_\alpha(\mathbf{x}, t) = f_\alpha(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} \left[f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{(eq)}(\mathbf{x}, t) \right]. \quad (2.5)$$



Obrázek 2.2: Distribuční funkce f_α pro D2Q9 model.

To znamená, že v kolizním kroku se provádí výpočet nových (post kolizních) distribučních funkcí $\hat{f}_\alpha(\mathbf{x}, t)$ v jednotlivých bodech sítě vzniklé kolizí částic přiteklych v daném časovém kroku do těchto bodů, viz obr. 2.3. Na tomto obrázku jsou barevně zobrazeny soubory post-kolizních distribučních funkcí v jednotlivých bodech mřížky.



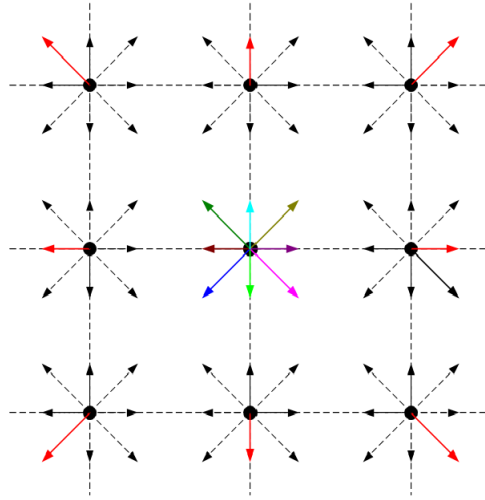
Obrázek 2.3: Kolizní krok.

Do výrazu pro výpočet nové post-kolizní distribuční funkce \hat{f}_α (2.5) může být navíc přidán člen Δf_α pro výpočet účinku objemové síly \mathbf{F} na tekutinu v následujícím tvaru, který byl odvozen v práci [12]

$$\Delta f_\alpha = w_\alpha \rho (\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{F}) \frac{1}{c_s^2}, \quad (2.6)$$

kde w_α označuje váhovou funkci, ρ je makroskopická hustota tekutiny, \mathbf{e}_α je mikroskopická rychlost částic tekutiny a c_s popisuje rychlost zvuku.

2. Propagační krok (streaming): distribuční funkce vzniklé po kolizi se přesouvají do nejbližších sousedních bodů podél spojnic bodů mřížky, viz obr. 2.4.



Obrázek 2.4: Propagační krok.

Tento proces vyjadřuje rovnice

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \delta t, t + \delta t) = \hat{f}_\alpha(\mathbf{x}, t). \quad (2.7)$$

Potíže ovšem nastávají při výpočtu distribučních funkcí na okrajích výpočtové oblasti. Distribuční funkce opouštějící výpočtovou oblast lze z výpočtů vyřadit, neboť po opuštění sítě již nepopisují proudění v pozorované oblasti. Naopak distribuční funkce přitékající dovnitř výpočtové oblasti z venku jsou neznámé. Tento problém se řeší zavedením okrajových podmínek, viz kapitola 2.3.

Po vypočítání všech směrů distribučních funkcí ve všech bodech mřížky již lze určit makroskopické veličiny. Tyto veličiny lze vyjádřit jako obecné momenty pravděpodobnostních distribučních funkcí. K -tý obecný moment m_k je definován jako integrál distribuční funkce $f(\mathbf{x}, \mathbf{e}, t)$, přenásobené k -tou mocninou mikroskopické rychlosti \mathbf{e} , přes rychlostní prostor, neboli

$$m_k = \int \mathbf{e}^k f(\mathbf{x}, \mathbf{e}, t) d\mathbf{e}, \quad (2.8)$$

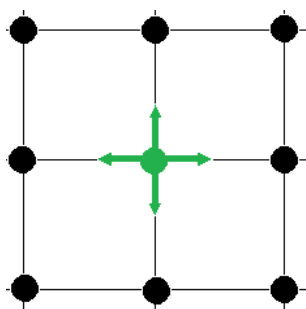
kde index $k \in \mathbf{N}_0$. To znamená, že distribuční funkce popisující množství částic tekutiny nacházející se v jednotlivých místech \mathbf{x} a pohybujícími se mikroskopickými rychlostmi \mathbf{e} jsou nahrazeny statistickými průměry hodnot v prostoru, které odpovídají makroskopickým veličinám [29]. Momenty vyjádřené ve spojitém rychlostním prostoru lze diskretizací rychlostního prostoru převést do diskrétního rychlostního prostoru. V této práci byly vyjadřovány hustota ρ a rychlost \mathbf{u} , které odpovídají nultému a prvnímu momentu distribuční funkce a v diskrétním rychlostním

prostoru mají tvar

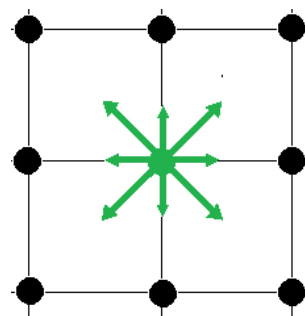
$$\rho = \sum_{\alpha} f_{\alpha}, \quad (2.9)$$

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha} f_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha}. \quad (2.10)$$

Model $D2Q9$, viz obr. 2.6, ovšem není jediný model, který lze pro výpočet proudění LB metodou použít. Ve 2D, čili v rovině, je možno definovat také model s pěti vektory mikroskopických rychlostí ($D2Q5$ model), viz obr. 2.5.



Obrázek 2.5: $D2Q5$ model.



Obrázek 2.6: $D2Q9$ model.

Dvourozměrný model lze rozšířit na trojrozměrný model. Pak strukturu mřížky popisuje $D3Q13$, $D3Q15$ nebo $D3Q19$ model, kde $Q13$, $Q15$ a $Q19$ opět značí počet vektorů rychlostí. Na druhou stranu je možné 2D model omezit na jednorozměrný model, viz obr. 2.7 a 2.8, kde jsou znázorněny modely $D1Q3$ a $D1Q5$.



Obrázek 2.7: $D1Q3$ model.



Obrázek 2.8: $D1Q5$ model.

Volba modelu závisí na tom, co požadujeme od dané simulace. Vyšší počet diskretních rychlostí zajišťuje přesnost a stabilitu metody, menším počtem diskretních rychlostí je dosaženo rychlejšího výpočtu s menším využitím paměti.

Stabilitu metody ovlivňuje také velikost relaxačního parametru τ . Čím více se hodnota τ blíží k $\frac{1}{2}$, tím je metoda méně numericky stabilní. Pro zvýšení stability se proto tento jednoduchý relaxační parametr (SRT, z angl. „Single-relaxation-time“), nahrazuje mnohonásobným relaxačním parametrem (MRT, z angl. „Multiple-relaxation-time“), který obsahuje diagonální relaxační matici, podrobněji viz kapitola 2.2.

2.1 Algoritmus implementace LBM

1. Zadefinování fyzikálního problému a jeho převedení z fyzikálního systému do lattice Boltzmannova systému.

2. Výpočet rovnovážných distribučních funkcí využitím makroskopických veličin, tj. makroskopické rychlosti $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_0)$ a hustoty $\rho(\mathbf{x}, t_0)$ v počátečním čase t_0 ze vztahu

$$f_\alpha^{(eq)}(\mathbf{x}, t) = w_\alpha \rho \left(1 + \frac{\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right) \quad (2.11)$$

a nadefinování počátečních hodnot distribučních funkcí $f_\alpha(\mathbf{x}, t_0) = f_\alpha^{(eq)}(\mathbf{x}, t_0)$.

3. Kolizní krok. Probíhá ve všech bodech uvnitř i na okraji výpočtové oblasti podle rovnice

$$\hat{f}_\alpha(\mathbf{x}, t) = f_\alpha(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} \left[f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{(eq)}(\mathbf{x}, t) \right]. \quad (2.12)$$

4. Propagace. Probíhá stejně jako kolize v celé výpočtové oblasti s tím rozdílem, že na jejích okrajích jsou vyjádřeny jen směry distribučních funkcí dovnitř oblasti. Vyjádří se vztahem

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \delta t, t + \delta t) = \hat{f}_\alpha(\mathbf{x}, t) \quad (2.13)$$

5. Určení okrajových podmínek a dopočet neznámých směrů distribučních funkcí na hranicích výpočtové oblasti, blíže viz kapitola 2.3.

6. Výpočet nových makroskopických veličin, rychlosti $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t + \delta t)$ a hustoty $\rho(\mathbf{x}, t + \delta t)$, pomocí vztahů

$$\rho(\mathbf{x}, t + \delta t) = \sum_\alpha f_\alpha(\mathbf{x}, t + \delta t), \quad (2.14)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t + \delta t) = \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t + \delta t)} \sum_\alpha \mathbf{e}_\alpha f_\alpha(\mathbf{x}, t + \delta t). \quad (2.15)$$

Tyto nové makroskopické veličiny jsou převedeny z lattice Boltzmannova systému zpět do fyzikálního systému.

7. Jsou-li splněny dané zastavovací podmínky, ukončíme výpočet. Není-li tomu tak, přepočítáme rovnovážné distribuční funkce podle vztahu (2.11) s použitím nových hodnot makroskopických veličin a vrátíme se zpět na bod 3.

2.2 Single-/Multiple - relaxation time

Numerická stabilita lattice Boltzmanovy metody s Bhatnagarovým-Grossovým-Krookovým kolizním členem (LBGK metoda) závisí mimo jiné na velikosti jednoduchého relaxačního parametru τ . Model s jedním relaxačním parametrem se označuje jako SRT model (z angl. „single relaxation time“). LBM využívající SRT se nazývá SRT-LB metoda. Výhodou tohoto modelu je jeho jednoduchost a rychlost výpočtu. Naopak jeho nevýhodou je numerická nestabilita pro hodnoty τ blíží se k $\frac{1}{2}$. Ze vztahu (2.47) vyplývá, že s rostoucí hodnotou Reynoldsova čísla Re se hodnota τ blíží k $\frac{1}{2}$ a tím klesá numerická stabilita SRT-LB metody. V těchto případech je vhodnější SRT nahradit mnohonásobným relaxačním časem neboli MRT (z angl. „multiple relaxation time“). Použitím MRT operátoru je zachována jednoduchost a výpočetní výkonnost LBGK modelu, ale navíc dochází k větší numerické stabilitě řešení i pro vysoká Reynoldsova čísla. Jednoduchý relaxační parametr je zjednodušeným případem MRT.

Hlavní myšlenka MRT-LB modelu je následující. Kolizní krok je uskutečněn v momentovém prostoru, tj. prostoru s momenty distribučních funkcí $m_\alpha(\mathbf{x}, t)$, ale propagační krok je nadále realizován v rychlostním (distribučním) prostoru, tj. prostoru s distribučními funkcemi $f_\alpha(\mathbf{x}, t)$ [16]. V lattice Boltzmannově metodě je kolizní operátor $\Omega(f_\alpha)$ obecně dán vztahem

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \delta t) - f_\alpha(\mathbf{x}, t) = \Omega(f_\alpha). \quad (2.16)$$

V LBGK metodě byl tento operátor vyjádřen v distribučním prostoru vztahem

$$\Omega = -\frac{1}{\tau} [\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{f}^{(eq)}(\mathbf{x}, t)].$$

V MRT-LB metodě je kolizní člen převeden do momentového prostoru a lze jej vyjádřit ve tvaru [8], [19]

$$\Omega = -\mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{S} [\mathbf{m}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{m}^{eq}(\mathbf{x}, t)], \quad (2.17)$$

kde \mathbf{S} označuje diagonální matici s relaxačními parametry na diagonále definovanou v momentovém prostoru. Pokud jsou všechny prvky matice \mathbf{S} stejné, MRT člen přejde v SRT člen. Pokud jsou těmito prvky navíc pouze zlomky $\frac{1}{\tau}$, MRT-LB model přejde v LBGK model. Prvky diagonální matice jsou obecně definovány následovně

$$\mathbf{S} = \text{diag}(s_1, s_2, s_3, s_4, s_5, s_6, s_7, s_8, s_9)^T, \quad (2.18)$$

kde jednotlivé prvky $s_i, i = 1, 2, \dots, 9$ jsou pro získání co nejstabilnějšího modelu voleny z intervalu $(0; 2)$. Členy $\mathbf{m}(\mathbf{x}, t)$ a $\mathbf{m}^{eq}(\mathbf{x}, t)$ jsou momentové vektory a pro model D2Q9 mají 9 členů. V tomto případě má nerovnovážný momentový vektor $\mathbf{m}(\mathbf{x}, t)$ následující podobu [19]

$$\mathbf{m} = (\rho, e, \varepsilon, j_x, q_x, j_y, q_y, p_{xx}, p_{xy})^T, \quad (2.19)$$

kde ρ označuje hustotu, e je energie, ε odpovídá kvadrátu energie, j_x , resp. j_y , popisují x -, resp. y -ovou, složku hybnosti, q_x a q_y označují x - a y -ovou složku energetického toku a p_{xx} , resp. p_{xy} , se vztahují k diagonálním, resp. mimodiagonálním, prvkům tenzoru napětí. \mathbf{M} označuje

transformační matici s konstantními prvky. Tato matice slouží k transformaci rychlostního prostoru do momentového a pro $D2Q9$ model má tento tvar

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 & -4 \\ -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 & 4 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 0 \\ -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

Pomocí transformační matice \mathbf{M} lze vyjádřit vztah mezi vektorem $\mathbf{m}(\mathbf{x}, t)$ a distribuční funkcí $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$ následovně [19]

$$\begin{aligned} \mathbf{m} &= \mathbf{M} \cdot \mathbf{f}, \\ \mathbf{f} &= \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{m} \end{aligned} \quad (2.21)$$

Rovnovážný stav momentu $\mathbf{m}(\mathbf{x}, t)$ je vyjádřen pomocí $\mathbf{m}^{eq}(\mathbf{x}, t)$. Jednotlivé prvky vektoru momentů \mathbf{m}^{eq} lze rozdělit do dvou skupin, a to na kinetické a hydrodynamické momenty. Hydrodynamické momenty zůstávají během kolizního procesu zachovány a platí tedy pro ně vztah $m_\alpha^{eq} = m_\alpha$. Pro kinetické momenty již ale tato rovnost neplatí, protože během kolizního procesu zachovány nejsou [8]. Na druhou stranu je možné alespoň vyjádřit schopnost těchto momentů navracet se do rovnovážného stavu relaxační rovnicí [19]

$$m_i^* = m_i - s_i(m_i - m_i^{eq}), \quad (2.22)$$

kde index * označuje momenty po kolizi a hodnoty momentů před kolizí jsou bez indexu. Při volbě hodnot kinetických momentů m_i^{eq} v rovnici (2.22) je nutné respektovat symetrii úlohy. Pokud se prvky rovnovážného vektoru \mathbf{m}^{eq} určí následovně [18]

$$\begin{aligned} m_0^{eq} &= \rho, \\ m_1^{eq} &= -2\rho + 3\rho(u_x^2 + u_y^2), \\ m_2^{eq} &= \rho - 3\rho(u_x^2 + u_y^2), \\ m_3^{eq} &= \rho u_x, \\ m_4^{eq} &= -\rho u_x, \\ m_5^{eq} &= \rho u_y, \\ m_6^{eq} &= -\rho u_y, \\ m_7^{eq} &= \rho(u_x^2 - u_y^2), \\ m_8^{eq} &= \rho u_x u_y, \end{aligned} \quad (2.23)$$

platí pro ně následující rovnost

$$\mathbf{m}^{eq} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{f}^{(eq)}. \quad (2.24)$$

Dosažením vztahů (2.21) a (2.24) do rovnice (2.17) lze upravit kolizní člen do tvaru, který se nazývá MRT operátor a vypadá takto

$$\Omega = -\mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{M} \cdot [\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{f}^{(eq)}(\mathbf{x}, t)]. \quad (2.25)$$

2.3 Okrajové podmínky

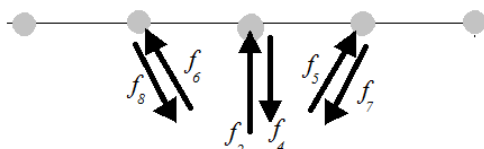
Okrajové podmínky řeší problém s určením hodnot distribučních funkcí na okrajích výpočtové oblasti. Směry distribučních funkcí v krajních bodech sítě směřující z oblasti ven, mimo síť, lze z výpočtů vyřadit, jelikož již nepopisují proudění uvnitř výpočtové oblasti. Hodnoty distribučních funkcí, které vtékají dovnitř mřížky, jsou naopak důležité, ale neznámé. Tyto neznámé hodnoty lze vyjádřit právě pomocí okrajových podmínek. Podstatou určení okrajových podmínek je vyjádření závislosti neznámé distribuční funkce vtékající do výpočtové oblasti na známé distribuční funkci opouštějící danou výpočtovou oblast.

2.3.1 Periodické okrajové podmínky

Periodické okrajové podmínky představují jeden z nejjednodušších případů okrajových podmínek. Princip spočívá v tom, že objem, který vyteče z výpočtové oblasti hranicí na jedné straně, přiteče zpět do oblasti opačnou stranou. Obecně vzato lze uvažovat dva typy periodických okrajových podmínek. Buď může být výpočtová oblast uzavřena kolem dokola pouze spojením levé a pravé hranice, čímž vznikne tvar dutého válce, nebo se navíc propojí ještě horní a dolní okraj oblasti, což svým tvarem připomíná dutý toroid [33].

2.3.2 „Bounce-back“ stěny

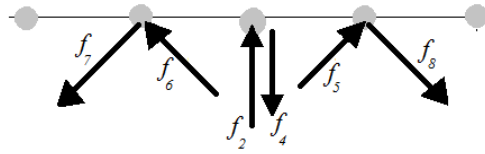
„Bounce-back“ neboli „no-slip“ okrajová podmínka popisuje situaci, kdy všechny směry distribučních funkcí vytékající z výpočtové oblasti ven, jejichž hodnoty jsou známy, se jakoby odrazí od pevné imaginární zdi a vrací se zpět dovnitř sítě, viz obr. 2.9. Tato zeď má neklouzavý povrch, proto se částice vrací po stejné trase, po jaké přišly. Tím se určí hodnoty neznámých distribučních funkcí [32].



Obrázek 2.9: „Bounce-back“ okrajová podmínka.

2.3.3 Hladká stěna

Rekonstrukce neznámých distribučních funkcí aplikací hladkých stěn je podobná „bounce-back“ podmínce, jen s tím rozdílem, že myšlená zeď je hladká se zanedbatelně malým třením, které již ale ovlivňuje pohyb tekutiny. Pohyb částic tekutiny při aplikaci těchto okrajových podmínek je naznačen na obr. 2.10 [32].



Obrázek 2.10: Okrajová podmínka hladké stěny.

2.3.4 Von Neumannovy okrajové podmínky

Von Neumannovy okrajové podmínky jsou formulovány pomocí vtékající či vytékající rychlosti na okrajích oblasti a lze je vyjádřit ze zadaného vektoru počáteční rychlosti $\mathbf{u}_0 = [u_{x0}, u_{y0}]^T$. Pomocí něj je možno následně vyjádřit makroskopickou hustotu (tlak) a zbývající tři neznámé distribuční funkce vtékající dovnitř výpočtové oblasti v jednotlivých hraničních bodech sítě. Celkem je tedy třeba určit čtyři neznámé. Aby bylo možné tyto neznámé vypočítat, je potřeba vyjádřit čtyři rovnice. Tyto rovnice jsou jednak dány vztahy makroskopických proměnných, tj. hustoty ρ a rychlosti \mathbf{u}_0

$$\rho = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \quad (2.26)$$

$$\mathbf{u}_0 = \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha} f_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} \quad (2.27)$$

a jednak splněním „bounce-back“ podmínky ve směru kolmém na stěnu podle [37]. Vztah (2.26) poskytuje první rovnici, další dvě rovnice jsou vyjádřeny rozepsáním vztahu (2.27) do x - a y -ové složky a čtvrtou rovnici poskytuje „bounce-back“ podmínka [33].

2.3.5 Dirichletovy okrajové podmínky

Dirichletovy okrajové podmínky se svým způsobem podobají Von Neumannovým okrajovým podmínkám. Liší se v tom, že jsou formulovány pomocí počáteční makroskopické hustoty (tlaku) ρ_0 proudící tekutiny. Pomocí ní je následně vyjádřena makroskopická rychlost \mathbf{u} a zbývající tři neznámé distribuční funkce přitékající zvenku dovnitř výpočtové oblasti jednotlivými krajními body sítě. Jelikož je uvažována jen rychlost ve směru kolmém na hranici, tečná složka rychlosti je nulová, neznámé jsou opět čtyři. Postup odvození těchto čtyř neznámých veličin je obdobný jako u Von Neumannových okrajových podmínek. Na začátku jsou zadány počáteční hodnoty v krajních bodech sítě, tj. makroskopická hustota $\rho = \rho_0$ a směry distribučních funkcí f_{α} , které již byly vypočteny v propagačním kroku. Pro určení zbylých čtyř neznámých hodnot je potřeba sestavit čtyři rovnice. Tyto rovnice se vyjádří z „bounce-back“ podmínky sestavené ve směru kolmém k hranici oblasti a ze vztahů pro výpočet makroskopických veličin, tzn. rychlosti

\mathbf{u} a hustoty ρ_0 [33]

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\rho_0} \sum_{\alpha} f_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha}, \quad (2.28)$$

$$\rho_0 = \sum_{\alpha} f_{\alpha}. \quad (2.29)$$

2.4 Převod mezi fyzikálním a lattice Boltzmannovým systémem (parametrizace)

Aby bylo možné provést výpočet fyzikálního problému lattice Boltzmannovou metodou, musí být nejprve daná úloha převedena z fyzikálního do lattice Boltzmannova systému. Teprve v tomto systému je řešení uskutečněno. Výsledné hodnoty jsou následně převedeny zpět do fyzikálního systému. Existují dva způsoby řešení tohoto problému. První možností je přímá diskretizace úlohy zadané ve fyzikálním systému do LB systému pomocí převodových zlomků, neboli podílu hodnot veličin ve fyzikálním systému ku hodnotám v lattice Boltzmannovo systému. Druhým způsobem je převedení fyzikálního problému do lattice Boltzmannova systému přes bezrozměrný systém zavedením pomocných veličin, charakteristického času t_0 a délky l_0 , a následně diskretizačních proměnných, časového kroku δt a prostorového kroku δx [28]. Druhý způsob řešení bude dále popsán. Veličiny ve fyzikálním systému jsou označeny indexem p (z angl. „physical“), v bezrozměrném systému mají index d (z angl. „dimensionless“) a v lattice Boltzmannovo systému je veličinám přiřazen index lb .

2.4.1 Fyzikální systém

Nejprve je nadefinován fyzikální problém. To znamená, že jsou zadány fyzikální veličiny: počáteční rychlost udělená tekutině $u_p [m/s]$, charakteristický rozměr kanálu či nádoby, kde je výpočet prováděn, $d_p [m]$, dynamická viskozita $\eta_p [Pa.s]$ a hustota sledované tekutiny $\rho_p [kg/m^3]$, ze kterých lze následně vyjádřit kinematickou viskozitu ν_p vztahem

$$\nu_p = \frac{\eta_p}{\rho_p} \left[\frac{m^2}{s} \right]. \quad (2.30)$$

Ze zadaných parametrů je následujícím vztahem vyjádřeno tzv. Reynoldsovo číslo

$$Re = \frac{u_p d_p}{\nu_p}. \quad (2.31)$$

Reynoldsovo číslo je bezrozměrný zlomek vyjadřující podobnost skutečného fyzikálního modelu a výpočtového modelu v bezrozměrném a lattice Boltzmannovo systému. Proto má Reynoldsovo číslo ve všech třech systémech stejnou hodnotu.

Pro přechod z fyzikálního systému na bezrozměrný systém jsou zavedeny referenční veličiny: délka $l_0 [m]$ a čas $t_0 [s]$. Referenční rychlost lze vyjádřit pomocí těchto dvou veličin

$$u_0 = \frac{l_0}{t_0} \left[\frac{m}{s} \right].$$

2.4.2 Bezrozměrný systém

Fyzikální veličiny lze převést do bezrozměrného systému následovně

$$\begin{aligned} u_p &= \frac{l_0}{t_0} u_d \Rightarrow u_d = \frac{t_0}{l_0} u_p, \\ d_d &= \frac{d_p}{l_0}, \\ t_d &= \frac{t_p}{t_0}. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Velikosti referenčních veličin jsou voleny stejně jako hodnoty odpovídajících fyzikálních veličin ve fyzikálním systému. Hodnoty výsledných bezrozměrných parametrů se pak podle (2.32) budou rovnat jednotkám

$$\begin{aligned} u_d &= 1, \\ d_d &= 1, \\ t_d &= 1. \end{aligned} \quad (2.33)$$

V bezrozměrném systému lze Reynoldsovo číslo vyjádřit obdobným způsobem jako ve fyzikálním systému, viz (2.31)

$$Re = \frac{u_d d_d}{\nu_d}.$$

Dosažením hodnot (2.33) do tohoto výrazu je vyjádřen vztah

$$Re = \frac{1}{\nu_d}. \quad (2.34)$$

Jelikož se přechodem mezi systémy Reynoldsovo číslo nemění, lze ze vzorce (2.34) vyjádřit kinematickou viskozitu v bezrozměrném systému, kdy Reynoldsovo číslo je určeno pomocí fyzikálních veličin

$$\nu_d = \frac{1}{Re}. \quad (2.35)$$

Pro diskretizaci bezrozměrného systému do lattice Boltzmannova systému je třeba zavést diskretizační proměnné, a to charakteristický délkový (prostorový) krok δx a charakteristický časový krok δt .

2.4.3 Lattice Boltzmannův systém

Diskretizační parametr δx je určen podílem

$$\delta x = \frac{l_0}{N}, \quad (2.36)$$

kde N je počet dílků použitých k diskretizaci referenční délky l_0 . Jednotkou diskretizačního délkového kroku δx je mřížková jednotka lu , z angl. „lattice unit“. Časový krok δt je doložen obdobným způsobem

$$\delta t = \frac{t_0}{N_{it}}, \quad (2.37)$$

kde N_{it} je počet iteračních kroků v daném výpočtu. Jednotkou diskretizačního časového parametru δt je časový krok ts , z angl. „time step“. Hodnoty referenčních veličin l_0 a t_0 vyjádřených v bezrozměrném systému jsou rovny jedné [21]. Proto lze vztahy (2.36) a (2.37) upravit na tvar

$$\delta x = \frac{1}{N}$$

a

$$\delta t = \frac{1}{N_{it}}.$$

Diskretizační parametry δt a δx je vhodné zvolit tak, aby lattice Boltzmannova metoda byla co nejstabilnější. To nastane v případě, kdy Machovo číslo $Ma = u/c_s$ bude menší než rychlost zvuku c_s . Pro makroskopickou rychlost v LB systému pak tedy musí platit podmínka [28]:

$$\|\mathbf{u}_{lb}\|_2 = \frac{\delta t}{\delta x} \|\mathbf{u}_d\|_2 \ll c_s,$$

kde velikost rychlosti u_d je dána vztahem (2.33). Pomocí δx a δt a vztahu (2.35) lze vyjádřit rychlost u_{lb} a kinematickou viskozitu ν_{lb} v lattice Boltzmannovo systému následovně

$$u_d = \frac{\delta x}{\delta t} u_{lb} \Rightarrow u_{lb} = \frac{\delta t}{\delta x} u_d, \quad (2.38)$$

$$\nu_d = \frac{\delta x^2}{\delta t} \nu_{lb} \Rightarrow \nu_{lb} = \frac{\delta t}{\delta x^2} \nu_d = \frac{\delta t}{\delta x^2} \frac{1}{Re}. \quad (2.39)$$

Nyní již lze vypočítat hodnotu relaxačního parametru τ . Relaxační parametr τ je s kinematickou viskozitou svázán vztahem

$$\nu_p = c_s^2 \delta t (\tau - 0.5), \quad (2.40)$$

kde c_s je rychlost zvuku v LB systému definovaná jako

$$c_s = \frac{c}{\sqrt{3}}, \quad (2.41)$$

kde c je mřížková rychlost. Mřížková rychlost je rychlost, se kterou se částice přesune o 1 délkový krok δx za 1 časový krok δt , tj.

$$c = \frac{\delta x}{\delta t} \left[\frac{l u}{ts} \right]. \quad (2.42)$$

Ze vztahů (2.40), (2.41), (2.42) se pak relaxační parametr τ vyjádří následovně

$$\tau = 0.5 + \frac{\nu_p}{c_s^2 \delta t} = 0.5 + \frac{3\nu_p}{c^2 \delta t} = 0.5 + \frac{3\nu_p}{\frac{\delta x^2}{\delta t^2} \delta t} = 0.5 + \frac{3\nu_p}{\frac{\delta x^2}{\delta t}} = 0.5 + \frac{3}{c \delta x} \nu_p. \quad (2.43)$$

Za použití výrazu (2.42) pro mřížkovou rychlost je vyjádřen vztah

$$\tau = 0.5 + \frac{3}{c \delta x} \nu_p = 0.5 + \frac{3}{\delta x} \frac{\delta t}{\delta x} \nu_p = 0.5 + 3 \frac{\delta t}{\delta x^2} \nu_p. \quad (2.44)$$

Dosažením vztahů pro převod kinematické viskozity z fyzikálního do LB systému přes bezrozměrný systém

$$\frac{\delta x^2}{\delta t} \nu_{lb} = \nu_d = \frac{t_0}{l_0^2} \nu_p = [\text{pro } l_0 = t_0 = 1] = \nu_p \quad (2.45)$$

je vyjádřen relaxační parametr τ v LB systému následovně

$$\tau = 0.5 + 3\nu_{lb}. \quad (2.46)$$

Upravením kinematické viskozity v LB systému pomocí vztahu (2.39) je vyjádřena závislost mezi τ a Reynoldsovým číslem

$$\tau = 0.5 + 3 \frac{\delta t}{\delta x^2} \frac{1}{Re}. \quad (2.47)$$

Z výrazu (2.47) vyplývá omezující interval pro velikost relaxačního parametru $\tau \in (0.5; +\infty)$. Dále je z tohoto vztahu zřejmé, že s rostoucím Reynoldsovým číslem se $\tau \rightarrow \frac{1}{2}$.

2.4.4 Z lattice Boltzmannova systému zpět do fyzikálního systému

Při převodu makroskopické rychlosti v lattice Boltzmannovo systému u_{lb} zpět do fyzikálního systému je třeba jít opět přes bezrozměrný systém. Tento převod lze vyjádřit pomocí vztahů (2.32) a (2.38) následujícím způsobem

$$u_p = u_{lb} \frac{\delta x}{\delta t} u_0. \quad (2.48)$$

Kapitola 3

Odvození Navierových-Stokesových rovnic z diskretní lattice Boltzmannovy rovnice

V této kapitole budou odvozeny Navierovy-Stokesovy rovnice pro proudění nestlačitelné vazké tekutiny z lattice Boltzmannovy rovnice. Výchozím tvarem LB rovnice bude diskretní kinetická rovnice popisující pohyb distribučních funkcí částic, jež vychází z kinetické rovnice LGA (1.2) [6]

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) - f_\alpha(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{eq}(\mathbf{x}, t)], \quad (3.1)$$

kde rovnovážná distribuční funkce f_α^{eq} je definována vztahem

$$f_\alpha^{eq} = w_\alpha \rho \left[1 + \frac{\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right] \quad (3.2)$$

a

$$c_s = \frac{c}{\sqrt{3}},$$

za předpokladu malého Machova čísla $Ma = \frac{u}{c_s}$ do $O(Ma^2)$. Důvodem, proč je předpis pro rovnovážnou distribuční funkci rozepsán právě do $O(\mathbf{u}^2)$ je fakt, že Navierovy-Stokesovy rovnice mají nelinearitu druhého řádu přesnosti rychlosti [6], [5]. Pro získání Navierových-Stokesových rovnic musí být mříž symetrická. Proto byl použit $D2Q9$ model [6], [9]. Pro $D2Q9$ model jsou indexy $\alpha = 1, 2, \dots, 9$. Za těchto předpokladů pak pro BGK model platí následující vztahy [20]

$$\begin{aligned} \sum_\alpha w_\alpha &= 1, \\ \sum_\alpha w_\alpha \mathbf{e}_\alpha &= 0, \\ \sum_\alpha w_\alpha \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha &= c_s^2 \mathbf{I}, \\ \sum_\alpha w_\alpha \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha &= 0, \\ \sum_\alpha w_\alpha \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha &= c_s^4 \mathbf{\Pi}, \\ \sum_\alpha w_\alpha \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha &= 0. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Z definice f_α^{eq} (3.2) a vztahů pro mřížkovou symetrii (3.3) vyplývají následující vztahy [11]

$$\sum_\alpha f_\alpha^{eq} = \rho, \quad (3.4)$$

$$\sum_\alpha \mathbf{e}_\alpha f_\alpha^{eq} = \rho \mathbf{u}, \quad (3.5)$$

$$\sum_\alpha \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha f_\alpha^{eq} = c_s^2 \rho \mathbf{I} + \rho \mathbf{u} \mathbf{u}, \quad (3.6)$$

$$\sum_\alpha \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha f_\alpha^{eq} = c_s^2 \rho \mathbf{u}. \quad (3.7)$$

Makroskopické veličiny jsou definovány následovně [11]

$$\rho = \sum_\alpha f_\alpha, \quad (3.8)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_\alpha \mathbf{e}_\alpha f_\alpha. \quad (3.9)$$

Ze vztahů (3.4), (3.5), (3.8) a (3.9) vyplývá podle [11], že

$$\sum_\alpha f_\alpha^{(k)} = 0, \quad (3.10)$$

$$\sum_\alpha \mathbf{e}_\alpha f_\alpha^{(k)} = 0, \quad (3.11)$$

kde $k > 0$. K odvození Navierových-Stokesových rovnic je třeba ještě znát další dvě makroskopické veličiny [7], a to tenzor napětí

$$\Pi^{(k)} = \sum_\alpha \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha f_\alpha^{(k)}; k > 0 \quad (3.12)$$

a rovnovážný tenzor napětí

$$\Pi^{(0)} = \sum_\alpha \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha f_\alpha^{(0)}. \quad (3.13)$$

Chapmanův-Enskogův přístup

Odvození makroskopických parciálních diferenciálních rovnic bylo provedeno Chapmanovým-Enskogovým přístupem. To znamená, že LB rovnice byla rozvinuta bezrozměrným perturbačním parametrem ε a následně byla provedena více-škálová analýza. Parametr ε je velice malé číslo, jehož fyzikálním významem je Knudsenovo číslo a lze jej vyjádřit jako podíl mikroskopické délky δ_x s charakteristickou makroskopickou délkou L [7].

Pro distribuční funkci v Boltzmannově rovnici navíc platí, že časová závislost distribuční funkce probíhá přes hustotu ρ a makroskopický vektor rychlosti \mathbf{u} , popřípadě teplotu T [13]

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} = \frac{\partial f_\alpha}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial f_\alpha}{\partial \mathbf{u}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}.$$

Pro realizaci analýzy bylo třeba provést následující Chapmanovy-Enskogovy rozvoje

$$f_\alpha = f_\alpha^{(0)} + \varepsilon f_\alpha^{(1)} + \varepsilon^2 f_\alpha^{(2)}, \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2}, \quad (3.15)$$

$$\nabla = \varepsilon \nabla_1. \quad (3.16)$$

Ukazuje se, že rozvoj distribuční funkce do druhého řádu přesnosti perturbačního parametru postačuje k vyjádření makroskopických rovnic. První člen rozvoje (3.14) $f_\alpha^{(0)}$ vyjadřuje rovnovážný stav částic a distribuční funkce $f_\alpha^{(k)}$, $k > 0$, popisují odchylku od tohoto stavu. Členy časového rozvoje (3.15) jsou stejného řádu přesnosti, ale $t_1 \gg t_2$. Tento velikostní rozdíl časů ∂_{t_1} a ∂_{t_2} je vyjádřen pomocí parametru ε . To znamená, že jsou popsány dvě časové škály, konvekční čas t_1 a difúzní čas t_2 [20].

Člen $f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \Delta t, t + \Delta t)$ rovnice (3.1) byl rozvinut Taylorovým rozvojem do řádu $n = 2$ a následně dosazen zpět do téže rovnice [20]

$$f_\alpha(\mathbf{x}, t) + \Delta t D_t f_\alpha(\mathbf{x}, t) + \frac{\Delta t^2}{2} D_t^2 f_\alpha(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{eq}(\mathbf{x}, t)], \quad (3.17)$$

kde

$$D_t = \partial_t + \mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla$$

je materiálová derivace, po jejímž dosazení do rozvinuté rovnice (3.17) a současném vydělení této rovnice členem Δt je získán výraz

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla f_\alpha + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial^2 f_\alpha}{\partial t^2} + 2\mathbf{e} \cdot \nabla \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha : \nabla \nabla f_\alpha \right) = -\frac{1}{\tau \Delta t} [f_\alpha - f_\alpha^{eq}]. \quad (3.18)$$

Po dosazení (3.14), (3.15), (3.16) do (3.18) a zanedbání členů se složitostí $O(\varepsilon^3)$ a vyšší je určen následující vztah

$$\begin{aligned} & \varepsilon \partial_{t_1} f_\alpha^{(0)} + \varepsilon^2 \partial_{t_2} f_\alpha^{(0)} + \varepsilon \mathbf{e}_\alpha \nabla_1 f_\alpha^{(0)} + \varepsilon^2 \partial_{t_1} f_\alpha^{(1)} + \varepsilon^2 \mathbf{e}_\alpha \nabla_1 f_\alpha^{(1)} + \frac{\Delta t}{2} \varepsilon^2 \partial_{t_1}^2 f_\alpha^{(0)} + \\ & + \varepsilon \mathbf{e}_\alpha \nabla_1 \partial_{t_1} f_\alpha^{(0)} + \frac{\Delta t}{2} e_\alpha e_i : \nabla_1 \nabla_1 \varepsilon^2 f_\alpha^{(0)} = -\frac{1}{\tau \Delta t} \left(f_\alpha^{(0)} + \varepsilon f_\alpha^{(1)} + \varepsilon^2 f_\alpha^{(2)} - f_\alpha^{(eq)} \right). \end{aligned}$$

Porovnáním jednotlivých řádů Knudsenova čísla v této rovnici jsou vyjádřeny tyto výrazy

$$O(\varepsilon^0) : f_\alpha^{(0)} = f_\alpha^{(eq)}, \quad (3.19)$$

$$O(\varepsilon^1) : \partial_{t_1} f_\alpha^{(0)} + \mathbf{e}_\alpha \nabla_1 f_\alpha^{(0)} = -\frac{1}{\tau \Delta t} f_\alpha^{(1)}, \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} O(\varepsilon^2) : & \partial_{t_2} f_\alpha^{(0)} + \partial_{t_1} f_\alpha^{(1)} + \mathbf{e}_\alpha \nabla_1 f_\alpha^{(1)} + \frac{\Delta t}{2} \partial_{t_1}^2 f_\alpha^{(0)} + \mathbf{e}_\alpha \nabla_1 \partial_{t_1} f_\alpha^{(0)} + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha : \nabla_1 \nabla_1 f_\alpha^{(0)} = \\ & = -\frac{1}{\tau \Delta t} f_\alpha^{(2)}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Rovnici (3.21) lze dále upravit tak, že se do ní za určité členy dosadí člen $\partial_{t_1} f_\alpha^{(0)}$ vyjádřený ze vztahu (3.20). Po provedení několika úprav je získána výsledná rovnice odpovídající $O(\varepsilon^2)$

$$\frac{\partial f_\alpha^{(0)}}{\partial t_2} + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \left(\mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla_1 f_\alpha^{(1)} + \frac{\partial f_\alpha^{(1)}}{\partial t_1}\right) = -\frac{1}{\tau \Delta t} f_\alpha^{(2)}. \quad (3.22)$$

Nyní již je vše připraveno pro vyjádření makroskopických partiálních diferenciálních rovnic [11]

1) makroskopické rovnice na škále $O(\varepsilon^1)$

Součtem rovnice (3.20) přes všechny α a dosazením vztahů (3.4), (3.5), (3.10) a (3.11) je určen vztah

$$\partial_{t_1} \rho + \nabla_1(\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (3.23)$$

Součtem rovnice $\mathbf{e}_\alpha \cdot$ (3.20) přes všechny α a dosazením vztahů (3.4), (3.5), (3.10), (3.11) a (3.13) je vyjádřena rovnice

$$\partial_{t_1}(\rho \mathbf{u}) + \nabla_1 \Pi^{(0)} = 0, \quad (3.24)$$

kde tenzor $\Pi^{(0)}$ lze vyjádřit ze vztahů (3.13) a (3.6) následovně

$$\Pi^{(0)} = c_s^2 \rho \mathbf{I} + \rho \mathbf{u} \mathbf{u}. \quad (3.25)$$

2) makroskopické rovnice na škále $O(\varepsilon^2)$

Součtem rovnice (3.22) přes všechny α a dosazením vztahů (3.4), (3.5), (3.10), (3.11) a (3.13) je získán výraz

$$\partial_{t_2} \rho = 0. \quad (3.26)$$

Součtem rovnice $\mathbf{e}_\alpha \cdot$ (3.22) přes všechny α a dosazením vztahů (3.5), (3.11) a (3.12) dostaneme

$$\partial_{t_2}(\rho \mathbf{u}) + \nabla_1 \Pi^{(1)} \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) = 0, \quad (3.27)$$

kde tenzor $\Pi^{(1)}$ lze vyjádřit takto

$$\sum_\alpha \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha \cdot (3.22) : \partial_{t_1} \sum_\alpha \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha f_\alpha^{(0)} + \nabla_1 \sum_\alpha \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha f_\alpha^{(0)} = -\frac{1}{\tau \Delta t} \sum_\alpha \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha f_\alpha^{(1)}.$$

Aplikací vztahů (3.7), (3.12) a (3.13) na tuto rovnici je vyjádřen vztah:

$$\Pi^{(1)} = -\Delta t \tau \left[\partial_{t_1} \Pi^{(0)} + \nabla_1 c_s^2 \rho \mathbf{u} \right],$$

do kterého je následně dosazen výraz (3.25) a získáme výsledek

$$\Pi^{(1)} = -\Delta t \tau \left[\partial_{t_1} (c_s^2 \rho \mathbf{I} + \rho \mathbf{u} \mathbf{u}) + \nabla_1 c_s^2 \rho \mathbf{u} \right].$$

Zanedbají-li se zbytkové členy $O(Ma^2)$ a předpokládá-li se konstantní hustota, lze tenzor $\Pi^{(1)}$ upravit do následující podoby

$$\Pi^{(1)} = -\Delta t \tau \nabla_1 c_s^2 \rho \mathbf{u}. \quad (3.28)$$

Dosazením vztahu (3.28) do (3.27) dostaneme rovnici

$$\partial_{t_2}(\rho \mathbf{u}) - \nabla_1 \left[\Delta t \tau \nabla_1 c_s^2 \rho \mathbf{u} \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \right] = 0. \quad (3.29)$$

Při označení výrazu

$$v = \Delta t \tau c_s^2 \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) = \Delta t c_s^2 \left(\tau - \frac{1}{2} \right), \quad (3.30)$$

lze makroskopickou rovnici na škále $O(\varepsilon^2)$ (3.29) přepsat do výsledného tvaru

$$\partial_{t_2}(\rho \mathbf{u}) - \nabla_1 \cdot [v \nabla_1(\rho \mathbf{u})] = 0. \quad (3.31)$$

Výsledné parciální diferenciální rovnice jsou pak získány součtem makroskopických rovnic řádu $O(\varepsilon^1)$ a řádu $O(\varepsilon^2)$, tj.

$$(3.23) + (3.26) : \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} \right) \rho + \varepsilon \nabla_1(\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (3.32)$$

$$(3.24) + (3.31) : \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} \right) (\rho \mathbf{u}) + \varepsilon \nabla_1 \cdot \Pi^{(0)} - \varepsilon^2 \nabla_1 \cdot [v \nabla_1(\rho \mathbf{u})] = 0. \quad (3.33)$$

Dosazením vztahu (3.15) a (3.16) do (3.32) je vyjádřena výsledná makroskopická rovnice kontinuity

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (3.34)$$

Druhá parciální diferenciální rovnice (3.33) je upravena následujícím způsobem. Po dosazení vztahů (3.15) a (3.16) do (3.33) získáme vztah

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot \Pi^{(0)} - \nabla \cdot [v \nabla(\rho \mathbf{u})] = 0. \quad (3.35)$$

Dosazením (3.25) do (3.35) dostaneme rovnici

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla(c_s^2 \rho + \rho \mathbf{u} \mathbf{u}) - \nabla \cdot [v \nabla(\rho \mathbf{u})] = 0,$$

po jejíž drobné úpravě je vypočítán následující výraz

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla(c_s^2 \rho) + v \nabla^2(\rho \mathbf{u}). \quad (3.36)$$

Tlak p lze pro izotermický LBE model určit stavovou rovnicí [23]

$$p = c_s^2 \rho. \quad (3.37)$$

Dosazením (3.37) do (3.36) je nakonec vyjádřena výsledná makroskopická Navierova-Stokesova rovnice

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + v \nabla^2(\rho \mathbf{u}). \quad (3.38)$$

Za předpokladu nestlačitelné tekutiny, tj. $\rho = konst$, lze rovnice (3.34) a (3.38) zjednodušit do tohoto tvaru

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{u} &= 0, \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} &= -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u}.\end{aligned}$$

Kapitola 4

Modelování pohybu volné hladiny

V této kapitole bude objasněna problematika modelování pohybu nestlačitelné vazké tekutiny s volnou hladinou. První podkapitola pojednává o možnostech modelování pohybu tekutiny s volnou hladinou obecně a ve druhé podkapitole bude popsán model pohybu volné hladiny pomocí lattice Boltzmannovy metody.

4.1 Způsoby řešení modelu pohybu volné hladiny

Ve výpočtové dynamice tekutin se rozlišují dva základní přístupy modelování pohybu částic tekutin, a to Lagrangeovský a Eulerovský přístup. Lagrangeovská metoda sleduje pohyb tekutiny z hlediska jednotlivých částic, což znamená, že výpočtová síť se při použití tohoto přístupu bude během simulace pohybovat spolu s proudící tekutinou. Nevýhodou této metody je deformace sítě během pohybu, proto je vhodná spíše pro více viskózní laminární proudění. Eulerovská metoda zachází s proudící tekutinou jako s kontinuem, takže při výpočtech touto metodou bude poloha výpočtové sítě pevně dána a proudící tekutina se bude pohybovat mezi jednotlivými buňkami [35].

Existují různé algoritmy využívající těchto dvou přístupů. Mezi Eulerovské metody patří například „Volume of Fluid“ (VOF) metoda nebo „Level Set“ metoda. Z Lagrangeovských metod lze zmínit například „Smoothed particle hydrodynamics“ (SPH) metodu.

VOF metoda patří mezi tzv. „Volume tracking“ metody [30]. Princip této metody spočívá ve sledování pohybu tekutiny mezi jednotlivými buňkami výpočtové sítě. Pohyb volné hladiny je sledován pomocí tzv. objemového podílu, který je přiřazen každé buňce. Hodnoty objemového podílu se pohybují v intervalu $\langle 0; 1 \rangle$ a vypovídají o tom, jak velká část buňky je zaplněna tekutinou. Buňky na rozhraní mají objemový podíl mezi 0 a 1, nulová hodnota odpovídá prázdné buňce a jednička buňce zaplněné tekutinou. Tato metoda dodržuje zákon zachování hmotnosti. To znamená, že objem, který z jedné buňky vyteče, se musí rovnat objemu, který přijímá sousední buňka.

„Level Set“ metoda je trochu jednodušší než VOF metoda, ale nezachovává hmotnost. Rozhraní tekutiny, které je definováno funkcí $\Gamma(t)$ popisující hranici oblasti s tekutinou, je určeno pomocí určité funkce $\varphi(\mathbf{x}, t)$, která určuje vzdálenost jednotlivých buněk od rozhraní. Pro buňky

na rozhraní má proto nulovou hodnotu, uvnitř oblasti s tekutinou je kladná a vně je záporná [26], [10]. Pohyb rozhraní je pak sledován prostřednictvím hodnot funkce φ ve výpočtové oblasti. Tento pohyb popisuje následující transportní rovnice

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \varphi = 0,$$

kde \mathbf{v} označuje rychlost rozhraní tekutiny ve vyjádřeném rychlostním poli. V následujícím časovém kroku si ale funkce φ nezachovává svou vzdálenost od rozhraní, což způsobuje jeho zkreslení. Proto tato funkce musí být v každém iteračním kroku aktualizována, což má za následek problém s dodržением zákona zachování hmotnosti.

„Smoothed particle hydrodynamics“ metoda je Lagrangeovská metoda, kterou lze také použít k simulaci proudění s volnou hladinou. Tato metoda nepožaduje výpočtovou síť, protože časový vývoj pohybu tekutiny je modelován prostřednictvím pohybu jednotlivých částic. Každá částice je nahrazena bodem, který je definován interpolovanými hodnotami hmotnosti, rychlosti a dalšími charakteristickými veličinami potřebnými k řešení úlohy. Tyto body pak simulují pohyb proudící tekutiny [25], [22].

4.2 Modelování pohybu volné hladiny lattice Boltzmannovo metodou

Pohyb tekutiny s volnou hladinou popisuje proudění dvou fází. Dvoufázové proudění typu kapalina - plyn lze zjednodušit na jednofázové proudění, kdy je sledován pouze pohyb kapaliny a její volné hladiny. Hustota plynu je ve srovnání s hustotou kapaliny velice malá, proto lze dynamiku plynu zanedbat a lze předpokládat, že plyn na rozhraní dvou fází kopíruje pohyb volné hladiny kapaliny [15].

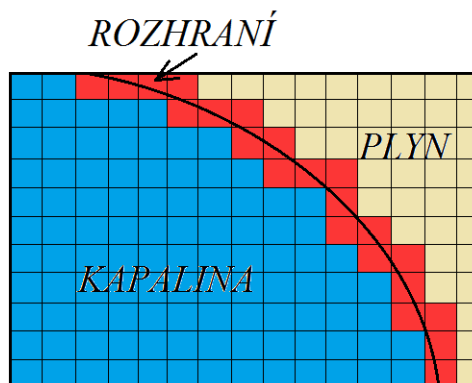
K modelování kapaliny s volnou hladinou byl použit algoritmus navržený v práci [34] a [15]. Tento přístup lze přirovnat k VOF metodě, ale na rozdíl od ní je tato metoda schopná modelovat i lehce stlačitelnou tekutinu. Pro výpočet pohybu kapaliny tímto algoritmem je potřeba znát tři proměnné, a to hustotu kapaliny $\rho(\mathbf{x}, t)$, podíl hmotnosti $m(\mathbf{x}, t)$ a objemový podíl kapaliny $\varepsilon(\mathbf{x}, t)$, kterou lze vyjádřit následujícím vztahem

$$\varepsilon(\mathbf{x}, t) = \frac{m(\mathbf{x}, t)}{\rho(\mathbf{x}, t)}. \quad (4.1)$$

Objemový podíl vyjadřuje, jak velká část buňky je zaplněna kapalinou a jeho hodnoty se pohybují v intervalu $\langle 0; 1 \rangle$, kde hodnota 0 platí pro prázdnou buňku a hodnota 1 označuje buňku plnou. Hodnoty uvnitř intervalu mezi 0 a 1 popisují objemový podíl jednotlivých buněk na rozhraní. Prázdná buňka má nulovou hmotnost a hmotnost buňky zaplněné kapalinou se rovná hustotě této kapaliny.

Pohyb volné hladiny je vyšetřován sledováním toku hmoty mezi jednotlivými buňkami. Obdobně je tomu i u VOF metody, ale na rozdíl od ní jsou v tomto algoritmu určovány změny hmotností v jednotlivých buňkách přímo z hodnot vypočtených LB metodou [34].

V modelu pohybující se tekutiny s volnou hladinou se rozlišují tři typy buněk, viz obr. 4.1, a to buňky úplně zaplněné kapalinou, buňky na rozhraní, které jsou částečně zaplněné



Obrázek 4.1: Typy buněk.

kapalinou a buňky s plynem, které lze označit jako buňky prázdné, protože vliv plynu je při výpočtech zanedbán.

Vrstva buněk tvořící rozhraní mezi dvěma fázemi musí být uzavřená. To znamená, že všechny distribuční funkce, které lze považovat za nositele hmotností, při propagaci z kapaliny do plynu a naopak musí nejprve přejít přes rozhraní. Tato podmínka zaručuje splnění zákona zachování hmotnosti, protože na rozhraní dochází k vyrovnání přebytečné hmoty z plné buňky, resp. chybějící hmoty z prázdné buňky [15]. Platí tedy, že hmoty z jedné buňky vytékající se rovná hmotě přitékající do sousední buňky, neboli

$$\Delta m_{\alpha}(\mathbf{x}, t) = -\Delta m_{\bar{\alpha}}(\mathbf{x} + \Delta t \mathbf{e}_{\alpha}, t).$$

Lattice Boltzmannova metoda pro simulaci volné hladiny se od základního algoritmu liší tím, že ke kolizi nedochází v celé výpočetní oblasti, ale jen v buňkách zaplněných vodou a na rozhraní. V každém iteračním kroku zároveň dochází k přetypování buněk. To znamená, že plná či prázdná buňka může být změněna na buňku na rozhraní a naopak. Přímá změna mezi plnou a prázdnou buňkou ale není možná.

Modelování volné hladiny podle [34] je provedeno ve třech hlavních krocích, kterými jsou: výpočet pohybu rozhraní, implementace okrajových podmínek a přetypování buněk.

Pohyb rozhraní lze určit vyjádřením hmotnostních změn v jednotlivých buňkách. Tuto změnu mezi dvěma přilehlými plnými buňkami nebo jednou plnou buňkou a jednou buňkou na rozhraní popisuje následující vztah

$$\Delta m_{\alpha}(\mathbf{x}, t + \Delta t) = f_{\bar{\alpha}}(\mathbf{x} + \Delta t \mathbf{e}_{\alpha}, t) - f_{\alpha}(\mathbf{x}, t), \quad (4.2)$$

kde index $\bar{\alpha}$ označuje směr inverzní ke směru α . Funkce $f_{\bar{\alpha}}$ popisuje, kolik tekutiny do buňky vtéká a f_{α} naopak množství tekutiny, které z buňky vyteklo během jednoho iteračního kroku. Výpočet přenosu hmoty mezi prázdnou buňkou a rozhraním se neprovádí. Pokud jsou vedle sebe dvě buňky popisující rozhraní, pravá strana rovnice (4.3) je navíc vynásobena průměrnou hodno-

tu objemových podílů těchto buněk

$$\Delta m_\alpha(\mathbf{x}, t + \Delta t) = [f_{\bar{\alpha}}(\mathbf{x} + \Delta t \mathbf{e}_\alpha, t) - f_\alpha(\mathbf{x}, t)] \frac{\varepsilon(\mathbf{x} + \Delta t \mathbf{e}_\alpha, t) + \varepsilon(\mathbf{x}, t)}{2}. \quad (4.3)$$

Celkovou hmotnost v následujícím iteračním kroku lze nakonec určit součtem původní hmotnosti $m(\mathbf{x}, t)$ a hmotnostních změn v jednotlivých směrech modelu α

$$m(\mathbf{x}, t + \Delta t) = m(\mathbf{x}, t) + \sum_{\alpha} \Delta m_\alpha(\mathbf{x}, t + \Delta t). \quad (4.4)$$

Buňky na rozhraní sousedí jednak s plnými buňkami, jejichž distribuční funkce jsou známy ve všech směrech, a jednak s prázdnými buňkami, s jejichž distribučními funkcemi nebylo dříve počítáno. Jelikož je ale i znalost těchto hodnot nutná k určení neznámých směrů distribučních funkcí v buňkách na rozhraní, je potřeba je také vyjádřit. K tomu poslouží vhodné okrajové podmínky. Neznámou distribuční funkci f' v buňce na rozhraní ve směru z prázdné sousední buňky $\bar{\alpha}$ na pozici $(\mathbf{x} + \Delta t \mathbf{e}_\alpha)$ lze dopočítat podle následující rovnice

$$f'_{\bar{\alpha}}(\mathbf{x}, t + \Delta t) = f_{\alpha}^{eq}(\rho_A, \mathbf{u}) + f_{\bar{\alpha}}^{eq}(\rho_A, \mathbf{u}) - f_\alpha(\mathbf{x}, t), \quad (4.5)$$

kde \mathbf{u} je makroskopická rychlost v místě \mathbf{x} v čase t a ρ_A se vztahuje k atmosférickému tlaku p_A působícímu na volnou hladinu vztahem [4]

$$\rho_A = \frac{1}{c_s^2} p_A,$$

kde c_s označuje rychlost zvuku. Aby byla dodržena rovnováha sil na fázovém rozhraní tekutin, je potřeba navíc přepočítat podle rovnice (4.5) distribuční funkce proudící ze směrů podél normály zkonstruované na rozhraní, které splňují následující podmínku (4.6)

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_{\bar{\alpha}} > 0, \quad (4.6)$$

kde normálu \mathbf{n} lze podle [34] vyjádřit jako aproximaci centrálními diferencemi objemových podílů v jednotlivých směrech prostoru. Pro 2D model má aproximace tvar

$$\mathbf{n} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \varepsilon(\mathbf{x}_{i-1,j}) - \varepsilon(\mathbf{x}_{i+1,j}) \\ \varepsilon(\mathbf{x}_{i,j-1}) - \varepsilon(\mathbf{x}_{i,j+1}) \end{pmatrix}, \quad (4.7)$$

kde $\mathbf{x}_{i,j}$ popisuje polohu buňky v i -tém řádku a j -tém sloupci dané mřížky. Pokud jsou již známy všechny směry distribučních funkcí, lze provést kolizi a následně přetypování buněk.

Jestli byla buňka na rozhraní vyprázdněna nebo zaplněna lze určit podle následujících vztahů

$$\begin{aligned} m(\mathbf{x}, t + \Delta t) > (1 + \kappa)\rho(\mathbf{x}, t + \Delta t) &\rightarrow \text{zaplněná buňka,} \\ m(\mathbf{x}, t + \Delta t) < (0 - \kappa)\rho(\mathbf{x}, t + \Delta t) &\rightarrow \text{vyprázdněná buňka,} \end{aligned} \quad (4.8)$$

kde $\kappa = 10^{-3}$ představuje okolí hodnot 1, resp. 0. Typ zaplněné buňky je změněn z typu rozhraní na typ plné buňky a současně okolní prázdné buňky jsou změněny na buňky typu rozhraní. V těchto nových buňkách typu rozhraní je potřeba určit hustotu, rychlost a jednotlivé směry

distribučních funkcí, které v prázdných buňkách nejsou známy. Hustota a rychlost jsou extrapolovány z okolních plných buněk a buněk na rozhraní, nikoliv ovšem z nově vzniklých buněk typu rozhraní, kde jsou tyto veličiny také neznámé. Distribuční funkce jsou vyjádřeny rovnovážnými distribučními funkcemi vypočítanými z extrapolovaných hodnot hustoty a rychlosti. Vyprázdněné buňky jsou naopak změněny z typu rozhraní na typ prázdná buňka a sousedící plné buňky jsou přetypovány na buňky na rozhraní. Zároveň je zapotřebí během přeměny buněk dodržovat zákon zachování hmotnosti. To znamená, že je nutné přebytečnou hmotnost, kterou obsahují buňky původního typu rozhraní, které byly nově přetypovány dle rovnice (4.8), propagovat do okolních buněk typu rozhraní. Do buněk typu kapalina, resp. plyn, přebytečnou hmotu distribuovat nelze, jelikož tyto typy jsou definovány hmotností rovnou 1, resp. 0. Vyprázdněná buňka má přebytečnou hmotnost rovnou své samotné hmotnosti a je záporná, zatímco přebytečná hmotnost zaplněné buňky je rovna rozdílu $(m - \rho)$ a je větší než nula, což vyjadřuje pohyb tekutiny a její volné hladiny do sousedních prázdných buněk. Protože rozměr buňky je $1 \times 1 \text{ lu}$, má buňka jednotkový objem, a proto lze hmotnost vyjádřit vztahem $m = \rho V = \rho$. Přebytečná hmotnost, která byla označena m^{ex} , je propagována do sousedních buněk typu rozhraní podle následujícího vztahu [34]

$$m(\mathbf{x} + \Delta t \mathbf{e}_\alpha) = m(\mathbf{x} + \Delta t \mathbf{e}_\alpha) + m^{ex} \left(\frac{\eta_\alpha}{\eta_{celk}} \right), \quad (4.9)$$

kde

$$\eta_\alpha = \begin{cases} \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_\alpha & \text{pro } \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_\alpha > 0, \\ 0 & \text{jinak} \end{cases} \quad \text{pro zaplněné buňky,}$$

$$\eta_\alpha = \begin{cases} -\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_\alpha & \text{pro } \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_\alpha < 0, \\ 0 & \text{jinak} \end{cases} \quad \text{pro vyprázdněné buňky}$$

a

$$\eta_{celk} = \sum_{\alpha} \eta_\alpha.$$

Vzhledem ke změně hmotnosti je potřeba aktualizovat také hodnoty objemového podílu jednotlivých buněk dle rovnice (4.1).

Během simulace pohybu tekutiny může zůstat jedna buňka typu rozhraní uvnitř oblasti s buňkami vyplněnými tekutinou nebo naopak mezi samými prázdnými buňkami. Tyto artefakty nemají vliv na průběh výpočtu pohybu kapaliny, ale mohou rušit výsledný vizuální dojem. Proto je vhodné je odstranit následujícím způsobem. Přebytečná buňka typu rozhraní sousedící pouze s prázdnými buňkami se změní na prázdnou buňku, zatímco buňka typu rozhraní obklopená samými plnými buňkami se změní na buňku plnou.

Kapitola 5

Numerické výsledky

Simulace proudění nestlačitelné vazké tekutiny pomocí lattice Boltzmannovy metody byla provedena ve výpočtovém prostředí MATLAB, kde byl namodelován pohyb dále blíže specifikované tekutiny s volnou hladinou použitím D2Q9 rychlostního modelu. Tekutina byla zadána pomocí fyzikálních veličin: dynamické viskozity η a hustoty ρ při teplotě T . Počáteční makroskopická rychlost tekutiny byla ve všech modelových případech nastavena na hodnotu $u = 0 \text{ m/s}$ a zároveň na tekutinu působila tíhová síla s gravitačním zrychlením $g = 9.81 \text{ m/s}^2$. Na jednotlivé stěny výpočtové oblasti modelu byly aplikovány „bounce-back“ okrajové podmínky.

Pro simulaci pohybu volné hladiny vody byl použit MRT model. Parametry diagonální relaxační matice \mathbf{S} byly zvoleny následovně: $s_1 = 0, s_2 = 1.19, s_3 = 1.19, s_4 = 0, s_5 = 1.19, s_6 = 0, s_7 = 1.19, s_8 = 1/\tau, s_9 = 1/\tau$. Parametry s indexy $i = 1, 4$ a 6 odpovídají hustotě ρ a složkám vektoru lineární hybnosti \mathbf{j} , jejichž hodnoty se během kolize při konstantní teplotě nemění. Proto je není třeba specifikovat a jsou položeny rovny nule. Prvky s indexy $2, 8$ a 9 odpovídají energii e a složkám tenzoru napětí p_{xx} a p_{xy} a závisí na viskozitě. Parametr s_8 je obvykle volen blízko 2 , proto lze toto číslo definovat převrácenou hodnotou relaxačního času τ . Prvek $s_9 = s_8$. Hodnoty prvků s_3, s_5 a s_7 bývají voleny blízko 1 , v této úloze mají hodnotu 1.19 , podle doporučení v [19].

V následujících odstavcích jsou prezentovány výsledky jednotlivých numerických simulací. V prvním odstavci jsou prezentovány výsledky simulace pádu kapky tekutiny na pevné dno. V dalším odstavci následuje pád kapky tekutiny na volnou hladinu. Poté je uveden testovací případ popisující průběh protržení vodní hráze. Na závěr jsou uvedeny numerické výsledky pro případ gravitačního lití zvoleného materiálu do formy.

5.1 Pád kapky na pevné dno

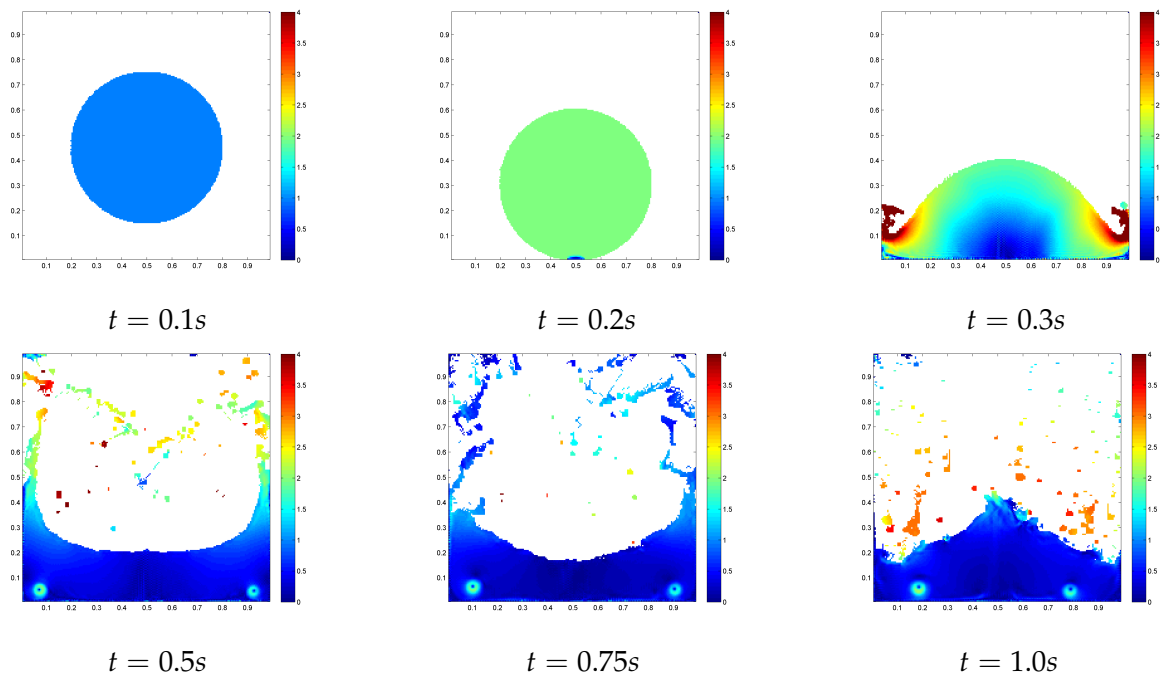
Na obr. 5.1, 5.3 a 5.5 jsou zobrazeny výsledky numerické simulace pádu kapky tekutiny s nulovou počáteční rychlostí vlivem působení gravitace na pevné, dokonale rovné dno. Konkrétně je uveden časový vývoj makroskopické rychlosti tekutiny v $[m/s]$.

Modelovaná kapka je kruhového tvaru o poloměru $0.3m$ a padá na pevné rovné dno z výšky $0.5m$, měřeno od středu kapky. Fyzikální rozměry výpočetní oblasti byly zvoleny $1m \times 1m$. Velikost výpočetní oblasti v lattice Boltzmanovo systému je 200×200 mřížkových jednotek.

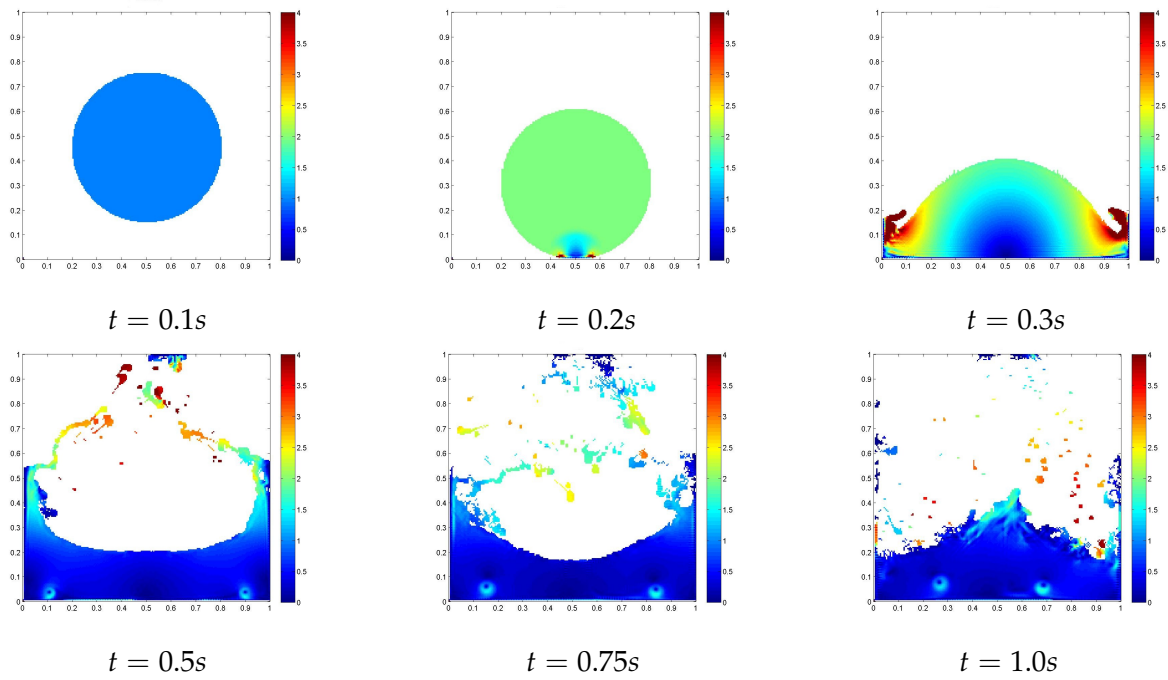
Úloha byla provedena pro tři různé vazké tekutiny, a to pro vodu, glycerol a sklo. Parametry vody jsou dynamická viskozita $\eta = 0.001 Pa \cdot s$ a hustota $\rho = 1000 kg/m^3$ při teplotě $T = 20^\circ C$. Hodnoty fyzikálních veličin pro glycerol jsou $\eta = 1.48 Pa \cdot s$ a $\rho = 1260 kg/m^3$ při teplotě $T = 20^\circ C$. Velikosti parametrů skla jsou $\eta = 25 Pa \cdot s$ a $\rho = 2500 kg/m^3$ při teplotě $T = 1000^\circ C$.

U každého obrázku je vždy uvedena velikost relaxačního parametru τ , který závisí na kinematické viskozitě modelované tekutiny podle výrazu (2.44) a na Reynoldsovu číslu podle vztahu (2.47), hodnota Reynoldsova čísla Re a reálný čas t .

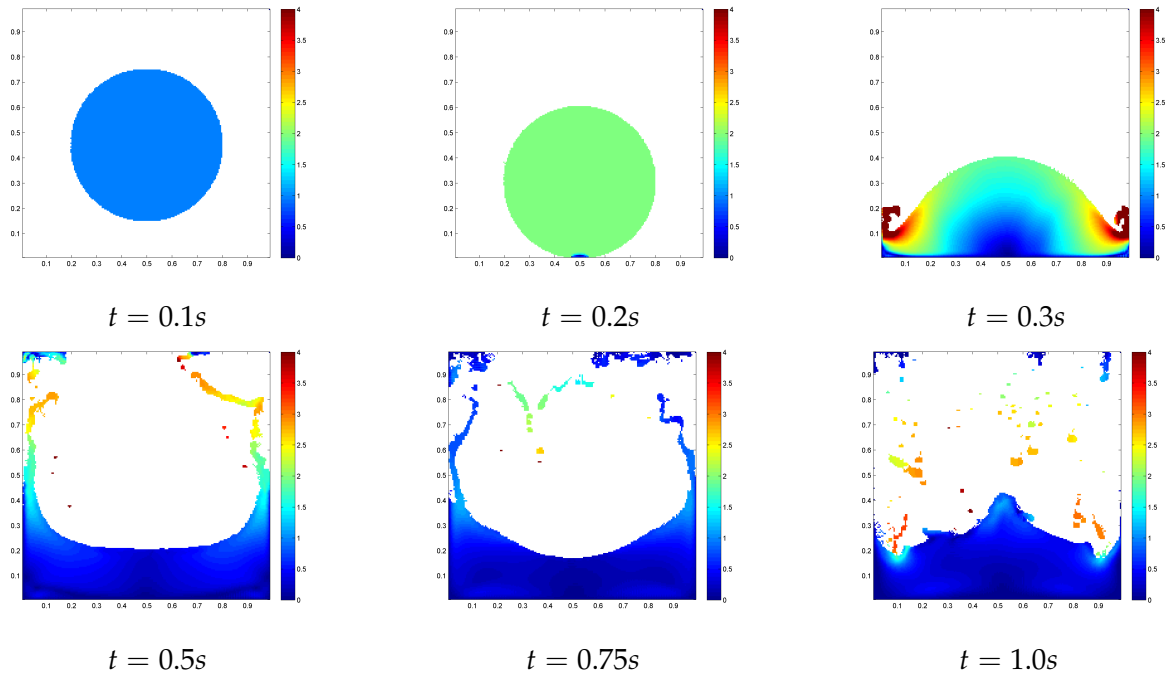
Na obr. 5.2, 5.4 a 5.6 jsou pro srovnání uvedeny výsledky simulace stejné úlohy toutéž metodou, ale nezávisle implementovanou vedoucím této práce ing. Bublíkem. Z uvedených obrázků je zřejmá dobrá shoda výsledků. Menší rozdíly ve výsledcích jsou způsobeny rozdílnou implementací lattice Boltzmannovy metody.



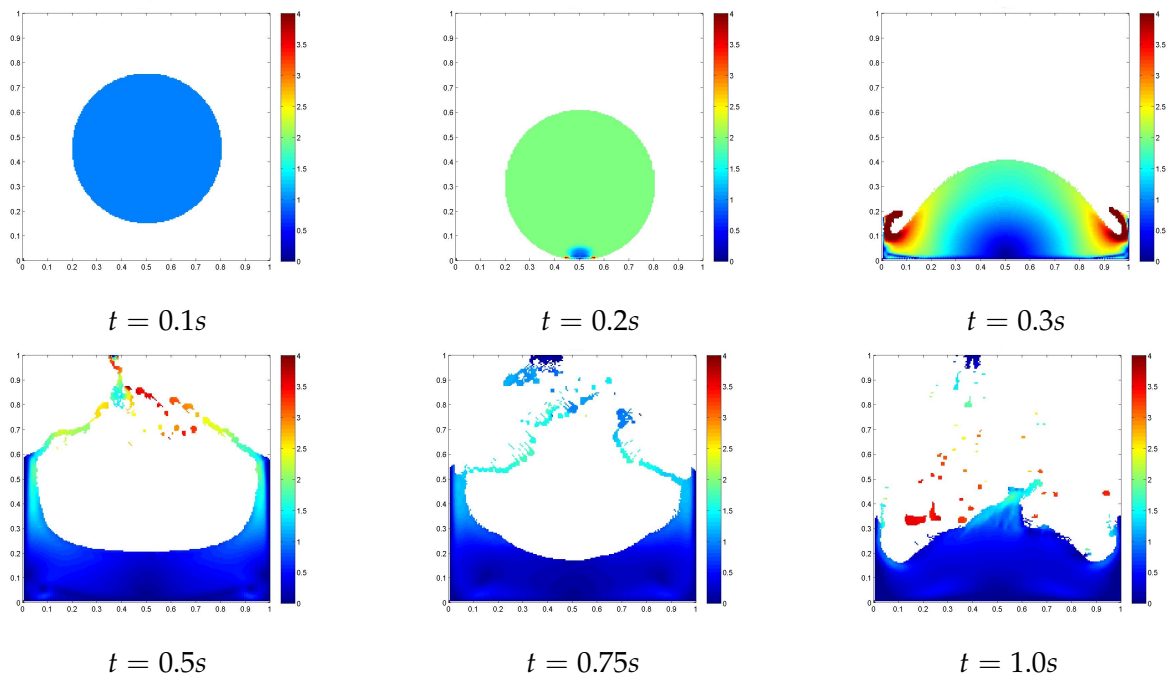
Obrázek 5.1: Voda: $\tau = 0.500015$, $Re = 4 \cdot 10^6$.



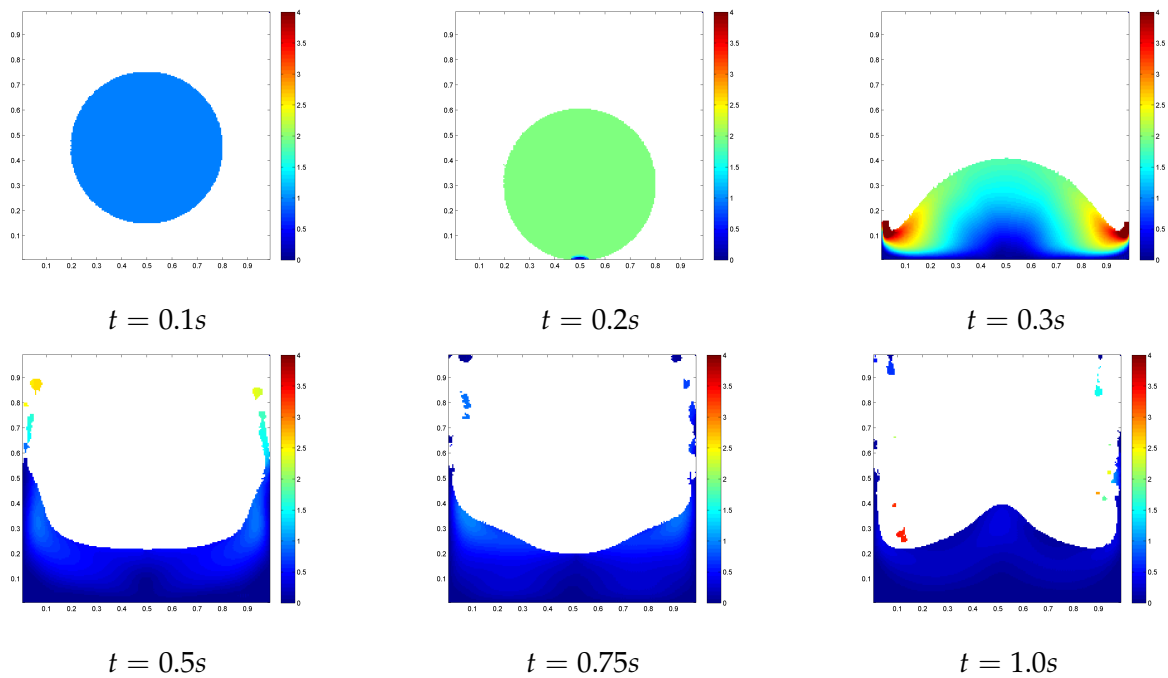
Obrázek 5.2: Výsledky simulace pádu vodní kapky poskytnuté panem ing. Bublíkem.



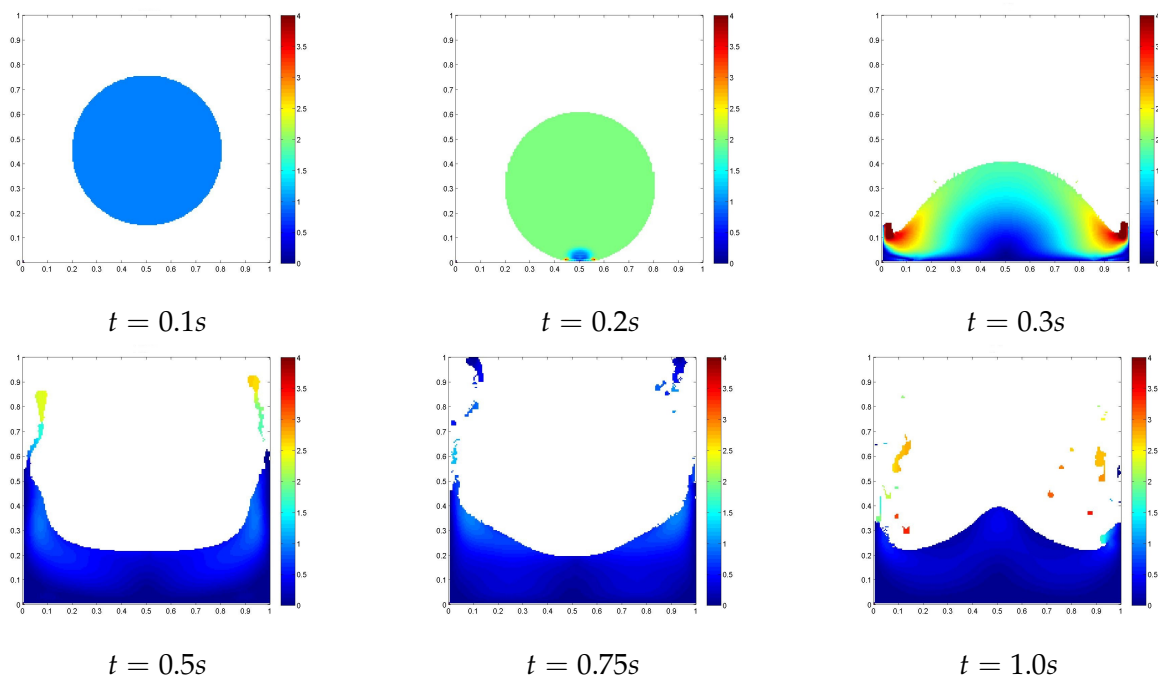
Obrázek 5.3: Glycerol: $\tau = 0.5176$, $Re = 3405$.



Obrázek 5.4: Záznam simulace pádu kapky glycerolu na zem provedené panem ing. Bublíkem.



Obrázek 5.5: Sklo: $\tau = 0.65$, $Re = 400$.



Obrázek 5.6: Výsledky modelu pádu kapky skla vytvořeného panem ing. Bublíkem.

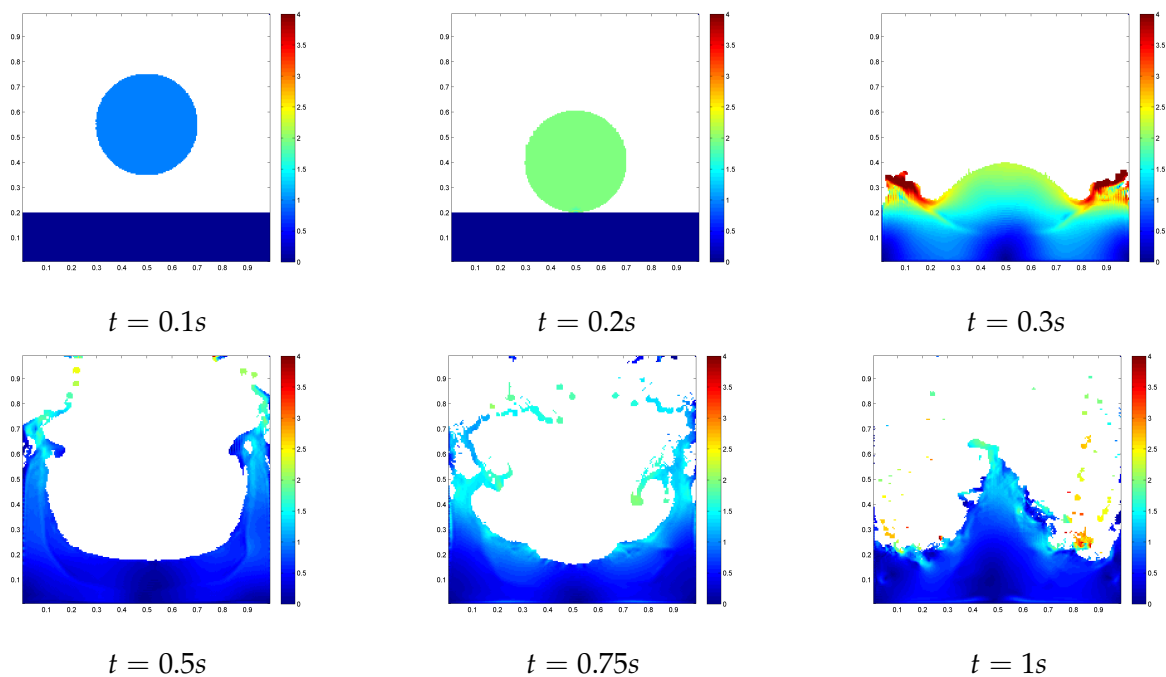
5.2 Pád kapky na volnou hladinu

Na obr. 5.7, 5.8 a 5.9 je uveden časový vývoj rychlosti padající kapky tekutiny v $[m/s]$, pohybující se pouze vlivem gravitačního zrychlení, na volnou hladinu.

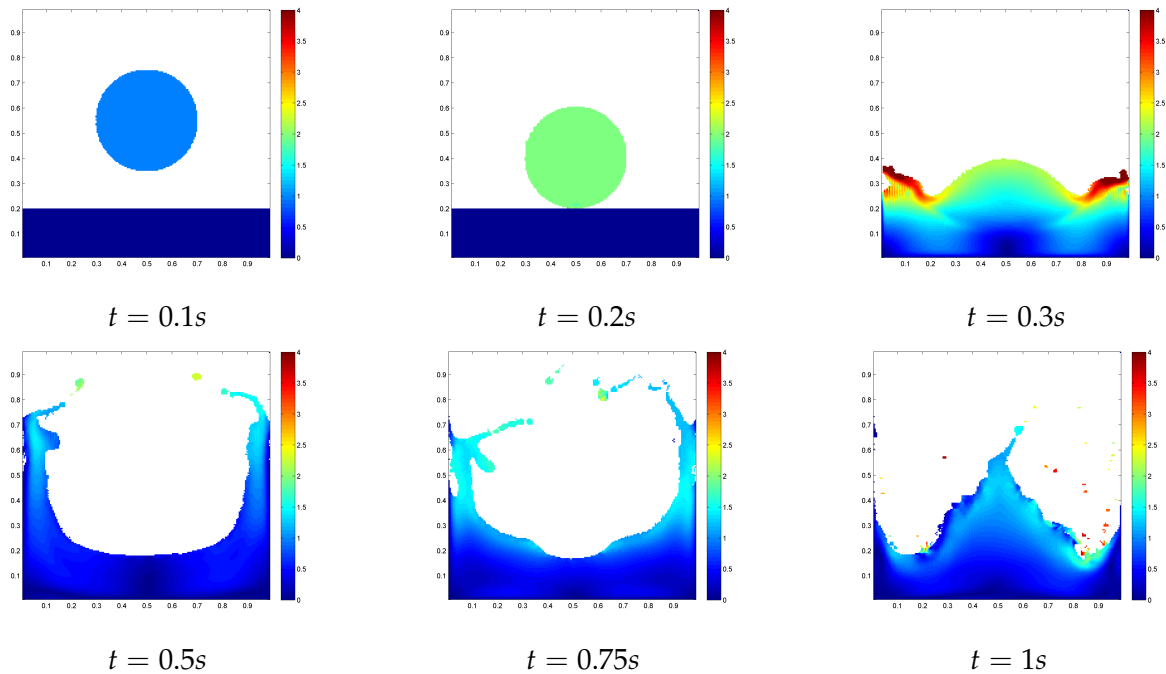
Kapka kruhového tvaru o poloměru $0.2m$ padá na volnou hladinu vysokou $0.2m$ z výšky $0.6m$, měřeno od středu kruhu ke dnu nádoby. Rozměry výpočetní oblasti byly zvoleny $1m \times 1m$ ve fyzikálním systému a 200×200 mřížkových jednotek v lattice Boltzmanovo systému.

Simulace byla realizována pro tři druhy tekutiny s různou vazkostí - vodu, glycerol a sklo. Voda byla zadána pomocí dynamické viskozity $\eta = 10^{-3} Pa \cdot s$ a hustoty $\rho = 1000 kg/m^3$ při teplotě $T = 20^\circ C$. Hodnoty parametrů pro glycerol jsou $\eta = 1.48 Pa \cdot s$ a $\rho = 1260 kg/m^3$ při teplotě $T = 20^\circ C$. Sklo je určeno fyzikálními veličinami $\eta = 25 Pa \cdot s$ a $\rho = 2500 kg/m^3$ při teplotě $T = 1000^\circ C$.

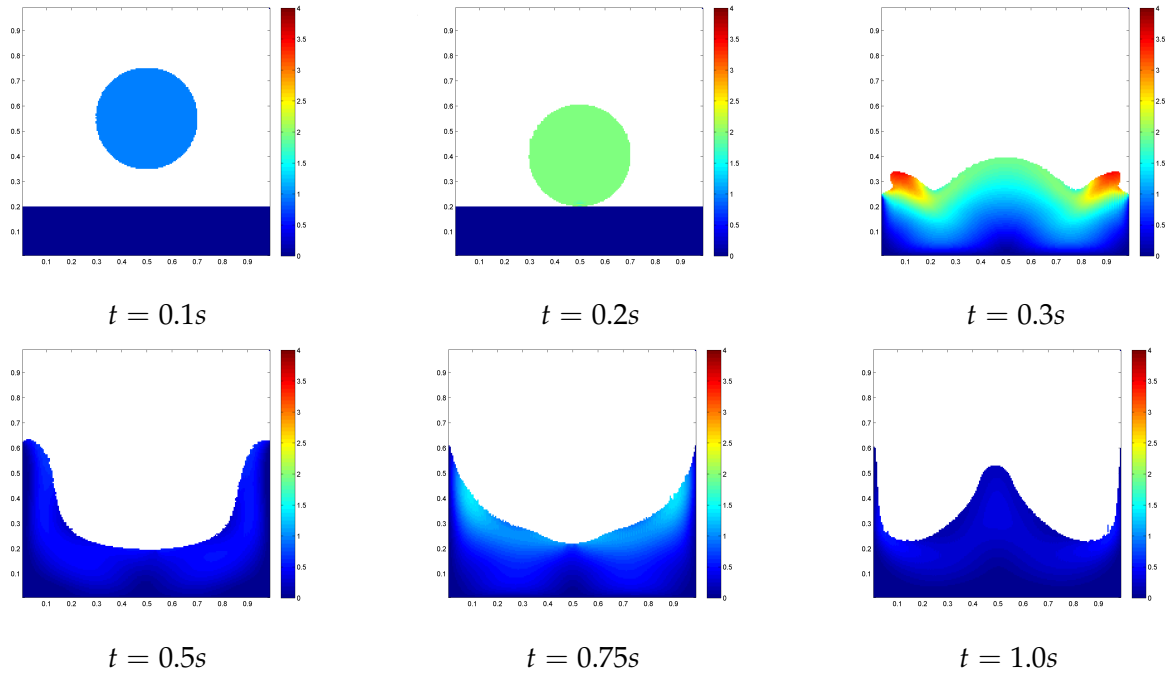
U jednotlivých obrázků jsou uvedeny hodnoty relaxačního parametru τ , Reynoldsova čísla Re a skutečného času t .



Obrázek 5.7: Voda: $\tau = 0.500015$, $Re = 4 \cdot 10^6$.



Obrázek 5.8: Glycerol: $\tau = 0.5176$, $Re = 3405.4$.

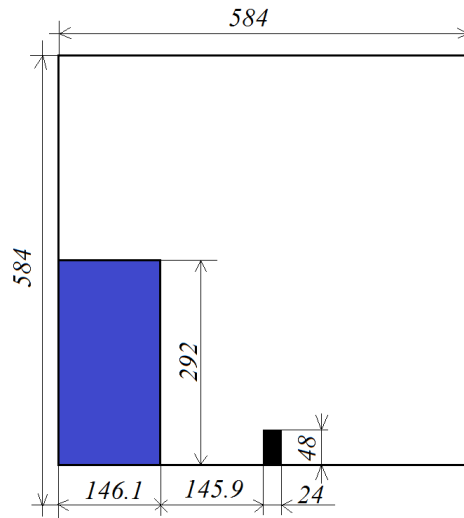
Obrázek 5.9: Sklo: $\tau = 0.65$, $Re = 400$.

5.3 Protržení vodní hráze

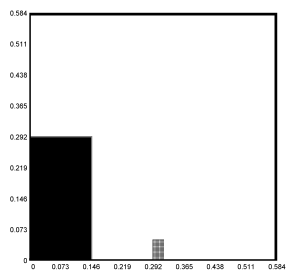
Na obr. 5.11 jsou zaznamenány výsledky modelování průběhu pohybu vody při náhlém protržení vodní hráze, pohybující se po rovné zemi s překážkou. Princip této úlohy je následující: je definována oblast ve tvaru obdélníka, viz obr. 5.10, která je zcela zaplněna vodou. V čase $t = 0$ s je odstraněna překážka po celé délce pravé strany hráze a objem vody se vlivem gravitace začne bortit. V tomto případě není zobrazen časový vývoj rychlosti tekutiny, ale jsou zde prezentovány výsledky časového vývoje pohybu tekutiny v podobě typů buněk. Černá barva označuje buňky zcela zaplněné vodou, šedá barva představuje rozhraní a prázdné buňky jsou zobrazeny bíle. Fyzikálními veličinami popisujícími vodu jsou dynamická viskozita $\eta = 10^{-3} Pa \cdot s$ a hustota $\rho = 1000 kg/m^3$ při teplotě $T = 20^\circ C$.

Výpočetní oblast modelu má velikost $0.584m \times 0.584m$ ve fyzikálním prostoru a 201×201 mřížkových jednotek v lattice Boltzmanovo systému. Tvar a rozměry vodní nádrže spolu s výpočetní oblastí jsou zobrazeny na obr. 5.10. Tento testovací případ byl uskutečněn pro relaxační parametr $\tau = 0.5000258$. Pod obr. 5.11 je uvedena rovněž velikost relaxačního parametru τ , Reynoldsova čísla Re a reálného času t .

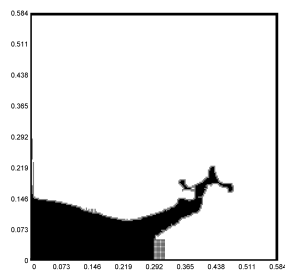
Na obr. 5.12 jsou pro srovnání uvedeny výsledky simulace stejné úlohy, ale použitím jiného algoritmu založeného na VOF metodě. Tyto výsledky byly převzaty z [2]. Při porovnání obr. 5.11 a 5.12 je zřejmá podobnost výsledků poskytnutými oběma numerickými metodami. Odchytky v řešení mohly být způsobeny např. vlivem povrchového napětí, které v lattice Boltzmannově metodě nebylo, narozdíl od VOF metody, uvažováno nebo rozdílnou jemností výpočtové sítě.



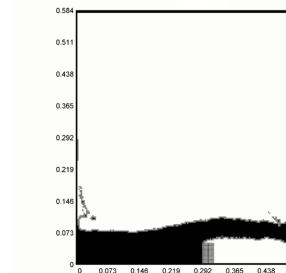
Obrázek 5.10: Parametry vodní hráze v [mm].



$t = 0s$

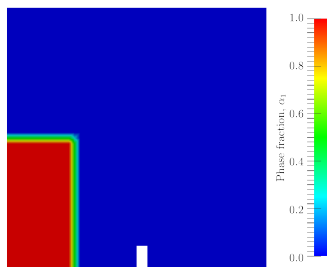


$t = 0.25s$

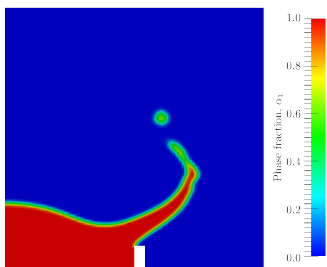


$t = 0.5s$

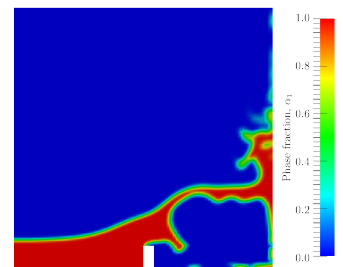
Obrázek 5.11: $\tau = 0.5000258$, $Re = 2336000$.



$t = 0s$



$t = 0.25s$



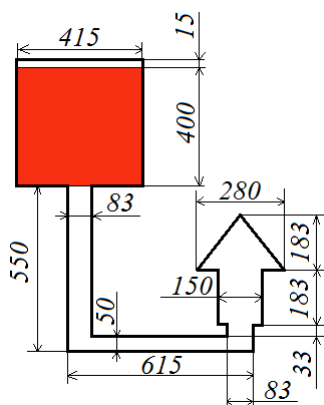
$t = 0.5s$

Obrázek 5.12: Výsledky podle [2]

5.4 Gravitační lití zvoleného materiálu do formy

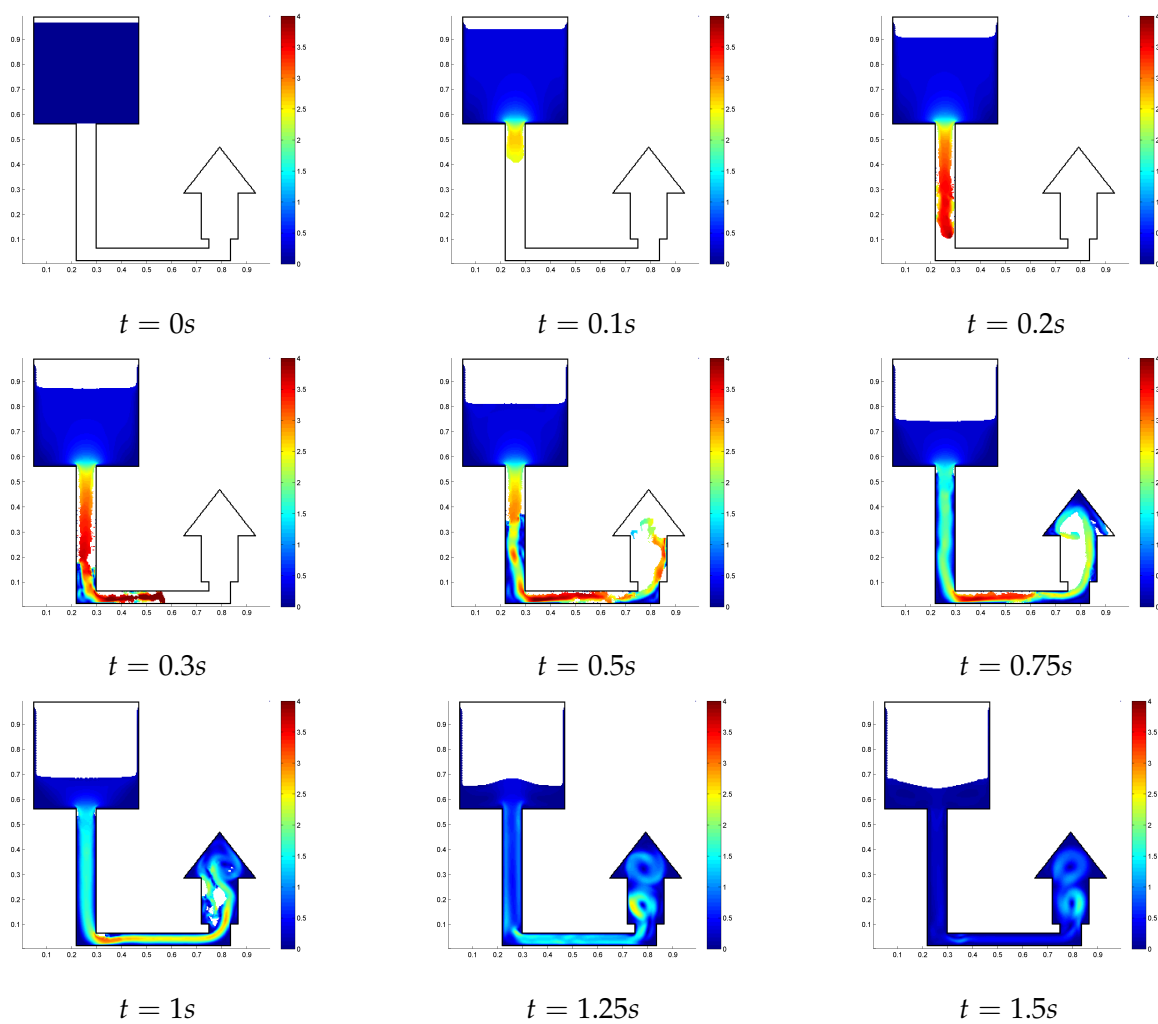
V tomto odstavci jsou na obr. 5.14 uvedeny výsledky případu gravitačního lití materiálu do formy. Je zde zobrazen časový vývoj rychlosti proudění v $[m/s]$. Modelovaným materiálem bylo v tomto případě roztavené železo, jehož charakteristickými parametry jsou dynamická viskozita $\eta = 1.5 \cdot 10^{-2} Pa \cdot s$ a hustota $\rho = 7500 kg/m^3$ při teplotě $T = 1550 ^\circ C$. Roztavené železo se pohybuje s nulovou počáteční rychlostí pouze vlivem gravitačního zrychlení g .

Geometrické parametry formy zvolené 2D výpočtové oblasti jsou uvedeny včetně rozměrů na obr. 5.13. Fyzikální rozměry výpočetní oblasti jsou $1m \times 1m$. V lattice Boltzmanovo systému má výpočetní oblast velikost 300×300 mřížkových jednotek. Tento případ byl numericky řešen pro relaxační čas $\tau = 0.5090$. Pod obr. 5.14 s výsledky simulace jsou uvedeny rovněž hodnoty použitého relaxačního parametru τ , Reynoldsova čísla Re a reálného času t .



Obrázek 5.13: Geometrie zvolené 2D výpočtové oblasti s uvažovanými rozměry v $[mm]$.

5.4. GRAVITAČNÍ LITÍ ZVOLENÉHO MATERIÁLU DO FORMY



Obrázek 5.14: $\tau = 0.5090$, $Re = 10000$.

Závěr

V této práci byl popsán princip lattice Boltzmannovy metody a její aplikace pro simulaci proudění tekutiny s volnou hladinou. Následně zde byly numericky řešeny čtyři problémy proudění tekutiny s volnou hladinou použitím lattice Boltzmannovy metody, a to pád kapky pro tři různé vazkých tekutin, nejprve na pevné rovné dno, poté na volnou hladinu, dále zborcení vodní nádrže a nakonec gravitační lití roztaveného železa do formy. Simulace padající kapky tekutiny byla provedena pro tři různé hodnoty Reynoldsova čísla, které nepřímo úměrně závisí na kinematické viskozitě tekutiny. Reynoldsovo číslo Re rozhoduje o typu proudění, zda se bude jednat o laminární, přechodové nebo turbulentní proudění. Re u modelu kapky skla mělo hodnotu 400, což představuje laminární proudění. Pro padající kapku glycerolu bylo $Re = 3405$. Typ proudění při simulaci pádu vodní kapky byl dán hodnotou $Re = 4 \cdot 10^6$, která již charakterizuje proudění turbulentní.

Numerická stabilita lattice Boltzmannovy metody závisí nejen na velikosti Reynoldsova čísla, ale také na hodnotě relaxačního parametru τ . Čím více se velikost relaxačního času τ blíží k hodnotě 0,5, tím je stabilita metody nižší. S rostoucím Reynoldsovým číslem klesá kinematická viskozita tekutiny v LB systému a zároveň klesá stabilita LB metody. Při příliš vysokém Reynoldsovu čísle přechází laminární proudění v proudění turbulentní, což způsobuje nestabilitu metody. Pro zvýšení numerické stability při vyšších hodnotách Reynoldsova čísla byl namísto SRT modelu aplikován MRT model s vhodně zvolenými prvky diagonální relaxační matice.

Průběh simulace pádu kapky na rovné dno nádoby byl porovnán s výsledky nezávisle vytvořeného programu ing. Bublíka, který využil stejnou metodu. Z obr. 5.1 až 5.6 je patrné, že oba programy poskytují velice podobné výsledky. Vzhledem k rozdílné implementaci LB metody ve výpočtovém prostředí MATLAB ale nelze očekávat úplně totožné řešení.

Testovací příklad protržení vodní hráze byl porovnán s výsledky vypočtenými jinou numerickou metodou, konkrétně VOF metodou, která je implementovaná ve výpočtovém softwaru OpenFOAM. Tyto výsledky byly převzaty z [2]. Při porovnání obr. 5.11 a 5.12 je zjevná podobnost výsledků poskytnutými oběma numerickými metodami. Vzniklé nesrovnalosti mohly být způsobeny např. vlivem povrchového napětí, které v lattice Boltzmannově metodě nebylo, narozdíl od VOF metody, uvažováno, nebo rozdílnou jemností výpočtové sítě. Jemnější síť poskytuje přesnější řešení, ale také časově náročnější výpočet.

Výhodou LB metody oproti jiným CFD řešičům, je především její výpočetní efektivita, jednoduchost implementace algoritmu a snadná paralelizace. Hodnoty jednotlivých bodů sítě jsou v každé iteraci aktualizovány najednou a k jejich výpočtu je potřeba znát pouze hodnoty sousedních bodů. Proto lze výpočet provádět na více procesorech najednou, nejvíce však na takovém počtu procesorů, kolik má výpočtová síť bodů. Díky charakteru metody,

kdy je pohyb tekutiny řešen přes kolize částic, lze metodu lehce rozšiřovat o různé fyzikální jevy (přenos tepla, vícefázové proudění včetně pohybu kapek a bublin) pouze úpravou kolizních procesů. Další výhodou lattice Boltzmannovy metody je její stabilita i pro vysoká Reynoldsova čísla díky použitému MRT modelu.

Naopak nevýhodou LB metody je rychlostní omezení v lattice Boltzmannovo systému. Aby byla metoda stabilní, neměla by rychlost překročit hodnotu 0.3, nejlépe by se měla pohybovat do hodnoty $c_s/2 = 0.289 lu/ts$. Také nižší viskozita modelované tekutiny znamená menší stabilitu metody, což se řeší aplikací MRT modelu, turbulentním modelem (např. LES model), zmenšením časového kroku nebo zjemněním výpočtové sítě.

Dalším možným pokračováním této práce může být rozšíření dvourozměrného modelu do 3D, zahrnutí vlivu teploty, zavedení turbulentního modelu či simulace vícefázového proudění.

Literatura

- [1] *Cellular Automatta*, <http://www.mathpages.com/home/kmath416/kmath416.htm>.
- [2] *The OpenFOAM Foundation*, <http://www.openfoam.org/docs/user/damBreak.php>.
- [3] P. L. Bhatnagar, E. P. Gross, and M. Krook, *A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems*, *Physical Review* **94** (1954), 511–525, APS.
- [4] S. Bogner, *Simulation of Free Surface Flows with the Lattice Boltzmann Method*, University Erlangen-Nuremberg, 2010.
- [5] H. Chen, S. Chen, and W. H. Matthaeus, *Recovery of the Navier-Stokes equations using a lattice-gas Boltzmann method*, *Physical Review A* **45** (1992), no. 8, R5339–R5342.
- [6] S. Chen and G. D. Doolen, *Lattice Boltzmann Method for Fluid Flow*, *Annual review of fluid mechanics* **30** (1998), 329–364, doi: 10.1146/annurev.fluid.30.1.329.
- [7] P. J. Dellar, *A priori derivation of lattice Boltzmann equations for rotating fluids*, Department of Applied Mathematics and Theoretical Physics, University of Cambridge, 2001.
- [8] D. d’Humières, I. Ginzburg, M. Krafczyk, P. Lallemand, and L.-S. Luo, *Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three dimensions*, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **360** (2002), 437–451.
- [9] U. Frisch, B. Hasslacher, and Y. Pomeau, *Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equations*, *Physical Review Letters* **56** (1986), 1505–1508.
- [10] D. Gerlach, G. Tomar, G. Biswas, and F. Durst, *Comparison of volume-of-fluid methods for surface tension-dominant two-phase flows*, *International Journal of Heat and Mass Transfer* **49** (2006), 740–754, Elsevier.
- [11] Z. Guo and T. S. Zhao, *Lattice Boltzmann model for incompressible flows through porous media*, *Physical Review E* **66** (2002), doi: 10.1103/PhysRevE.66.036304.
- [12] Z. Guo, C. Zheng, and B. Shi, *Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method*, *Physical Review E* **65** (2002), 046308.1–046308.6, DOI: 10.1103/PhysRevE.65.046308.
- [13] X. He and L.-S. Luo, *Lattice Boltzmann Model for the Incompressible Navier-Stokes Equation*, *Journal of Statistical Physics* **88** (1997).

- [14] M. Husáková, *Celulární automaty*, Znalostní technologie III, materiál pro podporu studia.
- [15] C. Körner, M. Thies, T. Hofmann, N. Thürey, and U. Rüde, *Lattice Boltzmann Model for Free Surface Flow for Modeling Foaming*, *Journal of Statistical Physics* **121** (2005), 179–196.
- [16] B. R. Kucinski, A. A. Afjeh, and R. C. Scherer, *On the application of the lattice Boltzmann method to the investigation of glottal flow*, *Journal of the Acoustical Society of America* **124** (2008), 523–534, doi: 10.1121/1.2924137.
- [17] M. E. Kutay, A. H. Aydilek, and E. Masad, *Laboratory validation of lattice Boltzmann method for modeling pore-scale flow in granular materials*, *Computers and Geotechnics* **33** (2006), 381–395, Elsevier.
- [18] A. Kuzmin, Z. L. Guo, and A. A. Mohamad, *Simultaneous incorporation of mass and force terms in the multi-relaxation-time framework for lattice Boltzmann schemes*, *Phil. Trans. R. Soc. A* **369** (2011), 2219–2227, doi: 10.1098/rsta.2011.0018.
- [19] P. Lallemand and L. S. Luo, *Theory of the lattice Boltzmann method: dispersion, dissipation, isotropy, Galilean invariance, and stability*, Tech. Report No. 2000-17, NASA/CR-2000-210103, Institute for Computer Applications in Science and Engineering, NASA Langley Research Center, 2000.
- [20] J. Latt, *Hydrodynamic limit of lattice Boltzmann equations*, Ph.D. thesis, Univ. Geneve, 2007.
- [21] ———, *Choice of units in lattice Boltzmann simulations*, 2008, <http://www.lbmmethod.org/legal>.
- [22] L. Lobovský, *Fluid-Structure Interaction by means of Smoothed Particle Hydrodynamics*, Ph.D. thesis, Západočeská univerzita v Plzni, 2009.
- [23] L.-S. Luo, *Lattice Boltzmann Methods for Computational Fluid Dynamics*, Institut für Computeranwendungen im Bauingenieurwesen (CAB), Technischen Universität Braunschweig, Germany, 2003.
- [24] G. McNamara and G. Zanetti, *Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata*, *Physical Review Letters* **61** (1988), 2332–2335, APS.
- [25] J. J. Monaghan, *Smoothed particle hydrodynamics*, *Reports on Progress in Physics* **68** (2005), no. 8, 1703–1759, doi:10.1088/0034-4885/68/8/R01.
- [26] S. Osher and P. R. Fedkiw, *Level Set Methods: An Overview and Recent Results*, *Journal of Computational Physics* **169** (2001), 463–502, Elsevier.
- [27] R. Pelánek, *Buněčné automaty*, prezentace.
- [28] Ch. Peng, *The Lattice Boltzmann Method for Fluid Dynamics: Theory and Applications*, Master's thesis, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2011.
- [29] P. C. Philippi, *Lectures in the Lattice Boltzmann Method*, Mechanical Engineering Department.
- [30] J. W. Rider and D. B. Kothe, *Reconstructing Volume Tracking*, *Journal of Computational Physics* **141** (1998), 112–152, Elsevier.

- [31] U. Ruede and D. Bartuschat, *Introduction to the Lattice Boltzmann Method*, 10th Indo-German Winter Academy, 2011.
- [32] S. Succi, *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond*, Oxford University Press, 2001.
- [33] M. Sukop, C. Thorne, and T. Daniel Jr., *Lattice Boltzmann Modeling – An Introduction for Geoscientists and Engineers*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006, 2007.
- [34] N. Thürey, *Physically based Animation of Free Surface Flows with the Lattice Boltzmann Method*, Ph.D. thesis, Der Technische Fakultät der Universität Erlangen-Nürnberg, 2007.
- [35] Z. Zhang and Q. Chen, *Comparison of the Eulerian and Lagrangian methods for predicting particle transport in enclosed spaces*, *Atmospheric Environment* **41** (2007), 5236–5248, Elsevier.
- [36] Y. Zhao, *Lattice Boltzmann Method*, VisWeek08, 2008.
- [37] Q. Zou and X. He, *On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model*, *Physics of Fluids* **9** (1997), 1591–1598.