

Západočeská univerzita v Plzni
Fakulta aplikovaných věd
Katedra mechaniky



DIPLOMOVÁ PRÁCE
Modelování vícefázového proudění
reálné tekutiny pomocí lattice
Boltzmannovy metody

PLZEŇ, 2016

Bc. Iveta Študentová

Prohlášení

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

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

V Plzni dne 30. května 2016

.....
vlastnoruční podpis

Poděkování

Chtěla bych poděkovat panu Ing. Ondřeji Bublíkovi, Ph.D, vedoucímu mé diplomové práce, za jeho cenné rady, trpělivost a čas, který mi během vedení práce věnoval. Rovněž bych ráda poděkovala panu Doc. Ing. Janu Vimmrovi, Ph.D, konzultantovi mé diplomové práce, za jeho vstřícnost a odborný dohled během psaní této práce.

Abstrakt

Cílem této práce byla tvorba stabilního numerického 2D modelu vícefázového proudění s konstantní teplotou použitím lattice Boltzmannovy metody. Model byl následně implementován ve výpočtovém prostředí Matlab. Vyvinutý program byl aplikován na tři příklady, konkrétně na testovací příklad na působení povrchového napětí na tekutinu, model stoupající bubliny vlivem vztlakové síly a úlohu Rayleighovy-Taylorovy nestability.

Klíčová slova: lattice Boltzmannova metoda, vícefázové proudění, MRT model, BGK model, Cahn-Hilliardova rovnice, povrchové napětí, Rayleighova-Taylorova nestabilita

Abstract

The goal of this work was a development of a stable numerical model of athermal multiphase flow using lattice Boltzmann method. The model was subsequently implemented in computational software Matlab. The developed program was applied on three problems, namely a problem testing the effect of surface tension on a fluid, a model of a rising bubble and a problem of Rayleigh-Taylor instability.

Keywords: lattice Boltzmann method, multiphase flow, MRT model, BGK model, Cahn-Hilliard equation, surface tension, Rayleigh-Taylor instability

Obsah

Úvod	1
1 Historický vývoj lattice Boltzmannovy metody	4
1.1 Vývoj lattice Boltzmannovy metody z buněčných automatů	4
1.2 Odvození diskrétní lattice Boltzmannovy rovnice ze spojitě Boltzmannovy rovnice	5
1.3 Metody pro výpočet vícefázového proudění	6
1.3.1 Lattice Boltzmannovy modely pro vícefázové proudění	6
2 Lattice Boltzmannova metoda	8
2.1 Princip lattice Boltzmannovy metody	8
2.2 Okrajové podmínky	12
2.2.1 Periodické okrajové podmínky	13
2.2.2 „Bounce-back“ („No-slip“) okrajové podmínky	13
2.3 Vyjádření makroskopických veličin	13
2.4 Převod mezi fyzikálním a lattice Boltzmannovým systémem	14
2.4.1 Fyzikální systém	14
2.4.2 Bezrozměrný systém	15
2.4.3 Lattice Boltzmannův systém	15
2.4.4 Zpětný převod z lattice Boltzmannova systému do fyzikálního systému	16
2.4.5 Vyjádření relaxačního parametru	16
2.5 MRT model	17
2.6 Algoritmus pro implementaci lattice Boltzmannovy metody	19
3 Lattice Boltzmannova metoda pro modelování vícefázové tekutiny	21
3.1 Teoretický popis metody	21
3.1.1 Cahn-Hilliardova rovnice	22
3.1.2 Lattice Boltzmannova rovnice	24

3.1.3	Poissonova rovnice	25
3.1.4	Korekce rychlosti	26
3.2	Algoritmus pro implementaci modelu vícefázového proudění	27
4	Vyhodnocení a diskuze dosažených numerických výsledků	30
4.1	Působení povrchového napětí	30
4.2	Rayleighova-Taylorova nestabilita	31
4.2.1	Re = 256	33
4.2.2	Re = 2048	33
4.3	Působení vztlakové síly na bublinu	33
	Závěr	42
	Literatura	44

Úvod

Modelování proudění tekutin má v praxi velké uplatnění. Hlavní výhodou numerických výpočtů a simulací proudění je ušetření finančních prostředků za reálné experimenty, které by bylo jinak potřeba provádět v průběhu vývoje výrobků, například při výpočtu obtékání těles s cílem navržení optimálního tvaru s požadovanou velikostí odporu vzduchu vyjádřeným koeficientem odporu (u karoserií aut či jiných dopravních prostředků). Dalším příkladem je zjišťování proudění vzduchu uvnitř výrobků (klimatizace, fény, apod.).

Modelování proudění tekutin je také potřebné v případech, kdy reálné experimenty nelze provést, například při zjišťování chování vody v řekách při dešti, vylévání vody z koryt při záplavách a tím určování rizikových záplavových oblastí.

Lze také zmínit využití modelování proudění ve filmovém průmyslu. Vzhledem k stále se zvyšující náročnosti diváků, musí být animace co nejméně reálné.

S vícefázovým prouděním se lze setkat v přírodě v podobě deště, sněhu, mlhy, sesuvů půdy, vln na moři apod. Z aplikací v průmyslu lze zmínit například lití či vstřikování materiálů do forem nebo rozprašování oleje. V petrochemickém průmyslu má využití modelování třífázového proudění ropa-voda-vzduch, se kterým se lze setkat v podobě ropných skvrn na moři.

Ve výpočtové dynamice tekutin (CFD, z angl. „Computational Fluid dynamics“) existuje mnoho numerických metod k výpočtu proudění tekutin. Tyto metody využívají makroskopického, mezoskopického nebo mikroskopického modelu proudění.

V makroskopickém modelu jsou přímo počítány Navier-Stokesovy rovnice a rovnice kontinuity, které pro nestlačitelné proudění mají tvar [37]

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f}, \quad (0.0.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (0.0.2)$$

kde i -tá složka druhého členu na levé straně rovnice (0.0.1) se vyjádří následovně

$$[(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]_i = \sum_{j=1}^3 u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j}. \quad (0.0.3)$$

Veličiny ve výše uvedených rovnicích vyjadřují hustotu proudící tekutiny ρ , okamžitou rychlost proudění \mathbf{u} , tlak p , kinematickou viskozitu tekutiny ν , čas t a vnější sílu \mathbf{f} . Tento model proudění je založen na Eulerově popisu proudění. To znamená, že sledovaná tekutina je chápána jako kontinuum, na kterém se uplatňují zákony zachování hybnosti, hmotnosti a energie. Výpočtová oblast je rozdělena na pevnou síť, kterou sledovaná tekutina proudí. V pevně určených bodech jsou pak vyhodnocovány makroskopické veličiny, jako rychlost nebo hustota tekutiny.

Mikroskopický model proudění vychází z Langrangeova přístupu, tj. pohyb tekutiny je počítán z hlediska jednotlivých pohybujících se částic. Na každou sledovanou částici tekutiny jsou aplikovány Newtonovy pohybové zákony. Diskretizační výpočtová síť je pevně spojena s proudící tekutinou a makroskopické veličiny jsou vyhodnocovány v pohybujících se bodech.

Mezoskopický model proudění sleduje, stejně jako mikroskopický model, pohyb částic tekutiny. Na rozdíl od něj, jsou zde ale částice popsány pravděpodobnostními funkcemi, na které se uplatňují Newtonovy pohybové zákony.

Ze základních metod založených na diskretizaci Navier-Stokesovy rovnice lze zmínit například metodu konečných diferencí [45], metodu konečných objemů [52] nebo metodu konečných prvků [13]. Nejznámějšími metodami pro modelování vícefázového proudění jsou například metoda částečných objemů (VOF, z angl. „Volume-of-Fluid Method“) [19], metoda modelování šíření rozhraní (FT, z angl. „Front-Tracking Method“) [10] a metoda hladin (LS, z angl. „Level-Set Method“) [34]. Mezi metody využívající mezoskopický model proudění patří lattice Boltzmannova metoda (LBM) [46], která bude dále v této práci popsána.

Lattice Boltzmannova metoda je poměrně nová metoda sloužící k numerickému výpočtu dynamiky tekutin. Princip této metody spočívá ve speciální diskretizaci Boltzmannovy rovnice, která se skládá z diskretizace prostoru, rychlostního prostoru a času. Spojitý prostor je diskretizován na pravidelnou výpočtovou mřížku, rychlostní prostor je nahrazen soubory rychlostí s konečným počtem směrů rychlostních vektorů a spojitý čas je rozdělen na konečný počet časových kroků. Neuspořádaně se pohybující částice tekutiny jsou nahrazeny konečným počtem distribučních funkcí, které se pohybují jen v určitých směrech po výpočtové mřížce. Distribuční funkce $f(\mathbf{x}, \mathbf{e}, t)$ vyjadřuje pravděpodobnost výskytu částic v určitém místě \mathbf{x} , pohybující se rychlostí \mathbf{e} v čase t . Popis pohybu částic tekutiny v lattice Boltzmannově metodě vychází z Boltzmannovy rovnice [32]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{e} \cdot \nabla f = \Omega(f), \quad (0.0.4)$$

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

Vícefázovým prouděním bude v následujícím textu rozuměno proudění dvou či více nemísitelných tekutin. Lze uvažovat jednosložkové a vícesložkové vícefázové proudění. Jednosložkovým vícefázovým prouděním se rozumí např. pohyb vody a vodní páry. Vícesložkové proudění je např. voda a olej. Poměr hustot dvou sousedících proudících tekutin je jedním z faktorů, které ovlivňují stabilitu metody. Pro nízký poměr, např. 1 : 10, je metoda stabilnější než pro vysoký poměr hustot tekutin, kterým je např. 1 : 1000 pro vodu-vzduch.

Mezi modelovanými tekutinami se nachází hranice dělicí každé dvě tekutiny zvaná rozhraní. Pro výpočet pohybu rozhraní lze použít dva typy metod - metodu difúzního rozhraní (DI, z angl. „Diffuse-Interface Method“) [31] a metodu sledování rozhraní (IT, z angl. „Interface-Tracking Method“) [51]. Metoda difúzního rozhraní uvažuje jako rozhraní tenkou vrstvu mezi dvěma tekutinami obsahující obě dvě tekutiny, zatímco metoda sledování rozhraní modeluje přímo přesnou linii dělicí modelované tekutiny.

Existuje mnoho různých lattice Boltzmannových modelů, které popisují vícefázové proudění. Na metodě sledování rozhraní jsou založeny například VOF metoda, LS metoda nebo FT metoda. V této práci bude popsán lattice Boltzmannův model vícefázového proudění vycházející z modelu prezentovaného v práci [4], který je založen na volno-energetickém modelu upraveného Inamurem [22] a využívající metodu difúzního rozhraní.

Hlavním cílem této diplomové práce je vytvoření stabilního numerického algoritmu popisujícího pohyb dvou tekutin o různé vazkosti a hustotě, nejlépe pro poměr hustot 1:1000, který je založen na Boltzmannově rovnici, a implementace tohoto algoritmu ve výpočtovém prostředí Matlab. Vyvinutý software je následně aplikován na několik příkladů. Nejprve je ověřen vliv povrchového napětí na kapalinu modelem tekutiny ve tvaru čtverce, ze které se vlivem povrchového napětí postupně stane kruh. Následně je počítána úloha Rayleighovy-Taylorovy nestability. Na závěr je modelována bublina v kapalině, která vlivem vztlakové síly stoupá vzhůru.

Předložená práce je rozčleněna do čtyř kapitol. První kapitola popisuje historický vývoj nejprve obecné lattice Boltzmannovy metody a následně vývoj LBM pro modelování vícefázového proudění. V druhé kapitole je popsán princip LBM, použité okrajové podmínky a algoritmus pro implementaci výše zmíněné metody. Třetí kapitola se zabývá úpravou LBM pro výpočet pohybu vícefázového proudění a dále je zde vysvětlen algoritmus pro implementaci upraveného modelu v prostředí Matlab. Poslední kapitola obsahuje aplikaci LBM pro vícefázové proudění na testovacích příkladech, viz odstavec výše, a vyhodnocení dosažených výsledků.

Kapitola 1

Historický vývoj lattice Boltzmannovy metody

Lattice Boltzmannovu metodu lze získat dvěma způsoby. Tato metoda se vyvinula z buněčných automatů, ale lze ji také odvodit diskretizací spojité Boltzmannovy rovnice. V následující kapitole bude nejprve popsán vývoj LBM z buněčných automatů a následně bude naznačeno odvození LBM ze spojité Boltzmannovy rovnice. Na závěr kapitoly jsou uvedeny příklady metod pro výpočet vícefázového proudění a některé typy lattice Boltzmannových modelů pro simulaci vícefázového proudění.

1.1 Vývoj lattice Boltzmannovy metody z buněčných automatů

Buněčné automaty (CA, z angl. „Cellular Automata“) byly vymyšleny ve 40. letech 20. století Stanislawem Ulamem a Johnem von Neumannem. Model CA se skládá z buněk uspořádaných do mřížky. Každou buňku charakterizuje její stav, v nejjednodušším případě buňka může mít dva stavy – 0 nebo 1, neboli živá nebo neživá („on“ - „off“). Každá buňka má zadefinováno své okolí, které na ni působí. Podle určitých pravidel mění jednotlivé buňky v mřížce v každém časovém kroku své stavy. Buňky vytváří v mřížce obrazce. Toto chování napodobuje evoluční vývoj a biologickou reprodukci [1, 2]. CA mají několik nedostatků: problém se zachováním některých veličin, problém s propagací informací v CA kvůli některým pravidlům, nemá vratné změny pravidel kvůli jednosměrnosti pravidel (problém při uplatnění některých pojmů ze statistické mechaniky) [53].

V roce 1986 navrhli Uriel Frisch, Brosl Hasslacher, Yves Pomeau a Stephen Wolfram mřížkový buněčný automat (LGCA, z angl. „Lattice Gas (Cellular) Automaton“) [12]. Tento model vychází z CA a odstraňuje některé jeho nedostatky. Vyhodnocení hodnot buněk v jednotlivých časových iteracích probíhá ve dvou krocích – kolize a propagace. Během

1.2. ODVOZENÍ DISKRÉTNÍ LATTICE BOLTZMANNOVY ROVNICE ZE SPOJITÉ BOLTZMANNOVY ROVNICE

kolizního kroku probíhá změna stavů buněk. V propagačním kroku jsou tyto nové hodnoty šířeny do přilehlých buněk. Tímto je, na rozdíl od CA, zajištěna propagace informací.

Prvním LGCA byl tzv. HPP model navržený roku 1973 autory Hardym, de Pazzisem a Pomeauem. V tomto dvourozměrném modelu byly zavedeny tzv. mřížkové rychlosti se směry danými jednotkovými mřížkovými vektory směřujícími z určité buňky do sousedních buněk. V každé buňce se může nacházet nejvýše jedna částice. Toto pravidlo se nazývá Pauliho princip a dodržují jej všechny LGCA. Během kolizního kroku je zachována hmotnost i hybnost [53]. Ovšem LGCA má také nedostatky, například statistický šum a závislost na Booleanovských proměnných, což ztěžovalo ladění parametrů, dále explicitní závislost tlaku na rychlosti nebo funkčnost jen pro nízké Reynoldsovo číslo.

Roku 1988 McNamara a Zanetti [33] nahradili částice LGCA diskrétními distribučními funkcemi. Tím byl odstraněn nežádoucí statistický šum.

V roce 1989 byl Higuerem a Jiménezem zaveden linearizovaný kolizní operátor [18, 53], který byl poté nahrazen jednoduchým relaxačním časem, což vedlo ke vzniku Bhatnagara, Grossova a Krookova (BGK) modelu [5]. BGK model byl využit například Qianem a kol. v roce 1992 [38] nebo Koelmanem v roce 1991 [23]. Díky mřížkovému BGK (LBGK, z angl. „Lattice BGK“) modelu již není kolizní krok vyjádřen explicitně [53].

V současné době se nejvíce používají vícerychlostní LBGK modely. Co se týče vícefázového proudění, tak se stále používají modely s komplexnějšími kolizními operátory [40, 53].

1.2 Odvození diskrétní lattice Boltzmannovy rovnice ze spojité Boltzmannovy rovnice

Boltzmannova rovnice při zanedbání vnějších sil má tvar [53]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{e} \cdot \nabla f = \Omega, \quad (1.2.1)$$

kde Ω je kolizní člen, který pro BGK aproximaci modelu má tvar

$$\Omega = -\frac{1}{\tau} (f - f^{eq}), \quad (1.2.2)$$

kde f , resp. f^{eq} , je nerovnovážná, resp. rovnovážná, distribuční funkce. Distribuční funkce jsou funkcemi prostoru \mathbf{x} , rychlosti \mathbf{e} a času t . Diskretizace rychlostního prostoru je provedena zavedením množiny rychlostí \mathbf{e}_α , která je přidělena každé částici tekutiny. Počet vektorů v jedné množině rychlostí odpovídá počtu distribučních funkcí přiřazených jedné

částici f_α . Boltzmannova rovnice má pak tvar

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla f_\alpha = -\frac{1}{\tau} (f_\alpha - f_\alpha^{eq}). \quad (1.2.3)$$

Dalším krokem je převedení rovnice (1.2.3) do bezrozměrného tvaru zavedením referenční délky, ref. rychlosti a ref. času. Po určitých úpravách, viz [53], je vyjádřena výsledná diskrétní mřížková Boltzmannova rovnice

$$F_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) - F_\alpha(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} (F_\alpha - F_\alpha^{eq}), \quad (1.2.4)$$

kde Δt je diskrétní časový krok, F_i , resp. F_i^{eq} , jsou diskrétní distribuční funkce a \mathbf{e}_α je diskrétní mikroskopická rychlost. Indexy α vyjadřují směry distribučních funkcí, resp. vektorů rychlostí [53].

1.3 Metody pro výpočet vícefázového proudění

Pro modelování vícefázového proudění existuje mnoho různých metod. Z těch nejznámějších makroskopických numerických metod lze zmínit například FT metodu, VOF metodu nebo LS metodu [42, 21].

Výhody LBM dle [7] jsou například:

- nemusí se řešit Navier-Stokesovy rovnice, protože lattice Boltzmannova rovnice popisující pohyb tekutiny v LBM nahrazuje řešení Navier-Stokesovy rovnice;
- při jednofázovém proudění není nutné řešit Poissonovu rovnici pro výpočet tlaku (znamená rychlejší výpočet);
- snadná paralelizace metody
- a snadné rozšíření LBM o různé fyzikální jevy pouhou modifikací kolizního procesu díky charakteru metody.

1.3.1 Lattice Boltzmannovy modely pro vícefázové proudění

V následujících odstavcích jsou stručně popsány některé z lattice Boltzmannových modelů, které slouží k výpočtu pohybu vícefázového proudění tekutin. Mezi LB modely patří například metoda barevného gradientu (CG, z angl. „Colour-Gradient Method“), Shanův-Chenův model, volno-energetický model a Heův-Chenův-Zhangův IT model.

CG model byl navržen Gunstenstenem v roce 1991 [14]. Tento model je založen na Rothmanovu-Kellerovu (RK) vícefázovém mřížkovém modelu plynu (LG, z angl.

„Lattice Gas“) dle Rothmana a Kellera z roku 1988 [39]. V tomto modelu jsou zavedeny dvě barvy pro dvě tekutiny popsané dvěma distribučními funkcemi.

Roku 1993 byl Shanem a Chenem vymyšlen Shanův-Chenův model [43, 44]. V tomto modelu byly zavedeny přitažlivé, resp. odpuzivé, síly tekutin mezi jednotlivými body výpočtové sítě, které způsobují fázovou separaci. Model poskytuje dobré výsledky pro vícefázové proudění s poměrem hustot do 1 : 10. Vyšší poměr hustot vede k numerické nestabilitě modelu. Numerickou stabilitu lze zvýšit zavedením modelu s vícenásobným relaxačním časem (MRT, z angl. „Multiple Relaxation Time“) do Shan-Chenova modelu (Yu a Fan, 2010 [55]).

Volno-energetický model navrhli Swift a kol. v letech 1995-1996 [50, 49]. Problém modelu byl, že viskózní členy Navier-Stokesových rovnic nebyly Galileovskými invariantní. Galileovská invariance obecně znamená, že pokud existuje nějaká funkce $A(u)$, kde u je rychlost, pak platí, že $A(u) = A(u + U)$, kde U je konstantní rychlost [21]. Holdych a kol. [20] tuto invariantnost roku 1998 odstranili do $O(u^2)$, což již vyhovuje LBM. Roku 2004 upravili Inamuro a kol. [22] Swiftův model tak, že bylo dosaženo vysokého podílu hustot modelovaných tekutin.

V roce 1999 vymysleli He a kol. Heův-Chenův-Zhangův IT model [17]. V tomto modelu se řeší LBM Navier-Stokesovy rovnice a Cahn-Hilliardovy rovnice. Pohyb tekutin popisují dvě distribuční funkce a dvě odpovídající lattice Boltzmannovy rovnice [21]. Z této metody vychází další modely, které jsou schopny simulovat proudění tekutin s vyšším poměrem hustot.

Dále existují také modely, které vychází z CFD metod, například symetrická volno-energetická metoda [30], FT lattice Boltzmannova metoda [28], LBM založená na konečných diferencích pro binární tekutiny [54] atd. [21].

Kapitola 2

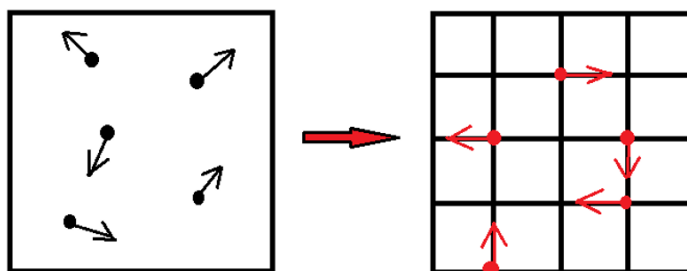
Lattice Boltzmannova metoda

V následující kapitole bude popsán princip lattice Boltzmannovy metody, použité okrajové podmínky a algoritmus pro implementaci LBM.

2.1 Princip lattice Boltzmannovy metody

LBM je poměrně nová metoda ve výpočtové dynamice tekutin používající se k numerickým výpočtům proudění tekutin. Tato metoda vychází z buněčných automatů, ale zároveň ji lze odvodit diskretizací Boltzmannovy rovnice.

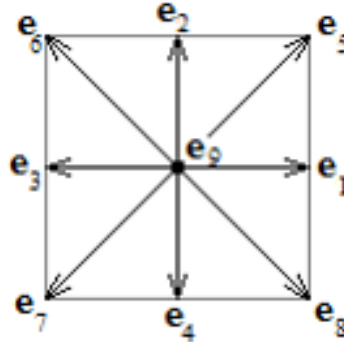
Diskretizace Boltzmannovy rovnice se skládá z diskretizace prostoru, rychlostního prostoru a času. Diskretizace času znamená nahrazení spojitého času časovými kroky neboli iteracemi. Prostor je rozdělen na pravidelnou síť a místo spojitého rychlostního prostoru jsou zavedeny soubory s konečným počtem vektorů rychlostí [25]. Nekonečné množství neuspořádaně se pohybujících se částic je nahrazeno konečným počtem pravděpodobnostních distribučních funkcí, které se pohybují pouze v určitých směrech po výpočtové síti, viz obrázek 2.1.



Obrázek 2.1: Nahrazení neuspořádaného pohybu částic tekutiny uspořádaným pohybem distribučních funkcí.

Distribuční funkce $f(\mathbf{x}, \mathbf{e}, t)$ popisuje pravděpodobnost výskytu částic v určitém místě \mathbf{x} v čase t , pohybující se rychlostí \mathbf{e} .

Směry, kterými se distribuční funkce mohou pohybovat, jsou dány směry rychlostních vektorů v souboru rychlostí. Počet a směry rychlostí v tomto souboru určuje typ modelu. V této práci je použit D2Q9 model, což znamená dvourozměrný model s devíti vektory mikroskopických rychlostí \mathbf{e}_α ($\alpha = 1, 2, \dots, 9$), viz obrázek 2.2.



Obrázek 2.2: Soubor vektorů rychlostí pro D2Q9 model.

Jak je z obrázku zřejmé, vektor rychlosti \mathbf{e}_9 označuje částici v klidu. Dalšími často používanými rychlostními modely jsou D2Q5, popř. D2Q7 v rovině a D3Q15, resp. D3Q19, v prostoru. Volbu rychlostního modelu určují požadavky simulace na přesnost a rychlost výpočtu. S rostoucím počtem diskretních rychlostí se zvyšuje nejen přesnost a stabilita, ale také paměťová náročnost výpočtu.

Pohyb distribučních funkcí po výpočtové mřížce popisuje lattice Boltzmannova rovnice [46, 47]

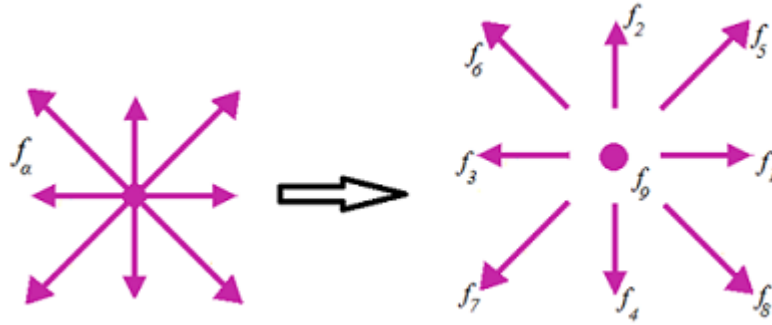
$$f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \delta t, t + \delta t) = f_\alpha(\mathbf{x}, t) + \Omega(f_\alpha), \quad (2.1.1)$$

kde δt označuje velikost časového kroku, \mathbf{e}_α popisuje mikroskopickou rychlost a index α vyjadřuje směry vektorů rychlosti. Počet a směr distribučních funkcí je roven počtu a směřům vektorů rychlostí umístěných v jednotlivých bodech sítě, viz obrázek 2.3.

Člen $\Omega(f_\alpha)$ se nazývá kolizní člen a vyjadřuje schopnost částic navracet se do svého rovnovážného stavu. Pro Bhatnagarův-Grossův-Krookův (BGK) model má tvar [32]

$$\Omega(f_\alpha) = -\frac{1}{\tau} \left[f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{(eq)}(\mathbf{x}, t) \right], \quad (2.1.2)$$

kde $f_\alpha^{(eq)}$ označuje rovnovážnou distribuční funkci, f_α je nerovnovážná distribuční funkce a parametr τ se nazývá jednoduchý relaxační čas. Na nerovnovážnou distribuční funkci lze pohlížet jako na malou výchylku pravděpodobností funkce ze svého rovnovážného



Obrázek 2.3: Soubor distribučních funkcí pro D2Q9 model.

stavu. Lokální rovnovážná distribuční funkce je přiřazena každé distribuční funkci, které se nachází v jednotlivých bodech výpočtové sítě, a má tvar [16]

$$f_{\alpha}^{(eq)}(\mathbf{x}, t) = w_{\alpha} \rho \left(1 + \frac{\mathbf{e}_{\alpha} \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_{\alpha} \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right), \quad (2.1.3)$$

kde c_s je rychlost zvuku, \mathbf{u} je makroskopická rychlost pohybující se tekutiny, ρ je hustota modelované tekutiny a w_{α} jsou váhové funkce. Mikroskopické rychlosti \mathbf{e}_{α} popisující pohyb částic tekutiny jsou pro D2Q9 model vyjádřeny následovně

$$\mathbf{e}_{\alpha} = \begin{cases} (0, 0) & \alpha = 9, \\ \left(\cos \frac{(\alpha-1)\pi}{2}, \sin \frac{(\alpha-1)\pi}{2} \right) c & \alpha = 1, 2, 3, 4, \\ \left(\cos \frac{(2\alpha-9)\pi}{4}, \sin \frac{(2\alpha-9)\pi}{4} \right) \sqrt{2}c & \alpha = 5, 6, 7, 8, \end{cases} \quad (2.1.4)$$

přičemž c je mřížková rychlost a popisuje rychlost, s níž se částice posune za jeden časový krok δt o jednu mřížkovou délku δx , což je vzdálenost dvou sousedních bodů výpočtové sítě. Veličina w_{α} vyjadřuje váhové funkce a pro D2Q9 model nabývá hodnot [16]

$$w_{\alpha} = \begin{cases} \frac{4}{9} & \alpha = 9, \\ \frac{1}{9} & \alpha = 1, 2, 3, 4, \\ \frac{1}{36} & \alpha = 5, 6, 7, 8 \end{cases} \quad (2.1.5)$$

Relaxační čas τ vyjadřuje dobu, za kterou se dostane nerovnovážná distribuční funkce zpět do svého rovnovážného stavu. Tento parametr je svázán s kinematickou viskozitou tekutiny ν vztahem [15]

$$\nu = c_s^2 \delta t \left(\tau - \frac{1}{2} \right). \quad (2.1.6)$$

Hodnota relaxačního parametru ovlivňuje stabilitu metody. Čím je hodnota parametru τ blíže k 0.5, tím je metoda méně stabilní. Hodnota τ se blíží k 0.5 s rostoucím Reynoldsovým číslem. Model s tímto jednoduchým relaxačním časem se nazývá SRT-model (z angl. „Single Relaxation Time“). Stabilitu modelu lze zvýšit zavedením relaxační matice, čímž vznikne MRT-model (z angl. „Multiple Relaxation Time“). Další možností, jak zvýšit stabilitu modelu, je zjemnění výpočtové sítě nebo zmenšení časového kroku.

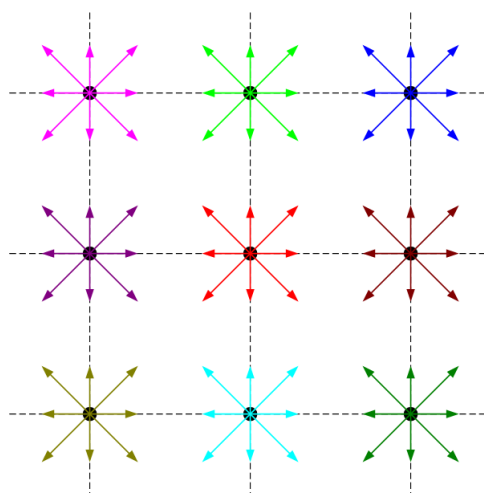
Na pravou stranu rovnice (2.1.1) lze přidat člen Δf_α , který vyjadřuje působení objemové síly \mathbf{F} na modelovanou tekutinu, ve tvaru dle [15]

$$\Delta f_\alpha = w_\alpha \rho (\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{F}) \frac{1}{c_s^2}. \quad (2.1.7)$$

Výpočet lattice Boltzmannovy rovnice (2.1.1) probíhá ve dvou krocích. Nejprve je vypočten kolizní krok (kolize) a následně propagační krok (propagace, distribuce) [41].

1.krok - kolize:

Schéma kolizního kroku je zobrazeno na obrázku 2.4.



Obrázek 2.4: Kolizní krok - soubory post-kolizních distribučních funkcí

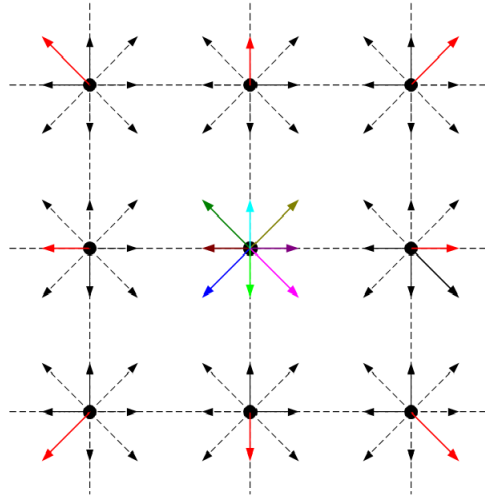
Při kolizi dochází v jednotlivých bodech sítě ke srážkám částic, které do těchto bodů během jednoho časového kroku přitekly, a výpočtu nových souborů post-kolizních distribučních funkcí. Tento krok popisuje pravá strana rovnice (2.1.1), neboli

$$\hat{f}_\alpha(\mathbf{x}, t) = f_\alpha(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} \left[f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{(eq)}(\mathbf{x}, t) \right]. \quad (2.1.8)$$

Na obrázku 2.4 jsou tyto nově vypočtené soubory barevně vyznačeny.

2.krok - propagace:

Průběh propagačního kroku je znázorněn na obrázku 2.5.



Obrázek 2.5: Propagační krok.

Při propagaci jsou nově vypočtené distribuční funkce přesouvány, ve směrech daných typem modelu (zde D2Q9 model), do přilehlých bodů v mřížce. Propagace je popsána levou stranou rovnice (2.1.1), neboli

$$f_{\alpha}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha}\delta t, t + \delta t) = \hat{f}_{\alpha}(\mathbf{x}, t). \quad (2.1.9)$$

Výpočet nových distribučních funkcí tímto způsobem lze ale provést pouze uvnitř výpočtové oblasti. Na hranicích chybí k výpočtům distribuční funkce, které přitékají z venku dovnitř sítě a směry distribučních funkcí, které opouští výpočtovou mřížku, jsou naopak pro tento výpočet již nepotřebné. Tento problém na hranicích výpočtové oblasti lze vyřešit zavedením okrajových podmínek.

2.2 Okrajové podmínky

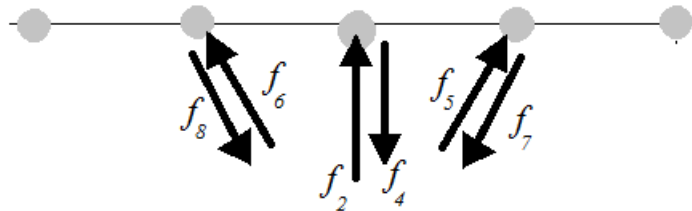
Existuje mnoho druhů okrajových podmínek. V tomto textu budou zmíněny dva typy, a to periodické a „bounce-back“ okrajové podmínky [46].

2.2.1 Periodické okrajové podmínky

Jeden z nejjednodušších typů okrajových podmínek je periodická okrajová podmínka. Princip tohoto typu okrajů je, že distribuční funkce, které na jenom okraji vytékají z výpočtové oblasti, vtékají protilehlým okrajem a nahrazují tak neznámé směry distribučních funkcí.

2.2.2 „Bounce-back“ („No-slip“) okrajové podmínky

Princip „bounce-back“ okrajových podmínek je zobrazen na obrázku 2.6.



Obrázek 2.6: „Bounce-back“ okraje.

Znamé distribuční funkce, které opouští výpočtovou síť, se odráží od imaginární zdi s neklouzavým povrchem, která je umístěna na hranici výpočtové oblasti, a vrací se zpět po stejné dráze jako náhrada neznámých směrů distribučních funkcí přicházejících z venku dovnitř mřížky.

2.3 Vyjádření makroskopických veličin

Když jsou již známy všechny směry všech distribučních funkcí ve výpočtové oblasti, lze konečně vyjádřit požadované makroskopické veličiny jako je hustota nebo rychlost proudící tekutiny. Tyto hodnoty jsou získány vyhodnocením obecných momentů pravděpodobnostních funkcí. Lze zadefinovat k -tý obecný moment m_k , kde k je přirozené číslo včetně nuly, ve tvaru [36]

$$m_k = \int \mathbf{e}^k f(\mathbf{x}, \mathbf{e}, t) d\mathbf{e}. \quad (2.3.1)$$

Touto integrací pravděpodobnostní funkce přes rychlostní prostor jsou vyjádřeny statistické průměry, které odpovídají makroskopickým veličinám [36]. Diskretizací rychlostního

prostoru lze převést momenty ze spojitého do diskrétního rychlostního prostoru. Nultý, resp. první, moment distribuční funkce odpovídá hustotě ρ , resp. rychlosti \mathbf{u} , neboli

$$\rho = \sum_{\alpha} f_{\alpha}, \quad (2.3.2)$$

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha} f_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha}. \quad (2.3.3)$$

2.4 Převod mezi fyzikálním a lattice Boltzmannovým systémem

Pro uskutečnění výpočtu fyzikální úlohy lattice Boltzmannovo metodou je nejprve zapotřebí převést tuto úlohu z fyzikálního do lattice Boltzmannova prostoru, ve kterém je daný problém řešen. Výsledek je pak převeden zpět do fyzikálního systému. Tento převod lze provést dvěma způsoby.

První možnost je fyzikální problém převést přes bezrozměrný systém do lattice Boltzmannova systému, kdy jsou navíc zavedeny pomocné veličiny, charakteristická délka l_0 a čas t_0 , a diskretizační proměnné, časový krok δt a prostorový krok δx . Převod mezi těmito prostory probíhá přes bezrozměrný systém. Tento způsob bude dále v následujících podkapitolách rozveden.

Druhou možností je přímo zdiskretizovat fyzikálně zadanou úlohu do lattice Boltzmannova systému zavedením převodových podílů hodnot fyzikálně zadaných veličin ku hodnotám vyjádřených v lattice Boltzmannově systému [35, 29].

2.4.1 Fyzikální systém

Veličiny vyjádřené ve fyzikálním systému budou v tomto textu označeny indexem p (z angl. „physical“). Při zadání fyzikálního problému jsou dány následující fyzikální veličiny: charakteristický rozměr výpočtové oblasti $d_p[m]$, dynamická viskozita tekutiny $\eta_p[Pa.s]$, hustota tekutiny $\rho_p[kg/m^3]$ a počáteční rychlost tekutiny $\mathbf{u}_p[m/s]$. Podělením dynamické viskozity hustotou lze vyjádřit kinematickou viskozitu $\nu_p[m^2/s]$. Z některých výše uvedených veličin lze následujícím způsobem vyjádřit bezrozměrný podobnostní zlomek zvaný Reynoldsovo číslo

$$Re = \frac{u_p d_p}{\nu_p}. \quad (2.4.1)$$

Toto číslo vyjadřuje podobnost modelů vyjádřených ve fyzikálním, bezrozměrném a lattice Boltzmannově systému a má proto stejnou hodnotu ve všech těchto systémech.

Při přechodu z fyzikálního do bezrozměrného systému je potřeba zavést referenční délku $l_0[m]$ a čas $t_0[s]$. Podělením referenční délky referenčním časem je vyjádřena referenční rychlost $u_0[m/s]$.

2.4.2 Bezrozměrný systém

Veličiny v bezrozměrném systému jsou dále značeny indexem d (z angl. „dimensionless“). Podělením fyzikálních veličin výše definovanými referenčními parametry jsou vyjádřeny bezrozměrné hodnoty veličin. Vzhledem k tomu, že jsou hodnoty referenčních parametrů voleny rovny fyzikálním veličinám, jsou hodnoty bezrozměrných veličin jednotkové, neboli

$$d_d = \frac{d_p}{l_0} = 1, \quad t_d = \frac{t_p}{t_0} = 1, \quad u_d = \frac{u_p}{u_0} = 1. \quad (2.4.2)$$

Reynoldsovo číslo je v bezrozměrném systému vyjádřeno analogicky k (2.4.1). Při dosazení jednotkových hodnot bezrozměrných veličin (2.4.2) má tento podobnostní zlomek tvar

$$Re = \frac{u_d d_d}{\nu_d} = \frac{1}{\nu_d}. \quad (2.4.3)$$

Z tohoto vztahu lze pak při znalosti Reynoldsova čísla jednoduše vyjádřit bezrozměrnou kinematickou viskozitu

$$\nu_d = \frac{1}{Re}. \quad (2.4.4)$$

Aby bylo možné diskretizovat bezrozměrný systém a tím převést bezrozměrné veličiny do lattice Boltzmannova systému, je nutné definovat diskretizační parametry, časový krok δt a délkový krok δx .

2.4.3 Lattice Boltzmannův systém

Veličiny definované v lattice Boltzmannově (LB) systému budou v následujících odstavcích značeny indexem lb . Nejprve je potřeba určit počet dílků N , na které je rozdělena jednotková bezrozměrná délka a počet iteračních kroků N_{it} , na které je rozdělen bezrozměrný jednotkový čas, jak bylo výše určeno. Podílem odpovídajících parametrů jsou následně vyjádřeny časový a délkový krok

$$\delta x = \frac{1}{N}[lu], \quad \delta t = \frac{1}{N_{it}}[ts]. \quad (2.4.5)$$

Jednotky těchto parametrů jsou mřížková jednotka lu (z angl. „lattice unit“) a časový krok ts (z angl. „time step“).

Na volbě diskretizačních parametrů závisí stabilita metody. Aby byla metoda stabilní, je potřeba, aby hodnota Machova čísla, definovaného bezrozměrným zlomkem $Ma = u/c_s$, byla menší než rychlost zvuku v LB systému c_s . Z toho vyplývá podmínka pro makroskopickou rychlost v LB systému [35]

$$\|\mathbf{u}_{lb}\|_2 = \frac{\delta t}{\delta x} \|\mathbf{u}_d\|_2 \ll c_s. \quad (2.4.6)$$

Rychlost \mathbf{u}_{lb} a kinematickou viskozitu ν_{lb} v LB systému lze vyjádřit vztahy

$$\mathbf{u}_{lb} = \frac{\delta t}{\delta x} \mathbf{u}_d, \quad \nu_{lb} = \frac{\delta t}{\delta x^2} \nu_d. \quad (2.4.7)$$

2.4.4 Zpětný převod z lattice Boltzmannova systému do fyzikálního systému

Zpětný převod veličin z LB do fyzikálního systému odpovídá přímo opačnému směru výše zmíněného postupu. Z lattice Boltzmannova systému je daná veličina převedena do bezrozměrného systému a následně do fyzikálního systému. Například makroskopická rychlost je vyjádřena z (2.4.2) a (2.4.7) následně

$$\mathbf{u}_p = \mathbf{u}_{lb} \frac{\delta x}{\delta t} \mathbf{u}_0. \quad (2.4.8)$$

2.4.5 Vyjádření relaxačního parametru

Relaxační parametr τ závisí na kinematické viskozitě tekutiny dle vztahu

$$\nu_p = c_s^2 \delta t (\tau - 0.5), \quad (2.4.9)$$

přičemž rychlost zvuku v LB systému je dána vztahem

$$c_s = \frac{c}{\sqrt{3}}. \quad (2.4.10)$$

Veličina c označuje mřížkovou rychlost, což je rychlost, při které se částice ve výpočtové mřížce posune během jednoho časového kroku δt o jeden délkový krok δx , neboli

$$c = \frac{\delta x}{\delta t} \left[\frac{lu}{ts} \right]. \quad (2.4.11)$$

Úpravou výrazů (2.4.9), (2.4.10), (2.4.11) lze následně upravit vztah pro výpočet relaxačního parametru na tvar

$$\tau = \frac{1}{2} + 3\nu_p \frac{\delta t}{\delta x^2}. \quad (2.4.12)$$

Dále je potřeba převést kinematickou viskozitu z fyzikálního do lattice Boltzmannova systému, což je provedeno využitím převodního vztahu

$$v_d = \frac{t_0}{l_0^2} v_p \quad (2.4.13)$$

a vztahu (2.4.7). Pro $l_0 = t_0 = 1$ je ve vztahu (2.4.13) kinematická viskozita vyjádřená ve fyzikálním systému rovna kinematické viskozitě tekutiny vyjádřené v bezrozměrném systému. Dosazením těchto výrazů do rovnice (2.4.12) je získán vztah pro výpočet parametru τ v lattice Boltzmannově systému

$$\tau = \frac{1}{2} + 3\nu_{lb}. \quad (2.4.14)$$

Pro určení vztahu mezi relaxačním parametrem a Reynoldsovým číslem je potřeba dosadit výraz (2.4.4) do (2.4.7) a tento výsledek do (2.4.14). Výsledkem je vztah

$$\tau = \frac{1}{2} + 3 \frac{\delta t}{\delta x^2} \frac{1}{Re}. \quad (2.4.15)$$

Z výrazu (2.4.15) je zřejmé, že $\tau \in (0.5; \infty)$ a vyplývá, že pro rostoucí Reynoldsovo číslo se relaxační čas blíží k $\frac{1}{2}$.

2.5 MRT model

V případě, že se relaxační parametr τ blíží svou hodnotou k $\frac{1}{2}$, numerická stabilita metody klesá. Jednou z možností, jak tento problém řešit, je zavedení MRT modelu. To znamená, že relaxační parametr τ je nahrazen relaxačním maticovým operátorem. Speciálním případem tohoto operátoru je právě jednoduchý relaxační parametr τ .

Princip MRT modelu je takový, že zatímco celý výpočet s klasickým SRT modelem je realizován v rychlostním neboli distribučním prostoru definovaným distribučními funkcemi $f_\alpha(\mathbf{x}, t)$, tak během výpočtů s použitým MRT modelem je kolizní krok proveden v momentovém prostoru definovaným momenty distribučních funkcí $m_\alpha(\mathbf{x}, t)$ [24].

Kolizní krok v distribučním prostoru je dán rovnicí (2.1.8), kde pro BKG model má kolizní člen tvar

$$\Omega = -\frac{1}{\tau} \left[\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{f}^{(eq)}(\mathbf{x}, t) \right]. \quad (2.5.1)$$

V MRT modelu je pro výpočet použit kolizní člen, který je převedený do momentového prostoru a má následující podobu [27, 8]

$$\Omega = -\mathbf{M}^{-1} \mathbf{S} \left[\mathbf{m}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{m}^{(eq)}(\mathbf{x}, t) \right], \quad (2.5.2)$$

kde matice \mathbf{S} má tvar

$$\mathbf{S} = \text{diag}(s_1, s_2, s_3, s_4, s_5, s_6, s_7, s_8, s_9)^T. \quad (2.5.3)$$

Prvky matice $s_i, i = 1, 2, \dots, 9$ ovlivňují stabilitu metody. Nejstabilnější výsledky bývají dosaženy pro hodnoty z intervalu $[0; 2]$. Navíc pokud jsou hodnoty všech prvků s_i stejné, stane se z MRT členu SRT člen. Pokud jsou všechny hodnoty na diagonále matice \mathbf{S} rovny $\frac{1}{\tau}$, je vyjádřen lattice BGK (LBGK) model. Dalšími členy rovnice (2.5.2) jsou nerovnovážné, resp. rovnovážné, momentové vektory $\mathbf{m}(\mathbf{x}, t)$, resp. $\mathbf{m}^{(eq)}(\mathbf{x}, t)$. Dle [27] má $\mathbf{m}(\mathbf{x}, t)$ tvar

$$\mathbf{m} = (\rho, e, \varepsilon, j_x, q_x, j_y, q_y, p_{xx}, p_{xy})^T, \quad (2.5.4)$$

kde jednotlivé členy postupně označují hustotu ρ , energii e , kvadrát energie ε , x- a y-ovou složku hybnosti j_x a j_y , x- a y-ovou složku energetického toku q_x a q_y , diagonální a mimodiagonální prvky tenzoru napětí p_{xx} a p_{xy} . Matice \mathbf{M} je transformační matice, jejíž tvar pro D2Q9 model je

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 & -4 \\ -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 & 4 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 0 \\ -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.5.5)$$

a její funkcí je transformovat rychlostní prostor do momentového prostoru, neboli distribuční funkci převést na moment distribuční funkce a naopak:

$$\begin{aligned} \mathbf{m} &= \mathbf{M}\mathbf{f}, \\ \mathbf{f} &= \mathbf{M}^{-1}\mathbf{m}. \end{aligned} \quad (2.5.6)$$

Pomocí transformační matice lze vyjádřit rovnovážné momenty ze vztahu

$$\mathbf{m}^{(eq)} = \mathbf{M}\mathbf{f}^{(eq)} \quad (2.5.7)$$

a prvky vektoru rovnovážného momentu $m^{(eq)}$ mají dle [26] následující tvar

$$\begin{aligned}
 m_0^{(eq)} &= \rho, \\
 m_1^{(eq)} &= -2\rho + 3\rho(u_x^2 + u_y^2), \\
 m_2^{(eq)} &= \rho - 3\rho(u_x^2 + u_y^2), \\
 m_3^{(eq)} &= \rho u_x, \\
 m_4^{(eq)} &= -\rho u_x, \\
 m_5^{(eq)} &= \rho u_y, \\
 m_6^{(eq)} &= -\rho u_y, \\
 m_7^{(eq)} &= \rho(u_x^2 - u_y^2), \\
 m_8^{(eq)} &= \rho u_x u_y.
 \end{aligned} \tag{2.5.8}$$

Použitím vztahů (2.5.6), (2.5.7) a úpravou kolizního členu (2.5.2) lze vyjádřit výsledný tzv. MRT operátor

$$\Omega = -\mathbf{M}^{-1}\mathbf{SM}[\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{f}^{eq}(\mathbf{x}, t)]. \tag{2.5.9}$$

2.6 Algoritmus pro implementaci lattice Boltzmannovy metody

1. Zadefinování fyzikální úlohy a její převedení do lattice Boltzmannova systému.

2. Výpočet rovnovážných distribučních funkcí v počátečním čase $t = t_0$ ze vztahu

$$f_\alpha^{(eq)}(\mathbf{x}, t) = w_\alpha \rho \left(1 + \frac{\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right) \tag{2.6.1}$$

pro zadané makroskopické veličiny, hustotu $\rho(\mathbf{x}, t_0)$ a rychlost $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_0)$, a určení počátečních hodnot nerovnovážných distribučních funkcí $f_\alpha(\mathbf{x}, t_0) = f_\alpha^{(eq)}(\mathbf{x}, t_0)$.

3. Výpočet kolizního kroku daného rovnicí

$$\widehat{f}_\alpha(\mathbf{x}, t) = f_\alpha(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} \left[f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{(eq)}(\mathbf{x}, t) \right]. \tag{2.6.2}$$

4. Výpočet propagačního kroku určeného vztahem

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \delta t, t + \delta t) = \widehat{f}_\alpha(\mathbf{x}, t). \tag{2.6.3}$$

5. Zavedení okrajových podmínek a určení neznámých směrů pravděpodobnostních funkcí na hranici výpočtové sítě.

6. Určení nových makroskopických veličin \mathbf{u} a ρ z momentů distribučních funkcí definovaných vztahy

$$\rho(\mathbf{x}, t + \delta t) = \sum_{\alpha} f_{\alpha}(\mathbf{x}, t + \delta t) \quad (2.6.4)$$

a

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t + \delta t) = \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t + \delta t)} \sum_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} f_{\alpha}(\mathbf{x}, t + \delta t) \quad (2.6.5)$$

a převedení těchto hodnot zpět do fyzikálního systému.

7. Pokud jsou splněny zastavovací podmínky, výpočet je ukončen. V opačném případě jsou znovu určeny hodnoty rovnovážných distribučních funkcí ze vztahu (2.6.1) s využitím nově vypočtených hodnot \mathbf{u} a ρ a výpočet pokračuje algoritmem počínaje krokem 3.

Kapitola 3

Lattice Boltzmannova metoda pro modelování vícefázové tekutiny

V následující kapitole bude teoreticky popsán lattice Boltzmannův model pro výpočet vícefázového proudění a následně algoritmus pro implementaci vyvinutého modelu v prostředí MATLAB.

3.1 Teoretický popis metody

Model pro výpočet vícefázového proudění v této práci je založen na modelu z [4], který vychází z volno-energetického modelu dle Inamura [22]. Pod pojmem vícefázové proudění bude uvažováno proudění dvou a více tekutin, které jsou nemísitelné, a proto se mezi nimi tvoří rozhraní, které jednotlivé tekutiny odděluje. Jedním z hlavních problémů modelování vícefázového proudění je zjišťování tohoto rozhraní. K tomu lze použít jeden z následujících dvou způsobů: metodu difúzního rozhraní a metodu sledování rozhraní. Druhou zmíněnou metodu používají k výpočtu rozhraní například VOF metoda, LS metoda či FT metoda.

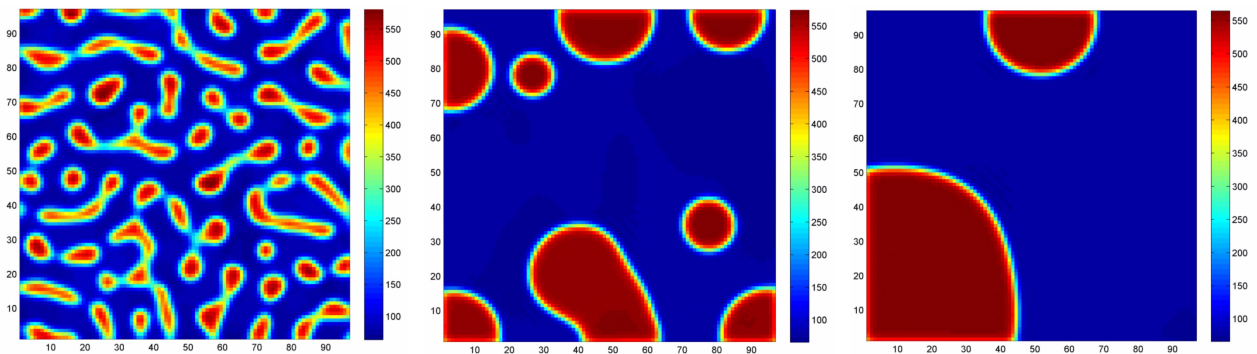
Metoda sledování rozhraní zjišťuje přesnou linii rozhraní. Difúzní rozhraní u dvoufázového proudění naopak znamená, že přesná linie rozhraní je nahrazena vrstvou o určité tloušťce obsahující obě dvě tekutiny, které dělí. Důležitým faktorem při použití difúzního rozhraní, je tloušťka rozhraní. Výhodou použití tohoto způsobu zjišťování rozhraní je přesněji vyjádřené povrchové napětí a lepší zachování hmoty [9]. V modelu popsáném v tomto textu je využito metody difúzního rozhraní. Dalším problémem při výpočtu pohybu vícefázového proudění je stabilita modelu pro velký poměr hustot modelovaných tekutin. Cílem je získání stabilního modelu pro poměr hustot 1 : 1000, který přibližně odpovídá proudění vody se vzduchem.

Výpočet vícefázového proudění se skládá z následujících hlavních částí. Nejprve je proveden výpočet pohybu rozhraní difúzním přístupem pomocí Cahn-Hilliardovy

rovnice. Následně je zjištěn pohyb tekutiny výpočtem lattice Boltzmannovy rovnice bez hustoty, což vede na modelování tzv. beztlakových rovnic. Tlak je poté vyjádřen z Poissonovy rovnice. Nakonec je určena celková rychlost proudění součtem rychlosti získané z beztlakových rovnic a korekcí rychlosti získané z dopočteného tlaku.

3.1.1 Cahn-Hilliardova rovnice

Cahn-Hilliardova rovnice byla vyvinuta pro modelování fázové separace roku 1958 [6, 11]. Na obrázku 3.1 jsou zobrazeny výsledky výpočtu Cahn-Hilliardovy rovnice provedené v softwaru Matlab. Zobrazovanou veličinou je hustota.



Obrázek 3.1: Ukázka výsledků modelu fázové separace na začátku, uprostřed a na konci procesu.

Cahn-Hilliardova rovnice má dle [4] tvar

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) = M \nabla^2 \mu_\phi, \quad (3.1.1)$$

kde M je koeficient mobility, který lze vyjádřit ze vztahu [22]

$$M = \left(\tau_f - 0.5 - \frac{C}{2} \right), \quad (3.1.2)$$

přičemž C je volitelná konstanta, a μ_ϕ je chemický potenciál [4]

$$\mu_\phi = \beta \Psi' - k \nabla^2 \phi, \quad (3.1.3)$$

kde $\Psi(\phi)$ označuje objemovou hustotu volné energie (angl. „bulk free-energy density“)

$$\Psi(\phi) = (\phi - \phi_2)^2 (\phi - \phi_1)^2. \quad (3.1.4)$$

Funkce $\phi \in [\phi_1, \phi_2]$, kde ϕ_1 označuje tekutinu 1, ϕ_2 označuje tekutinu 2 a hodnoty uvnitř intervalu označují rozhraní [4]. Konstanty k a β ovlivňují tloušťku rozhraní W

$$W = \frac{4}{\phi_1 - \phi_2} \sqrt{\frac{k}{2\beta}} \quad (3.1.5)$$

a povrchové napětí σ_{12}

$$\sigma_{12} = \frac{(\phi_1 - \phi_2)^3}{6} \sqrt{2k\beta}. \quad (3.1.6)$$

Cahn-Hilliardova rovnice je v modelu vícefázového proudění řešena aplikací lattice Boltzmannovy metody. Vývojová LB rovnice má svůj obvyklý tvar pro jednotkový časový krok Δt , viz rovnice (2.1.1) a (2.1.2),

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau_f} \left(f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{(eq)}(\mathbf{x}, t) \right), \quad (3.1.7)$$

kde index i označuje jednotlivé směry distribučních funkcí, resp. vektorů rychlostí v rychlostním souboru, a rovnovážná distribuční funkce se vypočte ze vztahu

$$f_i^{(eq)} = -10^{-3} H_{\phi i} (\phi - \phi_{ref}) + v_i \frac{M}{\tau_f - \frac{1}{2}} \mu_\phi + \phi w_i \left\{ \frac{e_{i\alpha} u_\alpha}{c_s^2} + \frac{(e_{i\alpha} u_\alpha)^2}{2c_s^4} - \frac{|\mathbf{u}|^2}{2c_s^2} \right\}, \quad (3.1.8)$$

kde

$$H_{\phi i} = \begin{cases} 1 & \text{pro } i = 9, \\ 0 & \text{pro } i = 1, 2, \dots, 8 \end{cases} \quad (3.1.9)$$

a funkce ϕ_{ref} má hodnotu 0, pokud je hustota v daném místě menší než hraniční hustota, nebo 1, pokud je hodnota hustoty větší než hraniční hustota. Hraniční hustotou se rozumí polovina součtu maximální a minimální hodnoty hustoty modelovaného dvoufázového proudění. V případě, že by došlo k úbytku hmoty, hraniční hustota je vypočtena dvěma třetinami ze součtu maximální a minimální hodnoty hustoty. V případě nadbytku hmoty je hraniční hustotou rozuměna jedna třetina ze součtu maximální a minimální hodnoty hustoty.

Analogicky k (2.3.1) lze zadefinovat momenty distribučních funkcí f_i , které mají následující podobu [4]

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^b f_i &= \phi, \\ \sum_{i=0}^b f_i e_{i\alpha} &= \phi u_\alpha, \\ \sum_{i=0}^b f_i e_{i\alpha} e_{i\beta} &= \frac{M \mu_\phi \delta_{\alpha\beta}}{\tau_f - \frac{\Delta t}{2}} + \phi u_\alpha u_\beta. \end{aligned} \quad (3.1.10)$$

Pro další výpočty bude potřeba první moment pro vyjádření funkce ϕ . Při znalosti hodnot funkce ϕ , lze následně vyjádřit novou hustotu ρ a kinematickou viskozitu ν proudících

tekutin dle vztahů podle [4, 17]

$$\rho(\phi) = \begin{cases} \rho_2 & \phi \leq \phi_2, \\ \frac{\phi - \phi_2}{\phi_1 - \phi_2}(\rho_1 - \rho_2) + \rho_2 & \phi_2 < \phi < \phi_1, \\ \rho_1 & \phi \geq \phi_1 \end{cases} \quad (3.1.11)$$

a

$$v(\rho) = \frac{\rho - \rho_2}{\rho_1 - \rho_2}(v_1 - v_2) + v_2. \quad (3.1.12)$$

3.1.2 Lattice Boltzmannova rovnice

Pohyb modelovaných tekutin je řešen pomocí klasické vývojové lattice Boltzmannovy rovnice (2.1.1), která má pro jednotkový časový krok Δt tvar

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) = g_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau_g} \left(g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{(eq)}(\mathbf{x}, t) \right). \quad (3.1.13)$$

Vzhledem k tomu, že při modelování dvoufázového proudění s velkým poměrem hustot vznikají velké numerické chyby ve výpočtech na rozhraní, je z výpočtů lattice Boltzmannových rovnic vyjmuta hustota, což vede k modelování tzv. beztlakových rovnic [4, 22]. Vliv tlaku je poté řešen externě pomocí Poissonovy rovnice, viz následující podsekcce. Momenty distribučních funkcí dle (2.3.2) a (2.3.3) jsou upraveny na tvar tak, že se ve výpočtech neuvažuje hustota, tj.

$$\begin{aligned} \sum_i g_i &= 1, \\ \sum_i g_i e_{i\alpha} &= u_\alpha^*. \end{aligned} \quad (3.1.14)$$

Index * označuje makroskopickou rychlost získanou výpočtem beztlakových rovnic. Relaxační parametr v rovnici (3.1.13) se vyjádří výrazem

$$\tau_g = \frac{\nu}{c_s^2} + \frac{1}{2}\Delta t. \quad (3.1.15)$$

Rovnovážná distribuční funkce je dána rovnicí (2.1.3) s přidáním členů navíc na pravé straně rovnice, které vyjadřují vliv objemových sil a povrchového napětí na tekutinu, neboli

$$g_i^{(eq)} = w_i \left\{ 1 + \frac{e_{i\alpha} u_\alpha^*}{c_s^2} + \frac{(e_{i\alpha} u_\alpha^*)^2}{2c_s^4} - \frac{|\mathbf{u}^*|^2}{2c_s^2} \right\} + w_i \frac{K}{\rho} G_{\alpha\beta} e_{i\alpha} e_{i\beta} - v_i \frac{K}{2\rho} |\nabla\phi|^2 + 3w_i e_{i\alpha} B_\alpha, \quad (3.1.16)$$

kde K označuje povrchové napětí, B_α je objemová síla, člen $G_{\alpha\beta}$ se vypočte vztahem

$$G_{\alpha\beta}(\phi) = \frac{9}{2c^4} \frac{\partial\phi}{\partial x_\alpha} \frac{\partial\phi}{\partial x_\beta} - \frac{9}{4c^4} \frac{\partial\phi}{\partial x_\gamma} \frac{\partial\phi}{\partial x_\gamma} \delta_{\alpha\beta} \quad (3.1.17)$$

a konstanty v_i mají pro jednotlivé směry distribučních funkcí i hodnoty

$$v_i = \begin{cases} -\frac{5}{3c^2} & i = 9, \\ \frac{3}{c^2}w_i & i = 1, 2, \dots, 8. \end{cases} \quad (3.1.18)$$

3.1.3 Poissonova rovnice

Dle [22] lze Poissonovu rovnici vyjádřit z následujícího vztahu

$$Sh \frac{\mathbf{u} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\frac{\nabla p}{\rho}, \quad (3.1.19)$$

kde Sh označuje Strouhalovo číslo, pro které platí dle [22] vztah

$$\Delta t = Sh \Delta x. \quad (3.1.20)$$

Skalárním přenásobením rovnice (3.1.19) operátorem ∇ a uvážením platnosti rovnice kontinuity pro rychlost \mathbf{u} (tj. $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$) je rovnice (3.1.19) upravena na tvar

$$Sh \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{\Delta t} = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla p}{\rho} \right). \quad (3.1.21)$$

Dosazením vztahu (3.1.20) do rovnice (3.1.21) a předpokladem $\Delta x = 1$ a $\Delta t = 1$ je vyjádřen následující tvar Poissonovy rovnice

$$\nabla \cdot \left(\frac{\nabla p}{\rho} \right) = \nabla \cdot \mathbf{u}^*. \quad (3.1.22)$$

Operátor ∇ vyjadřuje vektor prvních derivací dle jednotlivých složek a pro 2D úlohu má následující podobu

$$\nabla = \left[\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right]. \quad (3.1.23)$$

Dále platí vztah

$$\nabla \cdot \nabla = \nabla^2 = \Delta, \quad (3.1.24)$$

kde operátor Δ se nazývá Laplaceův operátor a vyjadřuje součet druhých derivací dle jednotlivých složek, neboli pro dvourozměrný případ

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}. \quad (3.1.25)$$

Využitím vztahu (3.1.25) a (3.1.24) lze rovnici (3.1.22) za předpokladu konstantní hustoty zapsat ve tvaru

$$\Delta p = \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} = \nabla \cdot \mathbf{u}^*. \quad (3.1.26)$$

Poissonova rovnice (3.1.26) je řešena metodou konečných diferencí. To znamená, že druhé derivace jsou aproximovány konečnými diferencemi, tj.

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} = \frac{p_{(i+1,j)} - 2p_{(i,j)} + p_{(i-1,j)}}{(\Delta x)^2} + \frac{p_{(i,j+1)} - 2p_{(i,j)} + p_{(i,j-1)}}{(\Delta y)^2}, \quad (3.1.27)$$

kde jsou předpokládány jednotkové prostorové kroky $\Delta x = \Delta y = 1$. Tyto konečné diference (3.1.27) lze zapsat jako součin čtvercové matice \mathbf{A}

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -4 & 1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 1 & -4 & 1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & 0 & 1 & -4 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 1 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 1 & -4 & 1 \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 1 & -4 \end{pmatrix} \quad (3.1.28)$$

a sloupcového vektoru \mathbf{p}

$$\mathbf{p} = \begin{pmatrix} \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ p_{(ij)} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}. \quad (3.1.29)$$

Okrajové podmínky pro Poissonovu rovnici byly vytvořeny interpolací hodnot na hranici výpočtové sítě z okolních známých hodnot.

Důvodem pro volbu řešení Poissonovy rovnice metodou konečných diferencí namísto lattice Boltzmannovou rovnicí je vyšší přesnost modelu a stabilita metody oproti řešení Poissonovy rovnice pomocí lattice Boltzmannovy rovnice.

3.1.4 Korekce rychlosti

Korekční rychlost $\Delta \mathbf{u}$ odpovídající vlivu tlaku je vyjádřena vztahem dle [4]

$$\Delta \mathbf{u} = -\frac{\nabla p}{\rho}. \quad (3.1.30)$$

Výsledná makroskopická rychlost je pak dána součtem rychlosti vyjádřené z beztlakové rovnice \mathbf{u}^* a korekční rychlosti $\Delta\mathbf{u}$ vyjádřené z tlakové Poissonovy rovnice, neboli

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^* + \Delta\mathbf{u}. \quad (3.1.31)$$

3.2 Algoritmus pro implementaci modelu vícefázového proudění

1. Zdefinování fyzikální úlohy a její převedení do lattice Boltzmannova systému.

2. Výpočet rovnovážných distribučních funkcí v čase $t = t_n$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) pro Cahn-Hilliardovu rovnici

$$f_i^{(eq)} = -10^{-3} H_{\phi i} (\phi - \phi_{ref}) + v_i \frac{M}{\tau_f - \frac{1}{2}} \mu_\phi + \phi w_i \left\{ \frac{e_{i\alpha} u_\alpha}{c_s^2} + \frac{(e_{i\alpha} u_\alpha)^2}{2c_s^4} - \frac{|\mathbf{u}|^2}{2c_s^2} \right\}, \quad (3.2.1)$$

a pro lattice Boltzmannovu rovnici

$$g_i^{(eq)} = w_i \left\{ 1 + \frac{e_{i\alpha} u_\alpha^*}{c_s^2} + \frac{(e_{i\alpha} u_\alpha^*)^2}{2c_s^4} - \frac{|\mathbf{u}^*|^2}{2c_s^2} \right\} + w_i \frac{K}{\rho} G_{\alpha\beta} e_{i\alpha} e_{i\beta} - v_i \frac{K}{2\rho} |\nabla\phi|^2 + 3w_i e_{i\alpha} B_\alpha, \quad (3.2.2)$$

Pokud $n = 0$: Určení počátečních rovnovážných distribučních funkcí v čase $t = t_0$ z rovnic (3.2.1) a (3.2.2) a určení počátečních hodnot nerovnovážných distribučních funkcí $f_i(\mathbf{x}, t_0) = f_i^{(eq)}(\mathbf{x}, t_0)$ a $g_i(\mathbf{x}, t_0) = g_i^{(eq)}(\mathbf{x}, t_0)$.

3. Výpočet koeficientu mobility M

$$M = \left(\tau_f - 0.5 - \frac{C}{2} \right), \quad (3.2.3)$$

chemického potenciálu μ_ϕ

$$\mu_\phi = \beta\Psi' - k\nabla^2\phi \quad (3.2.4)$$

a distribučních funkcí pro Cahn-Hilliardovu rovnici:

- kolizní krok

$$\hat{f}_i(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau_f} \left(f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{(eq)}(\mathbf{x}, t) \right), \quad (3.2.5)$$

- propagační krok

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) = \widehat{f}_i(\mathbf{x}, t), \quad (3.2.6)$$

- aplikace okrajových podmínek pro výpočet zbylých neznámých směrů distribučních funkcí.

4. Výpočet nových hodnot funkce Φ

$$\phi = \sum_i f_i, \quad (3.2.7)$$

hustoty ρ

$$\rho(\phi) = \begin{cases} \rho_2 & \phi \leq \phi_2, \\ \frac{\phi - \phi_2}{\phi_1 - \phi_2} (\rho_1 - \rho_2) + \rho_2 & \phi_2 < \phi < \phi_1, \\ \rho_1 & \phi \geq \phi_1 \end{cases} \quad (3.2.8)$$

a kinematické viskozity ν

$$\nu(\rho) = \frac{\rho - \rho_2}{\rho_1 - \rho_2} (\nu_1 - \nu_2) + \nu_2. \quad (3.2.9)$$

5. Výpočet relaxačního času τ_g

$$\tau_g = \frac{\nu}{c_s^2} + \frac{1}{2} \Delta t \quad (3.2.10)$$

a distribučních funkcí pro lattice Boltzmannovu rovnici:

- kolizní krok

$$\widehat{g}_i(\mathbf{x}, t) = g_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau_g} \left(g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{(eq)}(\mathbf{x}, t) \right). \quad (3.2.11)$$

- propagační krok

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) = \widehat{g}_i(\mathbf{x}, t), \quad (3.2.12)$$

- aplikace okrajových podmínek pro dopočet zbylých neznámých směrů distribučních funkcí.

6. Výpočet makroskopické rychlosti \mathbf{u}^*

$$u_\alpha^* = \sum_i g_i e_{i\alpha}. \quad (3.2.13)$$

7. Výpočet tlaku řešením Poissonovy rovnice.

8. Výpočet korekční makroskopické rychlosti

$$\Delta \mathbf{u} = -\frac{\nabla p}{\rho} \quad (3.2.14)$$

a výsledné celkové makroskopické rychlosti

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^* + \Delta \mathbf{u}. \quad (3.2.15)$$

9. Převedení všech požadovaných veličin zpět z lattice Boltzmannova do fyzikálního systému.

10. Při splnění zastavovacích podmínek je výpočet ukončen. Pokud zastavovací podmínky splněny nejsou, výpočet pokračuje od bodu 2 pro čas $t = t_{n+1}$. Nové hodnoty $f_i^{(eq)}$ a $g_i^{(eq)}$ jsou vyjádřeny z nově napočtené celkové makroskopické rychlosti \mathbf{u} .

Kapitola 4

Vyhodnocení a diskuze dosažených numerických výsledků

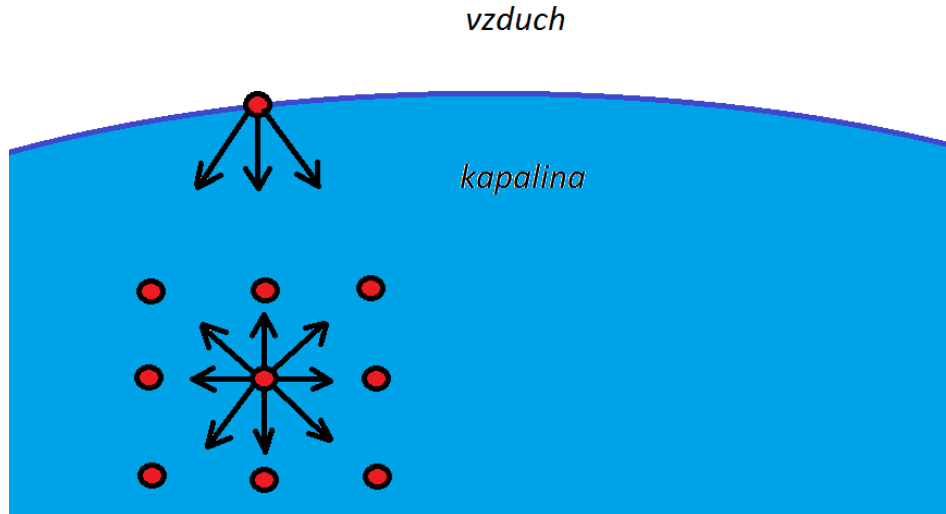
V následující kapitole jsou popsány úlohy na ověření správnosti výpočtů lattice Boltzmannovy metody uvedené v této práci. Nejprve je uvedena úloha na ověření působení povrchového napětí na čtverec vyplněný tekutinou. Dále jsou zobrazeny výsledky úlohy Rayleighovy-Taylorovy nestability. Poslední úlohou je model pohybu vzduchové bubliny ve vodě.

Parametry matice S MRT modelu definované vztahem (2.5.3) byly zvoleny následovně: $s_1 = s_4 = s_6 = 1$, $s_2 = 0.4$, $s_3 = 0.9$, $s_5 = s_7 = 1.1$. Konstanta C z rovnice (3.1.2) má zvolenou hodnotu 0.01. Hodnota relaxačního parametru byla obvykle volena $\tau_f = 0.51$, pokud není jinak určeno v zadání úlohy.

4.1 Působení povrchového napětí

Povrchové napětí působí na povrchu kapaliny a jeho vlivem dochází k zakulacení tvaru kapek, což je tvar s minimálním povrchem. Důvod vzniku povrchového napětí je následující. Uvažujme kapku kapaliny ve vzduchu. Každá kapalina je tvořena atomy, které na sebe navzájem působí přitažlivými silami. Vzhledem k pravidelnému uspořádání atomů, jsou atomy uvnitř kapaliny přitahovány ve všech směrech stejnou silou. Naopak na povrchu kapaliny jsou atomy přitahovány pouze ze směrů dovnitř kapaliny, protože mimo ni se nachází pouze malé množství atomů vzduchu, které nemá na povrch kapaliny téměř žádný vliv, viz obrázek 4.1. Proto na povrchu kapaliny vzniká vrstva atomů s většími meziatomovými silami, které definují povrchové napětí kapaliny. Při příliš velkém povrchovém napětí se z kapek stává mlha nebo aerosol. Naopak při malém povrchovém napětí dochází k rychlému vypaření kapaliny [3].

V tomto příkladu jsou uvažovány dvě tekutiny o různých hustotách a stejné kinematické viskozitě. Tekutina s nižší hustotou tvoří čtverec a je obklopena tekutinou s vyšší



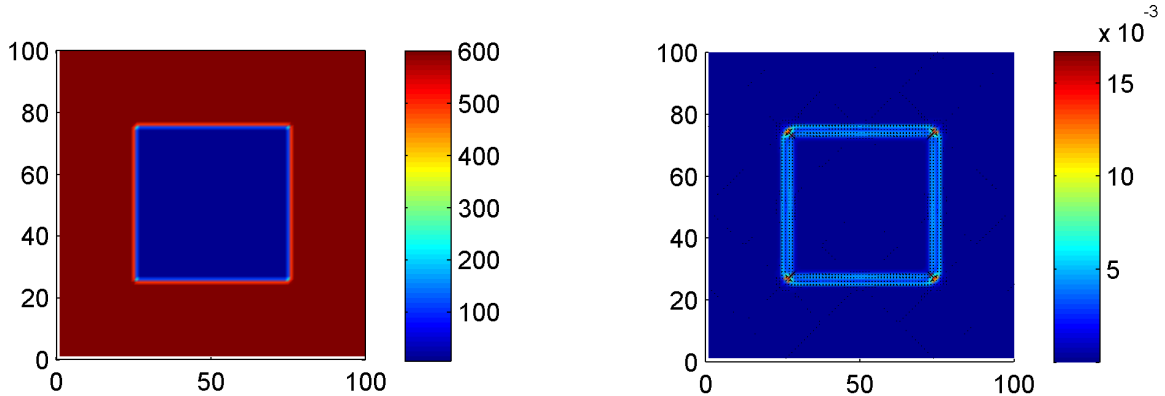
Obrázek 4.1: Atomy uvnitř a na povrchu kapaliny.

hustotou. Působením povrchového napětí se ze čtverce postupně stává kruh. Parametry tekutin byly převzaty z [4]. Tekutina 1 tvořící čtverec má hustotu $\rho_1 = 6 \text{ kg/m}^3$ a kinematickou viskozitu $\eta_1 = 2.1 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$. Tekutina 2 vyskytující se v okolí čtverce má hustotu $\rho_2 = 600 \text{ kg/m}^3$ a dynamickou viskozitu $\eta_2 = 2.1 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$. Výpočtová oblast je tvořena 100×100 buňkami, ve fyzikálních veličinách má čtvercová oblast hranu délky 0.5 m . Čtverec tvořený tekutinou 1 je umístěn uprostřed výpočtové oblasti s délkou hrany 0.25 m . Velikost povrchového napětí je $4 \cdot 10^{-3} \text{ N/m}$. Hodnoty konstant v rovnici (3.1.3) jsou $\beta = 0.15$ a $k = 0.009$. Na hranicích oblasti jsou použity „bounce-back“ okrajové podmínky. Na obrázku 4.2 je uveden počáteční stav úlohy a na obrázku 4.3 jsou uvedeny průběžné výsledky výpočtu během působení povrchového napětí na tekutinu ve tvaru čtverce. V obou případech je vždy zobrazena na levém obrázku hustota a na pravém obrázku průběh rychlosti.

Z obrázků je zřejmé, že se projevuje vliv povrchového napětí a čtverec se postupně zakulacuje.

4.2 Rayleighova-Taylorova nestabilita

V této úloze je modelován pohyb dvou nemísitelných tekutin o různých hustotách a viskozitách, které jsou v obdélníkové výpočtové oblasti uspořádány do dvou vrstev nad sebou a jejich rozhraní je mírně deformováno. Horní vrstva obsahuje tekutinu s vyšší hustotou a v průběhu času se tato hustější tekutina vleje do té dolní, méně husté tekutiny. Tento



Obrázek 4.2: Zobrazení úlohy působení povrchového napětí na tekutinu na počátku výpočtu - 1. iterace.

jev se nazývá Rayleighova-Taylorova nestabilita. Tvar rozhraní tekutin během vlévání se do sebe závisí na poměru hustot tekutin. Tento poměr je definován Atwoodovým číslem [37]

$$A = \frac{\rho_{tezsi} - \rho_{lehci}}{\rho_{tezsi} + \rho_{lehci}}, \quad (4.2.1)$$

kde ρ_{lehci} resp. ρ_{tezsi} označuje tekutinu s nižší, resp. vyšší, hustotou.

V tomto příkladu byly počítány dvě úlohy pro dvě různá Reynoldsova čísla. Reynoldsovo číslo je bezrozměrný zlomek, který vyjadřuje, zda je modelované proudění turbulentní nebo laminární. Je určeno podílem velikosti rychlosti proudění u a charakteristické délky, což je v tomto případě výška nádoby H , s kinematickou viskozitou těžší tekutiny ν_1 , neboli

$$Re = \frac{uH}{\nu_1}. \quad (4.2.2)$$

Rozhraní mezi tekutinami je popsáno rovnicí

$$y = 0.5 + 0.05\cos(2\pi x). \quad (4.2.3)$$

Velikost výpočtové oblasti je 128x512 buněk, konkrétně delší hrana obdélníkové oblasti má délku $H = 0.5 \text{ m}$. Hodnoty konstant v rovnici (3.1.3) jsou $\beta = 0.15$ a $k = 0.009$.

Parametry úlohy i výsledky pro srovnání správnosti výpočtů byly převzaty z [21]. Vzhledem k uvedeným veličinám v jednotkách LB prostoru v [21], budou i zde hodnoty uvedeny v těchto jednotkách pro lepší srovnání výsledků. Převody mezi jednotkami v lattice Boltzmannově prostoru a fyzikálním prostoru jsou objasněny v sekci 2.4. Velikost povrchového napětí se uvažuje v obou případech $1.12 \cdot 10^{-6} \text{ mu/ts}^2$. Okrajové podmínky byly zvoleny periodické na delších svislých hranách a „bounce-back“ na horní

a spodní hranici. Počítány jsou dva případy pro dvě různá Reynoldsova čísla, a to $Re = 256$ a $Re = 2048$. Jejich další parametry jsou uvedeny v následujících dvou odstavcích.

4.2.1 $Re = 256$

Prvním modelovaným případem je laminární proudění s Reynoldsovým číslem $Re = 256$. Modelované tekutiny mají následující parametry. Těžší tekutina má hustotu $\rho_1 = 0.12 \text{ mu/lu}^3$ a kinematickou viskozitu $\nu_1 = 0.02 \text{ lu}^2/\text{ts}$. Lehčí tekutina má hustotu $\rho_2 = 0.04 \text{ mu/lu}^3$ a stejnou kinematickou viskozitu jako těžší tekutina, tj. $\nu_2 = 0.02 \text{ lu}^2/\text{ts}$. Gravitační zrychlení je $1.25 \cdot 10^{-5} \text{ lu.ts}^{-2}$ a relaxační parametr má hodnotu $\tau_f = 0.56$.

Na obrázku 4.4 jsou uvedeny dosažené výsledky v průběhu času daného výsledky z práce [21], které jsou pro srovnání uvedeny na obrázku 4.5 a byly také počítány lattice Boltzmannovo metodou. Prezentované dosažené výsledky zobrazují hustotu modelovaných tekutin. Zobrazený čas je tzv. bezrozměrný čas normalizovaný výrazem $\sqrt{\frac{W}{g}}$, kde W označuje kratší hranu výpočtové oblasti a g je gravitační zrychlení.

4.2.2 $Re = 2048$

Druhým počítaným případem je případ turbulentního proudění daného Reynoldsovým číslem $Re = 2048$. Modelované tekutiny mají tyto parametry. Těžší tekutina má hustotu $\rho_1 = 0.12 \text{ mu/lu}^3$ a kinematickou viskozitu $\nu_1 = 0.005 \text{ lu}^2/\text{ts}$. Lehčí tekutina má hustotu $\rho_2 = 0.04 \text{ mu/lu}^3$ a kinematickou viskozitu $\nu_2 = 0.005 \text{ lu}^2/\text{ts}$. Gravitační zrychlení je nyní $6.25 \cdot 10^{-6} \text{ lu.ts}^{-2}$ a hodnota relaxačního parametru je $\tau_f = 0.515$.

Dosažené výsledky jsou zobrazeny na obrázku 4.6 a zobrazují opět hustotu tekutin. Uvedené časové okamžiky jsou dány podle obrázku 4.7 z [21]. Výsledky v práci [21] byly také počítány lattice Boltzmannovo metodou. Zobrazený čas je stejný jako v případě nižšího Reynoldsova čísla $Re = 256$.

Z uvedených obrázků je zřejmá poměrně dobrá shoda výsledků. Lepší shody by bylo dosaženo použitím jemnější sítě, která byla použita v [21].

4.3 Působení vztlakové síly na bublinu

Při ponoření tělesa do kapaliny působí na těleso jednak gravitační síla

$$F_g = mg \quad (4.3.1)$$

směrem dolů, a jednak vztlaková síla

$$F_{vz} = V_{teleso} \rho_{kapalina} g \quad (4.3.2)$$

směrem nahoru. V závislosti na tom, jaká z těchto dvou sil převažuje, klesá těleso ke dnu, stoupá vzhůru nebo při rovnosti sil plove v kapalině.

V následujícím příkladu je modelována bublina o průměru 0.01 m umístěná na počátku výpočtu ve vzdálenosti 0.02 m od středu bubliny ke dnu nádoby s tekutinami. Působením gravitační a vztlakové síly je tato bublina postupně vytlačována směrem nahoru. Poměry hustot a poměry viskozit jsou rovny hodnotě 1000. V této úloze je zvolena těžší tekutina o hustotě $\rho_1 = 1000\text{ kg/m}^3$ a dynamické viskozitě $\eta_1 = 10^{-2}\text{ Pa}\cdot\text{s}$. Lehčí tekutina tvořící bublinu má hustotu $\rho_2 = 1\text{ kg/m}^3$ a dynamickou viskozitu $\eta_2 = 10^{-5}\text{ Pa}\cdot\text{s}$. Velikost výpočtové oblasti je 90×270 buněk, ve fyzikálních rozměrech má delší hrana obdélníku délku 0.15 m . Hodnoty konstant v rovnici (3.1.3) jsou $\beta = 0.1$ a $k = 0.0001$. Gravitační zrychlení má hodnotu 9.81 m/s^2 .

Tvar bubliny závisí na velikosti povrchového napětí. Vliv povrchového napětí vyjadřuje Bondovo (Eotvosovo) číslo [4, 48]. Tento bezrozměrný zlomek je definován podílem gravitačního zrychlení g , druhou mocninou průměru bubliny D a rozdílem hustot modelovaných tekutin ρ_1 a ρ_2 s povrchovým napětím σ_{12} , neboli

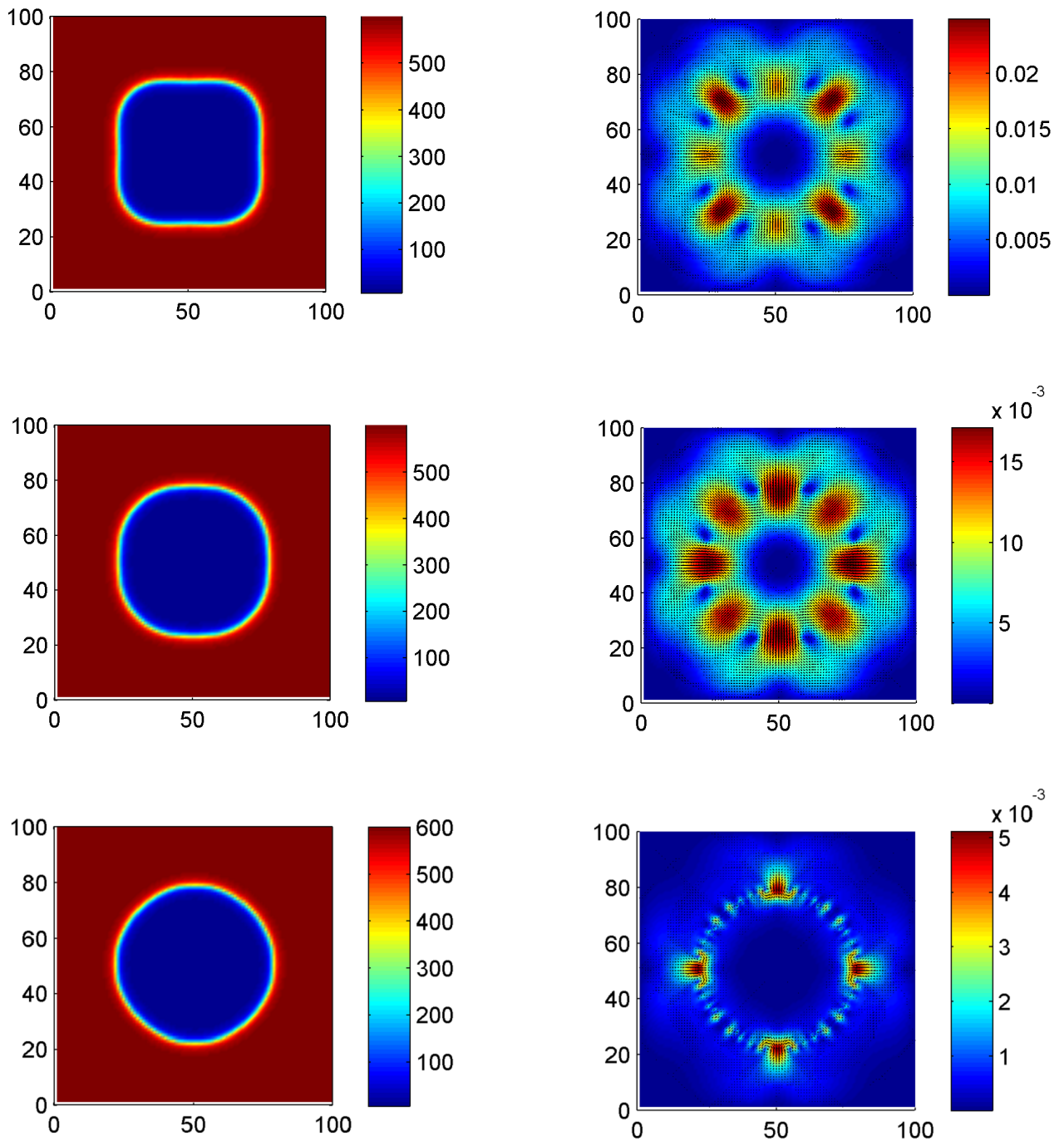
$$Bo = \frac{gD^2}{\sigma_{12}} (\rho_1 - \rho_2). \quad (4.3.3)$$

Se vzrůstajícím Bondovým číslem klesá vliv povrchového napětí na povrch bubliny a ze zakulaceného tvaru bubliny se postupně stává zakřivená elipsa. Při vyrovnání vztlakových a viskózních sil a sil vzniklých od povrchového napětí je určen konečný tvar bubliny.

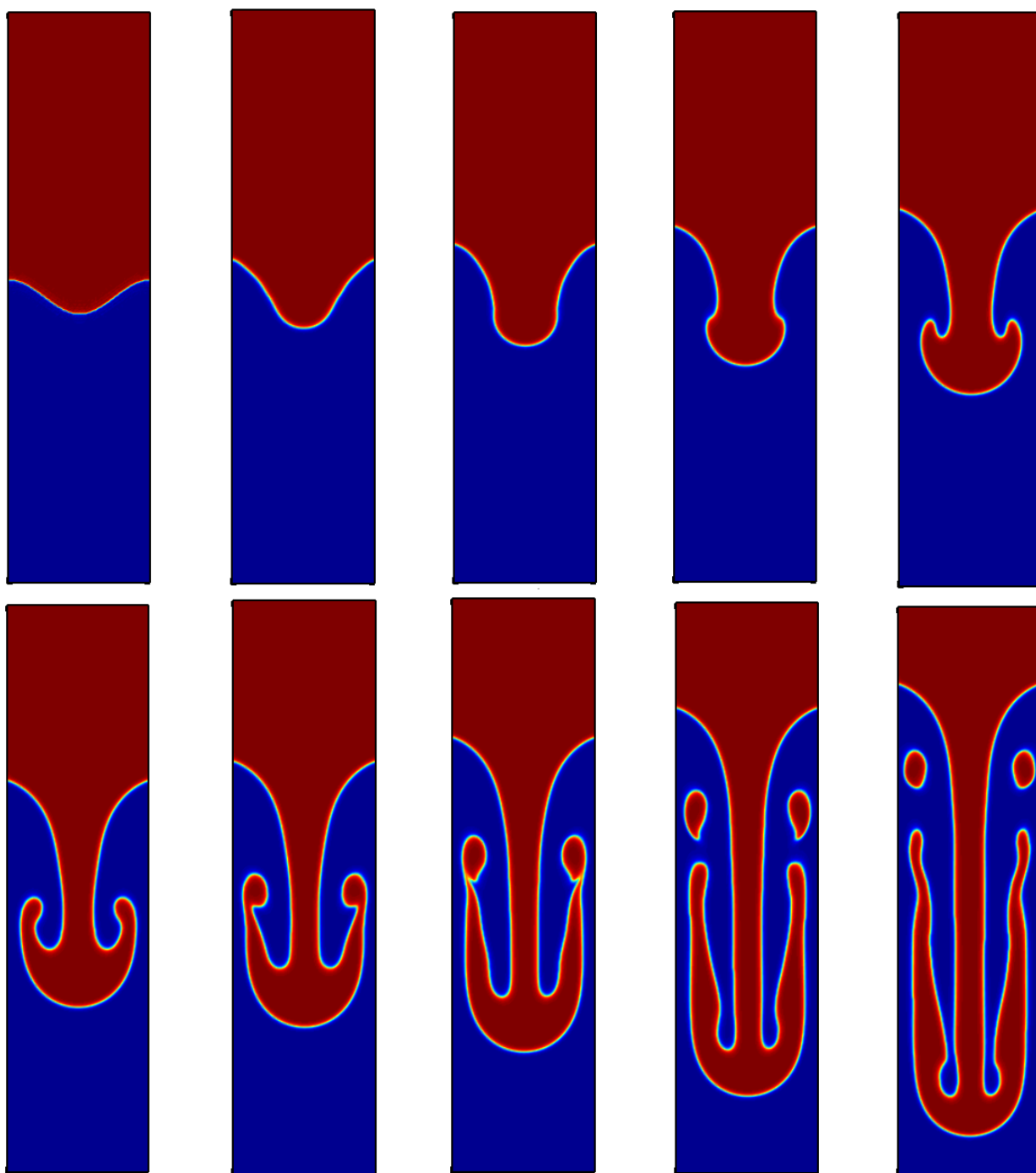
Na obrázcích 4.8, 4.9 a 4.10 jsou na levé straně zobrazeny dosažené výsledky pro různá Bondova čísla, konkrétně pro hodnoty $Bo = 1, 10, 100$ a výsledky jsou srovnány s výsledky z [48] zobrazenými vždy na pravé straně obrázků, které byly vypočteny VOSET metodou. VOSET je metoda, která spojuje dohromady VOF metodu a LS metodu. Z práce [48] byly převzaty i parametry úlohy.

Ze zobrazených výsledků lze usoudit poměrně dobrou shodu tvarů bublin pro jednotlivá Bondova čísla. Přesnějších výsledků by se dosáhlo zjemněním výpočtové sítě.

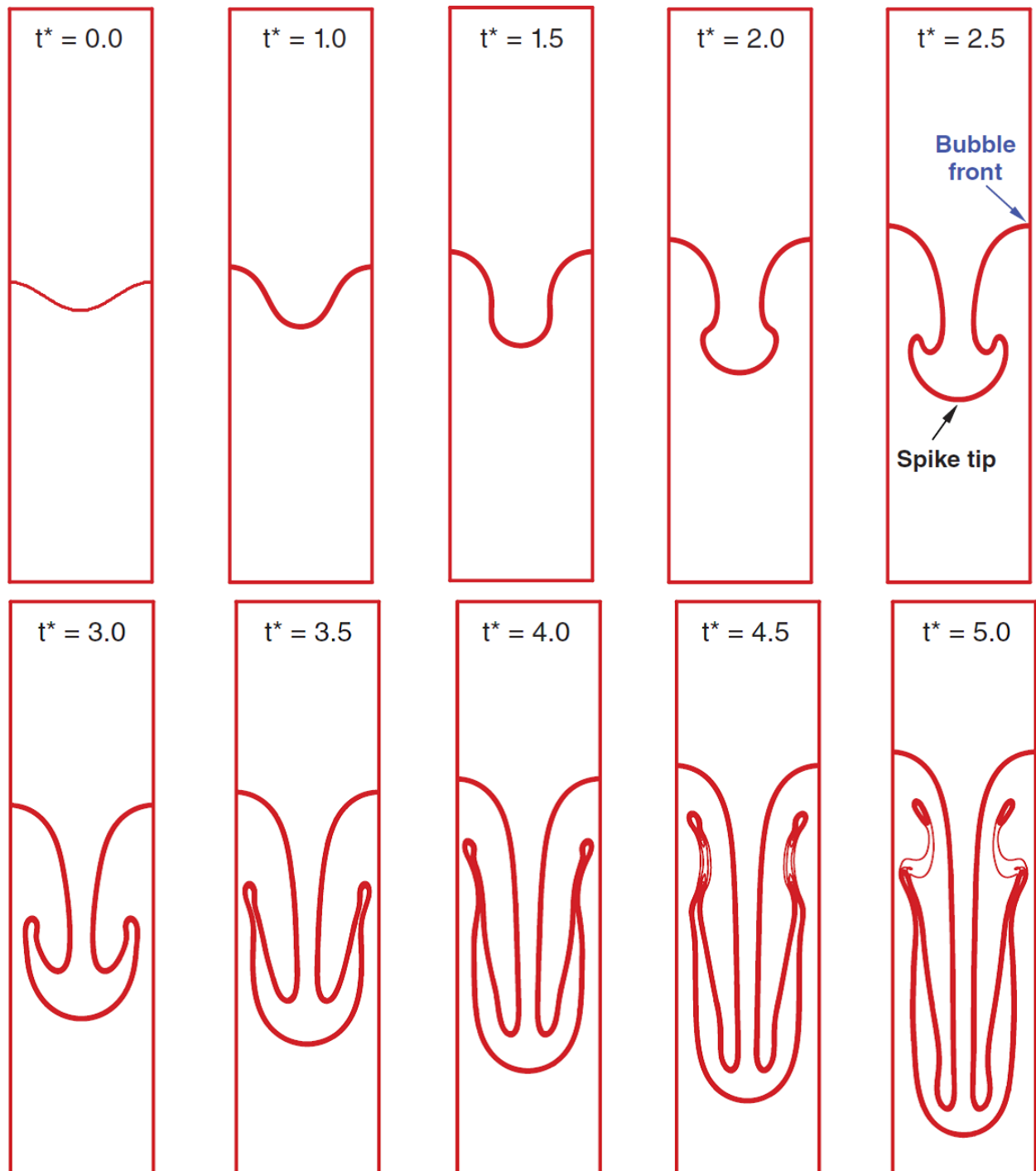
Na obrázku 4.11 jsou pro ukázkou uvedeny průběžné výsledky stoupající bubliny s hodnotou Bondova čísla $Bo = 1$. Zobrazeny jsou dvě třetiny výpočtové oblasti. Z výsledků je patrné, že pro $Bo = 1$ bublina skutečně drží kulatý tvar během celého svého pohybu směrem nahoru.



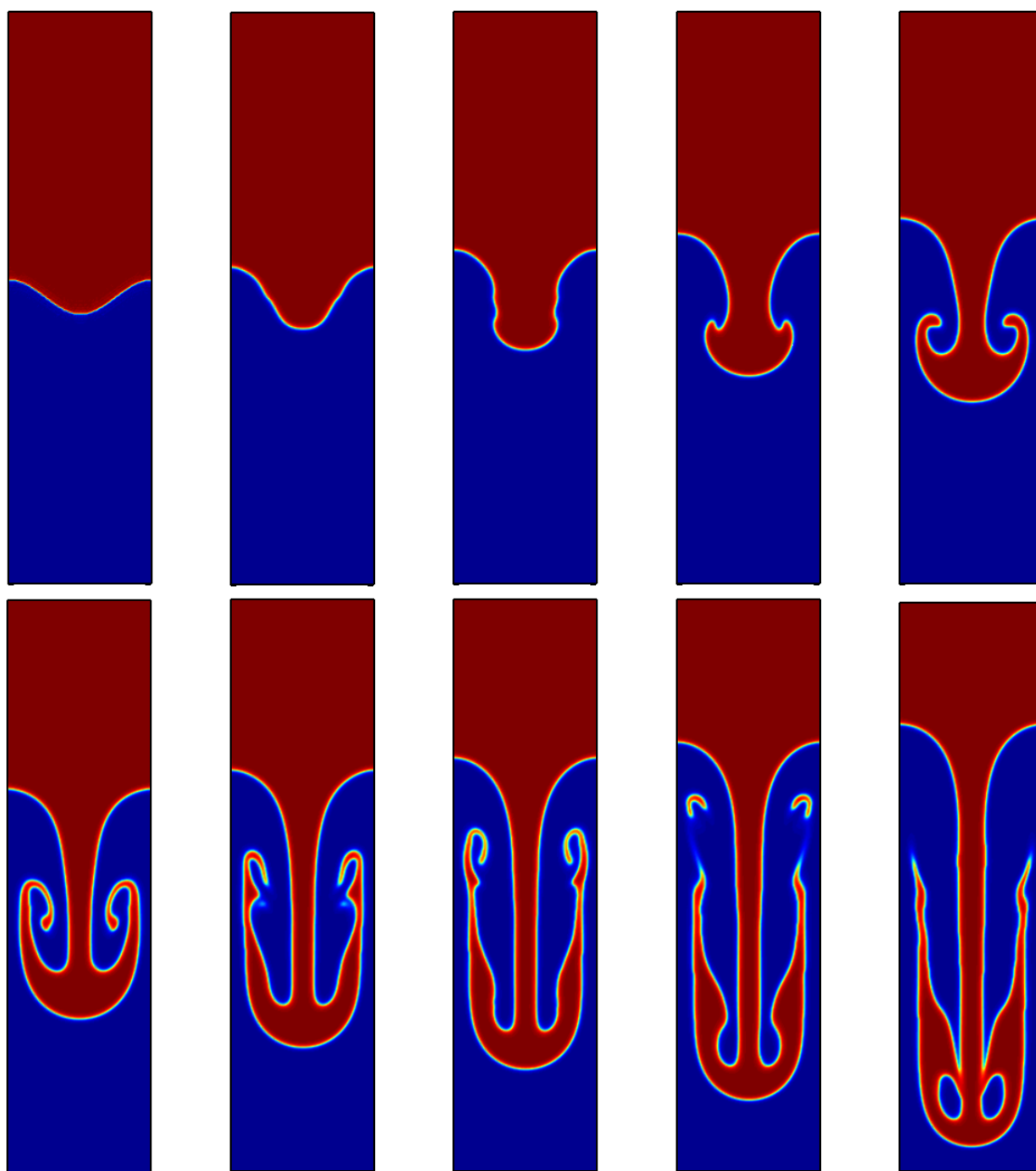
Obrázek 4.3: Zobrazení výsledků působení povrchového napětí na tekutinu tvořící čtverec na začátku výpočtu. Uvedeny jsou postupně 2400., 4000. a 12000. iterace. Na levé části obrázku je zobrazena hustota a na pravé části obrázku rychlost.



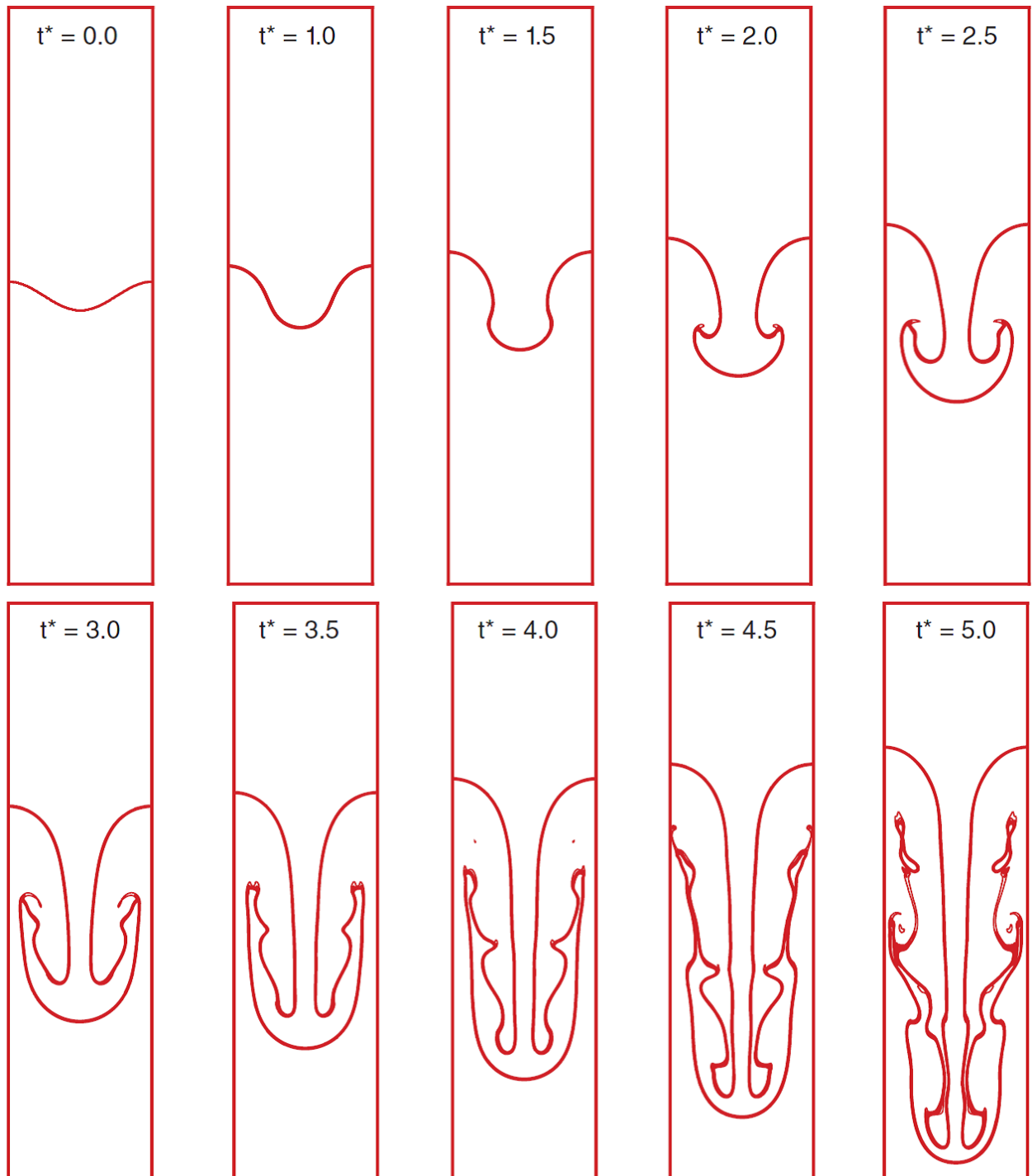
Obrázek 4.4: Výsledky výpočtu Rayleighovy-Taylorovy nestability pro $Re = 256$. Zobrazena je hustota modelovaných tekutin.



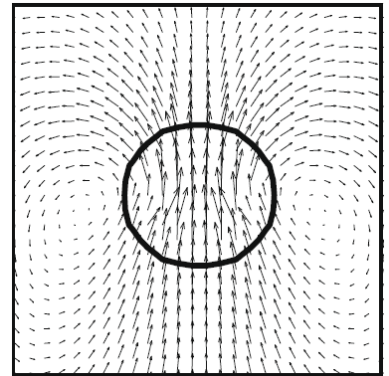
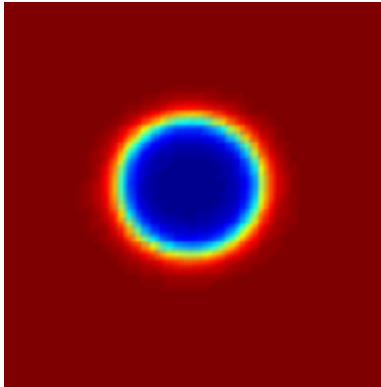
Obrázek 4.5: Výsledky výpočtu Rayleighovy-Taylorovy nestability pro $Re = 256$ převzaté z knihy [21].



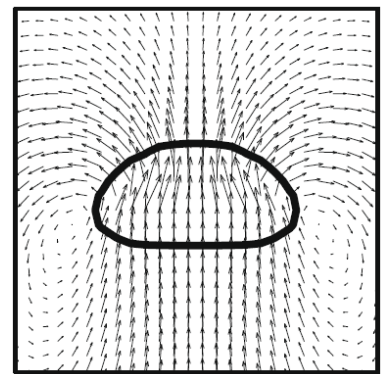
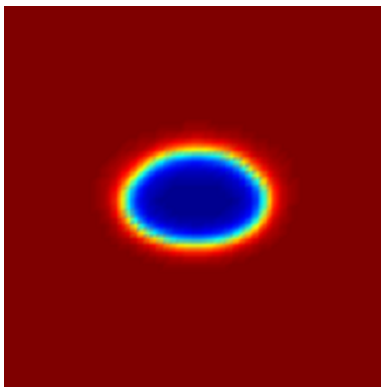
Obrázek 4.6: Výsledky výpočtu Rayleighovy-Taylorovy nestability pro $Re = 2048$. Zobrazena je hustota modelovaných tekutin.



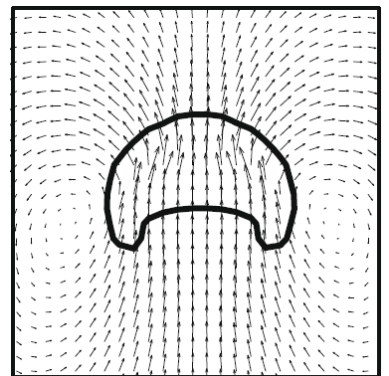
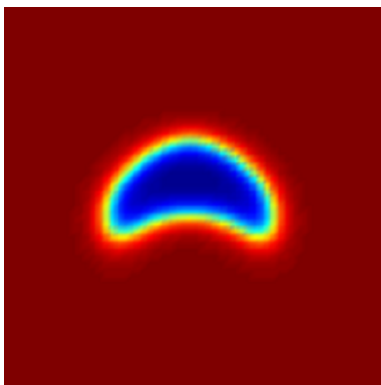
Obrázek 4.7: Výsledky výpočtu Rayleighovy-Taylorovy nestability pro $Re = 2048$ převzaté z knihy [21].



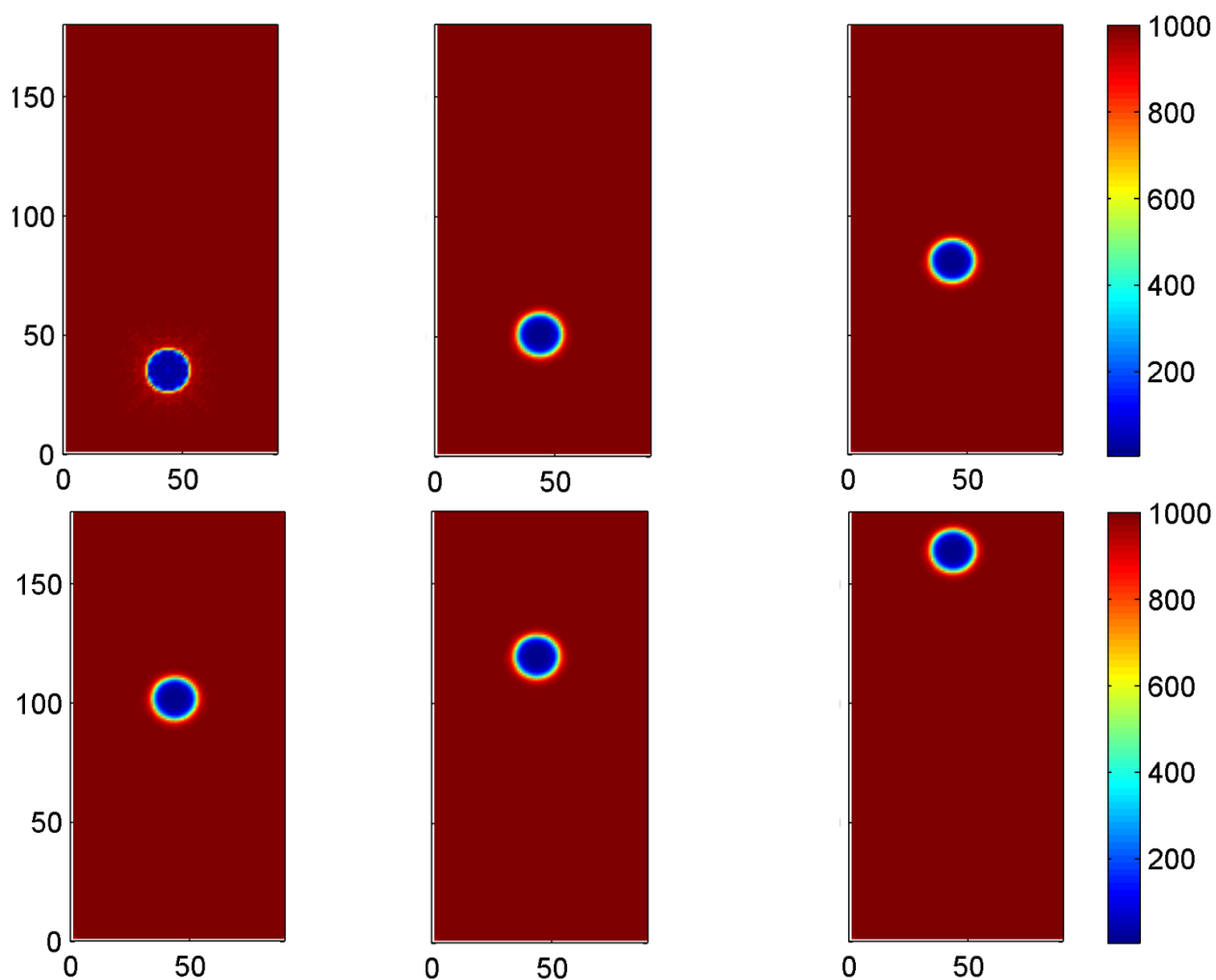
Obrázek 4.8: Srovnání výsledků modelu stoupající bubliny v kapalině pro $Bo = 1$. Levá část obrázku zobrazuje výsledky počítané algoritmem prezentovaným v této diplomové práci. Na pravé části obrázku jsou výsledky převzaté z [48] získané metodou VOSET.



Obrázek 4.9: Srovnání výsledků modelu stoupající bubliny pro $Bo = 10$.



Obrázek 4.10: Srovnání výsledků modelu stoupající bubliny pro $Bo = 100$.



Obrázek 4.11: Výsledky modelu stoupající bubliny pro $Bo = 1$.

Závěr

V této práci byl popsán vývoj a princip lattice Boltzmannovy metody. Následně byl definován algoritmus pro výpočet modelování vícefázového proudění. Byl navržen stabilní model dvoufázového proudění pro malý i velký poměr hustot modelovaných tekutin a se zahrnutým vlivem povrchového napětí. Model vícefázového proudění byl získán úpravou modelů z prací [4], resp. [22]. Výpočtem tlaku z Poissonovy rovnice metodou konečných diferencí se zvýšila stabilita metody a přesnost řešení pro velké poměry hustot. Úpravou vztahu pro vyjádření rovnovážné distribuční funkce pro výpočet Cahn-Hilliardovy rovnice pomocí LBM se zvýšila přesnost a stabilita řešení pohybu rozhraní.

Vyvinutý algoritmus byl aplikován na tři úlohy. První úloha testuje vliv povrchového napětí, kdy se ze čtverce naplněného tekutinou stane kruh. Druhou úlohou je modelování Rayleighovy-Taylorovy nestability. Třetí úlohou byl výpočet pohybu bubliny naplněné vzduchem stoupající vlivem vztlakové síly ve vodě.

Správné působení povrchového napětí dokazují výsledky první počítané úlohy uvedené na obrázcích 4.2 a 4.3. Z obrázků je patrné postupné zakulacování čtverce naplněného tekutinou, který se nachází uprostřed jiné, těžší tekutiny.

Úloha Rayleighovy-Taylorovy nestability byla vypočtena pro dvě různá Reynoldsova čísla, a to $Re = 256$ a $Re = 2048$. Výsledky úlohy byly srovnány s výsledky z knihy [21], které byly vypočteny také lattice Boltzmannovou metodou. Z obrázků 4.4, 4.5 a 4.6, 4.7 je zřejmá poměrně dobrá shoda výsledků. Lepších výsledků, především pro zachycení vznikajících a trhajících se malých vírů, by bylo dosaženo při použití jemnější sítě.

Model bubliny byl proveden pro tři případy s různým povrchovým napětím, definovanými Bondovým číslem Bo , a to pro hodnoty $Bo = 1$, 10 , 100 . Pro $Bo = 1$ má bublina kulatý tvar, pro $Bo = 10$ se tvar zužuje do eliptického tvaru a pro $Bo = 100$ má bublina tvar zakřivené elipsy. Výsledky tvarů bublin pro uvedené tři hodnoty Bondova čísla byly porovnány s výsledky z práce [48], kde byl výpočet proveden VOSET metodou. Z obrázků 4.8, 4.9 a 4.10 je patrná poměrně dobrá shoda výsledků. Přesnějších výsledků by bylo dosaženo při použití jemnější výpočtové sítě.

Výhodami LB modelu pro vícefázové proudění jsou především jednoduchost implementace algoritmu, snadná paralelizace díky charakteru metody a snadné rozšíření modelu o další fyzikální jevy úpravou kolizních procesů. Další výhodou je, že není

zapotřebí řešit Navier-Stokesovy rovnice, protože její řešení pohybu tekutin dostatečně nahrazuje lattice Boltzmannova rovnice.

Nevýhodami LB modelu pro vícefázové proudění je klesající stabilita modelu s klesající viskozitou modelovaných tekutin a s rostoucí rychlostí proudění, což způsobuje růst Reynoldsova čísla a z laminárního proudění se stává turbulentní proudění. Tento problém lze vyřešit implementací turbulentního modelu. Tzv. přechodové proudění, kde se střídá laminární a turbulentní proudění, lze stabilizovat zavedením MRT modelu, což bylo provedeno i v této diplomové práci. Stabilita modelu také klesá s rostoucím poměrem hustot modelovaných tekutin. Řešením tohoto problému je úprava modelu, čímž se zabývala také tato práce. Zvýšení stability modelu je dále možné provést zjemněním sítě nebo zmenšením časového kroku.

Dalším možným rozšířením této práce je například rozšíření 2D modelu na 3D model, optimalizace rychlosti výpočtu (zavedení paralelizace výpočtu), modelování většího počtu fází než dvě, zahrnutí vlivu teploty a implementace turbulentního modelu.

Literatura

- [1] <http://natureofcode.com/book/chapter-7-cellular-automata/>.
- [2] <http://plato.stanford.edu/entries/cellular-automata/>.
- [3] <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/serten.html>.
- [4] A. Banari, *Lattice Boltzmann simulation of multiphase flows; application to wave breaking and sea spray generation*, Ph.D. thesis, University of Rhode Island, 2014.
- [5] 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.
- [6] J. W. Cahn and J. E. Hilliard, *Free energy of a non-uniform system I. Interfacial free energy*, *J. Chem. Phys* **28** (1958), 258–267.
- [7] S. Chen and G. D. Doolen, *Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows*, *Annual review of fluid mechanics* **30** (1998), 329–364, doi: 10.1146/annurev.fluid.30.1.329.
- [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] H. Ding, Peter D. M. Spelt, and Ch. Shu, *Diffuse interface model for incompressible two-phase flows with large density ratios*, *Journal of Computational Physics* **226** (2007), 2078–2095.
- [10] G. Tryggvason et al, *A front-tracking method for the Computations of multiphase flow*, *Journal of Computational Physics* **169** (2001), no. 2, 708–759, doi:10.1006/jcph.2001.6726.
- [11] D. Eyre, M. Grinfeld, and A. Novick-Cohen, *Cahn-Hilliard equation*, 2001.
- [12] U. Frisch, B. Hasslacher, and Y. Pomeau, *Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equations*, *Physical Review Letters* **56** (1986), 1505–1508.

-
- [13] V. Girault and P.-A. Raviart, *Finite Element Methods for Navier-Stokes Equations - Theory and Algorithms*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1986.
- [14] A. K. Gunstensen, D. H. Rothman, S. Zaleski, and G. Zanetti, *Lattice Boltzmann model of immiscible fluids*, *Physical Review A* **43** (1991), no. 8, 4320–4327.
- [15] 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.
- [16] X. He and L.-S. Luo, *Lattice Boltzmann Model for the Incompressible Navier-Stokes Equation*, *Journal of Statistical Physics* **88** (1997).
- [17] X. Y. He, S. Y. Chen, and R. Y. Zhang, *A lattice Boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of Rayleigh-Taylor instability*, *Journal of Computational Physics* **152** (1999), no. 2, 642–663.
- [18] F. Higuera and J. Jimenez, *Boltzmann approach to lattice gas simulations*, *Europhys. Lett.* **9** (1989), no. 7, 663–668.
- [19] C. W. Hirt and B. D. Nichols, *Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries*, *Journal of Computational Physics* **39** (1981), no. 1, 201–225, doi:10.1016/0021-9991(81)90145-5.
- [20] D. J. Holdych, D. Rovas, J. G. Georgiadis, and R. O. Buckius, *An improved hydrodynamics formulation for multiphase flow lattice-Boltzmann models*, *International Journal of Modern Physics* **9** (1998), no. 8, 1393–1404.
- [21] H. Huang, M. C. Sukop, and X.-Y. Lu, *Multiphase Lattice Boltzmann Methods: Theory and Application*, John Wiley and Sons, Ltd, 2015.
- [22] T. Inamuro, T. Ogata, S. Tajima, and N. Koniski, *A lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows with large density differences*, *Journal of Computational physics* **198** (2004), 628–644.
- [23] J.M.V.A. Koelman, *A simple lattice Boltzmann scheme for Navier-Stokes fluid flow*, *Europhys. Lett.* **15** (1991), no. 6, 603–607.
- [24] 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.
- [25] 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.

-
- [26] 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.
- [27] 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.
- [28] P. Lallemand, L. S. Luo, and Y. Peng, *A lattice Boltzmann front-tracking method for interface dynamics with surface tension in two dimensions*, *Journal of Computational physics* **226** (2007), no. 2, 1367–1384.
- [29] J. Latt, *Choice of units in lattice Boltzmann simulations*, 2008, <http://www.lbmeth.org/legal>.
- [30] Q. Li and A. Wagner, *Symmetric free-energy-based multicomponent lattice Boltzmann method*, *Physical Review E* **76** (2007), no. 3, 036701.
- [31] P. F. Linden and T. G. L. Shirtcliffe, *The diffusive interface in double-diffusive convection*, *Journal of Fluid Mechanics* **87** (1978), 417–432, doi:10.1017/S002211207800169X.
- [32] L.-S. Luo, *Lattice Boltzmann Methods for Computational Fluid Dynamics*, Institut fuer Computeranwendungen im Bauingenieurwesen (CAB), Technischen Universitaet Braunschweig, Germany, 2003.
- [33] G. McNamara and G. Zanetti, *Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata*, *Physical Review Letters* **61** (1988), 2332–2335, APS.
- [34] S. Osher and R. P. Fedkiw, *Level Set Methods: An Overview and Some Recent Results*, *Journal of Computational Physics* **169** (2001), no. 2, 463–502, doi:10.1006/jcph.2000.6636.
- [35] Ch. Peng, *The Lattice Boltzmann Method for Fluid Dynamics: Theory and Applications*, Master’s thesis, Ecole Polytechnique Federale de Lausanne, 2011.
- [36] P. C. Philippi, *Lectures in the Lattice Boltzmann Method*, Mechanical Engineering Department.
- [37] A. Prosperetti and G. Tryggvason, *Computational methods for multiphase flow*, Cambridge University Press, 2007.
- [38] Y. Qian, D. dHumieres, and P. Lallemand, *Lattice BGK models for Navier-Stokes equation*, *EPL (Europhysics Letters)* **17** (1992), no. 6, 479.

-
- [39] D. Rothman and J. Keller, *Immiscible cellular-automaton fluids*, *Journal of Statistical Physics* **52** (1988), no. 3/4, 1119–1127.
- [40] D. H. Rothman and S. Zaleski, *Lattice-gas models of phase separation: interfaces, phase transitions, and multiphase flow*, *Rev. Modern Phys.* **66** (1994), no. 4, 1417–1479.
- [41] U. Ruede and D. Bartuschat, *Introduction to the Lattice Boltzmann Method*, 10th Indo-German Winter Academy.
- [42] R. Scardovelli and S. Zaleski, *Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow*, *Annual Review of Fluid Mechanics* **31** (1999), 567–603.
- [43] X. W. Shan and H. D. Chen, *Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components*, *Physical Review E* **47** (1993), no. 3, 1815–1819.
- [44] X. W. Shan and G. Doolen, *Multicomponent lattice-Boltzmann model with interparticle interaction*, *Journal of Statistical Physics* **81** (1995), no. 1-2, 379–393.
- [45] G. D. Smith, *Numerical solution of partial differential equations - Finite Difference Methods*, Brunel University. Oxford university press, 1985.
- [46] S. Succi, *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond*, Oxford University Press, 2001.
- [47] M. Sukop, C. Thorne, and T. Daniel Jr., *Lattice Boltzmann Modeling - An Introduction for Geoscientists and Engineers*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006, 2007.
- [48] D. L. Sun and W. Q. Tao, *A coupled volume-of-fluid and level set (VOSET) method for computing incompressible two-phase flows*, *International Journal of Heat and Mass Transfer* **53** (2009), 645–655, doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2009.10.030.
- [49] M. R. Swift, E. Orlandini, W. R. Osborn, and J. M. Yeomans, *Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems*, *Physical Review E* **54** (1996), no. 5, 5041–5052.
- [50] M. R. Swift, W. R. Osborn, and J. M. Yeomans, *Lattice Boltzmann simulation of nonideal fluids*, *Physical Review Letters* **75** (1995), no. 5, 830–833.
- [51] A.-K. Tornberg, *Interface Tracking Methods with Application to Multiphase Flows*, Ph.D. thesis, Royal Institute of Technology Department of Numerical Analysis and Computing Science, Stockholm, 2000.
- [52] H. K. Versteeg and W. Malalasekera, *An introduction to computational fluid dynamics - The Finite Volume Method*, Pearson Education Limited, 1995, 2007.
- [53] Dieter A. Wolf-Gladrow, *Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models - an introduction*, Springer, 2005.

- [54] A. Xu, *Finite-difference lattice-Boltzmann methods for binary fluids*, Physical Review E **71** (2005), no. 6, 066706.
- [55] Z. Yu and L. S. Fan, *Multirelaxation-time interaction-potential-based lattice boltzmann model for two-phase flow*, Physical Review E **82** (2010), no. 4, 046708.