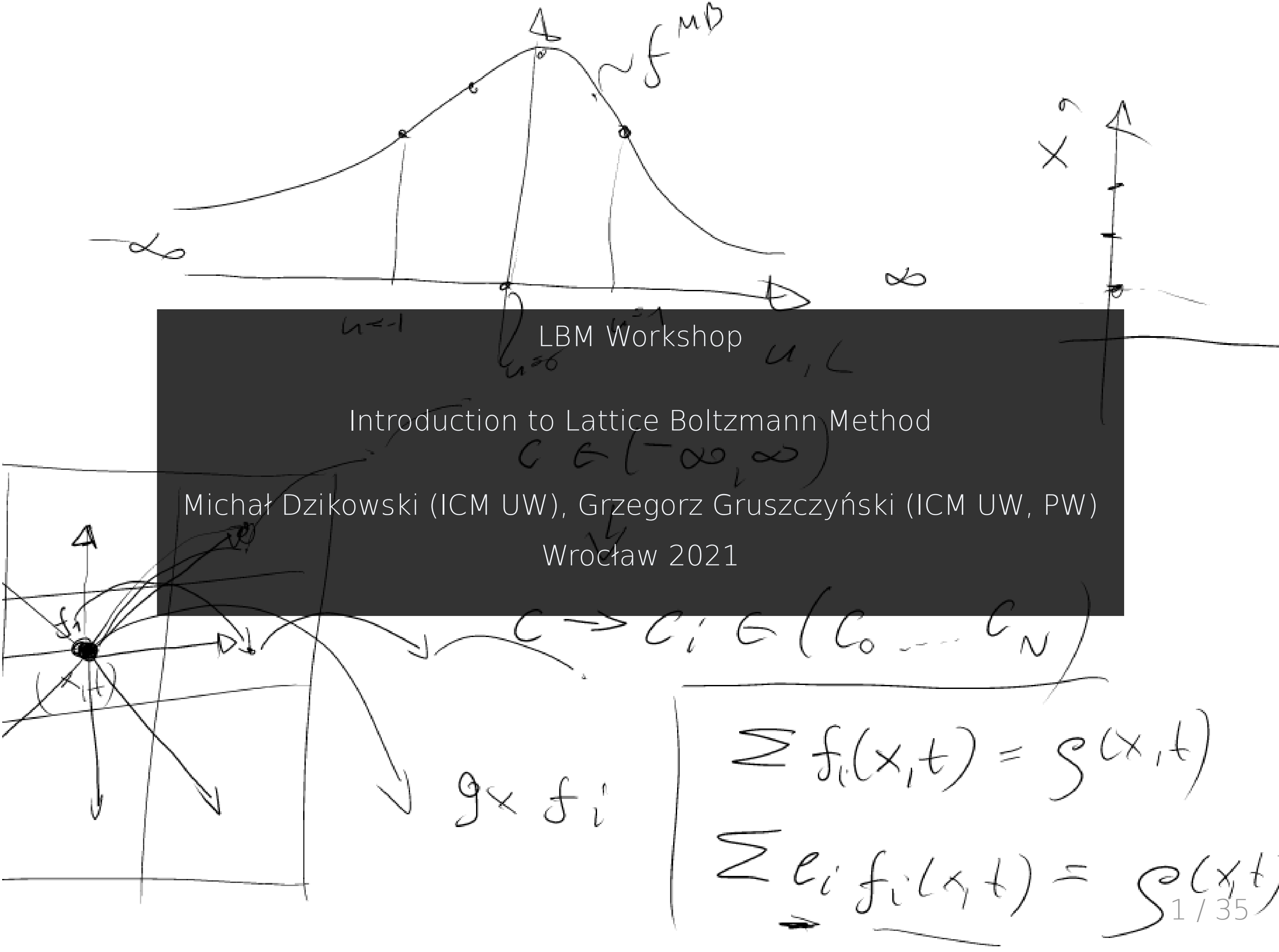


LBM Workshop

Introduction to Lattice Boltzmann Method

Michał Dzikowski (ICM UW), Grzegorz Gruszczyński (ICM UW, PW)

Wrocław 2021

- Model bilardowy gazu doskonałego, wykładnik Lapunowa, chaos i automaty komórkowe
- Równanie Boltzmanna
- Dyskretne Równanie i wersja kratowa

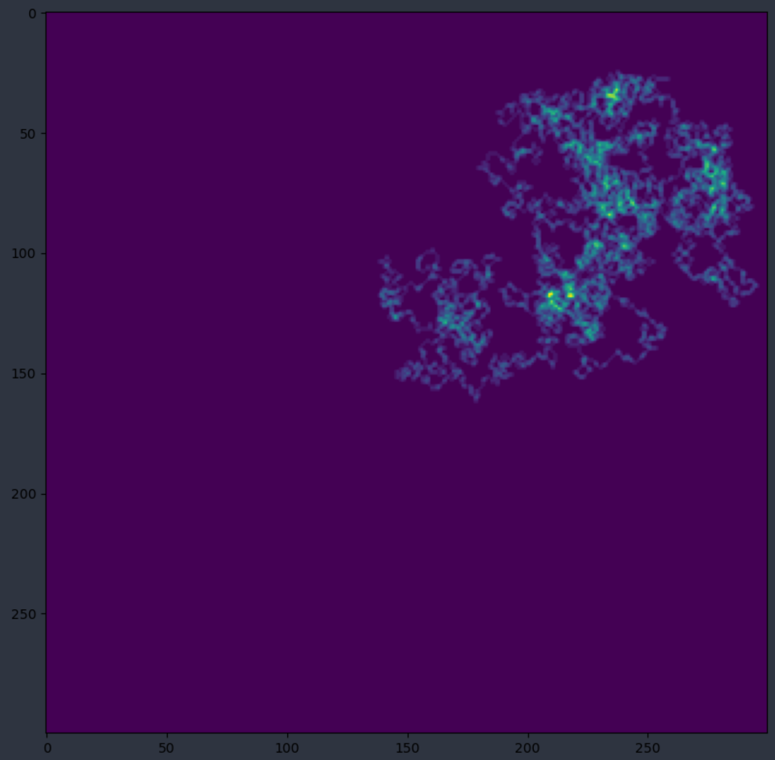
Mrówka Langtona

Mrówka Langtona

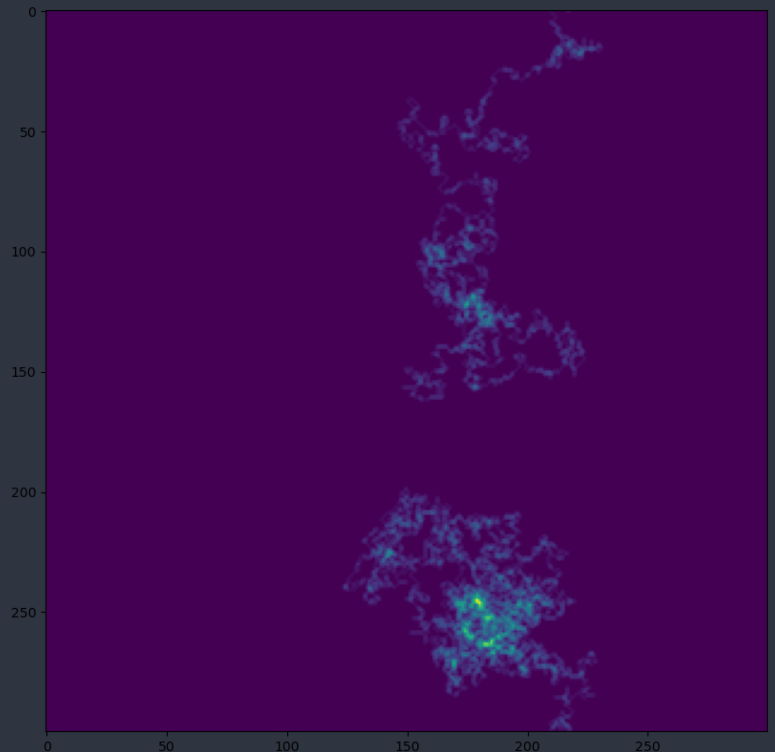
- kartka w kratkę, dana kratka jest czarna lub biała
- mrówka zaczyna gdziekolwiek
- przechodzi o 1 kratkę zgodnie ze swoją prędkością
- jeżeli kratka do której wejdzie jest:
  - biała, skręć w lewo
  - biała, skręć w prawo
- zmień kolor kratki

1. etap: proste, często symetryczne wzory
2. etap: chaos
3. etap: powtarzalny wzór

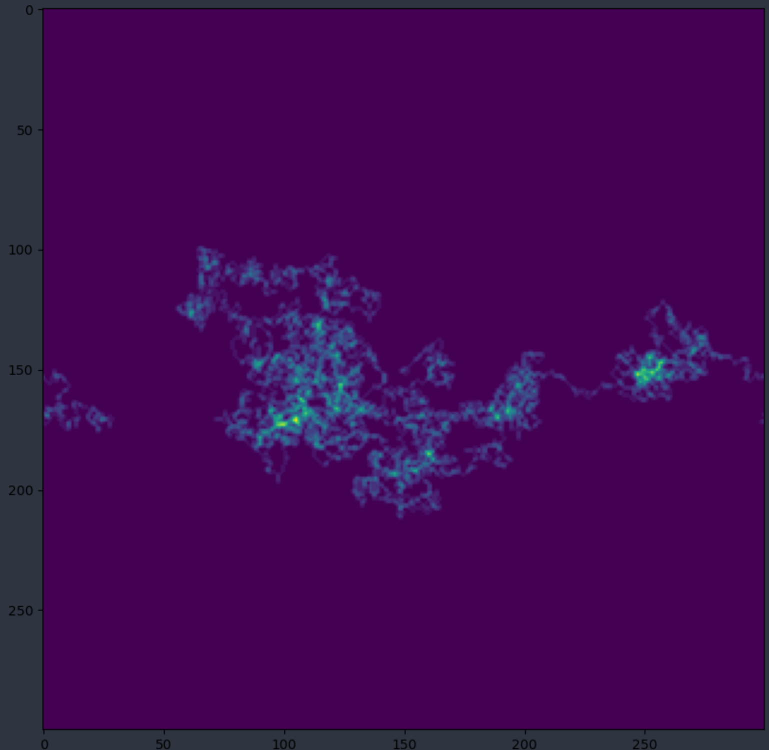
Mrówka Langtona - losowy warunek początkowy



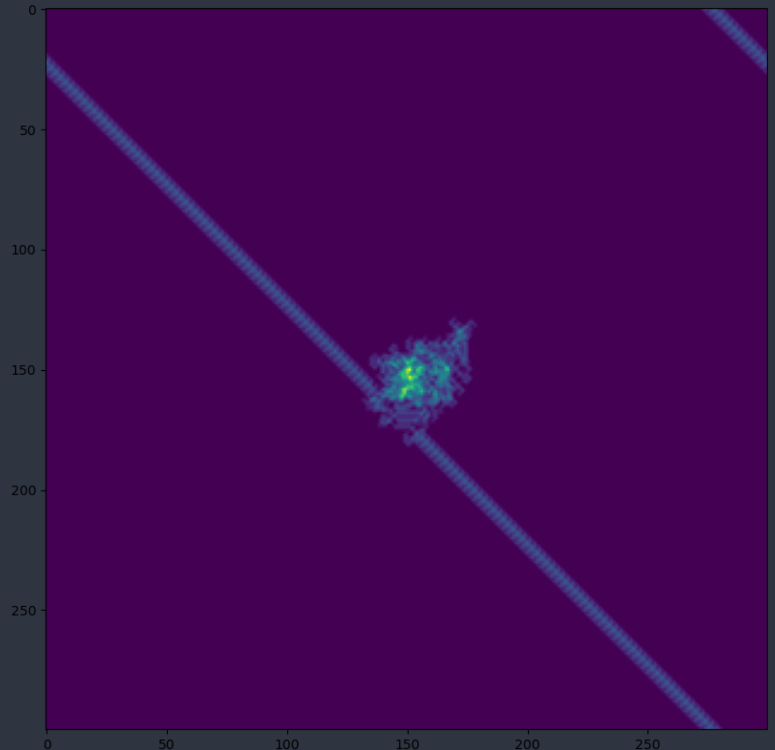
Mrówka Langtona - losowy warunek początkowy



Mrówka Langtona - losowy warunek początkowy



Mrówka Langtona - zerowy warunek początkowy



Model bilardowy gazu doskonałego

Model bilardowy gazu doskonałego

Przyjmijmy, że patrzymy na rzadki gaz. Każda cząstka jest "kulą bilardową", t.j

- zachowuje pęd
- lata swobodnie i jest mała w stosunku do obszaru
- zderza się z innymi kulami
- na kulki oddziaływają potencjał $\phi(r)$, gdzie r to odległość

Ruchem rządzą prawa Newtona, tj

$$\frac{dx_i}{dt} = p_i/m$$

$$\frac{dp_i}{dt} = F_i$$

gdzie $i = 1 \ldots N$, czyli mamy $6N$ równań

Model bilardowy gazu doskonałego

Niby proste, ale

Model bilardowy gazu doskonałego

Niby proste, ale

$$N \approx Av \approx 10^{23}$$

Model bilardowy gazu doskonałego

Niby proste, ale

$$N \approx Av \approx 10^{23}$$

jakby tego było mało to dowolnie mało zaburzenie w.p. rośnie jak

$$\delta(t) = \delta(0)\exp(\lambda t)$$

Model bilardowy gazu doskonałego

Niby proste, ale

$$N \approx Av \approx 10^{23}$$

jakby tego było mało to dowolnie mało zaburzenie w.p. rośnie jak

$$\delta(t) = \delta(0)\exp(\lambda t)$$

oraz

$1\ cm^3$ Argonu produkuje 10^{29} "digits of information" na sekundę

Równanie Boltzmanna

Przestrzeń fazowa

rysunek

Krzywa w przestrzeni fazowej określa ewolucję układu w czasie (wszystkich jego parametrów)

Gęstość prawdopodobieństwa

$f(p, x, t)$ mierzy jaka jest szansa, że spotkamy cząstkę w chwili t, mającej pęd p i przebywającej w punkcie x

Całkowita liczba cząstek: $N = \int f(p, x, t) du dx$

Równanie ewolucji

$$f(u, x, t)dudx$$

w chwili $t + \delta t$ będą zajmowały objętość

$$f(u + F/m\delta t, x + u\delta t, t + \delta t)dudx$$

Równanie kinetyczne Boltzmanna $\left(\frac{\partial}{\partial t} + u \cdot \nabla_r + F \cdot \nabla_u\right) f(u, x, t) = \Omega$

gdzie Ω to tzw. całka zderzeniowa. Zatem gaz doskonały opisany jest równaniem różniczkowo-całkowym

Równanie Boltzmanna stosowane jest bezpośrednio w przypadku tzw. rozrzedzonego gazu (aerodynamika powrotu w atmosferę itp)

Side note: Funkcja H Boltzmanna

Całka zderzeniowa: $\Omega = \int \sigma(\Gamma)(v_1 - v_2)(f_2' f_1' - f_2 f_1)$

$f_i = f_i(x, u, t)$

W stanie ustalonym ciśnienie/gęstość są stałe wszędzie, zatem $f_i = f_0(u)$

$\Omega = \int \sigma(\Gamma)(v_1 - v_2)(f_0(v_1') f_0(v_2') - f_0(v_1) f_0(v_2))$

Funkcja H została przez Boltzmanna zdefiniowana jako

$$H(t) = \int f(v,t) \ln f(v,t) dv$$

gdzie $f(v,t)$ spełnia r. Boltzmanna w stanie jednorodnym i bez sił czyli

$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \cancel{u \cdot \nabla_r + F \cdot \nabla_u}\right) f(u,x,t) = \Omega = 0$

Side note: Funkcja H Boltzmanna

Dla stanu ustalonego:

$$\frac{\partial}{\partial t} f(u,t) = \int \sigma(\Gamma)(v_1 - v_2)(f_2' f_1' - f_2 f_1) = 0$$

Pochodna H po czasie to

$$\frac{dH(t)}{dt} = \int \frac{\partial f(v,t)}{\partial t}(1 + \ln f(v,t))dv$$

stąd $\frac{dH(t)}{dt} = 0$

Rozwiązanie ustalone nazywane jest rozkładem równowagowym i oznaczane f_0 lub f^{eq}

Side note: Funkcja H Boltzmanna

Twierdzenie H Boltzmanna

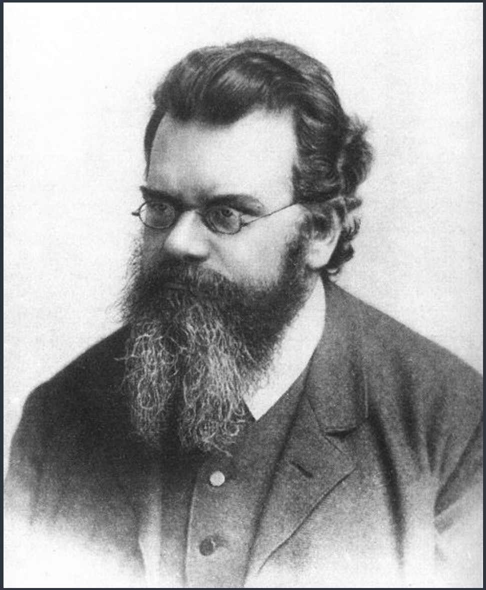
Jeżeli f spełnia równanie kinetyczne, to

$$\frac{dH(t)}{dt} \leq 0$$

oraz dla dowolnych warunków początkowych

$f \to f_0$

Ludwig Boltzmann



Niezmienniki zderzenia

Rozkład równowagowy jest rozwiązaniem

$$\int \sigma(\Gamma)(v_1 - v_2)(f_0' f_0' - f_0 f_0) = 0$$

wystarczy zatem aby

$$f_0' f_0' - f_0 f_0 = 0$$

co po zlogarytmowaniu daje

$$\ln(f_0') + \ln(f_0') = \ln(f_0) + \ln(f_0)$$

co przypomina prawa zachowania. Jeżeli $\xi(v)$ to dowolna wielkość zachowana przez zderzenie i zależna od v.

Niezmienniki zderzenia

Dla prostej kinematyki 2 piłek o prędkościach v_1 i v_2 zachowany jest

- pęd $mv_1 + mv_2 = mv_1' + mv_2'$
- energia $mv_1^2 + mv_2^2 = m(v_1')^2 + m(v_2')^2$
- liczba cząstek $m \cdot 1 + m \cdot 1 = m \cdot 1 + m \cdot 1$

czyli $\xi(v) = a \cdot v^2 + \mathbf{b} \cdot v + d = -A(v - v_0)^2 + \ln C$

jako że

$$\ln f_0(v) = \xi(v)$$

Rozkład równowagowy

$$f_0(v) = Ce^{-A(v-v_0)^2}$$

Momenty funkcji rozkładu

gęstość liczbowa gazu w stanie ustalonym to $n = N/V$

$$n = \int f(v)dv = C(\pi/A)^{3/2}$$

a średnia prędkość to

$$\int vf(v)dv/n = v_0$$

oraz energia kinetyczna

$$\int \frac{1}{2}mv^2 f(v)dv/n = \frac{3}{4}\frac{m}{A}$$

Mówimy tu o gazie z stanie równowagi, wielkości te możemy zatem powiązać z wielkościami makroskopowymi. Otrzymany rozkład to rozkład Maxwella-Boltzmanna

Momenty funkcji rozkładu

Wielkości te to też tzw. Momenty

$$\int f(v)dv$$

$$\int vf(v)dv$$

$$\int v^2 f(v)dv$$

Przybliżenie BGK

od nazwisk: Prabhu L. Bhatnagar, Eugene P. Gross, Max Krook

$$\Omega = -\omega(f)\left(f - f^{eq}\right)$$

warto dodać, że mimo pozornego radykalnego uproszczenia tak skonstruowana relaksacja jest nawet bardziej nieliniowa niż oryginalny operator Boltzmanna

Jego niezaprzeczalną zaletą jest prostota - stąd możliwość stworzenia LBM

Równanie Lattice Boltzmann, LBM

Równanie Boltzmanna z BGK

$$\frac{\partial}{\partial t} f(c, x, t) + c \cdot \nabla f(c, x, t) = -\omega(f) \left(f - f^{eq}\right)$$

Dyskretne Równanie Boltzmanna

$$\frac{\partial}{\partial t} f_i(x, t) + c_i \cdot \nabla f_i(x, t) = -\omega \left(f_i - f_i^{eq}\right)$$

Równanie Boltzmanna z BGK

$$\frac{\partial}{\partial t} f(c,x,t) + c \cdot \nabla f(c,x,t) = -\omega(f)\left(f - f^{eq}\right)$$

Dyskretne Równanie Boltzmanna

$$\frac{\partial}{\partial t} f_i(x,t) + c_i \cdot \nabla f_i(x,t) = -\omega\left(f_i - f_i^{eq}\right)$$

Lattice Boltzmann

$$\tilde{f}_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - \tilde{f}_i(\mathbf{x}, t) = -\int \omega \left(\tilde{f}_i - \tilde{f}_i^{eq}\right)$$

przy braku sił zewnętrznych możemy uznać wprost że

$$f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = f(x,t) - \omega\left(f_i(x,t) - f_i^{eq}\right)$$

Tak naprawdę całka z prawej strony całkowana jest metodą trapezów a schemat staje się jawny po zamianie zmiennych

Dyskretny rozkład równowagowy

$$\rho(2\pi T)^{-\frac{D}{2}} e^{-\frac{0.5v^2}{T}}$$

Momenty ciągłej funkcji równowagowej

$$\begin{bmatrix} \rho \\ U_x\rho \\ U_y\rho \\ U_x^2\rho + cs_2\rho \\ U_y^2\rho + cs_2\rho \\ U_xU_y\rho \\ U_ycs_2\rho \\ U_xcs_2\rho \\ U_x^2cs_2\rho + U_y^2cs_2\rho + cs_2^2\rho \end{bmatrix}$$

Dyskretny rozkład równowagowy

$$\rho(2\pi T)^{-\frac{D}{2}} e^{-\frac{0.5v^2}{T}}$$

Dyskretna funkcja równowagowa w D2Q9

$$\begin{bmatrix}
\rho\left(U_x^2 cs_2 - U_x^2 + U_y^2 cs_2 - U_y^2 + cs_2^2 - 2cs_2 + 1\right) \\
\frac{\rho}{2}\left(-U_x^2 cs_2 + U_x^2 - U_x cs_2 + U_x - U_y^2 cs_2 - cs_2^2 + cs_2\right) \\
\frac{\rho}{2}\left(-U_x^2 cs_2 - U_y^2 cs_2 + U_y^2 - U_y cs_2 + U_y - cs_2^2 + cs_2\right) \\
\frac{\rho}{2}\left(-U_x^2 cs_2 + U_x^2 + U_x cs_2 - U_x - U_y^2 cs_2 - cs_2^2 + cs_2\right) \\
\frac{\rho}{2}\left(-U_x^2 cs_2 - U_y^2 cs_2 + U_y^2 + U_y cs_2 - U_y - cs_2^2 + cs_2\right) \\
\frac{\rho}{4}\left(U_x^2 cs_2 + U_x U_y + U_x cs_2 + U_y^2 cs_2 + U_y cs_2 + cs_2^2\right) \\
\frac{\rho}{4}\left(U_x^2 cs_2 - U_x U_y - U_x cs_2 + U_y^2 cs_2 + U_y cs_2 + cs_2^2\right) \\
\frac{\rho}{4}\left(U_x^2 cs_2 + U_x U_y - U_x cs_2 + U_y^2 cs_2 - U_y cs_2 + cs_2^2\right) \\
\frac{\rho}{4}\left(U_x^2 cs_2 - U_x U_y + U_x cs_2 + U_y^2 cs_2 - U_y cs_2 + cs_2^2\right)
\end{bmatrix}$$

LBM dla $\omega = 1$

Rozwinięcie do równania Navier-Stoksa

- Zarówno ciągłe jak i dyskretne równanie Boltzmann oraz LBM "całkują po charakterystyce.
- Używamy LBM głównie do hydrodynamiki, zatem interesuje nas wynikowe równanie adwekcji-dyfuzji dla zmiennych makroskopowych

Dla małego parametru ϵ

$$t = \epsilon^{-1} t_1 + \epsilon^{-2} t_2$$

$$x = \epsilon^{-1} x_1$$

zatem

$$\partial t = \epsilon \partial t_1 + \epsilon^2 \partial t_2$$

$$\partial x = \epsilon \partial x_1$$

Korzystając z tak zdefiniowanego różniczkowania rozwijamy schemat w szereg Taylora. Odrzucamy $\mathcal{O}(\epsilon^3)$ oraz $\mathcal{O}(u^3)$

Ostatecznie dostajemy N-S z lepkością $\nu = \left(\omega - \frac{1}{2}\right)/3$

Inne rodzaje zderzeń

Inne rodzaje zderzeń

$$\sum f^{eq}(\rho, \mathbf{u}) = \int f^{MB}(\rho, \mathbf{e} - \mathbf{u}) d\mathbf{e}$$

$$\sum \mathbf{e}_i f^{eq}(\rho, \mathbf{u}) = \int \mathbf{e_i} f^{MB}(\rho, \mathbf{e} - \mathbf{u}) d\mathbf{e}$$

można zatem stworzyć macierz $\boldsymbol{M}$ i wykorzystać ją do zderzenia. W efekcie dostaniemy stabilniejszy schemat

Implementacja

Aspekty implementacyjne

- Array of structures vs structure of arrays
- Double buffering, SSS, AA