

Univerzita Palackého v Olomouci
Přírodovědecká fakulta

DIPLOMOVÁ PRÁCE

2010

Roman Krobot

Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci
Katedra experimentální fyziky

Modelování proudění pomocí celulárních automatů
Flow simulation by means of cellular automata

Roman Krobot

Diplomová práce



Vedoucí diplomové práce:
Tomáš Füst
Rok odevzdání: 2010

Vypracoval:
Roman Krobot
AF, 2. navazující ročník

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci zpracoval samostatně pod vedením pana Tomáše Fürsta a výhradně s použitím uvedených zdrojů.

V Olomouci dne 30. dubna 2010

Český abstrakt

V této diplomové práci se věnuji popisu proudění tekutin. Je zde provedeno klasické odvození Navierových-Stokesových rovnic, kterými se proudění tekutin běžně popisuje a jejichž numerické implementace jsou standardně používány k simulacím v rozličných aplikacích. Navíc je prezentován popis pomocí relativně nového přístupu, který na tekutinu pohlíží jako na celulární automat. Takovýchto celulárních automatů je více, ale pro účel této diplomové práce byl zvolen hexagonální FHP model. Nejprve je popsána jeho mikrodynamika a posléze provedena makroskopická limita tohoto modelu. Závěrem jsou prezentovány výsledky numerického experimentu, jenž simuluje obtékání rovinné překážky tekutinou.

Klíčová slova: dynamika tekutin, Navierovy-Stokesovy rovnice, celulární automaty, Matlab, FHP model

English abstract

This master thesis focuses on the description of flow of fluids. The thesis consists of a derivation of the Navier-Stokes equations which are commonly used to describe the phenomenon of fluid flow and are widely-used in other applications as well. Moreover, the fluid flow is described with the help of a relatively new approach that views fluids as cellular automata. For the purposes of the thesis, a hexagonal FHP model is used. Firstly, the FHP model is introduced. Secondly, the concept of a macroscopic limit is presented. Thirdly, a numerical experiment simulating a fluid flow around a flat obstacle is carried out. In the end, Matlab codes of simulations are presented.

Key words: hydrodynamics, Navier-Stokes equation, Cellular Automata, Matlab, FHP model

Obsah

1	Mechanika tekutin	6
1.1	Základní rovnice rovnováhy tekutin	6
1.2	Lagrangeův a Eulerův popis	7
1.3	Rovnice kontinuity	9
1.4	Pohybové rovnice	10
1.5	Navierova-Stokesova rovnice	12
2	Úvod do celulárních automatů	15
2.1	Trocha historie	15
2.2	Základní definice	16
2.2.1	Celulární automat	16
2.2.2	Okolí	16
2.2.3	Okrajové podmínky	17
3	FHP model	19
3.1	Pravidlo	19
3.2	Mikrodynamický popis FHP modelu	20
4	Matematická ekvilibristika s FHP modelem	23
4.1	Makroskopické veličiny	23
4.2	Multiškálování a Chapmanův-Enskogův rozvoj	24
4.3	Rovnice rovnováhy	25
4.4	Boltzmannova rovnice	28
4.5	Chapmanův-Enskogův rozvoj podruhé	29
4.6	Lokální rovnovážné řešení	31
4.7	Eulerova rovnice	33
5	Implementace FHP modelu v MatLabu	39
5.1	Řeka bez překážky	39

5.2	Řeka s překážkou	40
6	Apendix A	43
7	Apendix B	46
8	Apendix C	50

Úvod

Tato diplomová práce navazuje na mojí bakalářskou práci, ve které jsem se věnoval všeobecnému využití celulárních automatů ve fyzice. Z bakalářské práce vyplývá, že jednou z fyzikálních oblastí, ve které lze celulárních automatů s úspěchem využít, je popis proudění tekutin. Jedná se o ekvivalentní popis, který se nejčastěji provádí pomocí Navierových-Stokesových rovnic. Tyto rovnice, spolu s výpočetní silou dnešních počítačů, jsou s úspěchem používány k simulaci proudění v rozličných technických aplikacích. Ovšem přes veškeré úspěchy, které takovýto přístup přináší, jsou zde nevyřešené základní teoretické otázky. Mimo jiné není prokázána řešitelnost Navierových-Stokesových rovnic pro některé počáteční podmínky, či není jasné, mají-li některá řešení spojitě všechny derivace. To vede ke snaze nalézt ekvivalentní či lepší popis, který takovéto teoretické obtíže klást nebude.

Proto se zraky některých vědců stále více obrací na celulární automaty, které se v mnoha oblastech jeví jako vhodná řešení k alternativnímu popisu fyzikální reality. Jedním z takovýchto modelů je hexagonální FHP model a jeho nepřeborné variace, které na proudění nahlíží jako na diskrétní pohyb malých částic, které se vzájemně sráží. Díky pravidlům, kterými se pohyb i vzájemné srážky řídí, odpadá otázka řešitelnosti. Navíc se díky jisté volnosti, která je při srážkách povolena, mohou projevit fenomény, které pozorujeme u běžného proudění tekutin jako jsou například turbulence.

Z tohoto důvodu jsem se rozhodl věnovat ve své diplomové práci zejména FHP modelu, který je vhodný především pro popis laminárního proudění.

Cíle diplomové práce

Cílem diplomové práce je detailní seznámení se s FHP modelem a jeho následný popis. Dále, k prokázání jeho užitečnosti, vytvořit simulaci obtékání rovinné desky, která bude implementací tohoto celulárního automatu v numerickém softwaru Matlab. Jako nultý cíl si kladu standardní odvození Navierových-Stokesových rovnic, jelikož jsou nejrozšířenějším popisem proudění. Proto se budou výsledky modelů zabývajících se touto problematikou vždy znovu porovnávat s výsledky obdrženými numerickou implementací těchto rovnic.

1 Mechanika tekutin

Všechny části této kapitoly, pokud není uvedeno jinak, jsem zpracoval za pomoci [1].

Tekutiny, což je souhrnný název pro plyny a kapaliny, se liší od pevných látek především velkou pohyblivostí svých částic. Díky nízké kohezi kladou tekutiny relativně malý odpor silám, které působí ve směru vnější normály plochy. Proto nemají vlastní tvar a snadno se dělí.

Odpor tekutin proti změně tvaru nazýváme viskozitou, která se projevuje jen tehdy, pokud není tekutina v klidu. Viskózní síla má snahu zmenšit vzájemný rozdíl rychlostí v proudící tekutině a je tudíž analogií k třecí síle, kterou známe z mechaniky pevných látek.

Tekutinu, u které se neprojevují viskózní síly nazýváme *dokonalou*. Takováto tekutina byla do roku 1937 pouhou myšlenkovou idealizací. Tehdy byla poprvé pozorována supratekutost u atomů hélia, při teplotách pod 2,7 K. Supratekutými tekutinami nazýváme ty, které nevykazují měřitelnou viskozitu. V běžné praxi se ovšem setkáme i s tekutinami, které mají tak malou viskozitu, že je dokonalá tekutina jejich dobrou aproximací.

Tekutiny dělíme na kapaliny a plyny. Vzájemně se liší především stlačitelností a rozpínavostí. Plyny jsou rozpínavé, kdežto kapaliny vytvářejí volnou hladinu. Kapaliny jsou stlačitelné jen nepatrně, kdežto plyny jsou stlačitelné velmi jednoduše.

1.1 Základní rovnice rovnováhy tekutin

U tekutin, které jsou v rovnováze, se neuplatňují viskózní síly. Tudíž úvahy, které budeme provádět, se vztahují jak na ideální, tak na viskózní tekutiny. Vyjdeme z rovnice rovnováhy elastického kontinua

$$F_i + \frac{\partial \tau_{ji}}{\partial x_j} = 0, \quad (1)$$

kde F_i jsou složky vnější objemové síly a τ_{ji} jsou složky symetrického tenzoru druhého řádu, kterým se popisuje napětí. Uvažujme napětí působící na plochu kolmou k ose x . Toto napětí můžeme popsat pomocí tří složek

$$T_1 = (\tau_{11}, \tau_{13}, \tau_{13}) \quad (2)$$

První složka je čistě tahová (popř. tlaková pro $\tau_{11} < 0$), další dvě složky jsou smykové a popisují smyk rovnoběžný s osou y a z . Provedeme-li tuto úvahu i pro napětí působící na plochu kolmou k ose y a k ose z , dostaneme devět hodnot τ_{ij} , které tvoří tenzor napětí. Napětí na libovolné plošce procházející daným

bodem pak můžeme vyjádřit jako

$$T_i = \sum_{j=1}^3 \tau_{ji} \mathbf{n}_j, \quad (3)$$

kde $\mathbf{n}_j$ je normála plošky. Předpokládejme, že se tekutina pohybuje tak, že jedna vrstva molekul pomalu klouže po druhé vrstvě. Dokonalá tekutina neodporuje změnám tvaru a proto jsou tečná napětí nulová, tedy $\tau_{12} = \tau_{23} = \tau_{31} = 0$. V klidu vymizí tečná napětí i u viskózních kapalin. Rovnici

$$\tau_{ji} = 0 \quad (i \neq j)$$

můžeme považovat za definiční rovnici tekutiny v rovnováze. Protože tato rovnice platí pro libovolnou kartézskou soustavu souřadnic, jsou její osy hlavními osami tenzoru napětí a tenzorová plocha je v tomto případě kulová. Proto jsou si normálová napětí rovna $\tau_{11} = \tau_{22} = \tau_{33}$. Položíme-li $\tau_{11} = \tau_{22} = \tau_{33} = -p$, kde p je tlak, pak musí platit

$$\tau_{ij} = -\delta_{ij}p. \quad (4)$$

Po dosazení (4) do (1) dostaneme *základní hydrostatickou rovnici*

$$-\frac{\partial p}{\partial x_i} + F_i = 0 \quad \text{nebo vektorově} \quad -\nabla p + \mathbf{F} = \mathbf{0}.$$

Poslední rovnice jsou nutnou a postačující podmínkou rovnováhy tekutiny. Úplný diferenciál tlaku p , který je funkcí souřadnic x_i , vychází ze základní hydrostatické rovnice

$$dp = \frac{\partial p}{\partial x_i} dx_i = F_i dx_i.$$

U stlačitelných tekutin závisí hustota ρ na stavu kontinua, nevztahujeme proto vnější síly na jednotku objemu, nýbrž na jednotku hmotnosti. Objemovou sílu vztahenou na jednotku hmotnosti budeme značit G , její složky G_i . Tedy

$$F_i = \rho G_i,$$

takže rovnici rovnováhy tekutin můžeme přepsat takto

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + G_i = 0 \quad \text{nebo vektorově} \quad -\frac{1}{\rho} \nabla p + \mathbf{G} = \mathbf{0}.$$

1.2 Lagrangeův a Eulerův popis

V odvození základní statické rovnice jsme uvedli, že viskózní síly se neprojevují, pokud je tekutina v rovnováze. Při pohybu toto již neplatí. Z tohoto důvodu nejprve odvodíme pohybové rovnice pro ideální tekutinu a posléze rovnice určující pohyb vazkých tekutin.

Jsou dvě možné cesty, jak rovnice odvodit. První, zvaná Lagrangeova, spočívá ve sledování pohybu libovolné částice tekutiny. Druhá, zvaná Eulerova, sleduje změny fyzikálních veličin v určitém, pevně zvoleném bodě prostoru.

Při Lagrangeově metodě si vybereme jednu konkrétní částici v čase t_0 . Poloha částice v čase t bude záviset na počáteční poloze a na čase t . Rychlost u_i a zrychlení w_i určíme následovně

$$u_i = \frac{\partial x_i}{\partial t} \quad \text{a} \quad w_i = \frac{\partial u_i}{\partial t} = \frac{\partial^2 x_i}{\partial t^2}.$$

Pokud bychom chtěli takto popsat každou částici v tekutině, bylo by to velice nepraktické. Proto se podíváme, jak si s tímto úkolem poradí druhá metoda.

Eulerova metoda vyšetřuje stav proudění tekutiny v určitém místě prostoru. Částice, která se nachází v určitém časovém okamžiku t v místě se souřadnicemi x_1, x_2, x_3 , má rychlost se složkami

$$u_i = u_i(x_1, x_2, x_3, t) \equiv u_i(x_j, t), \quad \text{kde} \quad i, j = 1, 2, 3.$$

Z této rovnice můžeme určit zrychlení tekutiny v určitém bodě, pokud zafixujeme souřadnice x_j , nebo složky zrychlení každé částice při fixaci času t . Složky zrychlení tekutiny v určitém bodě jsou dány $\frac{\partial u_i}{\partial t}$. Toto zrychlení nazýváme lokální. Zrychlení částice odvodíme jednoduchou úvahou. V čase t se částice nachází v bodě o souřadnicích x_j , kde jsou složky rychlosti dány $u_i = u_i(x_j, t)$. Po uplynutí krátkého času dt se změnila poloha částice o dx_1, dx_2, dx_3 a složky rychlosti poté budou $u_i(x_1 + dx_1, x_2 + dx_2, x_3 + dx_3, t + dt)$. Označme změnu složek rychlosti du_i , pak můžeme napsat

$$u_i(x_j, t) + du_i = u_i(x_1 + dx_1, x_2 + dx_2, x_3 + dx_3, t + dt) \cong$$

$$u_i(x_j, t) + \frac{\partial u_i}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial u_i}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial u_i}{\partial x_3} dx_3 + \frac{\partial u_i}{\partial t} dt,$$

kde jsme použili rozvoje do Taylorovy řady a zanedbali členy vyšších řádů. Odtud dostaneme složky zrychlení

$$w_i = \frac{du_i}{dt} = \frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i}{\partial x_1} \frac{dx_1}{dt} + \frac{\partial u_i}{\partial x_2} \frac{dx_2}{dt} + \frac{\partial u_i}{\partial x_3} \frac{dx_3}{dt}. \quad (5)$$

Tuto rovnici lze zapsat také vektorově

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{w} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}.$$

Analogický výraz k (5) dostaneme pro každou funkci Eulerových proměnných. Mějme skalární funkci

$$f = f(x_j, t).$$

Platí pro ní

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x_j} u_j.$$

Totální derivaci $\frac{df}{dt}$ nazýváme *materiálovou derivací*, $\frac{\partial f}{\partial t}$ nazýváme *parciální derivace* a $\frac{\partial f}{\partial x_j} u_j$ je *konvektivní derivace*. Tento rozklad individuální časové změny na dvě části, na lokální a konvektivní, lze provést u libovolného vektoru $\mathbf{a}(x_i, t)$. Časovou změnu vektorového pole lze tudíž zapsat ve tvaru

$$\frac{d\mathbf{a}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{a}.$$

1.3 Rovnice kontinuity

Ke kompletnímu popisu stavu dokonalé tekutiny stačí znalost pěti fyzikálních veličin. Tři složky rychlosti u_i , $i = 1, 2, 3$ a dvě veličiny, které určují chování kapaliny z hlediska termodynamického. Těmi jsou tlak p a hustota ρ . Všechny veličiny jsou funkcemi závislými na třech prostorových a jedné časové souřadnici. Tedy např. $p = p(x_1, x_2, x_3, t)$.

Nyní se pokusíme odvodit vztahy, které svazují všech těchto pět veličin. Využijeme k tomu zákony zachování.

Kontinuum má určitou hmotnost m , která se během pohybu nemůže nikam ztratit ani samovolně vzniknout. Což je lapidární vyjádření zákona zachování hmotnosti. V proudící tekutině si vybereme pevně zcela libovolnou, jednoduchou, souvislou a uzavřenou plochu S , která se nepohybuje. Tuto plochu nazýváme kontrolní plochou. Kontrolní plocha S obepíná jednoduše souvislou oblast o objemu V . Pláštěm této kontrolní plochy proudí tekutina dovnitř a také ven. Elementem plochy o obsahu dS proteče za jednotku času tekutina o hmotnosti $\rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS = \rho u_i n_i dS$, kde ρ je hustota, $\mathbf{u}$ je rychlost a u_i jsou její složky, $\mathbf{n}$ je jednotkový vektor vnější normály elementu kontrolní plochy a n_i jsou složky $\mathbf{n}$. Součin $u_i n_i$ je kladný, pokud tekutina vytéká ven a záporný v opačném případě. Z toho důvodu je integrál

$$\int_S \rho u_i n_i dS,$$

který se vztahuje na celou kontrolní plochu S , celkovou hmotností tekutiny, jenž vytekla z objemu V za jednotku času.

Hmotnost tekutiny, uvězněné uvnitř kontrolní plochy S , je $\int_V \rho dV$, tudíž úbytek hmotnosti v tomto prostoru musí být roven

$$-\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV.$$

Protože se objem kontrolní oblasti V v čase nemění, je možné zaměnit totální časovou derivaci za objemový integrál. Za předpokladu, že uvnitř kontrolní plochy S nejsou žádná zřídla ani propusti a platí zákon zachování hmotnosti, musí se oba výrazy udávající množství tekutiny rovnat a tedy

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_S \rho u_i n_i dS = 0.$$

Tento vztah upravíme pomocí Gaussovy věty [3] na tvar

$$\int_V \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} \right] dV = \int_V \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) \right] dV = 0.$$

V úvodní úvaze jsme zvolili kontrolní plochu a tím i kontrolní objem libovolně. Poslední rovnice tedy bude splněna jen tehdy, pokud bude její integrand roven nule. Tedy matematicky

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad \text{nebo} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0.$$

Tato základní rovnice vyskytující se v mnoha oblastech fyziky, se nazývá *rovnici kontinuity*. Vektor $\rho \mathbf{u}$ se nazývá *hustota toku tekutiny*.

Z předchozí kapitoly víme, že časovou změnu libovolného vektorového pole můžeme psát ve tvaru

$$\frac{d\mathbf{a}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{a}.$$

Použijeme-li tento poznatek pro vyjádření hustoty ρ , dostáváme

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + u_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{u} \nabla \cdot \rho.$$

Rozepíšeme-li $\operatorname{div}(\rho \mathbf{u})$ dostáváme

$$\operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = u_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i} + \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = \mathbf{u} \cdot \nabla \rho + \rho \nabla \cdot \mathbf{u}.$$

Pomocí těchto vztahů je možno přepsat rovnici kontinuity takto

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad \text{nebo} \quad \frac{d\rho}{dt} + \rho \operatorname{div} \mathbf{u} = 0.$$

Je-li hustota konstantní, $\rho = \text{konst.}$, pak rovnice kontinuity přejde v *rovnici nestlačitelnosti*, která klade podmínku pouze na rychlost proudění

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad \text{neboli} \quad \operatorname{div} \mathbf{u} = 0.$$

1.4 Pohybové rovnice

Již dříve jsme odvodili rovnici rovnováhy tekutin a to z důvodu jejího využití pro odvození pohybových rovnic. Použijeme d'Alambertova principu, kdy se k rovnicím rovnováhy přidá setrvačná síla [2]. Tuto sílu můžeme vztáhnout na jednotku objemu, jejíž složky jsou $-\rho \frac{d u_i}{dt}$ a nebo na jednotku hmotnosti, jejíž složky jsou $-\frac{d u_i}{dt}$. D'Alambertovým principem dostaneme z rovnice rovnováhy pohybové rovnice pro dokonalou tekutinu

$$G_i - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{d u_i}{dt} = 0.$$

Nyní rozepíšeme materiálovou derivaci na dvě složky (parciální a konvektivní), jak jsme to ukázali v kapitole o Lagrangeově a Eulerově metodě.

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} u_j = G_i - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i}. \quad (6)$$

Této soustavě tří rovnic se říká *Eulerova hydrodynamická rovnice*. Povšimněme si, že se v této rovnici již vyskytuje všech pět nezbytných fyzikálních veličin, které plně určují pohyb dokonalé tekutiny. Jsou to tři souřadnice x_i , hustota ρ a tlak p . Máme tedy pět neznámých, ale jen tři rovnice. Pokud přidáme ještě rovnici kontinuity a rovnici polytropy, jsme v principu schopni určit všechny neznámé. Rovnice polytropy je obecnější vztah svazující změnu hustoty a tlaku při dvou významných termodynamických procesech. Při izotermické změně stavu plynu, tzv. Boyelův-Mariottův zákon, a při adiabatické změně. Rovnice polytropy má následující tvar

$$\frac{p}{p_0} = \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^n, \quad \text{kde } n \geq 1,$$

přičemž pro izotermický děj platí $n = 1$ a pro adiabatický děj je $n > 1$ [4]. Při adiabatickém ději značíme index n jako κ a nazýváme jej Poissonovou konstantou. Tato konstanta je rovna poměru měrných tepelných kapacit při stálém tlaku a stálém objemu.

Eulerovu rovnici hydrodynamiky můžeme přepsat do vektorového tvaru

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \mathbf{G} - \frac{1}{\rho} \nabla p. \quad (7)$$

A teď jednoduše odvodíme tyto rovnice v Lagrangeově tvaru. Jde o transformaci rovnice $G_i - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{d u_i}{d t} = 0$ do Lagrangeových proměnných a_j, t , kde $j = 1, 2, 3$. Namísto $\frac{d u_i}{d t}$ budeme psát $\frac{\partial^2 x_i}{\partial t^2}$, tedy rovnice má tvar

$$\frac{\partial^2 x_i}{\partial t^2} = G_i - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i}, \quad (8)$$

kde předpokládáme závislost G_i a p na nových proměnných a_j, t . Vynásobíme-li rovnici (8) výrazem $\frac{\partial x_i}{\partial a_j}$, obdržíme

$$\frac{\partial^2 x_i}{\partial t^2} \frac{\partial x_i}{\partial a_j} = G_i \frac{\partial x_i}{\partial a_j} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial a_j}.$$

Neboť a_j chápeme jako křivočaré souřadnice, lze $G_i \frac{\partial x_i}{\partial a_j}$ považovat za zobecněnou Lagrangeovu sílu, kterou je zvykem značit Q_j . Protože se ∂x_i ve výrazu $\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial a_j}$ zkrátí, píšeme

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial a_j} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial a_j}.$$

Pomocí tohoto vztahu lze zapsat pohybovou rovnici dokonalé tekutiny v Lagrangeově tvaru následovně

$$\frac{\partial^2 x_i}{\partial t^2} \frac{\partial x_i}{\partial a_j} = Q_j - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial a_j}.$$

1.5 Navierova-Stokesova rovnice

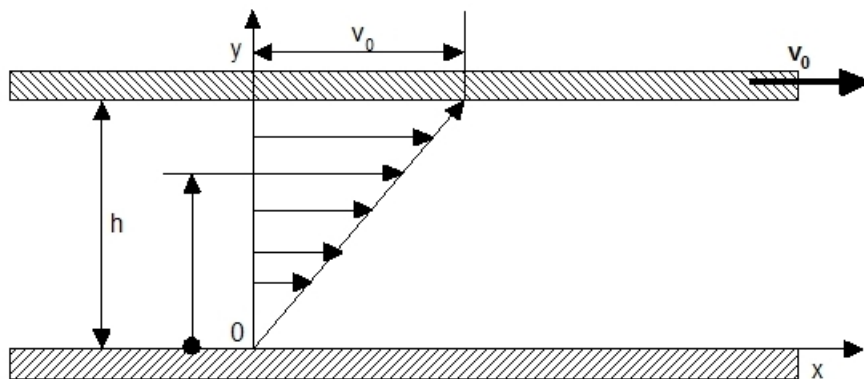
V této kapitole se pokusíme odvodit zákonitosti, kterými se řídí pohyb tekutin, se kterými se běžně setkáváme. Tedy tekutin viskózních.

Viskózní tekutina klade stejný odpor okolnímu tlaku jako dokonalá tekutina, značený $-\delta_{ij}p$ a navíc odpor vzájemnému pohybu částic vůči sobě navzájem, tedy τ'_{ij} . Matematicky zapsáno

$$\tau_{ij} = -\delta_{ij}p + \tau'_{ij},$$

kde τ_{ij} jsou složky tenzoru napětí.

K pochopení viskozity a určení tvaru členu τ'_{ij} použijeme model pohybující se viskózní tekutiny, který je znázorněn na obrázku 1. V tomto obrázku jsou desky rovnoběžné a proudí mezi nimi tekutina. Spodní z nich je v klidu a horní se pohybuje konstantní rychlostí u_0 . Obě vrstvy bezprostředně přiléhající k deskám jsou vůči nim v klidu. Tedy spodní vrstva tekutiny je v klidu a vrchní se pohybuje rychlostí u_0 . Vlivem vnitřního tření se začnou pohybovat všechny vrstvy tekutiny kromě vrstvy přiléhající na spodní desku.



Obrázek 1: Model viskozity

Označme si osu v rovině spodní desky jako x-ovou a k ní kolmou jako y-ovou. Rychlosti $\mathbf{u}$ jednotlivých vrstev tekutiny jsou poté u_x . Rychlosti u_x jsou funkcemi souřadnice y ($u_x = u_x(y)$). Předpokládejme úměrnost sil, vyvolaných třením na vztahu $\frac{\partial u_x}{\partial y}$. Vztáhneme-li je na jednotku plochy můžeme psát

$$\tau' = \mu \frac{\partial u_x}{\partial y},$$

kde μ je *dynamická viskozita* tekutiny a má jednotku Nsm^{-2} , což odpovídá Pascalu.

V [5] je odvozen tvar tenzoru třecích napětí s ohledem na předpokládané materiálové vlastnosti tekutin. A to izotropii a linearitu. Výsledkem úvah je vztah pro tenzor třecích napětí

$$\tau'_{ij} = \lambda \delta_{ij} \vartheta + 2\mu e_{ij},$$

kde

$$e = \frac{1}{2} (\nabla u + \nabla u^T) \quad \text{a} \quad \vartheta = \operatorname{div} \mathbf{u}.$$

Fyzikální veličina λ se nazývá *druhou viskozitou*. Z fyzikálních měření víme, že obě viskozity jsou závislé na tlaku i na teplotě, ale dále je budeme pro zjednodušení považovat za konstantní. Celkový tenzor napětí lze tedy napsat ve tvaru

$$\tau_{ij} = -\delta_{ij}p + \tau'_{ij} = -\delta_{ij}p + \lambda\delta_{ij}\vartheta + 2\mu e_{ij}. \quad (9)$$

Dosaďme tento vztah do pohybové rovnice a dostaneme

$$\frac{d u_i}{d t} = G_i + \frac{1}{\rho} \left(-\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\lambda \vartheta) + \frac{\partial}{\partial x_j} (2\mu e_{ij}) \right). \quad (10)$$

Vyjádřeme z rovnice (10) materiálovou derivaci pomocí derivace parciální a konvektivní

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} u_j = G_i + \frac{1}{\rho} \left\{ -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial u_r}{\partial x_r} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] \right\}.$$

V mnoha konkrétních aplikacích lze pro většinu tekutin považovat obě viskozity za konstantní, $\mu = \text{konst.}$ a $\lambda = \text{konst.}$, a tudíž lze psát tuto rovnici v jednodušším tvaru

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} u_j = G_i - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\mu + \lambda}{\rho} \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{\mu}{\rho} \Delta u_i. \quad (11)$$

Další rovnicí dynamiky tekutin je samozřejmě rovnice kontinuity ve tvaru

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i)}{\partial x_i} = 0.$$

Toto je stejný tvar, jaký jsme uvedli u dokonalé tekutiny, neboť rovnice kontinuity představuje zákon zachování hmotnosti. Jde-li o tekutinu vazkou, ale nestlačitelnou nabývá rovnice kontinuity tvaru $\frac{\partial u_i}{\partial x_i} \equiv \operatorname{div} \mathbf{u} = 0$ a proto se rovnice zjednoduší (11) na

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} u_j = G_i - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\mu}{\rho} \Delta u_i$$

nebo vektorově

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \mathbf{G} - \frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu}{\rho} \Delta \mathbf{u}.$$

Jde o *Navierovu-Stokesovu rovnici pro nestlačitelné viskózní tekutiny*, což je vektorová rovnice a tudíž má tři složky. Všimněme si, že zde nevystupuje druhá viskozita λ . Poměr $\frac{\mu}{\rho}$ se nazývá *kinematická viskozita* a zavádí se pro ní nové označení ν

$$\nu = \frac{\mu}{\rho},$$

která má jednotku $Nmkg^{-1}s^{-2}$. Pro stlačitelné tekutiny však nelze druhou viskozitu λ zanedbat. Lze si však situaci ulehčit, protože David Enskog [6] odvodil

pro jednoatomový plyn hodnotu druhé viskozity λ závislou na dynamické viskozitě následovně

$$\lambda = -\frac{2}{3}\mu.$$

U viskózní tekutiny se často odhlíží od její struktury a druhá viskozita se bere vždy $\lambda = -\frac{2}{3}\mu$. Tento vztah si odvodíme jednoduchou úvahou. Máme-li rovnici (9) a vezmeme v úvahu (11) dostaneme

$$\tau_{ii} = \tau_{xx} + \tau_{yy} + \tau_{zz} = -3p + (3\lambda + 2\mu)\frac{\partial v_r}{\partial x_r}.$$

Jedná-li se o nestlačitelnou tekutinu, je $\frac{\partial u_r}{\partial x_r} = 0$ a tudíž

$$p = -\frac{1}{3}\tau_{ii}.$$

Aby tento výsledek zůstal v platnosti i pro stlačitelné tekutiny, položíme

$$3\lambda + 2\mu = 0, \quad \text{tj.} \quad \lambda = -\frac{2}{3}\mu.$$

Dosadíme-li tento vztah do (11), dostaneme *Navierovu-Stokesovu rovnici pro stlačitelnou viskózní tekutinu*

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} u_j = G_i - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\nu}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) + \nu \Delta u_i. \quad (12)$$

nebo vektorově

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \mathbf{G} - \frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\nu}{3} \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + \frac{\mu}{\rho} \Delta \mathbf{u}.$$

Navierovy-Stokesovy rovnice jsou jedním z pilířů mechaniky tekutin, jelikož popisují jejich pohyb v čase a prostoru. Z tohoto důvodu jsou denně využívány k praktickým aplikacím od návrhu čerpadel po modelování vzdálených galaxií. Přes jejich nesmírnou praktičnost je naše porozumění řešitelnosti jen částečné. A to především proto, že řešení rovnic často zahrnuje turbulenci. Navrch tomuto, mnoho základních vlastností řešení nebylo prokázáno. Pro tří dimenzionální systém rovnic a některé počáteční podmínky ještě není prokázáno, že vždy existuje hladké řešení a pokud existuje tak nemusí být prokázáno, že mají omezenou kinetickou energii. Proto vypsál v roce 2000 Clay Mathematics Institute milion dolarů jako odměnu pro toho, kdo jako první vyřeší jimi zadaný problém týkající se právě řešitelnosti Navierových-Stokesových rovnic [7].

Právě tyto nevyřešené problémy jsou důvodem, proč se v následujících kapitolách budeme věnovat popisu tekutin ze zcela jiného úhlu, a to pomocí celulárních automatů.

2 Úvod do celulárních automatů

Následující tři kapitoly byly zpracovány za pomoci [8], pokud není uvedeno jinak.

Protože si v následujících kapitolách ukážeme, že jde proudění tekutin simulovat pomocí celulárních automatů, je následující pasáž věnována krátkému seznámení s tímto fenoménem. Laskavý čtenář se zde doví některé historické informace, možné příklady použití a především formální náležitosti spjaté s těmito automaty.

2.1 Trocha historie

Celulární automaty (CA) jsou časově i prostorově diskrétní idealizací fyzikálních systémů, kde hodnoty veličin nabývají pouze diskrétních hodnot. První nápady na CA se objevily již ve 40. letech dvacátého století, kdy se John von Neumann snažil navrhnout stroj, který by kontroloval i opravoval sám sebe [9]. Jeho cílem bylo najít logickou strukturu sebe-reprodukcujícího se automatu bez nutného vztahu k biologickým procesům. Spolu s S. Ulamem rozdělili celý prostor na jednotlivé buňky, přičemž každá buňka je na začátku charakterizována počátečním stavem. Tento počáteční stav se podle *evolučního pravidla* mění vždy po jednotlivých krocích, tzv. *iteracích*. Evoluční pravidlo nemusí být stejné pro všechny buňky, ale je vždy funkcí stavů buněk v okolí buňky, kterou právě zkoumáme.

V padesátých letech se poprvé začaly CA používat k automatickému zpracování obrazů [10]. Byla vyvinuta speciální pravidla pro úpravu šumu, odhad velikosti a počtu objektů na obraze pořízeným mikroskopem.

V roce 1970 našel John Conway jednoduché pravidlo vedoucí ke komplexnímu chování a nazval jej *Game of Life* [11]. Z této hry se stala senzace, která na CA upoutala značnou pozornost matematiků a fyziků, kteří se poté zasloužili o jejich další rozvoj. Hracím polem je čtvercová síť, kde jednotlivé čtverečky (buňky) jsou buď živé (stav 1) nebo mrtvé (stav 0). Pravidlo pro tuto hru je prosté. Mrtvá buňka, která je obklopena třemi živými buňkami, ožije. Pokud kolem živé buňky není žádná buňka živá, nebo je živá pouze jedna, zajde žalem a naopak pokud jsou kolem buňky více než tři živé buňky, umírá na umačkání. Buňkami kolem jsou chápány ty, které mají s buňkou alespoň jeden společný bod. Jedná se o tzv. Moorovo okolí (viz níže). Je jich tedy celkem osm.

V sedmdesátých letech byl vytvořen HPP model mřížového plynu trojicí Hardy, Pomeau a de Pazzis [12]. Je to jeden z prvních CA, který zachovává kromě počtu částic také hybnost. Tímto modelem se otevřela cesta k simulování pohybu tekutin nebo zrnitých látek pomocí CA.

V osmdesátých letech se Stephen Wolfram [13], [14] začal zabývat jednodimenzionálními CA, na kterých ukázal rozličné vlastnosti jednoduchých pravidel, jež vedou ke komplexnímu a mnohdy neočekávanému chování. Na těchto, nebo podobných CA ukázal, že mají vztah ke statistické mechanice.

V roce 1986 přišel na svět FHP model pánů Frisch, Hasslacher a Pomeau [15], který nezávisle na nich objevil také Stephen Wolfram. Provedou-li se u něj příslušné limity ukazuje se, že se jedná o obdobu Navierových-Stokesových rovnic, což je nepopíratelný důkaz schopnosti CA modelovat reálný fyzikální problém. Tento model je důkladně popsán v následujících dvou kapitolách a proto se nyní spokojíme s touto poznámkou.

2.2 Základní definice

Lidská mysl má zvláštní touhu vše různě škatulkovat. Proto, abychom mohli nějaký dosud nezatříděný model označit nálepkou celulární automat, je třeba si uvést definici, podle které tak můžeme učinit.

2.2.1 Celulární automat

Jaké podmínky jsou nezbytně nutné, aby se jednalo o objekt spadající do velké rodiny celulárních automatů a kolik těch nutných podmínek vlastně je? Jedná se o následujících pět podmínek

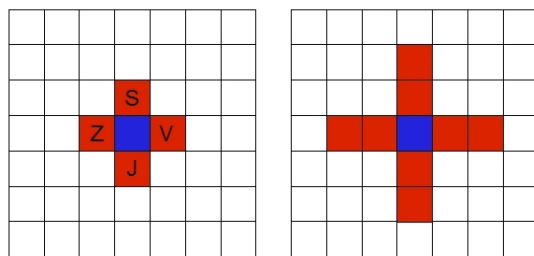
1. Mřížka, na které se pravidlo aplikuje, je diskrétní v N -dimenzionálním prostoru i v čase.
2. Na začátku se každé buňce v prostoru předepíše její počáteční stav.
3. V každé iteraci se všechny stavy buněk simultánně podrobují evolučnímu pravidlu, které řídí vývoj systému v čase.
4. Protože stav buňky závisí na stavu buněk v blízkém sousedství, je třeba definovat okolí buňky, které ovlivní její stav.
5. V neposlední řadě je nutné definovat okrajové podmínky systému.

Pokud je pravidlo $\mathbf{R}$ stejné pro každou buňku, hovoříme o *homogenním pravidle*. Jsou známé také nehomogenní pravidla, kde může být nehomogenita buď v čase nebo prostoru (máme na mysli matematické nebo). Nejjednodušší nehomogenita, se kterou se za chvíli setkáme, je prostorová nehomogenita zapříčiněná okrajovými podmínkami.

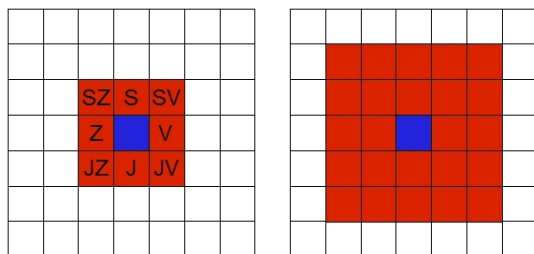
2.2.2 Okolí

Pravidlo každého CA pracuje podle definice se stavy buněk v okolí. V podstatě neexistuje žádné omezení, jak takovéto okolí definovat, ale je zvykem definovat jej pro všechny buňky stejně. V praxi se za okolí považují buňky, které s vyšetřovanou

buňkou přímo sousedí. Složitost výpočtu roste s počtem buněk v okolí exponenciálně, takže není vhodné z výpočetních důvodů brát v úvahu nějak rozlehlá okolí. Pro dvoudimenzionální čtvercovou síť existují dvě základní okolí. Jsou jimi *von Neumannovo okolí* a *Mooreovo okolí* (někdy nazývané Mooreovo oko). Von Neumannovo okolí zahrnuje 4 buňky, které jsou rozmístěny od zkoumané buňky severně (S), východně (V), jižně (J) a západně (Z). Mooreovo okolí zahrnuje stejné buňky jako von Neumannovo a jsou k nim přidány 4 další, jenž jsou situovány na severovýchodě (SV), jihovýchodě (JV), jihozápadě (JZ) a severozápadě (SZ). K těmto dvěma okolím existují tzv. rozšířená okolí, která zahrnují stejné buňky jako ta nerozšířená a jsou obohacena o buňky navíc, které jsou zřejmé z obrázků 2 a 3. V tomto obrázku je modře vyznačena buňka, jejíž stav se právě vyšetřuje a červeně ty, které jsou považovány za příslušné okolí.



Obrázek 2: von Neumannovo a von Neumannovo rozšířené okolí

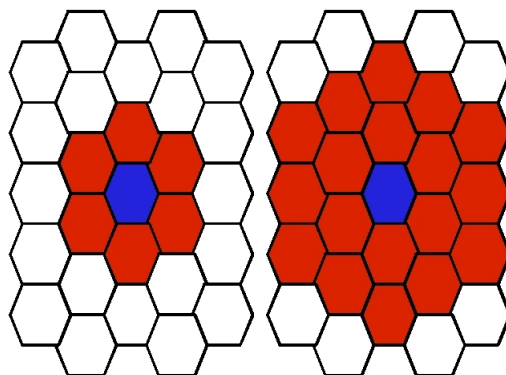


Obrázek 3: Mooreovo a Mooreovo rozšířené okolí

Na dvoudimenzionální ploše je také užitečná hexagonální mřížka, která je i se svým okolím a rozšířeným okolím znázorněna na obrázku 4. Tato mřížka je použita u FHP modelu, protože vykazuje symetrie, které nakonec vedou na isotropní chování tohoto modelu v makroskopické limitě.

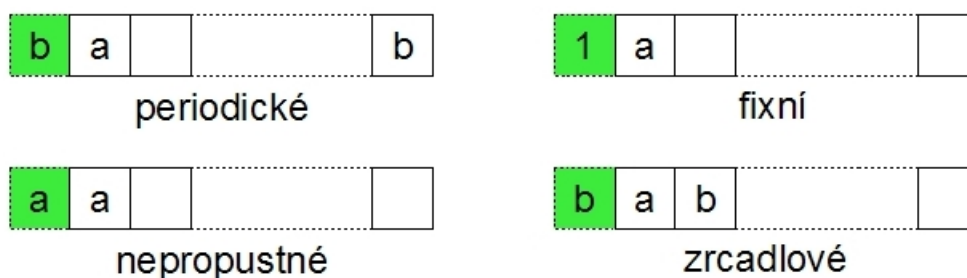
2.2.3 Okrajové podmínky

Jak jsme si již řekli, okrajové podmínky jsou příkladem prostorové nehomogeneity. Je to z důvodu konečnosti struktury. Kdyby tomu tak nebylo, nemělo by smysl evoluční pravidlo vůbec začít aplikovat, protože k druhé iteraci bychom nikdy nedospěli. Pokud máme omezenou strukturu, na níž je definováno okolí



Obrázek 4: Hexagonální okolí

pro každou buňku stejně, je nevyhnutelné, aby pro některé nešťastné buňky jejich okolí přesáhlo přes definované území. Pokud použijeme von Neumannovo okolí, tyto nešťastné buňky jsou ty, které leží na prvním a posledním řádku a prvním a posledním sloupci. Nebo-li ty, které tvoří jakýsi obvod celé studované oblasti. Těmto buňkám zadefinujeme v jakém stavu se nacházejí bez ohledu na evoluční pravidlo. Je možné si vymyslet nepřeberné množství způsobů, jak stavy obvodových buněk zadefinovat. Některé okrajové podmínky se hodí pro určité modely CA a pro jiné nikoliv. Nejčastěji používané počáteční podmínky jsou: periodické, fixní, nepropustné a zrcadlové. Všechny čtyři typy jsou znázorněny na obrázku 5, kde je nešťastná obvodová buňka zelená.



Obrázek 5: Okrajové podmínky

3 FHP model

FHP pravidlo je dvoudimenziálním modelem tekutiny, který roku 1986 popsali Frish, Hasslacher a Pomeau [15]. V této a především následující kapitole se pokusím dokázat, že tato diskrétní mikroskopická dynamika je vhodná k popisu makroskopického chování tekutin. Díky nelinearitě pravidla jsou však jednotlivé výpočty složité a proto se budeme muset uchýlit k jistým zjednodušením jako např. k Taylorově rozvoji. V této kapitole si představíme základní vlastnosti FHP modelu.

3.1 Pravidlo

FHP model popisuje pohyb částic v diskretizovaném prostoru, které se mohou vzájemně srážet. Prostor, na kterém se tak děje, je hexagonální mřížka. FHP model je myšlenkovou abstrakcí, snažící se co nejjednodušeji uchopit reálnou tekutinu na mikroskopické škále. Pokud je tato představa blízká realitě, měl by model v sobě ukrývat význačné efekty reálné tekutiny. Že tomu tak skutečně je, se snažím demonstrovat v následující kapitole. Je známo, že rovnice kontinuity a Navierovy-Stokesovy rovnice vyjadřují lokální zákon hmotnosti a hybnosti v kapalině. V mikroskopickém popisu FHP modelu se uplatňují také tyto dva zákony zachování během každé iterace. A to zachování počtu částic, který, jak si dále uvedeme, odpovídá zákonu zachování hmotnosti a zákonu zachování hybnosti, což překvapivé není. Navíc se v makroskopické limitě projeví symetrie hexagonální mřížky, která vede k isotropii systému, což ovšem překvapivé je.

Mikrodynamika FHP modelu je vyjádřena pomocí okupačních čísel, jež jsou Booleovými proměnnými. Částice se pohybují diskrétně nejen v prostoru, ale také v čase. Směřují jedním ze šesti směrů, při každé iteraci urazí konstantní vzdálenost a navíc podléhají vylučovacímu principu, který říká, že se v jednom směru a v jednom bodě diskrétního prostoru nemůže vyskytovat víc než jedna částice. Takto je zaručeno, že stav v jednom bodě je plně popsán šesticí Booleových proměnných.

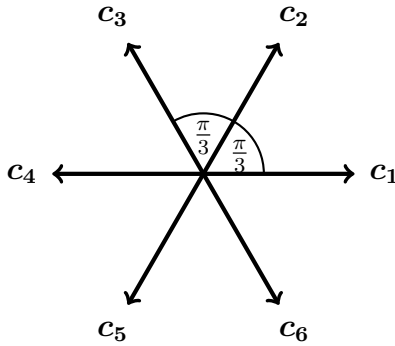
Bez možnosti vzájemných srážek by byl model vskutku nudný. Všechny částice by se pohybovaly daným směrem a každou iteraci by se objevily o kousek dále. Pokud ovšem povolíme srážky, začne systém vykazovat nelineární chování. K tomu, aby srážka nastala, je třeba splnění dvou podmínek, a to přítomnosti dvou či tří částic v jednom bodě a takováto srážka musí zachovat hybnost a počet částic. Pro dvoučásticové srážky je zachování hybnosti splněno jen a pouze v případech, kdy se srazí čelně. Nastane-li taková situace, je výsledek vychýlení obou částic o 60° , přičemž pravděpodobnosti vychýlení ve směru chodu hodinových ručiček či ve směru opačném jsou stejné. K tříčásticové srážce dojde jen tehdy, jsou-li všechny směry pohybu částic vzájemně posunuty o 120° . V takovém případě se částice vychýlí o 60° , přičemž je libovolné, v jakém směru k vychýlení dojde,

neboť obě varianty vedou ke stejnému výsledku. Pro jakékoliv jiné uspořádání částic ke srážce nedojde a částice je pohybují nerušeně dále podél jednotlivých směrů.

Existují i jiné varianty FHP modelu, např. FHP-II a FHP-III [17], která mohou obsahovat nepohyblivé částice a částice s různými rychlostmi, ale těmto modelům se v diplomové práci věnovat nebudu.

3.2 Mikrodynamický popis FHP modelu

Mikrodynamický popis FHP modelu lze provést pomocí evoluční rovnice pro okupační čísla. Zavádí se veličina $n_i(\mathbf{r}, t)$, která určuje počet částic vstupujících do bodu $\mathbf{r}$ v čase t ze směru $\mathbf{c}_i$, kde $i = 1, 2, \dots, 6$. Tyto částice jsou nezníčitelné a v daném bodě a směru se může pohybovat nejvýše jedna. Jednotlivé směry, podél nichž se musí částice pohybovat, jsou vzájemně pootočený o $\frac{\pi}{3}$, což je znázorněno na obr. (6).



Obrázek 6: Směry pohybu částic $\mathbf{c}_i$.

Také je třeba definovat čas τ , který uplyne mezi dvěma následujícími iteracemi modelu a mřížovou konstantu λ , která udává vzdálenost mezi nejbližšími body v diskrétním prostoru. Díky jejich znalosti se rychlosti, kterými se částice pohybují, vyjádří

$$\mathbf{v}_i = \frac{\lambda}{\tau} \mathbf{c}_i, \quad (13)$$

přičemž $\mathbf{c}_i$ je jednotkový vektor. Pokud by se částice nesrážely v jednotlivých uzlech mřížky, byla by evoluční rovnice dána

$$n_i(\mathbf{r} + \lambda \mathbf{c}_i, t + \tau) = n_i(\mathbf{r}, t), \quad (14)$$

což vyjadřuje, že se bez srážek částice v čase $t + \tau$ posunula o jeden uzel ve směru, v jakém se pohybovala v čase t . Toto je podstatná, avšak méně zajímavá část FHP modelu. Ten začne být zajímavý až v momentě, kdy dojde ke srážkám, které změní směr pohybu částic. Všechny srážky v FHP modelu vykazují dva základní rysy,

které každý fyzik uvítá. Zaprvé, srážky zachovávají hmotnost, tudíž je počet částic před a po srážce stejný a zadruhé, zachovávají hybnost. Srážek, které zachovávají hybnost, je celkem pět a dělí se na dvoučásticové a tříčásticové. Pokud je pouze n_i a n_{i+3} rovno 1 v místě $\mathbf{r}$, nastane dvoučásticová srážka při níž částice pohybující se rychlostí $\mathbf{v}_i$ změní svou rychlost na $\mathbf{v}_{i-1}$ nebo $\mathbf{v}_{i+1}$, přičemž se s index i počítá modulo 6. Zavádí se proměnná pro popis dvoučásticových srážek D_i

$$D_i = n_i n_{i+3} (1 - n_{i+1}) (1 - n_{i+2}) (1 - n_{i+4}) (1 - n_{i+5}). \quad (15)$$

Je-li $D_i = 1$, poté došlo ke kolizi částic ve směru i a $i + 3$. Proto je

$$n_i - D_i \quad (16)$$

počet částic, které zůstaly ve směru $\mathbf{c}_i$ díky dvoučásticovým srážkám podél daného směru. Byl-li počet částic $n_i = 0$, pak se může ve směru $\mathbf{c}_i$ částice objevit jako následek srážky mezi n_{i+1} a n_{i+4} nebo n_{i+2} a n_{i+5} . Je zvykem zavést Boolovskou proměnnou $q(\mathbf{r}, t)$ ¹, která určí, zda se částice odrazí vpravo ($q=1$) nebo vlevo ($q=0$) v případě, kdy dojde k dvoučásticové srážce. Tudíž počet částic, které se nově objeví ve směru $\mathbf{c}_i$ je

$$q D_{i-1} + (1 - q) D_{i+1}. \quad (17)$$

Může také dojít k tříčásticové srážce, pročež se zavádí proměnná T_i

$$T_i = n_i n_{i+2} n_{i+4} (1 - n_{i+1}) (1 - n_{i+3}) (1 - n_{i+5}). \quad (18)$$

Se stejnou úvahou dostaneme pro tříčásticovou srážku počet částic po srážce ve směru $\mathbf{c}_i$

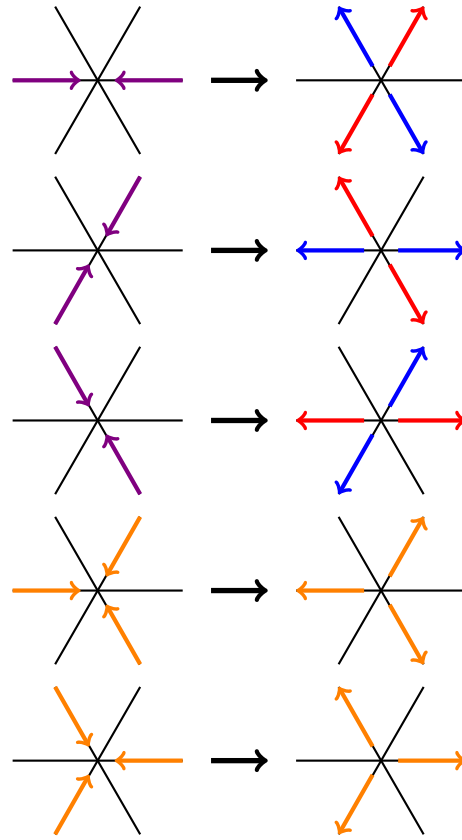
$$n_i - T_i + T_{i+3}. \quad (19)$$

Všech pět výše popsaných srážek je znázorněno na obr. (7).

Spojíme-li všechny tři poznatky (bezsrážkový pohyb, dvou a tříčásticové srážky) dohromady, dostaneme mikrodynamický popis FHP modelu, tedy

$$n_i(\mathbf{r} + \lambda \mathbf{c}_i, t + \tau) = n_i(\mathbf{r}, t) - D_i + q D_{i-1} + (1 - q) D_{i+1} - T_i + T_{i+3}. \quad (20)$$

¹V kódu však bude proměnná $q = q(t)$, tedy nezávislé na $\mathbf{r}$, protože generace náhodné proměnné je časově náročný proces a proto si pro každou iteraci vytvoříme pouze jednu proměnnou, kterou aplikujeme na celou mřížku.



Obrázek 7: Pět možných srážek v FHP modelu. Dvoučasticové srážky se mohou vyvinout dvěma různými směry a to s pravděpodobností $p_1=p_2$. Tříčasticové srážky mají pouze jednu možnost vývoje.

4 Matematická ekvilibristika s FHP modelem

Je snahou v této části diplomové práce ukázat, že jsou Navierovy-Stokesovy rovnice v jistém smyslu výsledkem upscalingu FHP modelu ve dvou dimenzích. Přitom cestu je třeba začít u evoluční rovnice (20). Je asi na první pohled patrné, že se nebude jednat o lehký úkol, jelikož mikrodynamický popis je jednoduchý, kdežto makroskopické rovnice nemají dodnes prokázanou řešitelnost, ačkoliv jsou již řadu desetiletí v centru pozornosti mnoha géniů své doby.

4.1 Makroskopické veličiny

FHP model pracuje v Booleovských proměnných n_i , ale jejich obdoba v reálném světě neexistuje. Proměnné n_i se říká *indikátor existence částic*. Nemáme žádný přístroj, který by něco takového dokázal změřit. Co však měřit umíme, jsou makroskopické veličiny jako je hustota či viskozita, nebo průměrné hodnoty, například rychlosti či hybnosti. K tomu je třeba zavést průměrnou hodnotu N_i

$$N_i(\mathbf{r}, t) = \langle n_i(\mathbf{r}, t) \rangle. \quad (21)$$

$N_i(\mathbf{r}, t)$ je také pravděpodobnost, že se částice nachází v bodě $\mathbf{r}$ v čase t s rychlostí $\mathbf{v}_i = \frac{\lambda}{\tau} \mathbf{c}_i$. Hustotu vyjádříme přirozeně jako sumu všech průměrných hodnot počtu částic pohybujících se v každém směru $\mathbf{c}_i$

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^6 N_i(\mathbf{r}, t). \quad (22)$$

Podobně zavedeme hustotu toku částic, jenž je definovaná jako hustota ρ vynásobená rychlostním polem $\mathbf{u}$

$$\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^6 \mathbf{v}_i N_i(\mathbf{r}, t). \quad (23)$$

Další důležitou proměnnou, která je podstatná pro odvození makroskopických limit je tenzor hustoty toku hybnosti $\Pi_{\alpha\beta}$

$$\Pi_{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^6 v_{i\alpha} v_{i\beta} N_i(\mathbf{r}, t), \quad (24)$$

kde α a β označují prostorové složky vektorů. Tenzor hustoty toku hybnosti Π představuje tok α -složky hybnosti na jednotkovou plochu kolmou k ose β . Tento člen, jak se později prokáže v sobě nese tlak, viskozitu a konvektivní člen.

4.2 Multiškálování a Chapmanův-Enskogův rozvoj

Je třeba ukázat, že i v makroskopické limitě si tento model zachová dvě důležité vlastnosti: platnost zákonů zachování a isotropii, kdežto diskretizace se nakonec neprojeví. V první řadě musíme získat řídicí rovnice FHP modelu v proměnných N_i , čehož se dosáhne jednoduchým průměrováním rovnice (20)

$$N_i(\mathbf{r} + \lambda \mathbf{c}_i, t + \tau) - N_i(\mathbf{r}, t) = \langle \Omega_i \rangle, \quad (25)$$

kde je zavedena průměrná hodnota kolizní funkce $\langle \Omega_i \rangle$

$$\langle \Omega_i \rangle = -\langle D_i \rangle + \frac{1}{2} \langle D_{i-1} \rangle + \frac{1}{2} \langle D_{i+1} \rangle - \langle T_i \rangle + \langle T_{i+3} \rangle, \quad (26)$$

jelikož je $\langle q \rangle = \frac{1}{2}$. Jak vidno, rovnice (25) je stále diskrétní v čase i v prostoru a N_i nabývá hodnot od 0 do 1. Je však rozumné očekávat, že na škále $L \gg \lambda$ a $T \gg \tau$ se FHP model stane spojitým jak v časové tak prostorové proměnné. Jako většinu složitých rovnic ve fyzice, tak i na rovnici (25) aplikujeme Taylorův rozvoj, a to druhého řádu

$$\tau \partial_t N_i + \lambda (\mathbf{c}_i \cdot \nabla) N_i + \frac{\tau^2}{2} \partial_t^2 N_i + \frac{\lambda^2}{2} (\mathbf{c}_i \cdot \nabla)^2 N_i + \lambda \tau (\mathbf{c}_i \cdot \nabla) \partial_t N_i = \langle \Omega_i \rangle. \quad (27)$$

Makroskopická limita FHP modelu si žádá řešení tého rovnice, což se při přihlédnutí k několika aproximacím nakonec ukáže jako řešitelný problém.

Jak z názvu podkapitoly plyne, jednou z těchto úprav je Chapmanův-Enskogův rozvoj, kterým rozvineme N_i

$$N_i = N_i^{(0)} + \varepsilon N_i^{(1)} + \varepsilon^2 N_i^{(2)} + \dots, \quad (28)$$

kde ε je malé a tudíž převážnou část informace celého výrazu nese člen $N_i^{(0)}$. K určení tvarů $N_i^{(\ell)}$ je nezbytné předpokládat podmínku, že makroskopické veličiny ρ a $\rho \mathbf{u}$ jsou dány pouze výrazem nultého řádu $N_i^{(0)}$

$$\rho = \sum_{i=1}^6 N_i^{(0)} \quad \text{a} \quad \rho \mathbf{u} = \sum_{i=1}^6 \mathbf{v}_i N_i^{(0)} \quad (29)$$

a proto

$$\sum_{i=1}^6 N_i^{(\ell)} = 0 \quad \text{a} \quad \sum_{i=1}^6 \mathbf{v}_i N_i^{(\ell)} = 0, \quad \text{pro } \ell \geq 1. \quad (30)$$

Tato podmínka se ukáže jako přirozená v momentě, kdy se dobereme řešení rovnice (27). Zatím nevíme, jak se v limitě projeví velikost λ a τ , ale očekáváme, že se pro různé jejich poměry objeví rozdílné jevy. Například, poměr $\frac{\lambda}{\tau}$ je rychlost částice, která se musí v rozumném modelu projevit i ve spojitě limitě jako rychlost konvekce. Od rozumného modelu také očekáváme disipativní jevy, které jsou

důsledkem viskozity, která by měla být úměrná $\frac{\lambda^2}{\tau}$. Na takové škálování je však třeba jít opatrně a s rozmyslem. Zaveďme si proto dvě časové makroskopické škály T_1 a T_2

$$\frac{\tau}{T_1} = O(\varepsilon) \quad \text{a} \quad \frac{\tau}{T_2} = O(\varepsilon^2) \quad (31)$$

a jednu prostorovou L

$$\frac{\lambda}{L} = O(\varepsilon). \quad (32)$$

Teď můžeme zavést dvě makroskopické časové proměnné t_1 a t_2

$$t = \frac{t_1}{\varepsilon} + \frac{t_2}{\varepsilon^2}, \quad (33)$$

což nám dává časovou derivaci ∂_t

$$\partial_t = \varepsilon \partial_{t_1} + \varepsilon^2 \partial_{t_2}. \quad (34)$$

Podobně zavedeme jednu makroskopickou prostorovou proměnnou $\mathbf{r}_1$

$$\mathbf{r} = \frac{\mathbf{r}_1}{\varepsilon} \quad (35)$$

což nám dává prostorovou derivaci

$$\frac{\partial}{\partial r_\alpha} = \varepsilon \partial_\alpha, \quad (36)$$

kde ∂_α je derivace vzhledem k α -složce $\mathbf{r}_1$. Nyní se pokusme nalézt jednotlivé podmínky, které musí ε v rov. (27) splňovat.

4.3 Rovnice rovnováhy

Snahou je nalézt pohybovou rovnici pro hustotu ρ a hustotu toku částic $\rho \mathbf{u}$. Obecnou strukturu této rovnice je možné získat bez řešení rov. (27) a bez hlubší znalosti $\langle \Omega_i \rangle$.

Přesto však o kolizním členu $\langle \Omega_i \rangle$ víme dvě základní vlastnosti

$$\sum_{i=1}^6 \Omega_i = 0 \quad \text{a} \quad \sum_{i=1}^6 \mathbf{v}_i \Omega_i = 0. \quad (37)$$

První rovnice vychází z rovností

$$\sum_{i=1}^6 T_i = \sum_{i=1}^6 T_{i+3} \quad \text{a} \quad \sum_{i=1}^6 D_i = \sum_{i=1}^6 D_{i-1} = \sum_{i=1}^6 D_{i+1}. \quad (38)$$

Druhá část rov. (37) je pravdivá z definice

$$D_i = D_{i+3}, \quad \mathbf{c}_i = -\mathbf{c}_{i+3} \quad (39)$$

a také

$$T_i = T_{i+2} = T_{i+4}, \quad \mathbf{c}_i + \mathbf{c}_{i+2} + \mathbf{c}_{i+4} = 0. \quad (40)$$

Proto se po sumaci všechny členy požerou. Rov. (37) nemá daný tvar náhodou a platí i pro střední hodnoty $\langle \Omega_i \rangle$. Tvar rovnice totiž vyplývá z lokálního zachování počtu částic a zachování hybnosti během srážek. Užitím rov. (28), (34) a (36) v rov. (27) dostaneme podmínky pro ε . Po dosazení dostáváme

$$\begin{aligned} & \tau (\varepsilon \partial_{t_1} + \varepsilon^2 \partial_{t_2}) \left(N_i^{(0)} + \varepsilon N_i^{(+)} + \varepsilon^2 N_i^{(2)} \right) + \\ & \quad \lambda \varepsilon c_{i\alpha} \partial_\alpha \left(N_i^{(0)} + \varepsilon N_i^{(+)} + \varepsilon^2 N_i^{(2)} \right) + \\ & \quad \frac{\tau^2}{2} (\varepsilon^2 \partial_{t_1}^2 + \varepsilon^3 \partial_{t_1} \partial_{t_2} + \varepsilon^4 \partial_{t_2}^2) \left(N_i^{(0)} + \varepsilon N_i^{(+)} + \varepsilon^2 N_i^{(2)} \right) + \\ & \quad \frac{\tau^2}{2} \varepsilon^2 c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_{\alpha\beta}^2 \left(N_i^{(0)} + \varepsilon N_i^{(+)} + \varepsilon^2 N_i^{(2)} \right) + \\ & \quad \lambda \tau \varepsilon c_{i\alpha} (\varepsilon \partial_{t_1} + \varepsilon^2 \partial_{t_2}) \partial_\alpha \left(N_i^{(0)} + \varepsilon N_i^{(+)} + \varepsilon^2 N_i^{(2)} \right) = \langle \Omega_i \rangle. \end{aligned} \quad (41)$$

Když se omezíme pouze na členy obsahující ε obdržíme pro hmotnost

$$\sum_{i=1}^6 \left[\tau \partial_{t_1} N_i^{(0)} + \lambda c_{i\alpha} \partial_\alpha N_i^{(0)} \right] = \langle \Omega_i \rangle \quad (42)$$

Po dosazení $\langle \Omega_i \rangle = 0$ a s přihlédnutím k rov. (29) dostáváme

$$\partial_{t_1} \rho + \text{div}_1 (\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (43)$$

Toto je rovnice kontinuity, která odráží zachování částic. Stejný postup aplikujme na hybnost

$$\sum_{i=1}^6 \left[\tau \partial_{t_1} c_{i\beta} N_i^{(0)} + \lambda c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_\alpha N_i^{(0)} \right] = 0. \quad (44)$$

Přičemž následně dostaneme

$$\partial_{t_1} (\rho u_\alpha) + \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = 0. \quad (45)$$

Nyní máme rovnici pro zachování hybnosti, která, jak dále uvidíme, odpovídá Eulerově hydrodynamické rovnici bez disipace energie.

Stejně srovnání provedme se členy, které obsahují ε^2 , což na rozdíl od členů s ε zachytí disipativní efekty. Nejprve se soustředíme opět na hmotnost

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^6 \left[\tau \varepsilon^2 \partial_{t_1} N_i^{(1)} + \tau \varepsilon^2 \partial_{t_2} N_i^{(0)} + \lambda \varepsilon^2 c_{i\alpha} \partial_\alpha N_i^{(1)} \right. \\ & \quad \left. + \frac{\tau^2}{2} \varepsilon^2 \partial_{t_1}^2 N_i^{(0)} + \frac{\lambda^2}{2} \varepsilon^2 c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_{\alpha\beta}^2 N_i^{(0)} + \lambda \tau \varepsilon^2 c_{i\alpha} \partial_{t_1} \partial_\alpha N_i^{(0)} \right] = 0. \end{aligned} \quad (46)$$

Díky rov. (30) vypadnou členy obsahující $N_i^{(1)}$ a s přihlédnutím k rovnici (29) dostáváme

$$\partial_{t_2}\rho + \frac{\tau}{2}\partial_{t_1}^2\rho + \frac{\tau}{2}\partial_{\alpha\beta}^2\Pi_{\alpha\beta}^{(0)} + \tau\partial_{t_1}\partial_{\alpha}(\rho\mathbf{u})_{\alpha} = 0. \quad (47)$$

A nyní pro hybnost

$$\sum_{i=1}^6 \left[\tau\varepsilon^2\partial_{t_2}c_{i\gamma}N_i^{(0)} + \lambda\varepsilon^2c_{i\alpha}c_{i\gamma}\partial_{\alpha}N_i^{(1)} + \frac{\tau^2}{2}\varepsilon^2\partial_{t_1}^2c_{i\gamma}N_i^{(0)} + \frac{\lambda^2}{2}\varepsilon^2c_{i\alpha}c_{i\beta}c_{i\gamma}\partial_{\alpha\beta}^2N_i^{(0)} + \tau\lambda\varepsilon^2c_{i\alpha}c_{i\gamma}\partial_{t_1}\partial_{\alpha}N_i^{(0)} \right] = 0, \quad (48)$$

což je třeba ještě upravit

$$\begin{aligned} & \frac{\tau}{\lambda}\tau\partial_{t_2}\sum_{i=1}^6\frac{\lambda}{\tau}c_{i\gamma}N_i^{(0)} + \lambda\frac{\tau^2}{\lambda^2}\partial_{\alpha}\sum_{i=1}^6\frac{\lambda}{\tau}c_{i\alpha}\frac{\lambda}{\tau}c_{i\gamma}N_i^{(1)} + \frac{\tau^2}{2}\frac{\tau}{\lambda}\partial_{t_1}^2\sum_{i=1}^6\frac{\lambda}{\tau}c_{i\gamma}N_i^{(0)} + \\ & \frac{\lambda^2}{2}\frac{\tau^3}{\lambda^3}\partial_{\alpha\beta}^2\sum_{i=1}^6\frac{\lambda}{\tau}c_{i\alpha}\frac{\lambda}{\tau}c_{i\beta}\frac{\lambda}{\tau}c_{i\gamma}N_i^{(0)} + \tau\lambda\frac{\tau^2}{\lambda^2}\partial_{t_1}\partial_{\alpha}\sum_{i=1}^6\frac{\lambda}{\tau}c_{i\alpha}\frac{\lambda}{\tau}c_{i\gamma}N_i^{(0)} = 0. \end{aligned} \quad (49)$$

Daný výraz je možno zjednodušit zkrácením konstant, užitím vztahů (29) a zavedením tenzoru třetího řádu $S_{\alpha\beta\gamma}$

$$S_{\alpha\beta\gamma} = \sum_{i=1}^6 v_{i\alpha}v_{i\beta}v_{i\gamma}N_i^{(0)} \quad (50)$$

na tvar

$$\partial_{t_2}\rho u_{\alpha} + \partial_{\beta}\Pi_{\alpha\beta}^{(0)} + \frac{\tau}{2}\partial_{t_1}^2\rho u_{\alpha} + \frac{\tau}{2}\partial_{\beta\gamma}^2S_{\alpha\beta\gamma}^{(0)} + \tau\partial_{t_1}\partial_{\beta}\Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = 0. \quad (51)$$

Použijeme-li rov. (43) a (45), můžeme rov. (47) a (51) dále upravit. Nejprve derivujeme celou rovnici rov. (43) podle t_1 , vynásobíme výrazem $\frac{\tau}{2}$ a dostaneme

$$\frac{\tau}{2}\partial_{t_1}^2\rho = -\frac{\tau}{2}\partial_{t_1}\partial_{\alpha}\rho u_{\alpha}. \quad (52)$$

Proto lze rov. (47) upravit na

$$\frac{\tau}{2}\partial_{t_1}^2\rho + \frac{\tau}{2}\partial_{\alpha\beta}^2\Pi_{\alpha\beta}^{(0)} + \tau\partial_{t_1}\partial_{\alpha}\rho u_{\alpha} = \frac{\tau}{2}\partial_{\alpha} \left[\partial_{t_1}\rho u_{\alpha} + \partial_{\beta}\Pi_{\alpha\beta}^{(0)} \right] = 0, \quad (53)$$

což vede na rovnici

$$\partial_{t_2}^2\rho = 0, \quad (54)$$

která nám říká, že na časové škále T_2 nedochází k žádným změnám hustoty. Stejně tak derivujeme celou rovnici rov. (45) podle t_1 , vynásobíme výrazem $\frac{\tau}{2}$ a dostaneme

$$\frac{\tau}{2}\partial_{t_1}^2\rho u_{\alpha} = -\frac{\tau}{2}\partial_{t_1}\partial_{\beta}\Pi_{\alpha\beta}^{(0)}. \quad (55)$$

Proto lze rov. (51) upravit na

$$\partial_{t_2} \rho u_\alpha + \partial_\beta \left[\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} + \frac{\tau}{2} \left(\partial_{t_1} \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} + \partial_\gamma S_{\alpha\beta\gamma}^{(0)} \right) \right] = 0. \quad (56)$$

Tato rovnice obsahuje disipativní příspěvek k Eulerově rovnici (45). Prvním příspěvkem je $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$, který je disipativní částí tenzoru hustoty toku hybnosti. Druhá část, tedy $\frac{\tau}{2} \left(\partial_{t_1} \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} + \partial_\gamma S_{\alpha\beta\gamma}^{(0)} \right)$, pochází z Taylorova rozvoje druhého řádu diskrétní formy Boltzmannovy rovnice. Tyto členy jsou zapříčiněné diskretizací prostoru a nemají ve standardní hydrodynamice obdoby.

Členy ε a ε^2 mohou být seskupeny a dát nám obecnou řídicí rovnici celého systému. Sumace rovnic (56) a (45) s příslušnou mocninou faktoru ε vede k

$$\partial_{t_2} \rho u_\alpha + \frac{\partial}{\partial r_\beta} \left[\Pi_{\alpha\beta} + \frac{\tau}{2} \left(\varepsilon \partial_{t_1} \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} + \frac{\partial}{\partial r_\gamma} S_{\alpha\beta\gamma}^{(0)} \right) \right] = 0, \quad (57)$$

kde $\Pi_{\alpha\beta} = \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} + \varepsilon \Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$ a kde jsme použili $\partial_t = \varepsilon \partial_{t_1} + \varepsilon^2 \partial_{t_2}$ a $\frac{\partial}{\partial r_\alpha} = \varepsilon \partial_\alpha$. Stejně tak rov. (43) a (54) vedou na

$$\partial_t \rho + \operatorname{div} \rho \mathbf{u} = 0, \quad (58)$$

což je dobře známá rovnice kontinuity.

Rov. (57) odpovídá Navierovým-Stokesovým rovnicím, avšak zatím není moc použitelná, jelikož tenzory Π a S nejsou vyjádřeny jako funkce ρ a $\mathbf{u}$. K vyjádření Π a S v závislosti na těchto dvou veličinách je potřeba spočítat rov. (27) a nalézt vyjádření pro $N_i^{(0)}$ a $N_i^{(1)}$ jako funkce ρ a $\mathbf{u}$.

4.4 Boltzmannova rovnice

Pro vyřešení rov. (27) je nezbytně nutné vyjádřit pravou stranu rovnice, nebo-li výraz $\langle \Omega_i \rangle$, ve vhodném tvaru. A protože příroda pro nás nemá žádný dárek, tak neexistuje žádné exaktní vyjádření $\langle \Omega_i \rangle$ pomocí N_i , neboť kolizní člen je nelineární a obecně neplatí, že průměr součinů je roven součinu průměrů. Naštěstí, pokud budeme N_i a N_j považovat za nezávislou proměnnou, pak faktorizace možná je.

Předpokládejme tuto rovnost

$$\langle n_i n_j \rangle = \langle n_i \rangle \langle n_j \rangle = N_i N_j, \quad \text{kde } i \neq j. \quad (59)$$

Tento předpoklad se zdá být oprávněný, a jelikož jej nutně potřebujeme k následným úpravám, tvrdím, že i oprávněným je. Představíme-li si enormní počet srážek atomů či molekul tekutin, který během jejich proudění nastává, je vhodnou představou tohoto procesu nějaká forma molekulárního chaosu a v tomto případě jsou n_i a n_j nezávislé. To ovšem ne zcela okamžitě, ale po jistém časovém okamžiku,

který je ovšem ještě kratší než T_1 . Takováto úvaha je známa jako *Boltzmannova hypotéza*.

Předpokládejme pravdivost Boltzmannovy hypotézy, pak tedy

$$\langle \Omega_i(n_1, n_2, n_3, n_4, n_5, n_6) \rangle = \Omega_i(N_1, N_2, N_3, N_4, N_5, N_6). \quad (60)$$

Poté můžeme naši oblíbenou rov. (27) přepsat takto

$$\tau \partial_t N_i + \lambda (\mathbf{c}_i \cdot \nabla) N_i + \frac{\tau^2}{2} \partial_t^2 N_i + \frac{\lambda^2}{2} (\mathbf{c}_i \cdot \nabla)^2 N_i + \lambda \tau (\mathbf{c}_i \cdot \nabla) \partial_t N_i = \Omega_i. \quad (61)$$

Tato rovnice se nazývá *Boltzmannova rovnice*. Použijeme-li explicitní vyjádření Ω_i pomocí proměnných T_i a D_i dostaneme rovnici

$$\begin{aligned} \Omega_i(N) = & -N_i N_{i+2} N_{i+4} (1 - N_{i+1}) (1 - N_{i+3}) (1 - N_{i+5}) \\ & + N_{i+1} N_{i+3} N_{i+5} (1 - N_i) (1 - N_{i+2}) (1 - N_{i+4}) \\ & - N_i N_{i+3} (1 - N_{i+1}) (1 - N_{i+2}) (1 - N_{i+4}) (1 - N_{i+5}) \\ & + \frac{1}{2} N_{i+1} N_{i+4} (1 - N_i) (1 - N_{i+2}) (1 - N_{i+3}) (1 - N_{i+5}) \\ & + \frac{1}{2} N_{i+2} N_{i+5} (1 - N_i) (1 - N_{i+1}) (1 - N_{i+3}) (1 - N_{i+4}). \end{aligned} \quad (62)$$

4.5 Chapmanův-Enskogův rozvoj podruhé

Nyní jde o úpravu rov. (61) za použití rovnic (28), (34) a (36). Pravá strana rov. (62) může být opět linearizována Taylorovým rozvojem jako

$$\Omega_i(\mathbf{N}) = \Omega_i(N_i^{(0)}) + \varepsilon \sum_{j=1}^6 \left(\frac{\partial \Omega_i(N^{(0)})}{\partial N_j} \right) N_j^{(1)} + O(\varepsilon^2). \quad (63)$$

V levé části rov. (61) je každý člen obsahuje ε v řádu minimálně 1 (ε^1), kdežto pravá strana vyjádřená rov. (63) obsahuje i členy ε nulového řádu (ε^0) a proto

$$O(\varepsilon^0) : \quad \Omega_i(N^{(0)}) = 0 \quad (64)$$

a

$$O(\varepsilon^1) : \quad \partial_{t_1} N_i^{(0)} + \partial_{\alpha} v_{i\alpha} N_i^{(0)} = \frac{1}{\tau} \sum_{j=1}^6 \left(\frac{\partial \Omega_i(N^{(0)})}{\partial N_j} \right) N_j^{(1)}. \quad (65)$$

Z rov. (64) vypočítáme $N_i^{(0)}$ a výsledek použijeme v rov. (65) k obdržení $N_i^{(1)}$. To ovšem není až tak přímočaré, jak bychom si představovali, jelikož matice $\frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{N}}$ není invertibilní. Vskutku, ze zákonů zachování plyne

$$\sum_i \left(\frac{\partial \Omega_i}{\partial N_j} \right) = \frac{\partial}{\partial N_j} \sum_i \Omega_i = 0 \quad (66)$$

a stejně tak

$$\sum_i c_{i\alpha} \left(\frac{\partial \Omega_i}{\partial N_j} \right) = 0, \quad (67)$$

což dokazuje, že sloupce matice $\frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{N}}$ jsou lineární kombinací jeden druhého a proto je determinant roven nule. Poslední dvě rovnice můžeme zapsat takto

$$\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{N}} \right)^T \mathbf{E}_0 = \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{N}} \right)^T \mathbf{E}_1 = \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{N}} \right)^T \mathbf{E}_2 = 0, \quad (68)$$

kde horní index T znamená transpozici matice a $\mathbf{E}_0$, $\mathbf{E}_1$ a $\mathbf{E}_2$ jsou vektory z $\mathcal{R}^6$ a jsou definovány

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_0 &= (1, 1, 1, 1, 1, 1) \\ \mathbf{E}_1 &= (c_{11}, c_{12}, c_{13}, c_{14}, c_{15}, c_{16}) \\ \mathbf{E}_2 &= (c_{21}, c_{22}, c_{23}, c_{24}, c_{25}, c_{26}), \end{aligned} \quad (69)$$

přičemž $c_{\alpha i}$ značí prostorovou komponentu α směrového vektoru $\mathbf{c}_i$. $\mathbf{E}_k$ jsou nazývány *kolizní invarianty*, protože popisují zachovávající se dynamické proměnné a to takto

$$\mathbf{N} \cdot \mathbf{E}_0 = \rho \quad v \mathbf{N} \cdot \mathbf{E}_1 = \rho u_1 \quad v \mathbf{N} \cdot \mathbf{E}_2 = \rho u_2, \quad (70)$$

kde $\cdot$ je symbol odpovídající skalární násobení v $\mathcal{R}^6$ a $v = \frac{\lambda}{\tau}$.

Aby bylo možné získat řešení rov. (65), je nezbytné, aby výraz $\partial_{t_1} N_i^{(0)} + \partial_\alpha v_{i\alpha} N_i^{(0)}$ ležel v oboru hodnot matice $\frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{N}}$. Z lineární algebry víme, že obor hodnot matice je ortogonální na jádro své vlastní transpozice

$$Im \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{N}} \right) = \left[Ker \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{N}} \right)^T \right]^\perp. \quad (71)$$

Proto je tedy nutné, aby byl výraz $\partial_{t_1} N_i^{(0)} + \partial_\alpha v_{i\alpha} N_i^{(0)}$ kolmý na $\mathbf{E}_0$, $\mathbf{E}_1$ a $\mathbf{E}_2$. Toto je ovšem splněno díky rov. (42) a (44).

Na závěr je třeba podotknout, že i když řešení rov. (65) existuje není, jednoznačné. Jak bylo napsáno dříve, máme podmínky

$$\sum_{i=1}^6 N_i^{(\ell)} = 0 \quad \sum_{i=1}^6 \mathbf{v}_i N_i^{(\ell)} = 0, \quad \text{pro } \ell \geq 1, \quad (72)$$

které odpovídají na otázku, je-li $N_i^{(1)}$ také ortogonální na kolizní invarianty a náleží do obrazu matice $\frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{N}}$. V následujících částech se pokusíme získat explicitní řešení rovnic (64) a (65).

4.6 Lokální rovnovážné řešení

Řešení $N_i^{(0)}$, která ve svém důsledku vynulují střední hodnotu kolizního členu Ω_i , jsou známa jako *lokální rovnovážná řešení*. V podstatě to odpovídá situaci, kdy se vzájemně rovnají poměry všech srážek. Tím, že je kolizní čas τ mnohem menší než čas pozorování T_1 a T_2 , je rozumné v prvním přiblížení očekávat, že rovnováha nastává lokálně.

Avšak k nalezení takových $N_i^{(0)}$, která splňují $\Omega_i(N_i^{(0)}) = 0$, je třeba přidat ještě jednu podmínku. Kolizní člen Ω_i je součtem několika příspěvků, jak plyne z rov. (26). Veličina $T_i(N)$ určuje pravděpodobnost tříčasticové srážky pro částici, která cestuje ve směru $\mathbf{c}_i$. V situaci lokální rovnováhy jsou pravděpodobnosti, že dojde k tříčasticové srážce pro částici ve směru $\mathbf{c}_i$ a $\mathbf{c}_{i+3}$ stejné, tedy

$$T_i(N^{(0)}) = T_{i+3}(N^{(0)}). \quad (73)$$

Při stejné úvaze dostaneme podobnou rovnost pro dvou-časticové srážky

$$D_i(N^{(0)}) = D_{i+1}(N^{(0)}) = D_{i-1}(N^{(0)}), \quad (74)$$

což ještě můžeme zjednodušit, jelikož i si můžeme libovolně zvolit, na tvar

$$D_i(N^{(0)}) = D_{i+1}(N^{(0)}). \quad (75)$$

Podmínku (73) můžeme pomocí rov. (18) vyjádřit i takto

$$\frac{N_i^{(0)}}{(1 - N_i^{(0)})} \frac{N_{i+2}^{(0)}}{(1 - N_{i+2}^{(0)})} \frac{N_{i+4}^{(0)}}{(1 - N_{i+4}^{(0)})} = \frac{N_{i+1}^{(0)}}{(1 - N_{i+1}^{(0)})} \frac{N_{i+3}^{(0)}}{(1 - N_{i+3}^{(0)})} \frac{N_{i+5}^{(0)}}{(1 - N_{i+5}^{(0)})}. \quad (76)$$

Pro jednoduchost si zavedeme značení

$$M_i = \frac{N_i^{(0)}}{(1 - N_i^{(0)})} \quad (77)$$

a rovnou použijeme dekadický logaritmus, který násobení převádí v prosté sčítání a dostaneme

$$\log M_i + \log M_{i+2} + \log M_{i+4} - \log M_{i+1} - \log M_{i+3} - \log M_{i+5} = 0. \quad (78)$$

Neboť je vztah stejný pro libovolné i , tak si bez újmy na obecnosti zvolíme $i = 1$ a máme

$$\log M_1 - \log M_2 + \log M_3 - \log M_4 + \log M_5 - \log M_6 = 0. \quad (79)$$

Podmínku (75) upravíme stejně

$$\log M_i + \log M_{i+3} = \log M_{i+1} + \log M_{i+4}. \quad (80)$$

Přičemž pro $i = 1$

$$\log M_1 - \log M_2 + \log M_4 - \log M_5 = 0 \quad (81)$$

a pro $i = 2$

$$\log M_2 - \log M_3 + \log M_5 - \log M_6 = 0. \quad (82)$$

Všechny vztahy, které bychom dostali pro i vyšší než dvě jsou lineární kombinací (81) a (82). Namísto rovnic (81) a (82) je zvykem nahradit je jejich součtem a rozdílem. Tedy pro součet

$$\log M_1 - \log M_3 + \log M_4 - \log M_6 = 0 \quad (83)$$

a pro rozdíl

$$\log M_1 - 2 \log M_2 + \log M_3 + \log M_4 - 2 \log M_5 + \log M_6 = 0. \quad (84)$$

To se dělá k získání dalších třech kolizních invariantů, které plynou z rovnic (79), (83) a (84). Pro přehlednost, všech šest invariantů vypadá následovně

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_0 &= (1, 1, 1, 1, 1, 1), \\ \mathbf{E}_1 &= (c_{11}, c_{12}, c_{13}, c_{14}, c_{15}, c_{16}), \\ \mathbf{E}_2 &= (c_{21}, c_{22}, c_{23}, c_{24}, c_{25}, c_{26}), \\ \mathbf{E}_3 &= (1, -1, 1, -1, 1, -1), \\ \mathbf{E}_4 &= (1, 0, -1, 1, 0, -1), \\ \mathbf{E}_5 &= (1, -2, 1, 1, -2, 1). \end{aligned} \quad (85)$$

Všech šest vektorů tvoří ortogonální bázi v $\mathcal{R}^6$, protože $\mathbf{c}_i$ mají tyto vlastnosti

$$\mathbf{c}_i = -\mathbf{c}_{i+3} \quad \text{a} \quad \mathbf{c}_i + \mathbf{c}_{i+2} + \mathbf{c}_{i+4} = 0 \quad (86)$$

a zároveň

$$\sum_{i=1}^6 c_{i\alpha} c_{i\beta} = 3\delta_{\alpha\beta}. \quad (87)$$

Rovnosti (86) přímo vyplývají z obrázku (6) a druhou rovnost lze jednoduše demonstrovat. V první řadě je vhodné připomenout, že je ekvivalentní s

$$\frac{1}{3} \sum_i \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i = \mathbf{1}, \quad (88)$$

kde $\mathbf{1}$ je jednotková matice 2x2 a $\mathbf{c}_i \mathbf{c}_i$ je matice, jejíž členy jsou $c_{i\alpha} c_{i\beta}$. Je jednoduché ověřit, že násobení matice $\sum_i \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i$ libovolným vektorem $\mathbf{c}_k$ dává výsledek $3\mathbf{c}_k$, jelikož $\mathbf{c}_k \cdot \mathbf{c}_{k+1} = 1/2$, $\mathbf{c}_k \cdot \mathbf{c}_{k+2} = -1/2$ a $\mathbf{c}_k + \mathbf{c}_{k+2} + \mathbf{c}_{k+3} = 0$.

Zavedeme-li vektor $\log \mathbf{M}$

$$\log \mathbf{M} = (\log M_1, \log M_2, \log M_3, \log M_4, \log M_5, \log M_6), \quad (89)$$

můžeme podmínky rovnováhy (79), (83) a (84) zapsat

$$\log \mathbf{M} \cdot E_3 = 0 \quad \log \mathbf{M} \cdot E_4 = 0 \quad \log \mathbf{M} \cdot E_5 = 0. \quad (90)$$

Tím, že E_k tvoří bázi $\mathcal{R}^6$, můžeme $\log \mathbf{M}$ vyjádřit jako lineární kombinaci kolizních invariantů E_0 , E_1 a E_2

$$\log \mathbf{M} = aE_0 + b_1E_1 + b_2E_2 \quad (91)$$

a nebo s přihlédnutím k definici kolizních invariantů E_0 , E_1 a E_2 a zápisu $\mathbf{b} = (b_1, b_2)$

$$\log M_i = a + \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}_i. \quad (92)$$

Použijme definici M_i v rovnici (77) a prostou úpravou dostaneme

$$N_i^{(0)} = \frac{1}{1 + e^{-a - \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}_i}}. \quad (93)$$

Výraz, který jsme obdrželi pro $N_i^{(0)}$, nabývá formy Fermiho-Diracova rozdělení. Je to důsledek vylučovacího principu, kdy může být v jednom místě v jednom směru pouze jedna částice.

4.7 Eulerova rovnice

Veličiny a a $\mathbf{b}$ v rov. (93) jsou funkcemi hustoty ρ a rychlostního pole $\mathbf{u}$ a jsou definovány v souladu s (29). K jejich vypočítání použijeme Taylorův rozvoj druhého řádu rychlostního pole $\mathbf{u}$. Přepíšme (93)

$$N_i^{(0)} = f(X_i) \equiv \frac{1}{1 + e^{-X_i}}, \quad (94)$$

kde je šesti-dimenzionální vektor $X = (X_1, X_2, X_3, X_4, X_5, X_6)$ je definován

$$X = a(\rho, \mathbf{u}) E_0 + b_1(\rho, \mathbf{u}) E_1 + b_2(\rho, \mathbf{u}) E_2. \quad (95)$$

Rozviňme $N_i^{(0)}$ v okolí $\mathbf{u} = 0$, tedy kde se tekutina makroskopicky nepohybuje

$$N_i^{(0)} = f(X_i(\mathbf{u} = 0)) + u_\alpha \frac{\partial}{\partial u_\alpha} f(X_i(\mathbf{u} = 0)) + \frac{1}{2} u_\alpha u_\beta \frac{\partial^2}{\partial u_\alpha \partial u_\beta} f(X_i(\mathbf{u} = 0)). \quad (96)$$

Upravme derivace

$$\frac{\partial}{\partial u_\alpha} = \frac{\partial X_i}{\partial u_\alpha} \frac{\partial}{\partial X_i} \quad (97)$$

a

$$\frac{\partial^2}{\partial u_\alpha \partial u_\beta} = \frac{\partial^2 X_i}{\partial u_\alpha \partial u_\beta} \frac{\partial}{\partial X_i} + \frac{\partial X_i}{\partial u_\alpha} \frac{\partial X_i}{\partial u_\beta} \frac{\partial^2}{\partial X_i^2}. \quad (98)$$

Protože se tekutina makroskopicky nepohybuje, $N_i^{(0)}$ by měla být z důvodu symetrie všechna stejná. Proto $X_i(\mathbf{u} = 0)$ nezávisí na i a můžeme psát

$$X_i(\rho, \mathbf{u} = 0) = x(\rho). \quad (99)$$

S tímto zjednodušením a s pozměněnými derivacemi lze přepsat (96)

$$\begin{aligned} N_i^{(0)} = & f(x) + u_\alpha \left(\frac{\partial X_i}{\partial u_\alpha} \right)_{\mathbf{u}=0} f'(x) + \\ & \frac{1}{2} u_\alpha u_\beta \left[\frac{\partial^2 X_i}{\partial u_\alpha \partial u_\beta} f'(x) + \frac{\partial X_i}{\partial u_\alpha} \frac{\partial X_i}{\partial u_\beta} f''(x) \right]_{\mathbf{u}=0}. \end{aligned} \quad (100)$$

Neznámé v tomto vztahu jsou určeny vztahem (70), který říká

$$\rho = \sum_i E_{0i} \cdot N_i^{(0)} \quad \rho u_1 = \sum_i E_{1i} \cdot N_i^{(0)} \quad \rho u_2 = v \sum_i E_{2i} \cdot N_i^{(0)} \quad (101)$$

Všimněme si, že platí

$$\sum_i E_{0i} \frac{\partial X_i}{\partial u_\alpha} = 6 \frac{\partial a}{\partial u_\alpha} \quad \sum_i E_{1i} \frac{\partial X_i}{\partial u_\alpha} = 3 \frac{\partial b_1}{\partial u_\alpha} \quad \sum_i E_{2i} \frac{\partial X_i}{\partial u_\alpha} = 3 \frac{\partial b_2}{\partial u_\alpha}, \quad (102)$$

neboť

$$E_0 \cdot E_0 = 6, \quad E_1 \cdot E_1 = E_2 \cdot E_2 = 3 \quad \text{a} \quad E_k \cdot E_l = 0 \quad \text{pro} \quad k \neq l. \quad (103)$$

Stejně pak

$$\sum_i E_{0i} \frac{\partial X_i}{\partial u_\alpha} \frac{\partial X_i}{\partial u_\beta} = 6 \frac{\partial a}{\partial u_\alpha} \frac{\partial a}{\partial u_\beta} + 3 \frac{\partial b_1}{\partial u_\alpha} \frac{\partial b_1}{\partial u_\beta} + 3 \frac{\partial b_2}{\partial u_\alpha} \frac{\partial b_2}{\partial u_\beta}, \quad (104)$$

$$\sum_i E_{1i} \frac{\partial X_i}{\partial u_\alpha} \frac{\partial X_i}{\partial u_\beta} = 3 \frac{\partial a}{\partial u_\alpha} \frac{\partial b_1}{\partial u_\beta} + 3 \frac{\partial b_1}{\partial u_\alpha} \frac{\partial a}{\partial u_\beta} \quad (105)$$

a konečně

$$\sum_i E_{2i} \frac{\partial X_i}{\partial u_\alpha} \frac{\partial X_i}{\partial u_\beta} = 3 \frac{\partial a}{\partial u_\alpha} \frac{\partial b_2}{\partial u_\beta} + 3 \frac{\partial b_2}{\partial u_\alpha} \frac{\partial a}{\partial u_\beta}, \quad (106)$$

a to platí, jelikož

$$\sum_i E_{0i} E_{0i} E_{ki} = \sum_i E_{ki} = \begin{cases} 6 & \text{pokud } k = 0 \\ 0 & \text{jindy} \end{cases} \quad (107)$$

$$\sum_i E_{0i} E_{ki} E_{li} = 3\delta_{kl} \quad \text{pokud} \quad k, l \neq 0 \quad (108)$$

a

$$\sum_i E_{ki} E_{li} E_{mi} = 0 \quad \text{pokud} \quad k, l, m \neq 0. \quad (109)$$

Pokud zavedeme notaci

$$a_\alpha \equiv \left(\frac{\partial a}{\partial u_\alpha} \right)_{\mathbf{u}=0} \quad \text{a} \quad a_{\alpha\beta} \equiv \left(\frac{\partial^2 a}{\partial u_\alpha \partial u_\beta} \right)_{\mathbf{u}=0} \quad (110)$$

a stejně tak i pro b_1 a b_2 , pak můžeme přepsat podmínku $\rho = E_0 \cdot N_i^{(0)}$ na tvar

$$\begin{aligned} \rho &= 6f(x) + 6u_\alpha a_\alpha f'(x) + 3u_\alpha u_\beta a_{\alpha\beta} f'(x) \\ &+ \frac{1}{2} u_\alpha u_\beta [6a_\alpha a_\beta + 3b_{1\alpha} b_{1\beta} + 3b_{2\alpha} b_{2\beta}] f''(x). \end{aligned} \quad (111)$$

Neboť tato rovnice musí být splněna pro všechny hodnoty ρ a také $\mathbf{u}$, lze usoudit na platnost

$$6f(x) = \rho \quad \text{a} \quad a_\alpha = 0 \quad (112)$$

a

$$a_{\alpha\beta} f'(x) + \frac{1}{2} (b_{1\alpha} b_{1\beta} + b_{2\alpha} b_{2\beta}) f''(x) = 0. \quad (113)$$

Jelikož $E_1 \cdot N_i^{(0)} = \rho u_1/v$, obdobně obdržíme

$$\frac{\rho u_1}{v} = 3u_\alpha b_{1\alpha} f'(x) + \frac{1}{2} u_\alpha u_\beta [b_{1\alpha\beta} f'(x) + 3(a_\alpha b_{1\beta} + b_{1\alpha} a_\beta) f''(x)], \quad (114)$$

následkem čehož

$$3b_{11} f'(x) = \frac{\rho}{v}, \quad b_{12} = 0 \quad \text{a} \quad b_{1\alpha\beta} = 0. \quad (115)$$

Z důvodu symetrie z poslední podmínky $E_2 \cdot N_i^{(0)} = \rho u_2/v$ vyplývá

$$3b_{22} f'(x) = \frac{\rho}{v}, \quad b_{21} = 0 \quad \text{a} \quad b_{2\alpha\beta} = 0. \quad (116)$$

Rov. (113) se pak redukuje

$$a_{11} f'(x) + \frac{1}{2} b_{11}^2 f''(x) = 0 \quad \text{a} \quad a_{22} f'(x) + \frac{1}{2} b_{22}^2 f''(x) = 0 \quad (117)$$

a tudíž jedinými nenulovými členy v našem rozvoji jsou

$$f(x) = \frac{\rho}{v}, \quad b_{11} = b_{22} = \frac{\rho}{3v f'(x)} \quad \text{a} \quad a_{11} = a_{22} = -\frac{\rho^2}{18v^2} \frac{f''(x)}{(f'(x))^3}. \quad (118)$$

Pokud tento výsledek zohledníme v daném rozvoji (96) vyjde nám

$$N_i^{(0)} = \frac{\rho}{6} + \frac{\rho}{3v} \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u} - \frac{\rho^2 u^2}{36 v^2} \frac{f''(x)}{(f'(x))^2} + \frac{\rho^2}{18} \frac{f''(x)}{(f'(x))^2} c_{i\alpha} c_{i\beta} \frac{u_\alpha}{v} \frac{u_\beta}{v}, \quad (119)$$

kde $u^2 = u_\alpha u_\beta = u_1^2 + u_2^2$.

Protože f je Fermiho-Diracovo rozdělení, platí

$$f' = f(f-1) \quad \text{a} \quad f'' = f(1-f)(1-2f) \quad (120)$$

a protože platí $f(x) = (\rho/6)$ dostáváme

$$\frac{\rho^2}{18} \frac{f''(x)}{(f'(x))^2} = \frac{2\rho(3-\rho)}{3(6-\rho)}. \quad (121)$$

Tato rovnost poskytuje již konečné vyjádření řešení lokální rovnováhy pro náš problém

$$N_i^{(0)} = \frac{\rho}{6} + \frac{\rho}{3v} \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u} - \frac{1}{2} \rho G(\rho) \frac{u^2}{v^2} + g G(\rho) c_{i\alpha} c_{i\beta} \frac{u_\alpha}{v} \frac{u_\beta}{v}, \quad (122)$$

kde jsme použili G definováno následovně

$$G(\rho) = \frac{2(3-\rho)}{3(6-\rho)}. \quad (123)$$

Ještě předtím, než obdržíme dlouho očekávanou Eulerovu rovnici, je třeba ověřit důležitý vztah, který je zodpovědný za výslednou isotropii hexagonálního modelu

$$\sum_{i=1}^6 c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} = \frac{3}{4} (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}). \quad (124)$$

Tento vztah je splněn pro jakoukoliv orientaci vektoru $\mathbf{c}_i$. Tenzor čtvrtého řádu $\sum_{i=1}^6 c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta}$ je isotropní a to je důvod, proč je použita hexagonální mřížka k popisu proudění tekutin, na rozdíl od mřížky čtvercové, která isotropii nevykazuje. Isotropní tenzory čtvrtého řádu, které vytváří směry mřížky, hrají kruciální roli v modelech mřížového plynu pro simulaci proudění tekutin, což je dáno nelineárním členem $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$ v Navierových-Stokesových rovnicích. Požadavek isotropie omezuje možné mřížky, které mohou být použity. To se nejvíce projevuje v třírozměrném prostoru, ve kterém žádná takováto mřížka neexistuje. Tento problém se dá naštěstí obejít, protože existuje mřížka s danou vlastností ve čtyřrozměrném prostoru a jde provést její projekci do třírozměrného prostoru. Takováto oklika však vede k tomu, že se již částice nepohybují jen jednou rychlostí, ale mohou se pohybovat dvěma a zároveň se v některých směrech mohou pohybovat dvě částice. Výsledek rov. (124) je možné obdržet přímým odvozením. Proto napíšme

$$\mathbf{c}_k = (\cos(k\psi + \phi), \sin(k\psi + \phi)), \quad (125)$$

kde

$$\psi = \frac{2\pi}{6} \quad \text{a} \quad \phi \in \langle 0, 2\pi \rangle. \quad (126)$$

Proměnné, jenž je třeba vypočítat v rov. (124) jsou

$$\sum_k c_{k1}^4, \quad \sum_k c_{k2}^4, \quad \sum_k c_{k1}^2 c_{k2}^2, \quad \sum_k c_{k1}^3 c_{k2} \quad \text{a} \quad \sum_k c_{k1} c_{k2}^3. \quad (127)$$

Použitím vztahu $\sum_{k=0}^{n-1} r^k = (r^n - 1) / (r - 1)$ platného pro $r \neq 1$ a vztahu $e^{i\psi} = \cos \psi + i \sin \psi$ dostáváme

$$\sum_{k=1}^6 (c_{k1} + i c_{k2})^4 = \sum_{k=0}^5 e^{4ik\psi} e^{4i\psi} = e^{4i\psi} \frac{e^{24i\psi} - 1}{e^{4i\psi} - 1} = 0, \quad (128)$$

$$\sum_{k=1}^6 (c_{k1} + i c_{k2})^3 (c_{k1} - i c_{k2}) = \sum_{k=0}^5 e^{2ik\psi} e^{2i\psi} = e^{2i\psi} \frac{e^{12i\psi} - 1}{e^{2i\psi} - 1} = 0 \quad (129)$$

a

$$\sum_{k=1}^6 (c_{k1} + i c_{k2})^2 (c_{k1} - i c_{k2})^2 = \sum_{k=0}^5 1 = 6. \quad (130)$$

Přímým výpočtem levé strany rovnic (128), (129) a (130) obdržíme

$$\sum_{k=1}^6 (c_{k1} + i c_{k2})^4 = \sum_{k=1}^6 [(c_{k1}^4 + c_{k2}^4 - 6c_{k1}^2 c_{k2}^2) + 2i(c_{k1}^3 c_{k2} - c_{k1} c_{k2}^3)], \quad (131)$$

$$\sum_{k=1}^6 (c_{k1} + i c_{k2})^3 (c_{k1} - i c_{k2}) = \sum_{k=1}^6 [(c_{k1}^4 - c_{k2}^4) + 2i(c_{k1}^3 c_{k2} + c_{k1} c_{k2}^3)] \quad (132)$$

a

$$\sum_{k=1}^6 (c_{k1} + i c_{k2})^2 (c_{k1} - i c_{k2})^2 = \sum_{k=1}^6 (c_{k1}^4 + c_{k2}^4 + 2c_{k1}^2 c_{k2}^2). \quad (133)$$

Porovnání těchto levých stran (131), (132) a (133) s pravými stranami (128), (129) a (130) poskytuje

$$\sum_k c_{k1}^4 = \sum_k c_{k2}^4 = \frac{9}{4}, \quad \sum_k c_{k1}^2 c_{k2}^2 = \frac{3}{4} \quad \text{a} \quad \sum_k c_{k1}^3 c_{k2} = \sum_k c_{k1} c_{k2}^3 = 0. \quad (134)$$

Toto je kompaktnější forma rov. (124).

Nyní se vraťme k výpočtu $\Pi^{(0)}$ za použití rov. (122) a právě rov. (124)

$$\begin{aligned}\Pi_{\alpha\beta}^{(0)} &= \sum_i N_i^{(0)} v_{i\alpha} v_{i\beta} = \\ &= \frac{\rho}{2} v^2 \delta_{\alpha\beta} - \frac{3\rho}{2} G(\rho) u^2 \delta_{\alpha\beta} + \frac{3\rho}{4} G(\rho) (u^2 \delta_{\alpha\beta} + 2u_\alpha u_\beta) \\ &= \left(\frac{v^2}{2} \rho - \frac{\rho}{2} g(\rho) u^2 \right) \delta_{\alpha\beta} + \rho g(\rho) u_\alpha u_\beta,\end{aligned}\tag{135}$$

kde

$$g(\rho) \equiv \frac{3}{2} G(\rho) = \frac{\rho - 3}{\rho - 6}.\tag{136}$$

Jak vidno, tento výsledek je *nezávislý* na směrech mřížky $\mathbf{c}_i$ a to právě díky isotropii tenzoru (124).

Výraz $\left(\frac{v^2}{2} \rho - \frac{\rho}{2} g(\rho) u^2 \right) \delta_{\alpha\beta}$ je tlaková část a výraz $\rho g(\rho) u_\alpha u_\beta$ je konvektivní část tenzoru hustoty toku hybnosti. Mikrodynamický popis nám dává explicitní vyjádření tlaku

$$p = \left(\frac{v^2}{2} \rho - \frac{\rho}{2} g(\rho) u^2 \right),\tag{137}$$

přičemž $\frac{v^2}{2} \rho$ odpovídá tlaku ideálního plynu při konstantní teplotě. Teplotu lze do systému dodat povolením různých rychlostí částic, což ovšem překračuje rámec této diplomové práce.

Jsme nyní v situaci, kdy je možné napsat Eulerovu aproximaci (na škále T_1 a L_1), popisující chování naší tekutiny. Jedná se o standardní aproximaci v hydrodynamice, kde pro nízká Machova čísla, nebo-li pro $\mathbf{u}$ mnohem menší než rychlost zvuku, lze považovat hustotu za konstantní $\rho = \rho_0$ všude, kromě tlakového členu. S tímto omezením a využitím rov. (135), přejde rovnice (45) na

$$\partial_{t_1} \mathbf{u} + g(\rho) (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p.\tag{138}$$

Tato rovnice se ve srovnání se standardní Eulerovou rovnicí (7) liší ve faktoru $g(\rho)$ před konvektivním členem. Jelikož $g(\rho) \neq 1$ nepopisuje FHP model proudění tekutin přesně. A to z důvodu porušení galileovské invariance dynamiky tohoto celulárního automatu a proto $\partial_t u_\alpha + g(\rho) (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}$ není totální derivací $d\mathbf{u}/dt$. Avšak pro malá Machova čísla $g(\rho)$ může být považováno za konstantní a vhodnou renormalizací ∂_{t_1} na $g(\rho) \partial'_t$ se tak zbavit faktoru $g(\rho)$ v rovnici (138).

5 Implementace FHP modelu v MatLabu

V této poslední kapitole mé diplomové práce uvádím výsledky vlastní implementace FHP modelu v MatLabu. Tento program jsem zvolil ze dvou důvodů. Zaprvé je to asi nejrozšířenější komerční software, pomocí kterého se provádí numerické výpočty nejen na univerzitní půdě. A zadruhé, existují i jeho open source klony, tudíž takové, které mají volně přístupný kód a jsou často zcela zdarma ke stažení na internetu. Tím pádem si může kdokoli výsledky zde prezentované ověřit, či příslušné pasáže kódu upravit k obrazu svému. Jedním takovým je např. GNU Octave.

Rozhodl jsem se simulovat obtékání nekonečně tenké desky umístěné v řece kolmo k směru toku tekutiny.

V prvním přiblížení se dá říci, že jistá část řeky je dvourozměrný rovinný útvar, který je ohraničen korytem, jehož břehy jsou vzájemně rovnoběžné. Hexagonální mřížka, která vyplňuje řeku, má směr $\mathbf{c}_1$ rovnoběžný s oběma břehy a směřuje doprava, na rozdíl od směru $\mathbf{c}_4$, který směřuje doleva. Na březích jsem zvolil podmínky, které de facto odpovídají zákonu odrazu. Tím je myšleno, že se částice, pohybující ve směru $\mathbf{c}_2$, resp. ve směru $\mathbf{c}_3$, odrazí od horního břehu a pokračuje ve směru $\mathbf{c}_6$, resp. ve směru $\mathbf{c}_5$. Podle stejné úvahy se částice pohybující ve směru $\mathbf{c}_5$, resp. ve směru $\mathbf{c}_6$, odrazí od dolního břehu a pokračuje ve směru $\mathbf{c}_3$, resp. ve směru $\mathbf{c}_2$. Kolmo k břehům jsou dvě místa, kde řeka začíná a končí. V těchto místech jsem zvolil periodické okrajové podmínky, nebo-li, to co z řeky vyteče, se do ní vrátí z druhé strany. Díky těmto okrajovým podmínkám je možné kontrolovat, jestli se zachovává počet částic, které byly do systému na počátku vloženy.

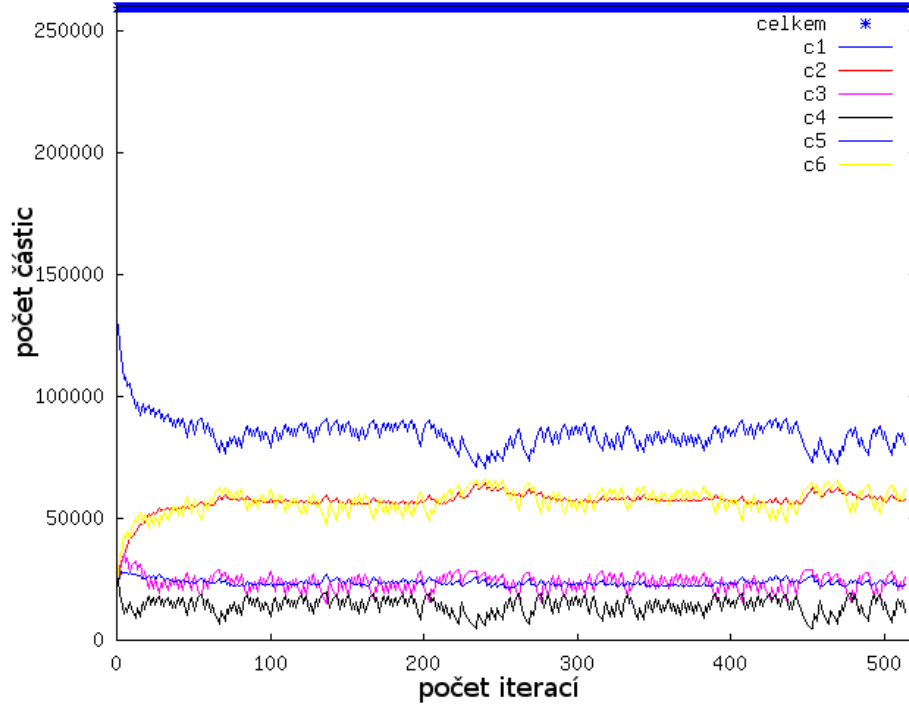
V následujících dvou podkapitolách jsou uvedeny výsledky simulací v případech, kdy ještě není v řece umístěna překážka a posléze, kdy již řeka tuto překážku obtéká.

5.1 Řeka bez překážky

V této části uvádím výsledek simulace, který byl obdržen implementací kódu, který je vypsán a vysvětlen v appendixu A. Cílem této simulace bylo ověřit, že pokud se na začátku pohybuje více částic jedním směrem než druhým, tak tomu tak bude i po uplynutí libovolného času. Tomu tak není, použije-li se např. čtvercová namísto hexagonální mřížky.

Toto je potvrzeno na obrázku (8), kde jsou vykreslené počty částic v příslušných směrech v závislosti na čase. Na počátku byl počet částic ve směru $\mathbf{c}_1$ pětikrát větší než v ostatních směrech. Je vidět, že se na začátku částice přeskupují ve všech směrech a poté počet částic v jednotlivých směrech osciluje kolem konstantní hodnoty. Tato počáteční reorganizace i následné oscilace kolem fixní hodnoty jsou zapříčiněné srážkami, které převádí částice z jednoho směru do jiného. Na obrázku

je vidět i korelace počtu částic ve směru $\mathbf{c}_1$ a $\mathbf{c}_4$. To je způsobeno tím, že při dvoučásticové srážce, která je pravděpodobnější než tříčásticová, se ve stejný okamžik objeví či ztratí částice pohybující se proti sobě. Během celé simulace je počet všech částic konstantní.



Obrázek 8: Počet částic v celém systému i v jednotlivých směrech v závislosti na počtu iterací a tím i na čase. V řece prozatím není umístěná překážka.

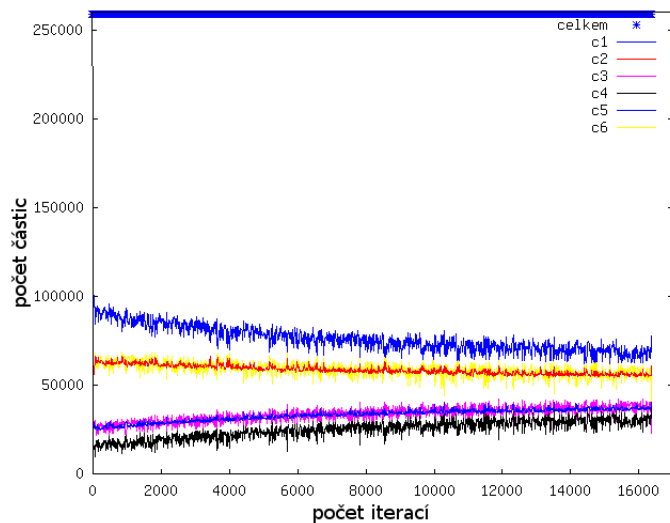
5.2 Řeka s překážkou

V této části uvádím výsledky simulace, které byly obdrženy implementací kódu, který je vypsán a vysvětlen v appendixu B. Řeka s překážkou je postavena na totožné myšlence, jako je řeka bez překážky - jen s tím doplněním, že se do simulace přidá překážka kolmá na směr $\mathbf{c}_1$. Překážka, která má šířku jedné buňky, se nachází asi v polovině řeky a zaujímá 1/3 její šířky. Střed překážky se nachází v ose řeky.

Do kódu, který je jen doplněním kódu prezentovaného v appendixu A, nejprve pouze vložíme překážku a ve směru $\mathbf{c}_1$ opět pustíme pětikrát více částic, než-li jich je ve směrech ostatních. Je rozumné očekávat, že bez působení vnější síly, to jest bez násilného otočení některých částic do jiného směru, se budou počty částic v jednotlivých směrech postupně vyrovnávat.

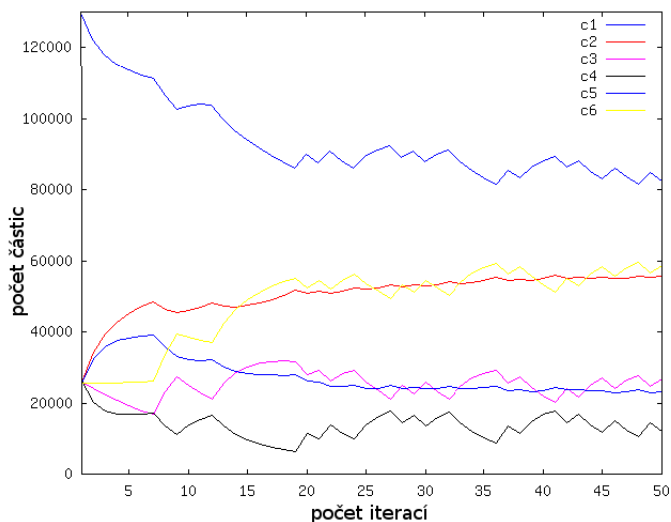
Toto je potvrzeno na obrázku (9), kde jsou vykreslené počty částic v příslušných směrech v závislosti na čase. Na počátku byl počet částic ve směru $\mathbf{c}_1$ pětikrát větší

než v ostatních směrech. Je zde vidět trend, kdy se počty částic v jednotlivých směrech s rostoucím časem blíží ke stejné hodnotě. Během celé simulace se počet všech částic zachovával.



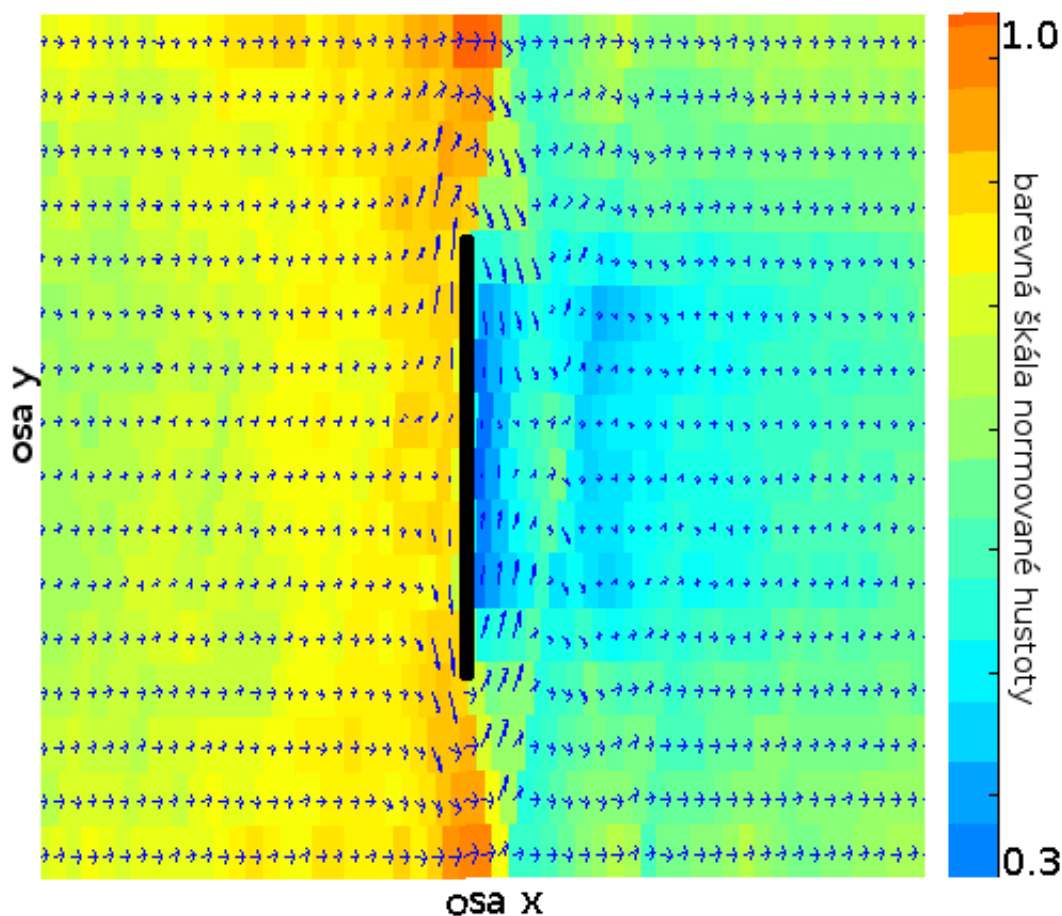
Obrázek 9: Počty částic v jednotlivých směrech i jejich výsledná suma v závislosti na počtu iterací.

Jelikož je na obrázku (9) znázorněno 16385 iteračních cyklů a tudíž není zřejmé, že je počet částic ve směrech c_2 až c_6 při první iteraci stejný, je na obrázku (10) znázorněno pouze prvních 50 iterací.



Obrázek 10: Počty částic v jednotlivých směrech v průběhu prvních 50 iterací. Osa x reprezentuje počet iterací a tím i čas, kdežto na ose y je vyneseno počet částic.

Závěrem je na obrázku (11) znázorněn průběh simulace obtékání překážky. Jsou vykresleny normované rychlosti toku částic spolu s jejich směry. Za normu byla zvolena největší rychlost, kterou se následně všechny rychlosti vynormalovaly. Tudiž má šipka, znázorňující největší rychlost modul roven jedné. Matice, která reprezentuje řeku, má 1024 bodů ve směru rovnoběžným s korytem a 256 bodů v kolmém směru. Uprostřed je kolmo na směr toku umístěná překážka o velikosti 106 bodů. K vykreslení byla použita sumační okénka, která mají velikost 16 na 16 bodů. Jako pozadí je znázorněna normovaná hustota v příslušném sumačním okénku, která je tím větší, čím teplejší barvou je příslušné okénko vyplněno. Je vidět, že nedochází k turbulentnímu proudění, což je dáno mikrodynamikou FHP modelu. K pozorování turbulencí je třeba použít FHP III model, který je takového jevy schopen zachytit, ale který již překračuje rámec této diplomové práce. Výsledné normované hustoty odpovídají očekávání. Před překážkou se částice hromadí a kolem ní je nuceno proudit nejvíce částic, čímž se zvyšuje lokální hustota.



Obrázek 11: Záznam ze simulace, která znázorňuje obtékání překážky.

6 Apendix A

Zde je vložen okomentovaný kód, který simuluje proudění bez překážky pomocí FHP modelu.

```
close all, clear all, clc

tmax = 2^9 + 1; % počet iterací
a = 2^10; % počet bodů hexagonální matice ve směru koryta
b = 2^8; % počet bodů kolmo na koryto
c = 2^3; % k sumaci přes mřížku ve směru koryta
d = 2^3; % k sumaci přes mřížku kolmo na koryta
ac = a/c; bd = b/d;
n = a*b; % počet všech bodů mřížky

pomer1 = .50; % k nastavení počtu částic ve směru c1 atd...
pomer2 = .10; pomer3 = .10; pomer4 = .10; pomer5 = .10; pomer6 = .10;

bot = 2:1:a-1; % dolní strana mřížky bez okrajů
lbot = [1 bot a]; % dolní strana mřížky i s okraji
top = n-a+2:1:n-1; % horní strana mřížky bez okrajů
ltop = [n-a+1 top n]; % horní strana mřížky i s okraji
right = 2*a:a:n-a; % pravá strana mřížky bez okrajů
lright = [a right n]; % pravá strana mřížky i s okraji
left = a+1:a:n-2*a+1; % levá strana mřížky bez okrajů
lleft = [1 left n-a+1]; % levá strana mřížky i s okraji
kraj = [1 bot a left right top n-a+1 n]; % jde o obvod celé řeky
kraj = sort(kraj); % setřídění obvodu řeky

W1 = rand(1,n)<pomer1; % inicializace systému ve směru c1 atd...
W2 = rand(1,n)<pomer2; W3 = rand(1,n)<pomer3; W4 = rand(1,n)<pomer4;
W5 = rand(1,n)<pomer5; W6 = rand(1,n)<pomer6;
W = [W1;W2;W3;W4;W5;W6]; % matice reprezentující celý systém
W(:,kraj)=0;% na počátku jsou buňky na obvodu řeky prázdné

S = zeros(6,(a/c)*(b/d)); % matice bude využita k sumaci
A = zeros(1,a*b); % vektor bude využit k zápisu adres pro sumaci
Q = zeros((a/c)*(b/d),c*d); % matice pro look up table k sumační matici S
% zde se vytváří adresy
A_1 = ceil([1:a]/c);
for i = 1: b
    z = ceil(i/d)-1;
    A(1, (i-1)*a+1 : i*a) = A_1 + z*(a/c);
end % konec vytváření adres
```

```

% zde se vytváří look up table na sumaci
for i = 1:(a/c)*(b/d)
Q (i,:) = find(A==i);
end % konec vytváření look up table

uhel = [0 pi/3 2*pi/3 pi 4*pi/3 5*pi/3 ]; % směry na mřížce pro hybnost

for cas = 1:1:tmax % zde začíná implementace FHP modelu
%%%% zde je srážková část
    nesrazca = W(:,[lbot ltop]); % srážky na korytu jsou zakázané
    z = [32, 16, 8, 4, 2, 1];
    col = z*W; % kolizní vektor
    colnew = col; % pomocný vektor, abych si nemazal data pod rukama
    nahoda = rand<0.5; % náhodně otáčí částice po srážkách
    colnew(col==42) = 21; % 3 částicová srážka
    colnew(col==21) = 42; % 3 částicová srážka
    colnew(col==9) = nahoda*18 + ~nahoda*36; % 2 částicová srážka
    colnew(col==18) = nahoda*9 + ~nahoda*36; % 2 částicová srážka
    colnew(col==36) = nahoda*9 + ~nahoda*18; % 2 částicová srážka
    zmena = col ~colnew; % přepíšeme pouze buňky, kde ke srážce došlo
    colnew(1) = col(1); % v rozích nedochází ke srážkám
    colnew(a) = col(a); % ...
    colnew(n-a+1) = col(n-a+1); % ...
    colnew(n) = col(n); % ...
%%%% zde je převod do logických proměnných
    col = colnew;
    m = dec2bin(col(zmena),6)';
    m = uint8(m);
    W(:,zmena) = m==49;
    W(:,[lbot ltop]) = nesrazca; % vrátím stav koryta před srážkami
%%%% zde je propagační část
    nuly = false(1,a); % zde jsou vytvořené vektory k posunu částic
    nul = false(1,a-1); % ...
%%%% posun ve směru c1
    pom = W(1,:); pom(n)=[]; pom = [false pom];
    new(1,:)=pom; new(1,lleft) = W(1,lright);
%%%% posun ve směru c2
    pom = W(2,:); pom(n-a+1:n)=[]; pom = [nuly pom];
    new(2,:)=pom; new(2,lbot)=W(2,ltop);
%%%% posun ve směru c3
    pom = W(3,:); pom(n-a+2:n)=[]; pom = [nul pom];
    new(3,:)=pom; new(3,right) = W(3,left); new(3,bot) = W(3,top);

```

```

%%%% posun ve směru c4
    pom = W(4,:); pom(1)=[]; pom = [pom false];
    new(4,:)=pom; new(4,lright) = W(4,lleft);
%%%% posun ve směru c5
    pom = W(5,:); pom(1:a)=[]; pom = [pom nuly];
    new(5,:)=pom; new(5,ltop) = W(5,lbot);
%%%% posun ve směru c6
    pom = W(6,:); pom(1:a-1)=[]; pom = [pom nul];
    new(6,:)=pom; new(6,left) = W(6,right); new(6,top) = W(6,bot);
%%%% zde se ošetřují rohy řeky
    new(3,a) = W(3,n-a+1); new(3,1)=0; new(3,n)=0;
    new(6,n-a+1) = W(6,a); new(6,1)=0; new(6,n)=0;

    W = new; % zde se vrátí celá matice zpět

%%%% zde se vytváří okrajové podmínky na korytu, protože
%%%% doteď byly na korytu podmínky periodické, je třeba je opravit
    W(6,top) = new(2,bot);
    W(5,top) = new(3,bot);
    W(3,bot) = new(5,top);
    W(2,bot) = new(6,top);

end % a to je konec

```

7 Apendix B

Zde je prezentován okomentovaný kód, který simuluje obtékání překážky pomocí FHP modelu.

```
close all, clear all, clc

tmax = 2^9 + 1; % počet iterací
a = 2^10; % počet bodů hexagonální matice ve směru koryta
b = 2^8; % počet bodů kolmo na koryto
c = 2^3; % k sumaci přes mřížku ve směru koryta
d = 2^3; % k sumaci přes mřížku kolmo na koryta
ac = a/c;
bd = b/d;
n = a*b; % počet všech bodů mřížky

pomer1 = .50; % k nastavení počtu částic ve směru c1 atd...
pomer2 = .10; pomer3 = .10; pomer4 = .10; pomer5 = .10; pomer6 = .10;
bot = 2:1:a-1; % dolní strana mřížky bez okrajů
lbot = [1 bot a]; % dolní strana mřížky i s okraji
top = n-a+2:1:n-1; % horní strana mřížky bez okrajů
ltop = [n-a+1 top n]; % horní strana mřížky i s okraji
right = 2*a:a:n-a; % pravá strana mřížky bez okrajů
lright = [a right n]; % pravá strana mřížky i s okraji
left = a+1:a:n-2*a+1; % levá strana mřížky bez okrajů
lleft = [1 left n-a+1]; % levá strana mřížky i s okraji
kraj = [1 bot a left right top n-a+1 n]; % jde o obvod celé řeky
kraj = sort(kraj); % setřídění obvodu řeky

W1 = rand(1,n)<pomer1; % inicializace systému ve směru c1 atd...
W2 = rand(1,n)<pomer2; W3 = rand(1,n)<pomer3; W4 = rand(1,n)<pomer4;
W5 = rand(1,n)<pomer5; W6 = rand(1,n)<pomer6;
W = [W1;W2;W3;W4;W5;W6]; % matice reprezentující celý systém
W(:,kraj)=0;% na počátku jsou buňky na obvodu řeky prázdné

S = zeros(6,(a/c)*(b/d)); % matice bude využita k sumaci
A = zeros(1,a*b); % vektor bude využit k zápisu adres pro sumaci
Q = zeros((a/c)*(b/d),c*d); % matice pro look up table k sumacni matici S
% zde se vytváří adresy
A_1 = ceil([1:a]/c);
for i = 1: b
    z = ceil(i/d)-1;
    A(1, (i-1)*a+1 : i*a) = A_1 + z*(a/c);
end % konec vytváření adres
```

```

% zde se vytváří look up table na sumaci
for i = 1:(a/c)*(b/d)
Q (i,:) = find(A==i);
end % konec vytváření look up table

uhel = [0 pi/3 2*pi/3 pi 4*pi/3 5*pi/3 ]; % směry na mřížce pro hybnost

% zde se vytváří souřadnice překážky
prekazka = zeros(1,106); % překážka zabírá 106 buněk v ose y
prekazka(1) = 75*a + 500; % první buňka je na pozici 500 v ose x
for ii = 2:1:106 % for cyklus na tvorbu souřadnic překážky
    prekazka(ii) = prekazka(ii-1) + a - mod(ii,2);
end % souřadnice jsou hotové
W(:,prekazka)=0; % na překážce nejsou částice

for cas = 1:1:tmax % zde začíná implementace FHP modelu
%%% tady je vytvořen forcing, aby pohyb časem neustal
%%% jde o prosté otočení částic do směru c1
    for i = 2:6
        M = ~W(1,:).* (rand(1,n)<.0006).*W(i,:);
        W(1,:) = W(1,:) + M;
        W(i,:) = W(i,:) - M;
    end
    %%%% zde je srážková část
    vyjmu_vlozim = W(:,prekazka); % tady nechci srážku, proto ji zakáži
    nesrazca = W(:,[lbot ltop]); % srážky na korytu jsou zakázané
    z = [32, 16, 8, 4, 2, 1];
    col = z*W; % kolizní vektor
    colnew = col; % pomocný vektor, abych si nemazal data pod rukama
    nahoda = rand<0.5; % náhodně otáčí částice po srážkách
    colnew(col==42) = 21; % 3 částicová srážka
    colnew(col==21) = 42; % 3 částicová srážka
    colnew(col==9) = nahoda*18 + ~nahoda*36; % 2 částicová srážka
    colnew(col==18) = nahoda*9 + ~nahoda*36; % 2 částicová srážka
    colnew(col==36) = nahoda*9 + ~nahoda*18; % 2 částicová srážka
    zmena = col ~colnew; % přepíšeme pouze buňky, kde ke srážce došlo
    colnew(1) = col(1); % v rozích nedochází ke srážkám
    colnew(a) = col(a); % ...
    colnew(n-a+1) = col(n-a+1); % ...
    colnew(n) = col(n); % ...

```

```

%%% zde je převod do logických proměnných
col = colnew;
m = dec2bin(col(zmena),6)';
m = uint8(m);
W(:,zmena) = m==49;
W(:,[lbot ltop]) = nesrazca; % vrátím stav koryta před srážkami
W(:,prekazka) = vyjmu_vlozim; % vrátím stav na překážce před srážkami
%%% zde je odraz na překážce
W(1,prekazka) = vyjmu_vlozim(4,:);
W(2,prekazka) = vyjmu_vlozim(3,:);
W(3,prekazka) = vyjmu_vlozim(2,:);
W(4,prekazka) = vyjmu_vlozim(1,:);
W(5,prekazka) = vyjmu_vlozim(6,:);
W(6,prekazka) = vyjmu_vlozim(5,:);
%%% zde je propagační část
nuly = false(1,a); % zde jsou vytvořené vektory k posunu částic
nul = false(1,a-1); % ...
%%% posun ve směru c1
pom = W(1,:); pom(n)=[]; pom = [false pom];
new(1,:)=pom; new(1,lleft) = W(1,lright);
%%% posun ve směru c2
pom = W(2,:); pom(n-a+1:n)=[]; pom = [nuly pom];
new(2,:)=pom; new(2,lbot)=W(2,ltop);
%%% posun ve směru c3
pom = W(3,:); pom(n-a+2:n)=[]; pom = [nul pom];
new(3,:)=pom; new(3,right) = W(3,left); new(3,bot) = W(3,top);
%%% posun ve směru c4
pom = W(4,:); pom(1)=[]; pom = [pom false];
new(4,:)=pom; new(4,lright) = W(4,lleft);
%%% posun ve směru c5
pom = W(5,:); pom(1:a)=[]; pom = [pom nuly];
new(5,:)=pom; new(5,ltop) = W(5,lbot);
%%% posun ve směru c6
pom = W(6,:); pom(1:a-1)=[]; pom = [pom nul];
new(6,:)=pom; new(6,left) = W(6,right); new(6,top) = W(6,bot);
%%% zde se ošetřují rohy řeky
new(3,a) = W(3,n-a+1); new(3,1)=0; new(3,n)=0;
new(6,n-a+1) = W(6,a); new(6,1)=0; new(6,n)=0;
W = new; % zde se vrátí celá matice zpět

```

```

%%%% zde se vytváří okrajové podmínky na korytu, protože
%%%% doteď byly na korytu podmínky periodické, je třeba je opravit
    W(6,top) = new(2,bot);
    W(5,top) = new(3,bot);
    W(3,bot) = new(5,top);
    W(2,bot) = new(6,top);
%% zde je vizualizace výsledků co 64 iterací
    if mod(cas,64)==1
%% samotná sumace na vykreslení
        for i = 1:(a/c)*(b/d)
            kde = Q(i,:);
            S(:,i) = sum(W(:,kde),2);
        end
%% vykreslení
        figure(cas)
        kresli(c,d,ac,bd,sour,S)
        title(['cas ' num2str(cas) ' po scatter: n = ' num2str(sum(sum(W)))])
        fname = ['iterace' num2str(cas)]; % název na uložení
        print(fname, '-dpng'); % uložení obrázku
        close(figure(cas))
        fOut = sprintf('suma%05d.mat',cas); % název na uložení
        save(fOut, 'S_celkova'); % uložení sumace
        S_celkova = zeros*S_celkova; % vymazání pro příští iteraci
    end
end % a to je konec

```

8 Apendix C

V tomto appendixu jsou vypsány a vysvětleny m-funkce `souradnice.m` a `kresli.m`, které byly použity k vykreslení průběhu simulace v Appendixu B.

`souradnice.m`

Tato funkce vytváří prostorové souřadnice ve dvou dimenzích, které jsou následně použity m-funkcí `kresli.m` k tvorbě hexagonální struktury, do které se výsledky simulace vykreslují.

```
function vysl = souradnice(ac,bd) % název funkce

    N = ac*bd; % celkový počet bodů, což odpovídá dimenzi S
    x = 1:1:ac; % budoucí x komponenta
    y = zeros(1,ac); % budoucí y komponenta
    cit = -1; % použito ve for cyklu k čítání
    vysl = zeros(2,N); % alokace paměti
    for j=0:ac:N
        cit = cit+1; % inkrementace při každé iteraci
        kus = j+1:1:j+ac; % tomuto bloku se přiřadí souřadnice
        vysl(1,kus) = x + cit*0.5; % x komponenta
        vysl(2,kus) = y + sqrt(2)*cit/2; % y komponenta
    end % konec for cyklu
```

kresli.m

Tato funkce potřebuje ke své činnosti m-funkci `souradnice.m`. Slouží k samotné vizualizaci simulace.

```
function kresli(c,d,ac,bd,sour,S)           % název funkce

uhel = [0 pi/3 2*pi/3 pi 4*pi/3 5*pi/3 ]; % směry na mřížce
komponenty = [cos(uhel); sin(uhel)];       % sin a cos směrů
%% zde se nastavuje velikost šipky na vykreslení
rx = komponenty(1,:)*S; % x-komponenta velikosti v daném bodě
ry = komponenty(2,:)*S; % y-komponenta velikosti v daném bodě
r = sqrt(rx.^2 + ry.^2); % celková velikost před normalizací
R = c*d; % toto je normalizační konstanta
rx_norma = rx/R; % normovaná x-komponenta
ry_norma = ry/R; % normovaná y-komponenta

[mm,N] = size(S); % k určení počtu iterací for cyklu

for j = 1:1:N % for cyklus
    plot(sour(1,j),sour(2,j),'r.') % nakreslí puntík
    hold on % a k němu vykreslí šipku do bodu x a y
    x = [sour(1,j); sour(1,j) + rx_norma(j)];
    y = [sour(2,j); sour(2,j) + ry_norma(j)];
    line(x,y) % samotná šipka
    hold on
end % konec for cyklu

axis([0.5 ac+bd*0.5 -0.5 bd*sqrt(2)/2]) % nastavení os
```

Závěr

V diplomové práci bylo provedeno odvození Navierových-Stokesových rovnic, jakožto běžného nástroje k uchopení proudění tekutin. Následovala kapitola, která v krátkosti seznamuje s fenoménem celulárních automatů jako takovým. Těžiště práce se ovšem nachází v posledních třech kapitolách, které se věnují FHP modelu. Nejprve je model uveden, jsou představeny jeho charakteristické rysy a následuje jeho první matematický popis. Navazuje kapitola, ve které se z tohoto vcelku intuitivního popisu pozvolnými úpravami, zjednodušeními a aproximacemi postupně prokazuje, že FHP model je vhodným popisem tekutin a jejich dynamiky. To je prokázáno tím, že se z FHP modelu v makroskopické limitě odvodí Eulerova rovnice, která je jedním ze stavebních kamenů dnešního poznání hydrodynamiky. V poslední kapitole jsou uvedeny vybrané vizualizace simulací proudění, které byly získány implementací FHP modelu v Matlabu. Tyto simulace byly obdrženy evaluací kódů, které jsem sám sestavil a které jsou uvedeny v apendixech.

Na základě výše uvedeného si dovoluji usoudit, že cíle této diplomové práce byly dosaženy. Za vlastní přínos považuji sestavení volně šiřitelných kódů FHP modelu, které nejsou jinde veřejně dostupné.

Reference

- [1] Miroslav Brdička, Ladislav Samek a Bruno Sopko: *Mechanika kontinua*, Academia, 2000.
- [2] Miroslav Brdička, Arnošt Hladík: *Teoretická mechanika*, Academia, 1987
- [3] Jiří Kopáček: *Matematická analýza pro fyziky (III)*, Matfyzpress, 2004
- [4] Jozef Kvasňica: *Statistická fyzika*, Academia, 2000.
- [5] Morton E. Gurtin: *An Introduction to Conrinuum Mechanics*, Academic Press, 1981.
- [6] Richard L. Liboff: *Kinetic Theory*, Springer–Verlag, 2003.
- [7] <http://www.claymath.org/millennium>, navštíveno 26. dubna 2010.
- [8] Bastien Chopard a Michel Droz: *Cellular Automata Modeling of Physical Systems*, Cambridge University Press, 1998.
- [9] S. Ulam: *Random processes and transformations*, Proc. Int. Congr. Math. **2** (1952), 264–275,
- [10] K. Preston a M. Duff: *Modern Cellular Automata: Theory and Applications*, Plenum Press, 1984,
- [11] M. Garden: *The fantastic combinations of John Conway's new solitaire game life*, Scientific American **4** (1970), 120–127,
- [12] J. Hardy, Y. Pomeau a O. de Pazzis: *Molecular Dynamics of a classical lattice gas: Transport properties and time correlation functions*, Phys. Rev. A **13** (1976), 1949–60,
- [13] S. Wolfram: *Theory and Application of Cellular Automata*, World Scientific, 1986,
- [14] S. Wolfram: *Cellular Automata and Complexity*, Addison–Wesley, 1994,
- [15] U. Frisch, B. Hasslacher a Y. Pomeau: *Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation*, Phys. Rev. Lett., 56(14):1505–1508, 1986.
- [16] Daniel H. Rothman a Stéphane Zaleski: *Lattice-Gas Cellular Automata*, Cambridge University Press, 1997.
- [17] G. Doolen, editor, *Lattice Gas Methods for Partial Differential Equations*, Addison-Wesley, 1990.
- [18] R. Krobot *Využití celulárních automatů ve fyzice*, bakalářská práce, UPOL, 2008.

- [19] U. Frisch a kolektiv: *Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions*, Complex Systems, 1:649–707, 1987.
- [20] S. Wolfram: *Cellular Automaton Fluids 1: Basic Theory*, J. Stat. Phys., 45(3/4):471–526, 1986.