

ZÁPADOČESKÁ UNIVERZITA V PLZNI
FAKULTA APLIKOVANÝCH VĚD

KATEDRA MECHANIKY



Numerická simulace proudění chladiva
v palivovém souboru reaktoru VVER1000 pomocí
lattice Boltzmannovy metody

*Disertační práce
k získání akademického titulu doktor
v oboru Aplikovaná mechanika*

Autor: **Ing. Václav Heidler**

Školitel: **doc. Ing. Jan Vimmr, Ph.D.**

Plzeň, říjen 2017

Abstrakt

Předkládaná práce se zabývá 3D numerickou simulací nestacionárního turbulentního proudění chladiva v palivovém souboru TVSA-T reaktoru VVER1000 jaderné elektrárny Temelín pomocí metody simulace velkých vírů (LES - Large-Eddy-Simulations). Z důvodu geometrické složitosti palivového souboru a velké výpočtové náročnosti LES, byl pro numerické simulace vyvinut řešič založený na lattice Boltzmannově metodě. Metoda je známá pro svou relativně jednoduchou algoritmicizaci, iterační rychlost a schopnost velmi efektivní paralelizace.

Cílem práce je řešit intenzitu laterálních toků chladiva vyvolaných turbulencemi od mřížek palivových souborů. Dosažené numerické výsledky nestacionárního turbulentního proudění ve formě pole rychlostí a tlaků přispívají ke stanovení budících sil palivových proutek. Znalost těchto nestacionárních sil přináší vzhled do problematiky vzniku netěsností palivových proutek jejich otěrem o distanční mřížky nazývané Grid-to-Rod fretting.

Autor se domnívá, že podle jemu dostupných informací byl první, který aplikoval lattice Boltzmannovu metodu na řešení úloh v oblasti problematiky Grid-to-Rod fretting, což lze považovat za přínos této disertační práce. Přednostmi této metody jsou zejména výpočetní rychlost a efektivní paralelizovatelnost, což umožňuje simulovat proudění chladiva v oblastech zachycujících větší části palivového souboru a pro delší časové intervaly. Tím lze získat přesnější znalost charakteristik proudového pole. Aplikace lattice Boltzmannovy metody pro řešení úloh v oblasti Grid-to-Rod fretting je z tohoto důvodu významným přínosem.

Klíčová slova

Lattice Boltzmannova metoda, izotermické proudění nestlačitelné newtonovské kapaliny, palivový soubor, Grid-to-Rod fretting, Large-Eddy-Simulations, hierarchicky zjemněná výpočetní síť, CFD.

Abstract

The paper deals with numerical simulation of 3D unsteady turbulent coolant flow inside a fuel assembly TVSA-T of the VVER1000 type reactor operated in Nuclear Power Plant Temelín using Large-Eddy-Simulations (LES). Because of complex geometry of the fuel assemblies and very computational demanding technique LES, we have developed an own solver based on lattice Boltzmann method. The method is famous for its simplicity to algorithmize, fastness and its efficiency in parallel computing.

The aim of the present study is to calculate the lateral flow intensity evoked by grids inside the fuel assemblies. Numerical results of the unsteady turbulent flow simulation in the form of velocity and pressure fields contribute to asses exciting force on fuel rods. The knowledge of this unsteady excitation offers an insight into area of solving problems of fuel rod failures by fretting wear in the contact points between rods and spacer grids. This phenomenon is called Grid-to-Rod fretting.

The author believe that to the best of his knowledge is first who have applied lattice Boltzmann method for solving tasks in the area of Grid-to-Rod fretting. This can be regarded as a contribution of this thesis. The advantages of the method, especially fastness and effective implementation on parallel computing systems, provide simulating coolant flow in domains representing larger part of fuel assembly and for longer time periods. It gives better knowledge of flow field characteristics. Application of the lattice Boltzmann method for solving tasks in the area of Grid-to-Rod fretting is from that reason a significant contribution.

Key words

Lattice Boltzmann method, isothermal flow of the incompressible newtonian fluid, fuel assembly, Grid-to-Rod fretting, Large-Eddy-Simulations, hierarchically refined grid, CFD.

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem tuto práci vypracoval samostatně s použitím odborné literatury a pramenů uvedených v seznamu, který je součástí této práce.

V Plzni dne

.....
Podpis autora

Poděkování

Tímto bych rád poděkoval svému školiteli doc. Ing. Janu Vimmrovi, Ph.D. za cenné profesionální rady, připomínky a metodické vedení práce. Dále děkuji svým rodičům za trvalou podporu během mého celého dosavadního studia a mé manželce za pochopení a povzbuzení při psaní této práce.

Obsah

OBSAH	6
SEZNAM SYMBOLŮ A ZKRATEK	7
ÚVOD	9
1 PRIMÁRNÍ OKRUH JE VVER 1000	13
1.1 JADERNÝ REAKTOR.....	13
1.2 CÍRKULAČNÍ SMYČKA A HLAVNÍ CÍRKULAČNÍ ČERPADLO	17
1.3 PAROGENERÁTOR	17
1.4 SYSTÉM KOMPENZACE OBJEMU.....	18
2 PALIVOVÉ SOUBORY JE TEMELÍN	20
2.1 TVSA-T.MOD.1	20
2.2 TVSA-T.MOD.2	22
2.3 GRID-TO-ROD FRETTING.....	26
3 LATTICE BOLTZMANNOVA METODA	27
3.1 ÚVOD DO KINETICKÉ TEORIE PLYNŮ	28
3.2 BOLTZMANNOVA ROVNICE	28
3.3 H-TEORÉM A ROVNOVÁŽNÝ STAV.....	32
3.4 ODVOZENÍ LATTICE BOLTZMANNOVY ROVNICE	33
3.5 KINETICKÉ MODELÝ	35
3.5.1 Lattice Boltzmannova rovnice ve variantě Single-Relaxation-Time	35
3.5.2 Lattice Boltzmannova rovnice ve variantě Multiple-Relaxation-Time.....	37
3.6 ALGORITMIZACE	39
3.7 OKRAJOVÉ PODMÍNKY.....	41
3.7.1 Bounce-Back schéma	42
3.7.2 Yu schéma	43
3.7.3 Okrajová podmínka se zadaným třením.....	44
4 LARGE EDDY SIMULATION	48
4.1 SMAGORINSKÉHO SUBGRIDNÍ MODEL.....	49
4.2 IMPLEMENTACE LES DO LBM.....	50
4.3 TURBULENTNÍ OKRAJOVÉ PODMÍNKY	50
4.3.1 Turbulentní mezní vrstva.....	51
4.3.2 Stěnové funkce.....	53
5 REGULARIZACE A STABILIZACE	57
5.1 ENTROPICKÁ FILTRACE	59
5.2 EHRENFESTOVA REGULARIZACE	61
5.3 MEDIÁN FILTR	62
6 ZJEMNĚNÍ VÝPOČETNÍ SÍŤ	63
6.1 HIERARCHICKY ZJEMNĚNÁ SÍŤ	63
6.1.1 Aktualizace rozhraní hrubé síť	66
6.1.2 Aktualizace rozhraní jemné síť	67
6.2 NEUNIFORMNÍ SÍŤ.....	67
7 PARALELIZACE A OPTIMALIZACE VÝPOČTOVÉHO KÓDU	70
7.1 ÚVOD DO PARALELNÍHO PROGRAMOVÁNÍ.....	70

7.1.1	<i>OpenMP</i>	71
7.2	<i>PARALELIZACE ALGORITMU</i>	73
7.3	<i>OPTIMALIZACE ALGORITMU</i>	76
7.3.1	<i>Optimalizace kolizního kroku</i>	76
7.3.2	<i>Optimalizace propagačního kroku</i>	78
8	VALIDAČNÍ ÚLOHY	81
8.1	<i>PROUDĚNÍ VE ČTVERCOVÉ KAVITĚ</i>	81
8.2	<i>OBTĚKÁNÍ KOULE</i>	82
8.3	<i>PROUDĚNÍ KANÁLEM S NÁHLÝM ROZŠÍŘENÍM</i>	88
9	VÝPOČET PROUDĚNÍ CHLADIVA V PALIVOVÉM SOUBORU	93
9.1	<i>VÝPOČTOVÝ MODEL</i>	93
9.2	<i>VÝSLEDKY NUMERICKÝCH SIMULACÍ</i>	97
	ZÁVĚR	115
	LITERATURA	118
	VLASTNÍ PUBLIKACE AUTORA ÚZCE SOUVISEJÍCÍ S TÉMATEM DISERTAČNÍ PRÁCE	121

Seznam symbolů a zkratek

CFD.....	výpočtová dynamika tekutin (Computational Fluid Dynamics)
JETE.....	jaderná elektrárna Temelín
JE	jaderná elektrárna
AZ	aktivní zóna
PO	primární okruh
PS	palivový soubor
DM.....	distanční mřížka
TVSA-T	ruský typ palivového souboru
BOT	blok ochrany trubek
VVER1000.....	reaktor ruského typu (Vodo-Vodjanoj Energetičeskij Reaktor)
NS	Navierovy-Stokesovy rovnice
DNS	přímá numerická simulace (Direct Numerical Simulation)
RANS.....	Reynoldsovy středované rovnice (Reynolds-Averaged Navier-Stokes)
LES	metoda simulace velkých vírů (Large Eddy Simulations)
GTRF	Grid-to-Rod fretting
DM.....	distanční mřížka
LBM.....	lattice Boltzmannova metoda
ELBM	entropická lattice Boltzmannova metoda
ISLBM	Interpolation Supplemented LBM
MRT.....	Multiple-Relaxation-Time kinetický model
BGK.....	Bhatnagarův-Grossův-Krookův kinetický model
LBR-BGK.....	lattice-Boltzmannova rovnice s BGK aproximací
LBR-MRT.....	lattice-Boltzmannova rovnice s MRT aproximací
Re	Reynoldsovo číslo
Kn	Knudsenovo číslo
f	distribuční funkce
ρ	hustota kapaliny
\mathbf{u}	vektor makroskopické rychlosti
e	vnitřní energie
σ	tenzor napjatosti
\mathbf{q}	vektor tepelného toku

\mathbf{j}	vektor hybnosti
S	kolizní operátor
f_M	Maxwell-Boltzmannova distribuční funkce
R	molární plynová konstanta
f_α	diskrétní distribuční funkce
f_α^{eq}	rovnovážná část diskretních distribučních funkcí
f_α^{neq}	nerovnovážná část diskretních distribučních funkcí
m_α	momenty distribučních funkcí
m_α^{eq}	rovnovážná část momentů distribučních funkcí
m_α^{neq}	nerovnovážná část momentů distribučních funkcí
\mathbf{S}	diagonální relaxační matice
p	statický tlak
ν	kinematická viskozita
ν_t	turbulentní složka kinematické viskozity
ν_m	molekulární složka kinematické viskozity
\mathbf{M}	transformační matice mezi prostorem distribučních funkcí a jejich momentů
\mathbf{T}	transformační matice mezi úrovněmi lokálně zjemněné výpočetní sítě
C_S	Smagorinského konstanta

Neuvedené symboly a zkratky jsou vysvětleny na příslušném místě v textu.

Úvod

Předkládaná disertační práce je zaměřena na numerickou simulaci proudění chladiva v palivovém souboru reaktoru VVER1000 jaderné elektrárny Temelín. Palivový soubor je tvořen nosným skeletem, ve kterém jsou vertikálně umístěny palivové proutky. Chladivo primárního okruhu proudí s relativně vysokým Reynoldsovým číslem podél svazku proutků od spodní k horní části palivových souborů. Jejich nosný skelet se mimo jiné skládá z distančních a mísících mřížek, které generují silné turbulence v proudovém poli chladiva. Konkrétně se tedy práce zabývá simulací nestacionárního izotermického turbulentního proudění nestlačitelné vazké kapaliny. Protože běžně používané metody modelování turbulentního proudění vycházejí z Reynoldsových středovaných Navierových-Stokesových rovnic (RANS), použijeme pro řešení nestacionárních fluktuací proudového pole chladiva metodu simulace velkých vírů (LES). Z důvodu geometrické složitosti palivového souboru a velké výpočtové náročnosti LES, byl pro numerické simulace vyvinut řešič založený na lattice Boltzmannově metodě. Metoda je známá pro svou relativně jednoduchou algoritmizaci, iterační rychlost a schopnost velmi efektivní paralelizace.

Motivace

Hlavní motivací celé práce je nezanedbatelnou měrou přispět k problematice, v jaderně-energetickém průmyslu, nazývané GTRF (Grid-to-Rod fretting). Jedná se o typ poškození pokrytí proutků palivových souborů. Tento nežádoucí jev vzniká vlivem příčných toků chladiva v aktivní zóně tlakovodního reaktoru. Palivové proutky jsou příčnými toky rozkmitávány a dochází k otěru pokrytí palivových proutků v místech kontaktů s jejich distančními mřížkami. Nadměrné opotřebení může mít za následek až únik produktů štěpení jaderné reakce do primárního chladiva. Poznamenejme, že GTRF je jednou z nejčastějších příčin poškození a vzniku netěsností palivových proutků.

V následujícím odstavci je provedena rešerše publikací, které se věnují speciálně této problematice. Poznamenejme, že cílem rešerše není vyčerpávající přehled a souhrn všech možných úloh v oblasti GTRF, ale pouze představení některých významných odborných studií prezentovaných v posledních letech zejména se zaměřením do oblasti výpočtové dynamiky tekutin.

V práci [34] je pomocí metody LES řešeno proudění na výpočetní síti o osmi milionech elementů v okolí jednoho palivového proutku. Následně jsou pomocí výsledných rozložení tlaků stanoveny budící silové účinky a zkoumány vibrace palivových proutků. Na tuto studii navázali Kim a kolektiv [35], kteří definují matematický model výpočtu otěru pokrytí palivového proutku. Další prací přispívající do problematiky GTRF je například [32]. Tato studie vznikla v rámci velkého projektu orientovaného na vývoj nástrojů pro predikci GTRF. Autoři se snaží stanovit budící síly působící na stěnu palivového proutku pomocí metody simulace velkých vírů (LES) za použití programu STAR CCM+. Získané buzení je poté použito ke studiu vibrací palivových proutků. Práce využívá nesdruženého přístupu řešení interakcí, a tedy neuvažuje změnu proudového pole chladiva vlivem kmitání palivových proutků. Autoři článku [33] se na jednoduché geometrii, která zahrnuje pouze část jednoho palivového proutku a jeho okolí, již zabývali řešením úlohy Fluid Structure Interaction (FSI). Pomocí kódu STAR CCM+ provedli sdruženou analýzu kmitání palivového proutku v proudovém poli chladiva primárního okruhu. Závěrem prezentovali nezanedbatelný rozdíl ve výsledcích získaných pomocí sdruženého a nesdruženého přístupu řešení. Zároveň ale ukázali, že prostý nesdružený přístup řešení je konzervativní aproximací a může být použit pro řešení většiny úloh problematiky GTRF. V práci [36] autoři použili opět metodu LES k výpočtu proudového pole chladiva v části geometrie palivového souboru (PS) obsahující 3x3 palivových proutků. Z výsledných polí stanovují budící síly působící na proutky a závěrem podrobně prezentují vliv na jejich hodnoty pro různá natočení svazku proutků v proudovém poli. Komplexnější geometrií o svazku 5x5 palivových proutků se již zabývali autoři v práci [38]. Výsledná nestacionární pole rychlostí, tlaků a ostatních turbulentních veličin jsou statisticky zpracována. Pomocí tlakových diferencí jsou stanoveny budící síly na palivové proutky a je provedena analýza jejich kmitání. Uvedené výpočty jsou provedeny na výpočetní síti až o 96 milionech uzlů. Na závěr rešerše bych rád zmínil tým odborníků z katedry mechaniky na Fakultě aplikovaných věd ZČU v Plzni, který ve spolupráci s ÚJV Řež významně přispívá k problematice GTRF. Jejich práce mohou být rozděleny do třech základních kategorií. Studium vlivu tření v kontaktu pokrytí palivových proutků a distančních mřížek na kmitání a otěr palivového proutku. Interakce palivových tablet s pokrytím proutků. A nakonec stanovování nejistot práce třecích sil a třecího součinitele. Některé výsledky jejich prací a prací odborníků z ÚJV Řež jsou k nalezení například v [39], [40], [41] a [46].

Cíle disertační práce

Cílem této disertační práce je numericky simulovat pomocí metody LES intenzitu laterálních toků chladiva vyvolaných turbulencemi od mřížek palivových souborů TVSA-T jaderné elektrárny Temelín za použití relativně nové Lattice Boltzmannovy metody. Z výsledných tlakových polí poté určit hydrodynamické síly zatěžující palivové proutky, které jsou pokládány za budící účinky vibrační způsobující poškození pokrytí palivových proutků typu GTRF. Lattice Boltzmannova metoda je velmi rychlá, snadno implementovatelná a je známá pro svou schopnost efektivní paralelizace. Navíc v kombinaci s metodou simulace velkých vírů, je značnou výhodou LBM lokálnost výpočtu turbulentní viskozity. Lattice Boltzmannova metoda v kombinaci s metodou LES byla již s úspěchem použita v řadě výzkumných prací, např. [6], [61] a [62]. Pro řešení této komplexní úlohy je cílem vytvořit vlastní softwarové vybavení. Pro tento účel byl zvolen programovací jazyk FORTRAN.

Předkládaná práce je rozdělena do devíti kapitol. První kapitola, s ohledem na téma disertační práce, stručně popisuje hlavní části primárního okruhu jaderné elektrárny Temelín (JETE). Následuje kapitola, ve které jsou popsány používané typy paliva a jejich základní rozdíly. V této kapitole je dále nastíněna problematika vzniku netěsnosti palivového proutku vlivem GTRF (Grid-to-Rod fretting), jehož výzkum, jak bylo uvedeno výše, je hlavní motivací této práce. Třetí kapitola je věnována lattice Boltzmannově metodě. V jejím úvodu jsou popsány základní předpoklady kinetické teorie plynů a z nich vycházející tvar slavné Boltzmannovy rovnice, ze které je odvozeno diferenční schéma metody, lattice Boltzmannova rovnice. Poté je stručně nastíněn základní algoritmus a implementace různých typů okrajových podmínek. Čtvrtá kapitola představuje způsob řešení turbulentního proudění pomocí metody LES. Je popsán tzv. Smagorinského subgridní model [5] a jeho varianta pro lattice Boltzmannovu metodu. Pro stabilizaci numerického řešení jsou v další kapitole popsány některé z možných přístupů filtrací v oblasti LBM. Šestá kapitola je věnována lokálnímu zjemňování výpočetní sítě pro LBM. Tato kapitola je rozdělena na dvě části. První se zabývá hierarchickým zjemňováním pomocí předepsaného koeficientu zjemnění, viz [1], [2]. Druhá pak způsobem implementace neuniformní kartézské sítě pomocí metody ISLBM (Interpolation supplemented LBM) [27], [30]. Z důvodu možnosti počítat rozsáhlejší úlohy je sedmá kapitola věnována paralelizaci a optimalizaci výpočtového kódu. V osmé kapitole jsou pro validaci vyvinutých algoritmů a celého řešiče numericky řešeny testovací úlohy, u nichž je známo experimentální řešení. Poslední, devátá kapitola, popisuje použité výpočtové modely

a dosažené numerické výsledky proudění uvnitř PS. Byly vytvořeny dva odlišné geometrické modely zachycující oblast za deflektory mísících mřížek PS TVSA-T.mod.1 a TVSA-T.mod.2.

1 Primární okruh JE VVER 1000

S ohledem na téma této disertační práce a její hlavní motivaci, která byla popsána v úvodu, pokládá autor z hlediska srozumitelnosti za důležité, v první kapitole stručně přiblížit základní části primárního okruhu (PO) jaderné elektrárny Temelín (JETE).

Jaderná elektrárna Temelín je tvořena dvěma bloky (původně plánované čtyři) s tlakovodními reaktory VVER 1000 V320. Každý blok je dvouokruhový, neboli se skládá z primárního a sekundárního okruhu.

Primární okruh je systém zařízení, viz obr. 1, kde se mění jaderná energie izotopu ^{235}U prostřednictvím řízené štěpné reakce na tepelnou, a ta se přenáší do sekundárního okruhu, kde se dále mění na mechanickou a elektrickou energii. Radioaktivní primární okruh je umístěn v ochranné obálce tvořící bariéru proti průniku radioaktivity a je hermeticky oddělen od ostatních částí jaderné elektrárny.

Konstrukce celého primárního okruhu je velmi složitá a její popis není cílem této práce. V následujících odstavcích uvedeme pouze stručný popis jeho hlavních částí, jimiž jsou reaktor, hlavní cirkulační čerpadla, parogenerátory a systém kompenzace objemu.

1.1 Jaderný reaktor

Jaderný reaktor, viz obr. 2, je technologické zařízení, ve kterém dochází k přeměně jaderné energie na tepelnou. V jeho aktivní zóně (AZ) je umístěno palivo, v němž dochází ke štěpení jader ^{235}U a tím k vývinu tepla, které se akumuluje do chladiwa primárního okruhu. Aktivní zóna je umístěna v reaktorové nádobě, která zajišťuje průtok chladiwa aktivní zónou a zároveň tvoří bariéru proti průniku radioaktivity. Reaktorová nádoba musí vydržet vysoký tlak chladiwa, které je nutné udržet za všech podmínek v kapalném stavu.

V České republice jsou v provozu pouze energetické reaktory „ruského“ typu VVER (zkratka ruského Vodo-Vodjanoj Energetičeskij Reaktor), které patří do typu tlakovodních reaktorů PWR (Pressurized Water Reactor). Konkrétně jsou v ČR provozovány čtyři bloky jaderného reaktoru VVER 440 v lokalitě Dukovany a dva bloky typ VVER 1000 v Temelíně. Pojem tlakovodní reaktor je zkráceným názvem pro jaderné reaktory chlazené a moderované tlakovou lehkou vodou a je na světě nejrozšířenějším typem jaderného reaktoru.

Reaktor typu V-320 VVER 1000 je určen pro práci v systému reaktorového zařízení se čtyřmi paralelními chladíci smyčkami, především v základním jmenovitém režimu

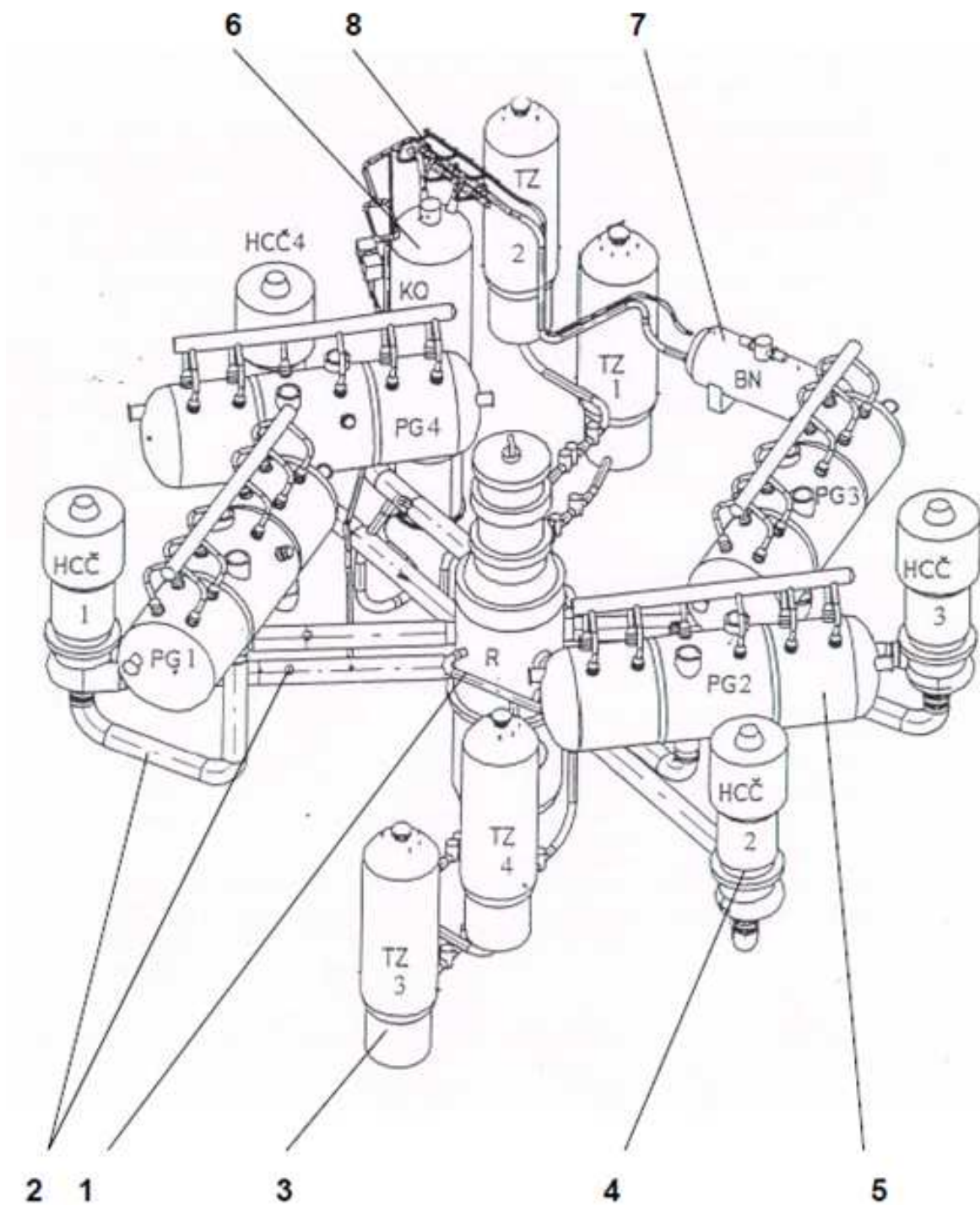
s tepelným výkonem 3000 MW. V reaktoru VVER 1000 je použita jako moderátor obyčejná chemicky upravená voda, která je zároveň chladivem. Štěpná řetězová reakce je v reaktoru řízená dvěma způsoby: změnou koncentrace kyseliny borité při kompenzaci dlouhodobých změn reaktivity v průběhu kampaně, nebo pomocí svazkových řídicích tyčí tzv. klastrů pro kompenzaci okamžitých změn neutronového toku a pro rychlé přerušení řetězové reakce. Jako palivo je použit mírně obohacený uran - cca až 4 % ^{235}U ve formě keramických tablet uložených do palivových proutků, které jsou umístěny v bezobálkovém šestihranném palivovém souboru (PS). Kompletní sestava reaktoru je umístěná v betonové šachtě, která je součástí hermetických prostorů.

Uvnitř tělesa tlakové nádoby, viz obr. 2, je usazena šachta reaktoru, která je v oblasti mezi vstupními a výstupními hrdly tělesa tlakové nádoby vystředěna rozdělovacím prstencem. Rozdělovací prsteneček zároveň slouží k oddělení vstupu a výstupu chladiva proudícího reaktorem. Děrované eliptické dno šachty slouží k usměrnění a zrovnoměnění toku chladiva po průřezu aktivní zóny reaktoru. Na vnitřním osazení děrovaného dna šachty reaktoru je usazena distanční deska, v níž jsou uchyceny podpěry pro uložení palivových souborů. Uvnitř šachty je uložen plášť aktivní zóny, tvořící její radiální ohraničení.

Shora se na aktivní zónu usazuje blok ochranných trubek (BOT), viz obr. 2, který vymezuje vzájemnou polohu PS, přitlačuje je do podpěr a tím zabraňuje jejich posuvu vlivem rozdílu tlaku chladiva před a za PS. Po uložení bloku ochranných trub na aktivní zónu zapadnou odpružené cylindrické části hlavic všech palivových souborů do otvorů v jeho spodní desce, která je přitlačuje do podpěr v šachtě reaktoru. BOT vytváří ochranný prostor pro regulační orgány (klastry) a závěsné tyče.

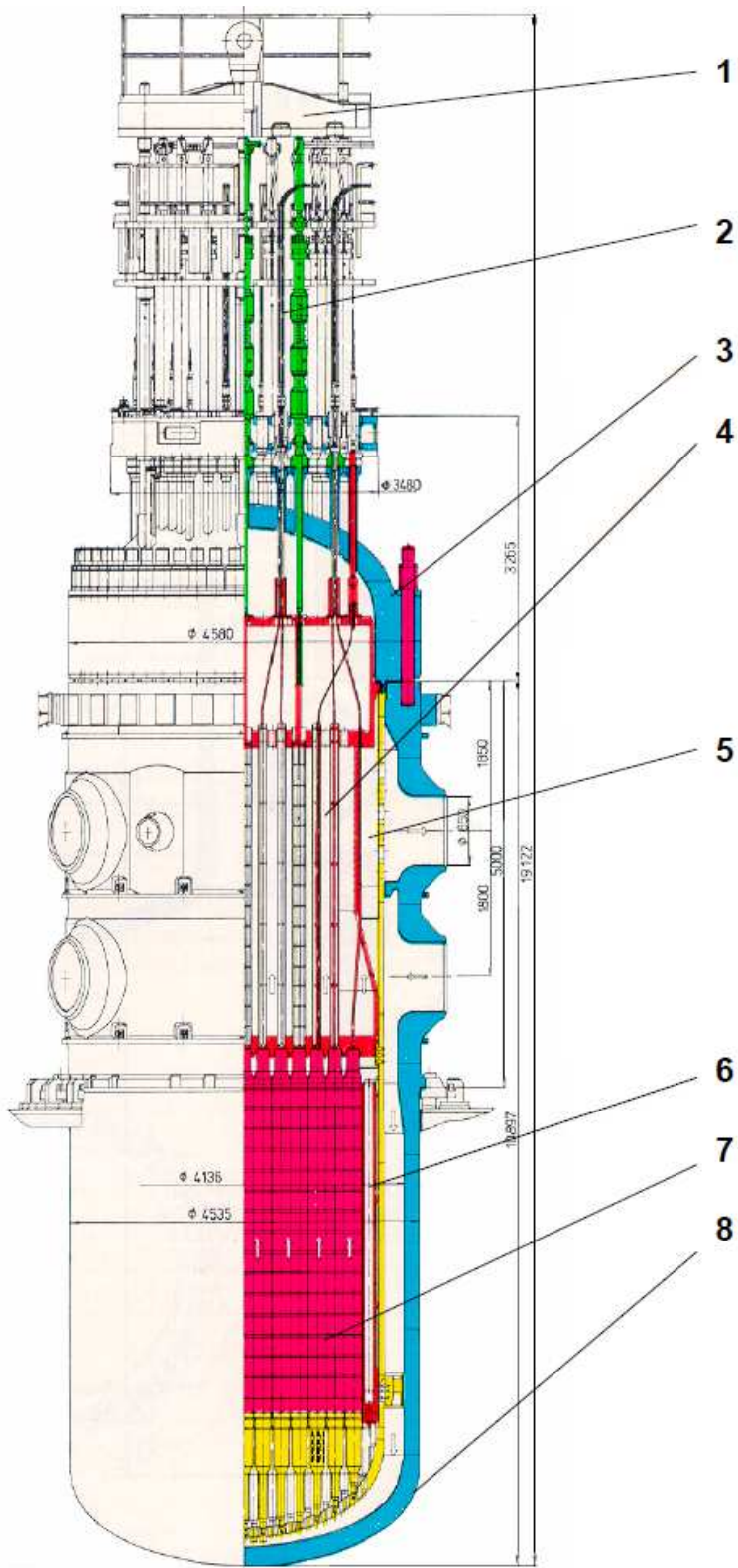
Pro umožnění kontroly vnitřního povrchu tlakové nádoby reaktoru jsou vnitřní části reaktoru (šachta, plášť AZ a blok ochranných trub) vyjímatelné. Na přírubovém prstenci tělesa tlakové nádoby reaktoru je usazen horní blok skládající se z víka a nosné ocelové konstrukce pro uložení lineárních krokových pohonů, které zajišťují posuv klastrů aktivní zónou a tím regulaci výkonu reaktoru, případně jeho odstavení.

Aktivní zóna se skládá ze 163 palivových souborů a 61 klastrů. Výška aktivní zóny v chladném stavu je 3530 mm a její ekvivalentní průměr je 3160 mm. Uspořádání palivových souborů vytváří trojúhelníkovou mříž s krokem 236 mm.



- | | |
|--|------------------------|
| 1 – reaktor | 5 - parogenerátor |
| 2 – hlavní cirkulační potrubí | 6 – kompenzátor objemu |
| 3 – tlakový zásobník (hydroakumulátor) | 7 – barbotážní nádrž |
| 4 – hlavní cirkulační čerpadlo | 8 – pojistné ventily |

Obr. 1: Primární okruh JE VVER 1000



- 1 – horní blok
- 2 – lineární krokový pohon
- 3 – svorník
- 4 – blok ochranných trub
- 5 – šachta reaktoru
- 6 – plášť aktivní zóny
- 7 – aktivní zóna
- 8 – těleso tlakové nádoby

Obr. 2: Reaktor VVER 1000

1.2 Cirkulační smyčka a hlavní cirkulační čerpadlo

Cirkulační smyčka spojuje reaktor s parogenerátorem, viz obr. 3, a je rozdělena na studenou a horkou větev. Z reaktoru horkými větvemi hlavního cirkulačního potrubí proudí chladivo ohřáté štěpnou reakcí o teplotě $320 \pm 3,5$ °C a tlaku 15,7 MPa do parních generátorů odkud se ochlazené na teplotu 289,7 °C vrací studenými větvemi zpět do reaktoru. Chladící voda za běžného provozu cirkuluje mezi reaktorem a parogenerátorem pomocí hlavních cirkulačních čerpadel, která jsou umístěna na studených větvích hlavního cirkulačního potrubí. Zajišťují tak průtok každou smyčkou 21 200 m³/h. Při vypnutých hlavních cirkulačních čerpadlech dochází v hlavním cirkulačním potrubí k přirozené cirkulaci.

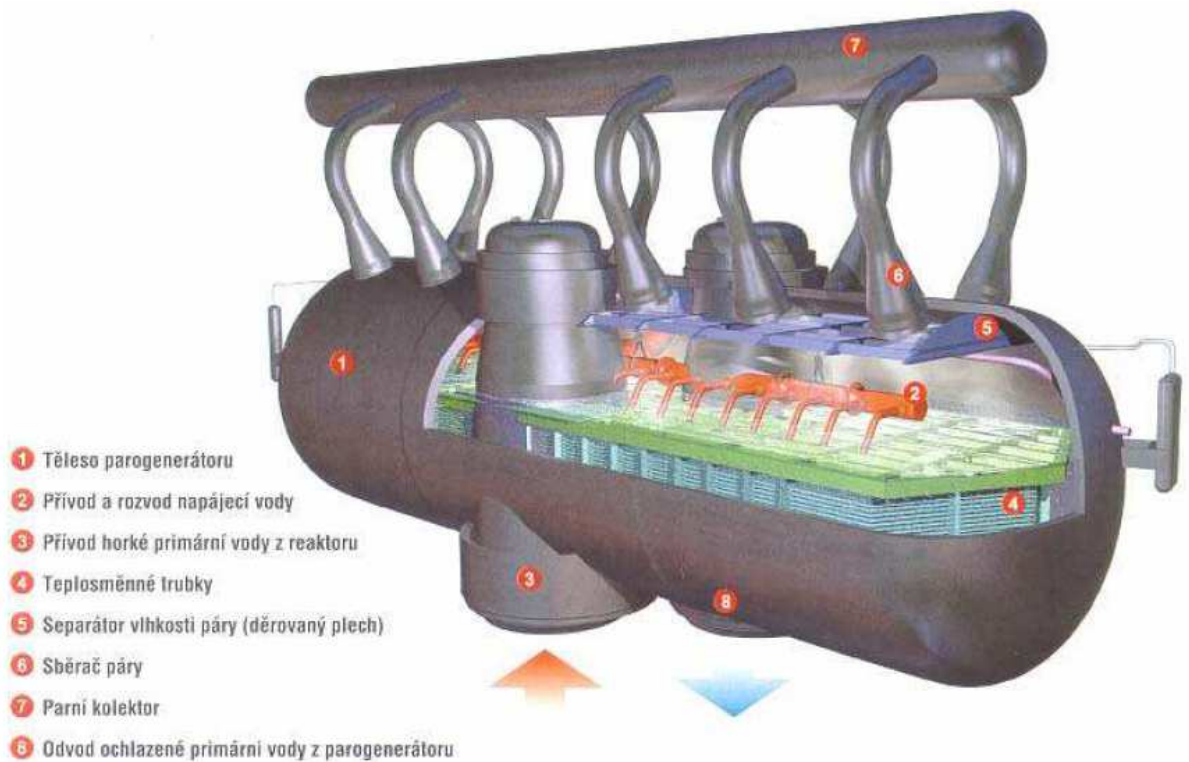
V primárním okruhu jaderného reaktoru VVER 1000 jsou čtyři cirkulační smyčky, viz obr. 1, tvořené potrubím o jmenovité světlosti DN 850 vyrobeným z vysokopevnostní legované oceli. Vnitřní povrch potrubí je opatřen výstelkou z austenitické nerezové oceli.

1.3 Parogenerátor

Chladivo primárního okruhu proudí z reaktoru do parního generátoru, kde se akumulované teplo předává přes stěny trubek teplosměnné plochy napájecí vodě sekundárního okruhu, která se ohřívá a mění na sytou páru. Sytá pára proudí z parogenerátoru, viz obr. 3, hlavním parním kolektorem do parní turbíny, ve které se tepelná energie mění na mechanickou. V kondenzátoru parní turbíny pára zkondenzuje, kondenzát se upraví na napájecí vodu, kterou napájecí čerpadlo dopravuje zpět do parogenerátoru.

Parogenerátor je rekuperační tepelný výměník, přenášející tepelnou energii z primárního do sekundárního okruhu. Dále odděluje primární okruh od sekundárního, a proto jsou na jeho provedení a obzvláště na těsnost kladeny nejpřísnější požadavky. Je tvořený celosvařovanou jednoplášťovou tlakovou nádobou s 11 000 horizontálně uspořádanými teplosměnnými trubami zahnutými do tvaru U.

V primárním okruhu jaderné elektrárny s reaktory VVER 1000 jsou čtyři parogenerátory horizontálního provedení, viz obr. 3.



Obr. 3: Parogenerátor JE VVER 1000

1.4 Systém kompenzace objemu

Chladivo primárního okruhu musí být ve všech provozních stavech neustále v kapalně fázi. Primární okruh je v podstatě uzavřená tlaková nádoba zaplněná chladivem o vysokém tlaku. Mění-li se provozní stavy v primárním okruhu, mění se teplota chladiva a tím i jeho objem. Důsledkem toho se mění i jeho tlak.

Pro bezpečný provoz nesmí tlak poklesnout k hodnotě, při které by došlo ke tvorbě páry v AZ, anebo stoupnout na hodnotu, při které by nastala porucha celistvosti primárního okruhu. Proto se musí změny objemu chladiva, a tím i změny jeho tlaku kompenzovat. K tomuto účelu je na jednu cirkulační smyčku, na její horkou větev, připojen kompenzátor objemu, který vyrovnává objemové změny chladiva. Proti překročení tlaku jsou za kompenzátořem objemu instalovány pojistné ventily spojené s barbotážní nádrží. Tento soubor zařízení tvoří dohromady systém kompenzace objemu.

Kompenzátor objemu, viz obr. 1, je během nominálního provozu částečně zaplněn chladivem PO a částečně parou. Parametry uvnitř kompenzátoru objemu odpovídají stavu nasycených par chladiva. Při pomalém poklesu tlaku dojde k porušení rovnováhy a nastane intenzivnější odpařování chladiva, protože teplota se dostane nad teplotu nasycených par. Tím

se zvětší objem páry a tlak, čímž se parametry opět vyrovnají. Když se tlak v kompenzátoru objemu mírně zvýší, dochází ke kondenzaci a k opětovnému vyrovnání parametrů. Při větších tlakových změnách dochází k zapracování elektroohříváčů a sprchového systému, které jsou řízeny regulátorem, či k zapracování odlehčovacího nebo pojistného uzlu kompenzátoru objemu. Pára z kompenzátoru objemu pak proudí do barbotážní nádrže, viz obr. 1.

2 Palivové soubory JE Temelín

Motivací práce je přispět k řešení problému netěsností palivových proutků palivových palivových souborů JE Temelín vzniklých typem opotřeбенí GTRF. Z toho důvodu následující kapitola nejprve popisuje typ palivových souborů používaných v JE Temelín a poté vysvětluje podstatu tohoto typu poškození palivových proutků.

Původním palivem pro reaktory VVER1000/320 jaderné elektrárny Temelín byly soubory VVantage-6 od americké firmy Westinghouse LLC. Jedná se o palivový soubor vyvinutý ze standardu Vantage-5H tak, aby poskytoval maximální provozní spolehlivost a výkon.

Zpočátku byly s tímto typem souboru problémy. Nedostatečná tuhost souborů vedla k jejich deformacím a například až k tomu, že regulační orgány nedopadly při bezpečnostních zkouškách do svých koncových poloh. Počet nedosednutých klastrů se s délkou pobytu paliva v aktivní zóně zvyšoval. Dalším problémem bylo tření palivových proutků o distanční mřížky až s následným vznikem netěsností v některých místech (Grid-to-Rod fretting). Palivový soubor VVANTAGE-6 byl dále zdokonalován a byly tak uvedeny na trh nové verze těchto souborů. Avšak počátkem roku 2006, po tendru započatém v roce 2004, byl zvolen nový dodavatel paliva pro jadernou elektrárnu Temelín. Jako náhrada za západní palivové soubory VVantage-6 byl zvolen ruský typ TVSA-T.mod.1 od firmy TVEL a od léta 2010 je provozován v reaktorech JE Temelín.

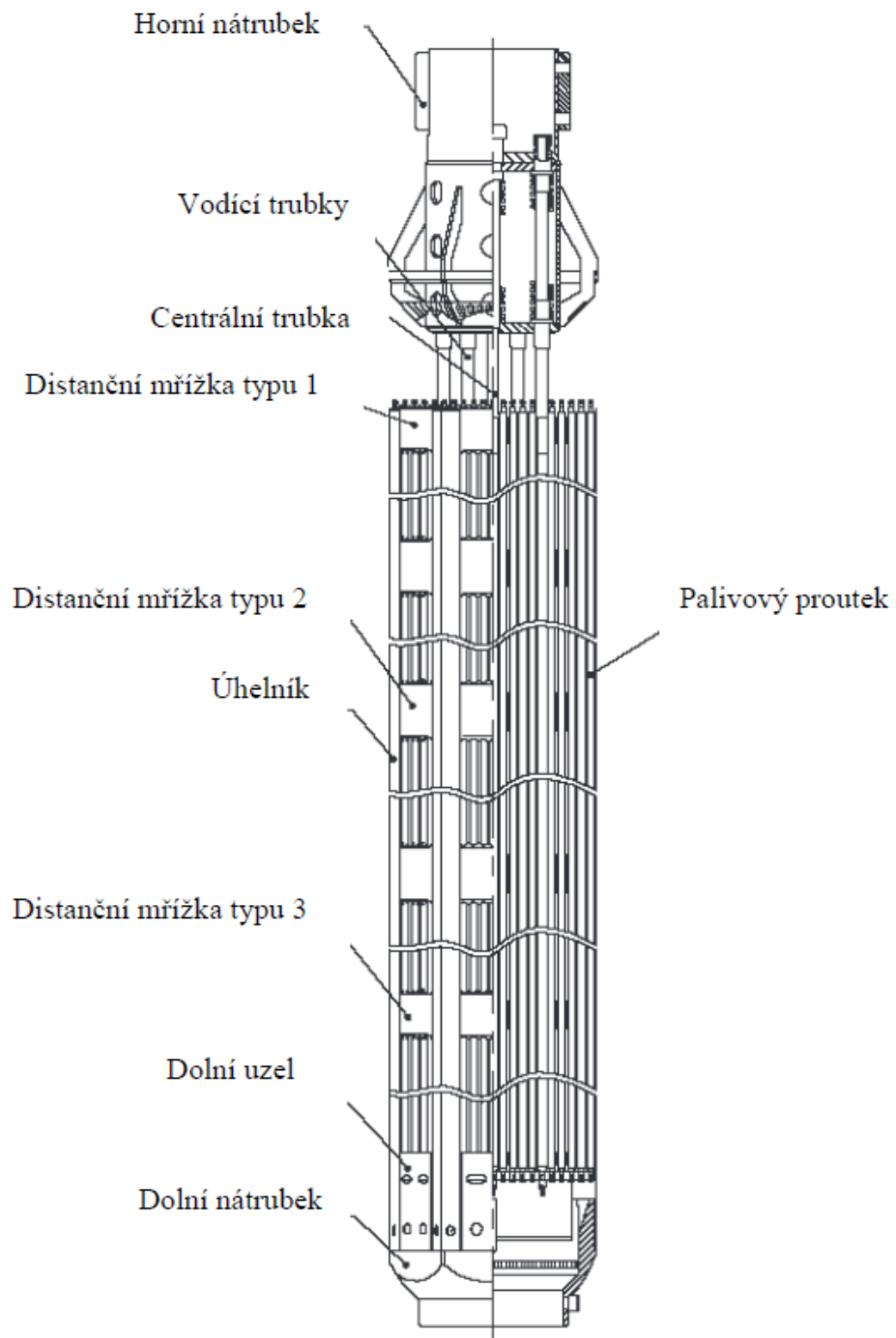
V současné době se připravuje provoz bloků s modernizovaným jaderným palivem TVSA-T mod.2, vyvinutým opět ruskou společností TVEL.

2.1 TVSA-T.mod.1

Jak již bylo zmíněno výše, palivový soubor TVSA-T.mod.1, viz obr. 4 [51], vyvinutý ruskou společností TVEL nahradil do té doby používaný palivový soubor VVANTAGE-6 firmy Westinghouse.

Hlavní rozdíl od předchozího typu paliva je v jeho konstrukci. Nosný skelet palivového souboru je tvořen šesti rohovými úhelníky, osmnácti vodicími trubkami, centrální trubkou, osmi distančními mřížkami (DM) a spodním opěrným uzlem. Tímto konstrukčním provedením je zajištěna trvalá tuhost konstrukce palivového souboru za provozu. Během provozování palivového souboru v aktivní zóně reaktoru dojde k minimálnímu prohnutí a tím

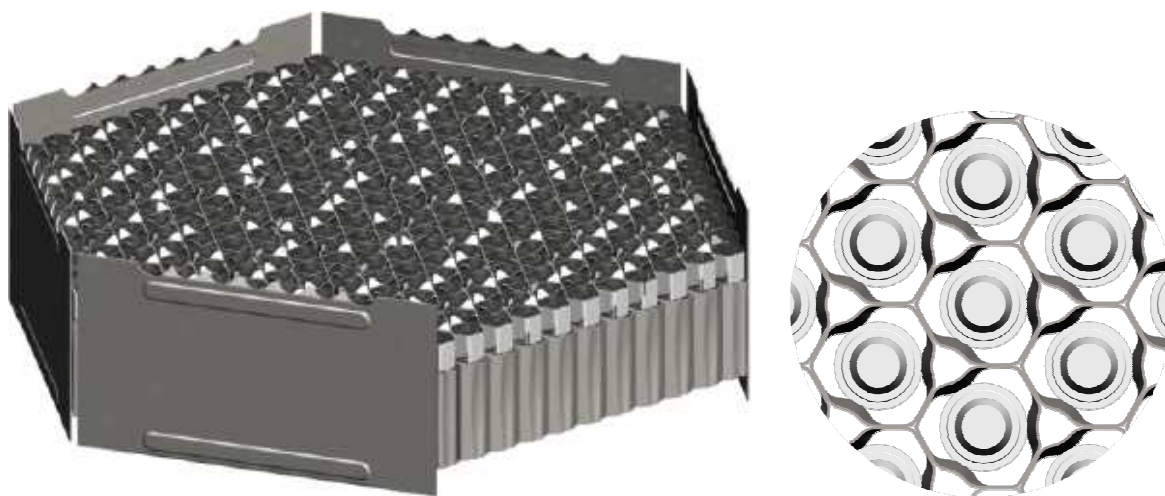
je zajištěna správná funkce řídicích tyčí. Mezi nevýhody může patřit fakt, že výztužné úhelníky vytváří překážku a omezují tak příčné toky mezi palivovými soubory v aktivní zóně. Změny se dále týkaly použitých materiálů, provedení hlavice a patice, počtu a konstrukce distančních mřížek, uchycení klastrů a také tvaru a velikosti palivové peletky.



Obr. 4: Konstrukce palivového souboru TVSA-T.mod.1

Jednotlivé buňky DM jsou k sobě svařeny bodovým svarem. V DM mřížce je 312 buněk, ve kterých jsou umístěné palivové proutky o průměru 9,1 mm a délce zhruba

3900 mm. Palivové proutky obsahují palivové peletky z oxidu uraničitého. Obohacení paliva v aktivní zóně je proměnné v axiálním i v radiálním směru podle fyzikálních požadavků, stanovených neutronově fyzikálními numerickými kódy. Osová vzdálenost mezi jednotlivými buňkami a tedy rozteč palivových proutků je 12,75 mm. V buňkách DM jsou vytvořeny prolisy, viz obr. 5, které udržují palivový proutek v dané pozici a zároveň vyvíjejí svým přesahem jistou přítlačnou sílu. Distanční mřížky jsou trojího typu. Horní a dolní distanční mřížky, které jsou umístěny při koncích palivového souboru. Mezi nimi je dále rovnoměrně rozmístěno šest kombinovaných distančních mřížek [8], viz obr. 5. Kombinované mřížky jsou složením distanční a mísící mřížky. Hlavním úkolem distančních mřížek je udržet palivové proutky ve správné poloze. Mísící mřížky, které jsou horní částí kombinovaných distančních mřížek, viz obr. 5, jsou vybaveny tzv. mísícími křídélky (deflektory). Tato část již není v kontaktu s palivovými proutky a slouží k lepšímu promíchávání chladiva o různých teplotách. Při použití těchto mřížek se zvyšuje hodnota kritického tepelného toku a také se zvyšuje spolehlivost odvodu tepelné energie z aktivní zóny reaktoru. Deflektory jsou orientovány ve směru roztočení chladiva kolem osy obtékaného palivového proutku, viz obr. 9.



Obr. 5: Kombinovaná distanční mřížka TVSA-T.mod.1 a detail distanční mřížky

2.2 TVSA-T.mod.2

Palivový soubor TVSA-T.mod.2 [50] je modifikací PS TVSA-T.mod.1. a byl vyvinut ruskou společností TVEL pro zlepšení jeho technických a ekonomických charakteristik. V budoucnu by měl nahradit stávající typ PS. V palivovém souboru TVSA-T.mod.2 je umístěno 12 distančních, viz obr. 7, a 3 mísící mřížky, viz obr. 6. Tyto mřížky se svojí konstrukcí liší od

PS TVSA-T.mod.1. Změny v rozmístění a počtu jednotlivých mřížek jsou patrné z obr. 8. Změnami prošla i palivová peletka a pokrytí palivových proutků.



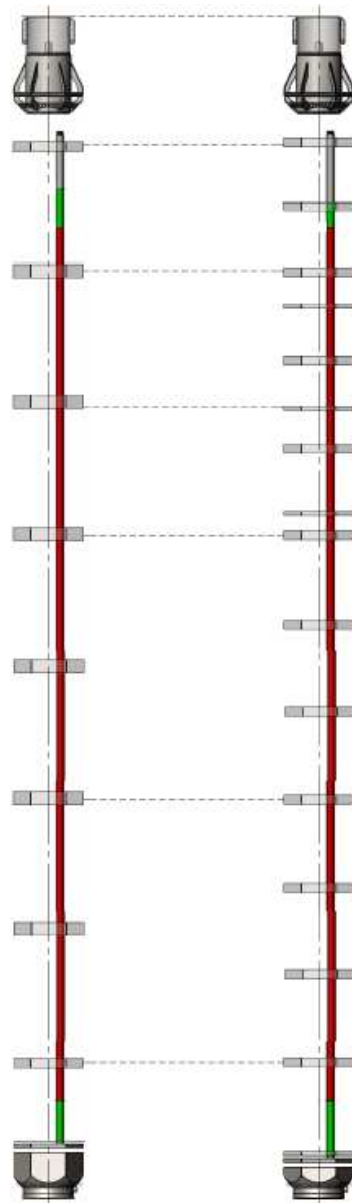
Obr. 6: Mísící mřížka TVSA-T.mod.2



Obr. 7: Distanční mřížka TVSA-T.mod.2

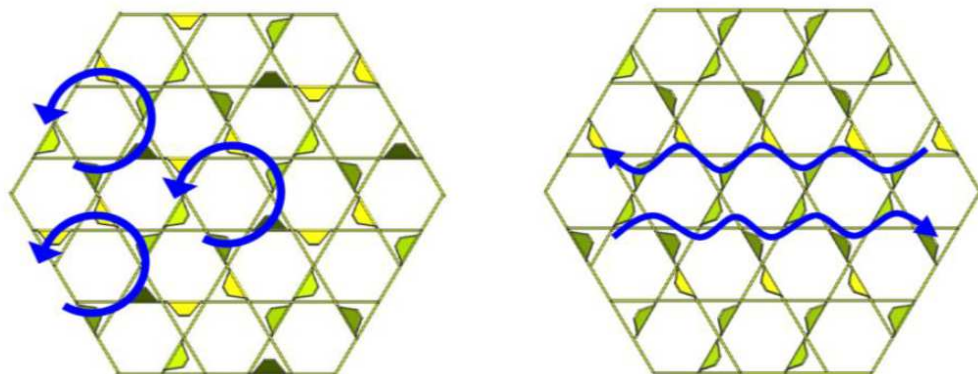
Tento palivový soubor tedy již neobsahuje kombinované distanční mřížky. Mísící mřížky jsou uloženy samostatně v horní části PS. Geometrie deflektorů se liší především úhlem náklonu a orientací. Jejich orientace je ve smyslu přesouvání chladiva v rámci jednotlivých řad, viz obr. 9. Použitím PS s tímto typem optimalizovaných mísících mřížek

dochází ke zlepšení míšení a snížení teplotní nevyváženosti. Důsledkem je možnost zvýšení maximálního přípustného výkonu PS z důvodu vyšší hodnoty kritického tepelného toku.



TVSA-T (TVSA-T.mod 1) TVSA-T.mod 2

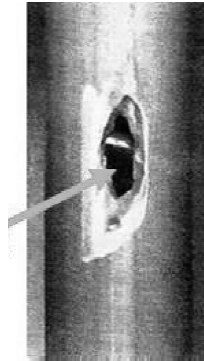
Obr. 8: Rozmístění mřížek v TVSA-T.mod.1 a TVSA-T.mod.2



Obr. 9: Očekávaný vliv deflektorů mřížek PS TVSA-T.mod.1 (vlevo) a TVSA-T.mod.2 (vpravo)

2.3 Grid-to-Rod fretting

Poškozování paliva během provozu v jaderném reaktoru je celkem běžný jev, avšak spolehlivost pokrytí se neustále zvyšuje s vývojem nových materiálů. Jednou z nejčastějších příčin vzniku netěsností palivových proutků je jev, nazývaný v oblasti jaderné energetiky, Grid-to-Rod fretting (GTRF). Jak již bylo zmíněno v úvodu této disertační práce, tímto typem poškození je celá práce motivována.



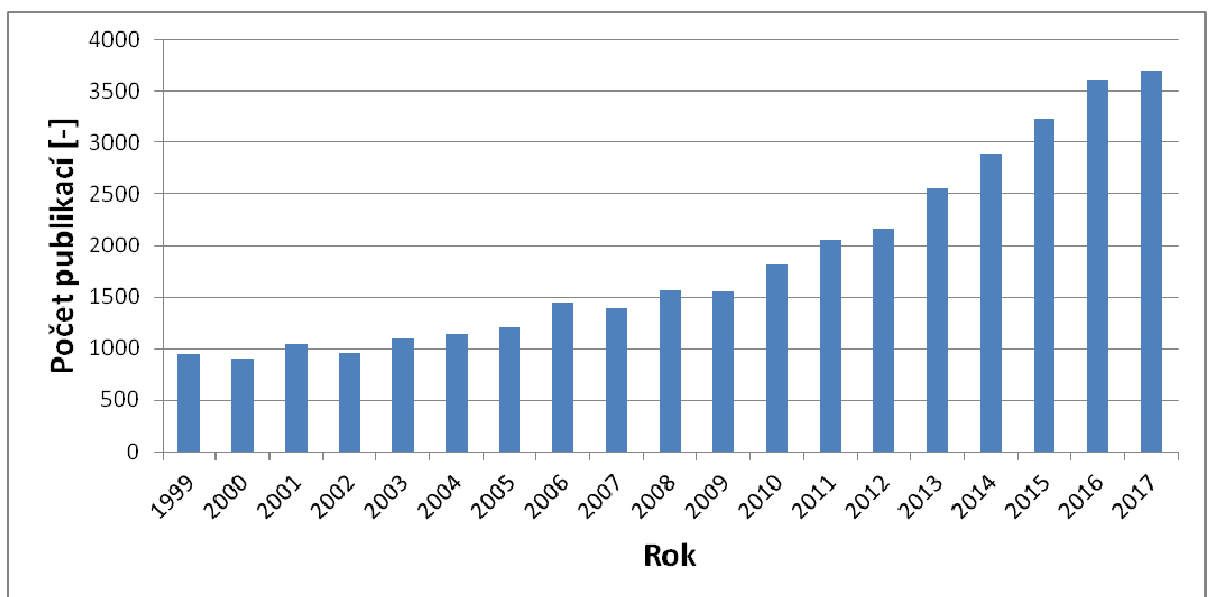
Obr. 10: Příklad důsledku otěru o distanční mřížku (GTRF)

Prouděním chladiva palivovými soubory, primárně v axiálním směru, je silami od turbulentních struktur vybuzeno kmitání palivových proutků. Mřížky palivových souborů, převážně deflektory mísících mřížek, intenzitu turbulencí významně zvyšují. Pokud jsou navíc nedodrženy výrobní tolerance palivových proutků a distančních mřížek nebo jsou nevhodně konstrukčně navrženy, může dojít za provozu k uvolnění palivového proutku v místě kontaktu s mřížkou. Tímto vznikne jeho nedostatečná podpora a vlivem vybuzeného kmitání je velmi pravděpodobný vznik opotřebení pokrytí palivového proutku v místě kontaktu s mřížkou. Během provozu reaktoru tak může dojít k porušení pokrytí palivového proutku s následným nežádoucím únikem produktů štěpení do primárního chladiva. Voda pronikající do vnitřní části proutku zde reaguje a vznikají agresivní sloučeniny, které se také dostávají do primárního chladiva. Některé další radioaktivní látky se uvolňují ve formě plynů a zapříčiňují tak zvýšené dávky obsluhujícímu personálu jaderné elektrárny. Tento jev klade velké nároky na designéry jaderného paliva. Výskyt otěru palivového proutku o distanční mřížku je závislý na mnoha fyzikálních faktorech, které nejsou během provozu reaktoru konstantní. Hodnoty otěru v průběhu provozu globálně klesají, což je dáno zejména klesajícím předepnutím buněk distančních mřížek, a tedy i zmenšením normálových sil v kontaktních bodech. Obecně lze říci, že větší pravděpodobnost výskytu netěsnosti proutku je při větším průtoku chladiva reaktorem, při menší kontaktní ploše proutku s DM, při menším počátečním předepnutí a při nižší tvrdosti materiálu pokrytí.

3 Lattice Boltzmannova metoda

V současné době jsou nejrozšířenějším nástrojem v oblasti výpočtové dynamiky tekutin přímé metody, mezi které patří např. metoda konečných objemů, či metoda konečných prvků. Tyto metody řeší přímo Navierovy-Stokesovy rovnice a popisují proudění na úrovni kontinua. Metody tohoto typu však potřebují relativně vysokou kvalitu diskretizace výpočtové oblasti, jejíž splnění je občas velmi náročné a vyžaduje velké množství inženýrských zkušeností. Vedle tohoto přístupu existuje popis kontinua na mezoskopické úrovni, na němž je založena lattice Boltzmannova metoda.

Lattice Boltzmannova metoda (LBM) je relativně novou, rychle se rozvíjející metodou v oblasti výpočtové dynamiky tekutin. Dokladem je graf na obr. 11, který ukazuje počet nových publikací s tématikou LBM od roku 1999 podle databáze na www.sciencedirect.com.



Obr. 11: Četnost publikací s tématikou LBM

Metoda vychází ze slavné Boltzmannovy rovnice, proto na úvod této kapitoly stručně popíšeme základy kinetické teorie plynů. V další části odvodíme Boltzmannovu rovnici a následně její diskretizovaný tvar, lattice Boltzmannovu rovnici, která je základním diferenčním schématem LBM. Vzhledem ke složitosti pravé strany Boltzmannovy rovnice je nutné provést při odvození diferenčního schématu jistá zjednodušení. Proto se v další části zabýváme tzv. kinetickými modely, které navrhuji vhodnou aproximaci pravé strany. Konkrétně odvodíme rovnice pro dva nejčastěji používané kinetické modely. Lattice Boltzmannovu rovnici ve variantě Single-Relaxation-Time (LBR-SRT) a Multiple-

Relaxation-Time (LBR-MRT). V závěru této kapitoly popíšeme základní algoritmus metody.

3.1 Úvod do kinetické teorie plynů

Kinetická teorie plynů se snaží vysvětlit makroskopické chování plynů na základě chování jednotlivých molekul (jejich rychlostí, počtu nárazů na stěnu nádoby, srážek s ostatními molekulami, atd.). Pomocí mechanických vlastností molekul (hmotnosti, rychlosti, hybnosti, mechanické energie) vysvětluje termodynamické veličiny na makroskopické úrovni (teplota, rychlost, tlak, atd.). Tyto veličiny jsou projevem zprůměrovaného (v čase a prostoru) pohybu molekul. Jinými slovy teorie představuje jakési spojení klasické fenomenologické termodynamiky s mechanikou. Tudíž je nutné zavedení jistého statistického popisu systému.

Teorie je založena na třech základních předpokladech.

- Plyn sestává z molekul o hmotnosti m a průměru d , které jsou v neustálém náhodném pohybu.
- Velikost molekul je zanedbatelná vzhledem ke vzdálenostem, které urazí mezi jednotlivými srážkami.
- Molekuly jsou tuhé koule, mezi nimiž dochází k elastickým srážkám. Elastická srážka je taková, při které se zachovává celková kinetická energie sražených molekul.

Jedním z pojmů kinetické teorie je dynamický režim kontinua, pro jehož určení se používá Knudsenova podobnostního čísla, definovaného poměrem střední volné dráhy molekul λ a jejich průměrné velikosti L

$$Kn = \frac{\lambda}{L}. \quad (3.1)$$

Klasické modely založené na Navierových-Stokesových (NS) a Eulerových rovnicích jsou zpravidla platné, pokud je $Kn < 0.01$. Tuto platnost je vhodnou implementací okrajových podmínek možné rozšířit do dynamického režimu „*slip flow*“ pro $0.02 < Kn < 0.1$, při kterém je možný výskyt nespojitostí rychlostního pole na stěnách výpočtové oblasti. Modely založené na Boltzmannově rovnici jsou platné až do $Kn < 100$, čímž pokrývají téměř všechny dynamické režimy proudění a jsou tedy bezpochyby aplikovatelné na širší spektrum praktických aplikací.

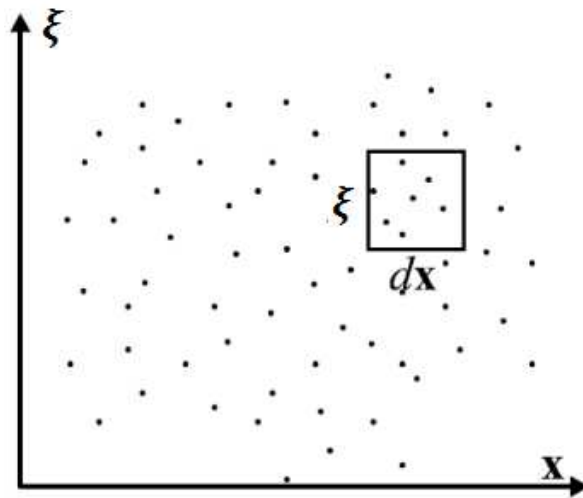
3.2 Boltzmannova rovnice

Jak bylo uvedeno v předchozím odstavci 3.1, základní otázkou kinetické teorie plynů je

zavedení statistického popisu systému. Proto definujeme tzv. distribuční funkci $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ vztahem

$$N_{\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}} = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\mathbf{x} d\boldsymbol{\xi}, \quad (3.2)$$

kde $N_{\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}}$ představuje počet částic, které se v čase t nacházejí v jednom elementu fázového prostoru, kde fázový prostor, viz obr. 12, je definován jako šesti-rozměrný prostor rychlostí a polohy částic $\{\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}\}$. Jinými slovy, $N_{\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}}$ je počet částic, které se v daném časovém okamžiku nachází v prostoru vymezeném intervalem $\{\mathbf{x}, \mathbf{x} + d\mathbf{x}\}$ s rychlostí $\{\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi} + d\boldsymbol{\xi}\}$.



Obr. 12: Grafické znázornění fázového prostoru

Základní makroskopické proměnné, jako jsou hustota $\rho(\mathbf{x}, t)$, vektor rychlosti $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$, vnitřní energie $e(\mathbf{x}, t)$, tenzor napětí $\sigma(\mathbf{x}, t)$ a vektor tepelného toku $\mathbf{q}(\mathbf{x}, t)$ je možné určit pomocí momentů distribuční funkce, [45]

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (3.3)$$

$$\rho \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \int \boldsymbol{\xi} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (3.4)$$

$$\rho e(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \int \boldsymbol{\xi}_0^2 f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (3.5)$$

$$\sigma(\mathbf{x}, t) = - \int \boldsymbol{\xi}_0 \boldsymbol{\xi}_0 f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (3.6)$$

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \int \boldsymbol{\xi}_0 (\boldsymbol{\xi}_0 \cdot \boldsymbol{\xi}_0) f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (3.7)$$

kde $\boldsymbol{\xi}_0 = \boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}$ je rychlost částice vzhledem k makroskopické rychlosti proudění. Poznamenejme, že $\boldsymbol{\xi}_0 \boldsymbol{\xi}_0$ je tenzor druhého řádu a tedy $\boldsymbol{\xi}_0 \boldsymbol{\xi}_0 \neq \boldsymbol{\xi}_0 \cdot \boldsymbol{\xi}_0$.

V následující části tohoto odstavce provedeme odvození Boltzmannovy rovnice.

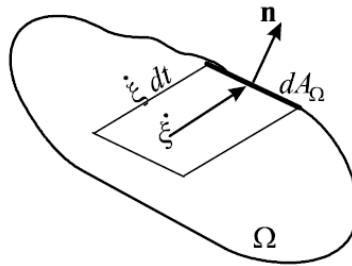
Uvažujme kontrolní objem Ω fázového prostoru a elementární plochu dA_Ω elementu vytknutého daným objemem. Poznamenejme, že plocha elementu ve fázovém prostoru je definovaná v pěti dimenzích. Celkový počet částic v čase t v objemu Ω dostaneme integrací rovnice (3.2)

$$N_\Omega = \iint_\Omega f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\mathbf{x}d\boldsymbol{\xi}. \quad (3.8)$$

Definujme ve fázovém prostoru polohový vektor $\epsilon(x, y, z, u, v, w)$ a jeho časovou derivaci $\dot{\epsilon}(\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}, \dot{u}, \dot{v}, \dot{w}) = (\boldsymbol{\xi}, \dot{\boldsymbol{\xi}})$. Pomocí jednoduché úvahy, která je znázorněna na obr. 13, vyjádříme počet částic prošlých za jednotku času elementární plochou dA_Ω elementu Ω následovně

$$\frac{dN_\Omega}{dt} = \frac{d}{dt} \iint_\Omega f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\mathbf{x}d\boldsymbol{\xi} = - \oint \dot{\epsilon}_A n_A f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) dA_\Omega, \quad (3.9)$$

kde $\dot{\epsilon}_A$ je A-tá složka vektoru $\dot{\epsilon}$ a n_A je A-tá složka vektoru normály k příslušné elementární ploše dA_Ω .



Obr. 13: Grafické znázornění elementárního objemu Ω a plochy dA_Ω

Na pravou stranu rovnice (3.9) aplikujeme Gaussovu-Ostrogradského větu. Jelikož uvažujeme pevný, v čase neměnný objem, na levé straně zaměníme pořadí časové derivace s integrálem. Derivace nyní musí být parciální, protože funkce f není proměnná pouze v čase. Po provedení uvedených úprav dostaneme

$$\iint_\Omega \frac{\partial f}{\partial t} d\mathbf{x}d\boldsymbol{\xi} = - \iint \frac{\partial \dot{\epsilon}_A f}{\partial x_A} d\mathbf{x}d\boldsymbol{\xi}, \quad (3.10)$$

kde x_A je A-tá složka obecného vektoru fázového prostoru. Rovnici (3.10) dále přepíšeme do anulovaného tvaru a provedeme součet integrálů

$$\iint_\Omega \left[\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial \dot{\epsilon}_A f}{\partial x_A} \right] d\mathbf{x}d\boldsymbol{\xi} = 0. \quad (3.11)$$

Protože rovnice (3.11) musí být splněna pro každý kontrolní objem z fázového prostoru, platí

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial \dot{\epsilon}_A f}{\partial x_A} = 0. \quad (3.12)$$

Jelikož $\dot{\epsilon} = (\xi_k, \dot{\xi}_k)$ a obecný vektor fázového prostoru, kde $k = 1, 2, 3$, můžeme druhý člen

na levé straně rovnice (3.12) rozdělit následujícím způsobem

$$\frac{\partial \dot{\epsilon}_A f}{\partial x_A} = \frac{\partial}{\partial x_A} (\dot{\epsilon}_A f) = \frac{\partial \xi_k f}{\partial x_k} + \frac{\partial \dot{\xi}_k f}{\partial \xi_k}, \quad (3.13)$$

Člen $\frac{\partial \dot{\xi}_k f}{\partial x_k}$ v rovnici (3.13) rozepíšeme s užitím pravidla pro derivování součinu. Po dosazení zpět do rovnice (3.13) dostáváme

$$\frac{\partial \dot{\epsilon}_A f}{\partial x_A} = \frac{\partial \xi_k}{\partial x_k} f + \xi_k \frac{\partial f}{\partial x_k} + \frac{\partial \dot{\xi}_k f}{\partial \xi_k}. \quad (3.14)$$

Nakonec výraz $\frac{\partial \dot{\xi}_k}{\partial x_k}$ položíme rovný nule, z důvodu nezávislosti jednotlivých souřadnic.

Dosazením do rovnice (3.12) dostaneme

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_k \frac{\partial f}{\partial x_k} + \frac{\partial \dot{\xi}_k f}{\partial \xi_k} = 0. \quad (3.15)$$

Zrychlení $\dot{\xi}_k$ rozložíme na zrychlení částic, které je způsobeno vnějším silovým polem G_k (např. tíhové zrychlení, vliv coriolisovy síly, atd.) a na zrychlení W_k způsobené vzájemnými interakčními silami mezi částicemi

$$\dot{\xi}_k = G_k + W_k, \quad (3.16)$$

Dosadíme-li z rovnice (3.16) do rovnice (3.14) a uvažujeme-li, že vnější síla není závislá na rychlosti částic, dostaneme slavnou Boltzmannovu rovnici

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_k \frac{\partial f}{\partial x_k} + G_k \frac{\partial f}{\partial \xi_k} = - \frac{\partial W_k f}{\partial \xi_k}, \quad (3.17)$$

Výraz na pravé straně rovnice (3.17) $S(f) = - \frac{\partial W_k f}{\partial \xi_k}$ je tzv. kolizní operátor a představuje změnu distribuční funkce způsobenou interakcemi jednotlivých částic.

Pro zapsání kompletní Boltzmannovy rovnice, je nutné specifikovat kolizní operátor $S(f)$, neboli blíže analyzovat vzájemné interakce částic. Odvození pravé strany Boltzmannovy rovnice zde nebudeme pro jednoduchost uvádět. Může být nalezeno například v [10] a je založeno na následujících předpokladech:

- Uvažují se pouze binární interakce částic (do vzájemné srážky vstupují vždy jen dvě částice).
- Platí předpoklad molekulárního chaosu (rychlosti částic při vzájemné srážce jsou nekorelované a nezávislé na poloze, neboli v každém bodě časoprostoru jsou hodnoty distribuční funkce odpovídající dvou různým rychlostem navzájem nezávislé).
- Kolize dvou částic se projeví pouze jako okamžitá změna jejich rychlostí.

Po dosazení výsledného tvaru pravé strany Boltzmannovy rovnice, [10], do rovnice (3.17) dostaneme její úplný tvar

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c_k \frac{\partial f}{\partial x_k} + G_k \frac{\partial f}{\partial \xi_k} = \iint_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} (\bar{f}\bar{f}_1 - ff_1) g \vartheta \sin \theta \, d\theta d\zeta d\xi_1, \quad (3.18)$$

kde \bar{f} , \bar{f}_1 , f a f_1 jsou definovány následovně $\bar{f} \equiv (\mathbf{x}, \bar{\xi}, t)$, $\bar{f}_1 \equiv (\mathbf{x}, \bar{\xi}_1, t)$, $f \equiv (\mathbf{x}, \xi, t)$ a $f_1 \equiv (\mathbf{x}, \xi_1, t)$. Rychlosti $\bar{\xi}$ a $\bar{\xi}_1$ jsou rychlosti molekul po srážce a rychlosti ξ a ξ_1 před jejich vzájemnou srážkou. Úhly ζ a θ popisují natočení tzv. srážkové roviny, neboli definují polohu bodu srážky na povrchu částice s rychlostí ξ . Dále g popisuje relativní rychlost jedné částice vůči druhé a ϑ je kontaktní plocha srážky. Boltzmannova rovnice (3.18), v oblasti kinetické teorie plynů, je nelineární integro-diferenciální rovnicí, která popisuje evoluci distribuční funkce f ideálního jednoatomového plynu v čase a prostoru.

3.3 H-teorém a rovnovážný stav

Podle prvního axiomu termodynamické rovnováhy každý makroskopický systém dospěje po určitém relaxačním čase v daných, časově neměnných podmínkách, do stavu termodynamické rovnováhy. Tuto vlastnost je možné ukázat prostřednictvím funkce, viz [43], [44]

$$H(\mathbf{x}, t) = \int f \ln f \, d\xi. \quad (3.19)$$

Derivováním rovnice (3.19) podle času dostaneme

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \int (1 + \ln f) \frac{\partial f}{\partial t} \, d\xi. \quad (3.20)$$

Předpokládáme-li systém, který je z hlediska prostoru uniformní (distribuční funkce f závisí pouze na čase), můžeme předchozí rovnici (3.20) napsat ve tvaru

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \int (1 + \ln f) S(f) \, d\xi. \quad (3.21)$$

Dosazením výše odvozeného tvaru kolizního operátoru do rovnice (3.21) a jednoduchou úvahou, dostaneme

$$\frac{\partial H}{\partial t} \leq 0. \quad (3.22)$$

Rovnice (3.22) tedy říká, že výše definovaná funkce $H(\mathbf{x}, t)$ je v čase vždy nerostoucí. Toto tvrzení je známé jako Boltzmannův H-teorém.

Rovnovážný stav systému (equilibrium) nastává tehdy, je-li $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$. Z odvozeného tvaru kolizního operátoru (3.18) tomuto odpovídá stav, kdy

$$\bar{f}\bar{f}_1 = ff_1. \quad (3.23)$$

Zlogaritmujeme-li rovnici (3.23) a využijeme-li vlastností logaritmu, dostaneme

$$\ln \dot{f} + \ln \dot{f}_1 = \ln f + \ln f_1. \quad (3.24)$$

Z uvedeného výrazu plyne, že v equilibriu je přirozený logaritmus rovnovážné hodnoty distribuční funkce $\ln f$ tzv. kolizním invariantem (jeho hodnota se důsledkem vzájemných interakcí částic nemění).

Je možné ukázat [45], že předpokládáme-li pouze binární kolize, jsou ξ , ξ^2 a 1 kolizními invarianty. Obecně platí, že jakákoli lineární kombinace invariantů je také kolizním invariantem. Z tohoto důvodu lze napsat

$$\ln f(\xi) = A + \mathbf{B} \cdot \xi + C\xi^2. \quad (3.25)$$

Protože pro distribuční funkci v rovnovážném stavu musí platit momentové rovnice (3.3)-(3.7), lze konstanty v rovnici (3.25) určit jednoznačně. Po provedení dostaneme equilibrium distribuční funkce, známé také jako Maxwell-Boltzmannova distribuční funkce.

$$f_M = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{3/2}} e^{-(\xi-\mathbf{u})^2/2RT}, \quad (3.26)$$

kde R je molární plynová konstanta a T je termodynamická teplota.

3.4 Odvození lattice Boltzmannovy rovnice

Jak jsme již zmínili v úvodu této kapitoly lattice Boltzmannova metoda vychází z Boltzmannovy rovnice. Proto k odvození základního diferenčního schématu metody, lattice Boltzmannovy rovnice, provedeme její diskretizaci.

Poznamenejme, že historicky byla lattice Boltzmannova rovnice odvozena empiricky z přístupů postavených na principu buněčných automatů (lattice gas automata (LGA) [20],[21]). Metoda byla vyvinuta tak, aby předešla některým problémům, které se objevovaly v LGA (statistický šum, omezený rozsah fyzikálních parametrů a složitost implementace v třídimenzionálním prostoru). Až později bylo ukázáno, že lattice Boltzmannova rovnice může být odvozena z Boltzmannovy rovnice [34,35].

Pro určení lattice Boltzmannovy rovnice je nutné nejprve provést vhodnou diskretizaci fázového prostoru [11]. Nejprve aproximujeme rychlostní pole konečným počtem Q diskrétních rychlostí ξ_i , $i = 0, \dots, Q - 1$. Pro každou diskrétní rychlost dostaneme diskrétní ekvivalent distribuční funkce

$$f_\alpha(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x}, \xi_\alpha, t). \quad (3.27)$$

Po dosazení do rovnice (3.17) a při zanedbání zdrojového silového členu dostaneme

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \xi_{\alpha k} \frac{\partial f_\alpha}{\partial x_k} = S(f), \quad (3.28)$$

kde jsme diskrétní část rovnovážné Maxwell-Boltzmannovy distribuční funkce f_M označili jako f_α^{eq} . Další diskretizace rovnice (3.17) je v časové oblasti. Proto výraz na levé straně rovnice napíšeme jako materiálovou derivaci distribuční funkce a provedeme její aproximaci pomocí dopředné diference

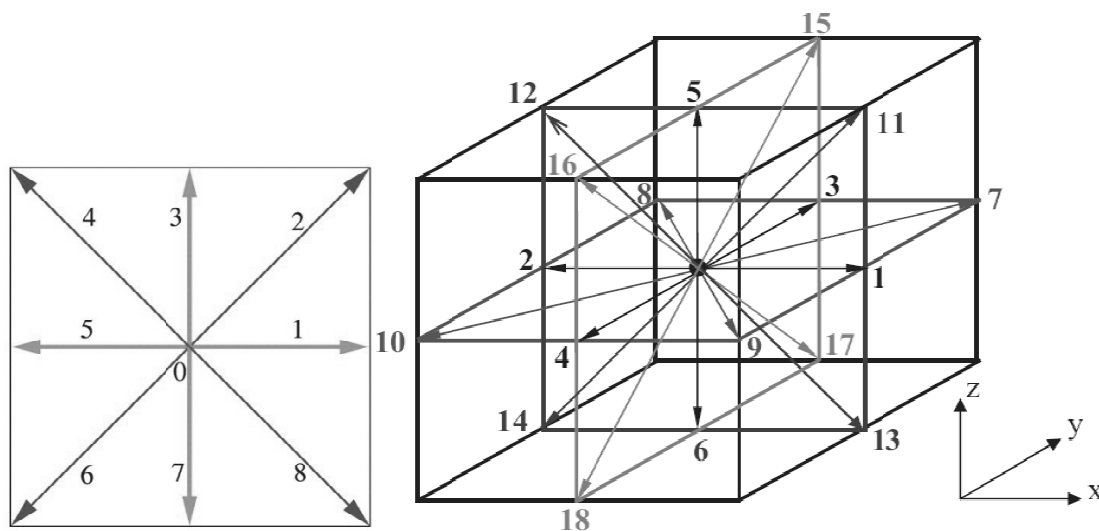
$$\frac{Df_\alpha}{Dt} = \frac{f_\alpha(x + \xi_\alpha \delta t, t + \delta t) - f_\alpha(x, t)}{\delta t}. \quad (3.29)$$

Dosadíme-li rovnici (3.29) do rovnice (3.28), dostaneme konečný tvar lattice Boltzmannovy rovnice v následujícím tvaru

$$f_\alpha(x + \xi_\alpha \delta t, t + \delta t) - f_\alpha(x, t) = S_\alpha(t, x). \quad (3.30)$$

Poznamenejme, že obor platnosti Boltzmannovy rovnice se její diskretizací fázového prostoru a časové oblasti omezil pouze na malá Knudsenova $K_n \sim 0.1$ a Froudeova čísla. Tento obor platnosti může být ale vhodnou volbou aproximace diskrétního tvaru kolizního operátoru rozšířen.

Jak jsme uvedli výše, rychlostní pole fázového prostoru aproximujeme konečným počtem mikroskopických rychlostí. Na obr. 14 jsou znázorněny dvě z mnoha variant rychlostních modelů, model $d2q9$ a $d3q19$. Označení $dDqQ$ bylo poprvé zavedeno v [12], kde parametr D určuje počet dimenzí a Q počet mikroskopických rychlostí.



Obr. 14: $d2q9$ a $d3q19$ rychlostní model

První model $d2q9$ je nejčastěji používaným modelem pro dvou dimenzionální úlohy. Jak je vidět na obrázku obr. 14, model uvažuje devět mikroskopických rychlostí. Čtyři jsou ve směru souřadnicových os a čtyři v diagonálních směrech. Poslední rychlost je zavedena pro

popsání nepohybujících se částic. Částicím je tedy umožněno pohybovat se pouze v osmi směrech směřujících do sousedních uzlů, nebo zůstat ve stávajícím uzlu. Protože v této práci pracujeme s prouděním ve třech dimenzích, zavádíme model $d3q19$. Tento model má oproti $d2q9$ další dva vektory ve směru prostorových souřadnicových os a osm diagonálních vektorů ve zbývajících kombinacích dvojic os. Podle [13] je tento typ velmi rychlý, dobře aproximuje spojitou funkci ve fázovém prostoru a oproti jiným variantám ve 3D ($d3q15$, $d3q27$, atd.) vykazuje lepší stabilitu výpočtu.

Protože v této práci používáme model $d3q19$, uveďme zde pro úplnost složky jednotlivých směrových vektorů mikroskopických rychlostí

$$\xi_\alpha = \begin{cases} (0, 0), & \alpha = 0, \\ (\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1), & \alpha = 1 - 6, \\ (\pm 1, \pm 1, 0), (\pm 1, 0, \pm 1), (\pm 1, \pm 1, 0), & \alpha = 7 - 18. \end{cases} \quad (3.31)$$

3.5 Kinetické modely

Vzhledem ke složitosti výrazu na pravé straně Boltzmannovy rovnice (3.18) je nutné pracovat s vhodnou aproximací kolizního operátoru. V tomto odstavci uvedeme dva nejčastěji používané kinetické modely aproximace pravé strany Boltzmannovy rovnice.

3.5.1 Lattice Boltzmannova rovnice ve variantě Single-Relaxation-Time

Single-Relaxation-Time model, někdy také nazýván jako Bhatnagarů-Grossův-Krookův (BGK) [11], patří mezi nejzákladnější přístupy aproximace kolizního operátoru. Jeho odvození můžeme shrnout do třech částí:

1. Nahradíme hodnoty $\hat{f}\hat{f}_1$ hodnotami $\hat{f}_M\hat{f}'_{1M}$. Toto zjednodušení vychází z předpokladu, že díky vzájemným interakcím částic, se hodnoty distribuční funkce přibližují rovnovážnému stavu a tedy nahrazujeme hodnoty ve stavu po kolizi přímo hodnotami Maxwell-Boltzmannovy distribuční funkce

$$\iint_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} (\hat{f}_M\hat{f}'_{1M} - \hat{f}\hat{f}_1) g \vartheta \sin \theta \, d\theta d\zeta d\xi_1, \quad (3.32)$$

2. Podmínku rovnovážného stavu z rovnice (3.23) dosadíme do rovnice (3.32). Dalším rozepsáním integrálu a vytknutím distribučních funkcí f a f_M před integrál (jsou vzhledem k integrační proměnné konstantní) dostaneme

$$f_M \iint_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \hat{f}_{1M} g \vartheta \sin \theta \, d\theta d\zeta d\xi_1 - f \iint_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \hat{f}_1 g \vartheta \sin \theta \, d\theta d\zeta d\xi_1, \quad (3.33)$$

3. Integrály v rovnici (3.33) považujeme za identické. Po úpravě a zavedení tzv. kolizní

frekvence ν dostaneme

$$-\lambda(f - f_M). \quad (3.34)$$

Aproximovaný tvar kolizního operátoru z rovnice (3.34) dosadíme do Boltzmannovy rovnice (3.18). Splněním podmínky korektnosti kinetického modelu musí být kolizní frekvence nezávislá na rychlosti částic. Nahrazujeme ji tedy průměrnou hodnotou $\bar{\lambda}$. Po provedení uvedených úprav dostaneme tvar Boltzmannovy rovnice s BGK aproximací následovně

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c_k \frac{\partial f}{\partial x_k} + G_k \frac{\partial f}{\partial \xi_k} = -\bar{\lambda}(f - f_M). \quad (3.35)$$

Po pro provedení diskretizace v čase a v prostoru, jak bylo uvedeno v předchozím odstavci, dostaneme lattice Boltzmannovu rovnici s BGK aproximací (LBR-BGK) v následujícím tvaru

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_\alpha \delta t, t + \delta t) - f_\alpha(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} f_\alpha^{neq}, \quad (3.36)$$

kde $f_\alpha^{neq} = f_\alpha - f_\alpha^{eq}$ je vzdálenost od rovnovážné hodnoty distribuční funkce a τ je bezrozměrný tvar relaxačního času, tzv. relaxační parametr. Tento parametr může být chápán jako střední hodnota časového intervalu mezi dvěma po sobě jdoucími kolizemi a je úzce spjat s kinematickou viskozitou.

Equilibrium distribuční funkce f_α^{eq} dostaneme aproximací rovnovážné Maxwell-Boltzmannovy distribuční funkce f_M [12] ve tvaru

$$f_\alpha^{eq} = \omega_\alpha \left\{ \delta\rho + \rho_0 \left[\frac{3\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}}{c^2} + \frac{9(\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{c^2} - \frac{9\mathbf{u}^2}{2c^2} \right] \right\}, \quad (3.37)$$

kde váhové faktory modelu $d3q19$ jsou $\omega_0 = 1/3$, $\omega_{1-6} = 1/18$ a $\omega_{7-18} = 1/36$. Hustota je zde rozdělena na konstantní ρ_0 (obvykle nastavena rovna jedné) a flukтуаční $\delta\rho$ složku. Proměnná $c = \delta_x / \delta_t$ je tzv. mřížková rychlost, která je při vhodně zvolené parametrizaci proměnných rovna jedné.

Pomocí Chapman-Enskogovy analýzy [14] lze ukázat, že rovnice LBR-BGK přejde do tvaru nestlačitelných Navierových-Stokesových rovnic, za podmínek

$$\nu = -\frac{1}{3} \left(\tau - \frac{1}{2} \right) c \delta_x, \quad (3.38)$$

$$p = \frac{c_s^2 \rho}{\rho_0}, \quad (3.39)$$

kde ν je kinematická viskozita kapaliny a $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}$ je rychlost zvuku v mřížkových jednotkách $\delta_x = \delta_t = 1$.

Počet částic, které se pohybují s danou mikroskopickou rychlostí a daným směrem udává hodnoty makroskopických veličin kapaliny, jako jsou například hustota a rychlost. Tyto veličiny získáme pomocí momentů distribuční funkce, viz rovnice (3.3)-(3.7), převedených do diskrétního tvaru

$$\rho = \sum_{\alpha} f_{\alpha}, \quad (3.40)$$

$$\rho_0 \mathbf{u} = \sum_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} f_{\alpha}. \quad (3.41)$$

3.5.2 Lattice Boltzmannova rovnice ve variantě Multiple-Relaxation-Time

První myšlenka Multiple-Relaxation-Time (MRT) modelu se poprvé objevila už ve stejném období jako BGK, ale její praktická implementace byla poprvé uvedena až v [3]. Hlavním rozdílem od BGK je, že v MRT modelu, jsou jednotlivé momenty distribučních funkcí (jak hydrodynamické, uvedené v rovnicích (3.3)-(3.7), tak momenty vyšších řádů) relaxovány různými koeficienty.

Oproti BGK se tedy v MRT sestavuje Q momentů distribučních funkcí. Aby bylo dosaženo různé míry relaxace jednotlivých momentů, počítá se kolizní část algoritmu, viz odstavec 3.6, v prostoru momentů distribučních funkcí. Transformace mezi prostorem momentů distribučních funkcí M , vymezeným podle $\{m_{\beta} | \beta = 0, 1, \dots, Q\}$ a rychlostním prostorem $V \{f_{\alpha} | \alpha = 0, 1, \dots, Q\}$, ve kterém probíhá propagační část algoritmu, viz odstavec 3.6, je dána lineárním zobrazením $L: |m\rangle = M|f\rangle$ a $|f\rangle = M^{-1}|m\rangle$. Označení $|\cdot\rangle$ reprezentuje sloupcový vektor. Vyjdeme-li z diskretizované Boltzmannovy rovnice (3.30), evoluční lattice-Boltzmannova rovnice s MRT aproximací (LBR-MRT) má tvar

$$|f(\mathbf{x} + \xi_{\alpha} \delta t, t + \delta t)\rangle - |f(\mathbf{x}, t)\rangle = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{S} [|m(\mathbf{x}, t)\rangle - |m^{eq}(\mathbf{x}, t)\rangle], \quad (3.42)$$

kde $|m^{eq}\rangle$ je vektor hodnot jednotlivých momentů $|m\rangle$ v equilibriu. Matice \mathbf{S} je diagonální, tzv. relaxační matice koeficientů pro relaxování jednotlivých momentů. Transformační matice lineárního zobrazení prostoru momentů distribučních funkcí a rychlostního prostoru je závislá na typu rychlostního modelu a pro $d3q19$ je určena například v [15], [16].

Pro $d3q19$, který používáme v této práci, jsou hydrodynamické momenty a momenty vyšších řádů následující. Moment $m_0 = \delta\rho$ je flukтуаční složka hustoty, $m_1 = e$ je energie a $m_2 = \varepsilon$ představuje její druhou mocninu. Momenty $m_{3,5,7} = j_{x,y,z}$ jsou jednotlivé komponenty vektoru hybnosti $\mathbf{j} = (j_x, j_y, j_z) = \rho_0 \mathbf{u}$ a $m_{4,6,8} = q_{x,y,z}$ představují složky vektoru tepelného toku $\mathbf{q} = (q_x, q_y, q_z)$. Komponenty symetrického tenzoru napjatosti jsou

vyjádřené pomocí $m_9 = 3p_{xx}$, $m_{11} = p_{\omega\omega}$ a $m_{13,14,15} = p_{xy,yz,zx}$. Další momenty, tzv. momenty čtvrtého řádu jsou $m_{10} = 3\pi_{xx}$, $m_{12} = \pi_{\omega\omega}$ a třetího řádu $m_{16,17,18} = m_{x,y,z}$.

$$\mathbf{m} = (\rho, e, \epsilon, j_x, q_x, j_y, q_y, j_z, q_z, 3p_{xx}, 3\pi_{xx}, p_{ww}, \pi_{ww}, p_{xy}, p_{yz}, p_{zx}, m_x, m_y, m_z). \quad (3.43)$$

Diagonální relaxační matice pro model $d3q19$ má následující tvar

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= \text{diag}(0, s_1, s_2, 0, s_4, 0, s_4, 0, s_4, s_9, s_2, s_9, s_2, s_9, s_9, s_9, s_{16}, s_{16}, s_{16}) \\ &= \text{diag}(0, s_e, s_\epsilon, 0, s_q, 0, s_q, 0, s_q, s_\nu, s_\pi, s_\nu, s_\pi, s_\nu, s_\nu, s_\nu, s_m, s_m, s_m). \end{aligned} \quad (3.44)$$

Rovnovážné stavy jednotlivých momentů obsažené ve vektoru \mathbf{m}^{eq} jsou funkce hydrodynamických, konzervativních momentů ($\mathbf{m}^{eq}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{m}^{eq}(\rho(\mathbf{x}, t), \mathbf{u}(\mathbf{x}, t))$) a pro $d3q19$ jsou ve tvaru

$$m_1^{eq} = -11\delta\rho + \frac{19}{\rho_0} \mathbf{j} \cdot \mathbf{j}, \quad (3.45)$$

$$m_2^{eq} = \omega_\epsilon \delta\rho + \frac{\omega_{\epsilon j}}{\rho_0} \mathbf{j} \cdot \mathbf{j}, \quad (3.46)$$

$$m_{4,6,8}^{eq} = -\frac{2}{3} j_{x,y,z}, \quad (3.47)$$

$$m_9^{eq} = \frac{1}{\rho_0} (3j_x^2 - \mathbf{j} \cdot \mathbf{j}), \quad m_{11}^{eq} = \frac{1}{\rho_0} (j_y^2 - j_z^2), \quad (3.48)$$

$$m_{10}^{eq} = \omega_{xx} m_9^{eq}, \quad m_{12}^{eq} = \omega_{xx} m_{11}^{eq}, \quad (3.49)$$

$$m_{13}^{eq} = \frac{1}{\rho_0} j_x j_y, \quad m_{14}^{eq} = \frac{1}{\rho_0} j_y j_z, \quad m_{15}^{eq} = \frac{1}{\rho_0} j_z j_x, \quad (3.50)$$

$$m_{16}^{eq} = m_{17}^{eq} = m_{18}^{eq} = 0. \quad (3.51)$$

Poznamenejme, že hodnoty konzervativních momentů se vždy rovnají jejich hodnotám v rovnovážném stavu a jsou tedy kolizními invarianty. Hodnoty parametrů uvedených v rovnicích pro jednotlivá equilibria, viz rovnice (3.45)-(3.51), jsou volené (vzhledem k optimalizaci lineární stability modelu) následovně $\omega_\epsilon = \omega_{xx} = 0$ a $\omega_{\epsilon j} = -\frac{475}{63}$ [3].

Kinematická viskozita je spjata s relaxačním koeficientem s_ν podle

$$\nu = -\frac{1}{3} \left(\frac{1}{s_\nu} - \frac{1}{2} \right) c \delta_x. \quad (3.52)$$

Hodnoty ostatních relaxačních koeficientů nekonzervativních momentů distribučních funkcí jsou v této práci voleny následovně: $s_e = 1.19$, $s_\epsilon = s_\pi = 1.4$, $s_q = 1.2$ a $s_m = 1.98$. Tyto hodnoty jsou určeny vzhledem k optimalizaci lineární stability modelu [3].

3.6 Algoritmizace

Numerické řešení lattice Boltzmannovy rovnice je relativně jednoduché. Metoda pracuje s normalizovaným časovým krokem na výpočtové oblasti, která je diskretizovaná konečným počtem uzlů. Na příklad pro rychlostní model $d3q9$ je uniformě rozdělena přímkami rovnoběžnými se směry souřadnicových os. Výpočtové uzly sítě jsou poté definovány v místech jejich průsečíků. Každému výpočtovému uzlu je přiřazen konečný počet hodnot distribučních funkcí f_α , $\alpha = 1, \dots, Q$ ($Q = 9$ pro $d2q9$). Změna stavu hodnot v uzlu v daném iteračním kroku závisí pouze na hodnotách jeho a s ním sousedících uzlů z konce předchozího iteračního kroku.

Algoritmus metody pro LBR-BGK i LBR-MRT můžeme rozdělit na dva základní kroky, kolizní a propagační část, viz obr. 15 a obr. 16. Jednotlivé části mohou být vykonány odděleně, což přispívá k vyššímu výpočetnímu výkonu a nižším nárokům na paměť.

- **Kolizní část**

Tato část iteračního kroku fyzikálně reprezentuje difuzní jevy v kapalině, a tedy lokálně modifikuje hodnoty distribučních funkcí v každém bodě výpočetní oblasti podle rovnice

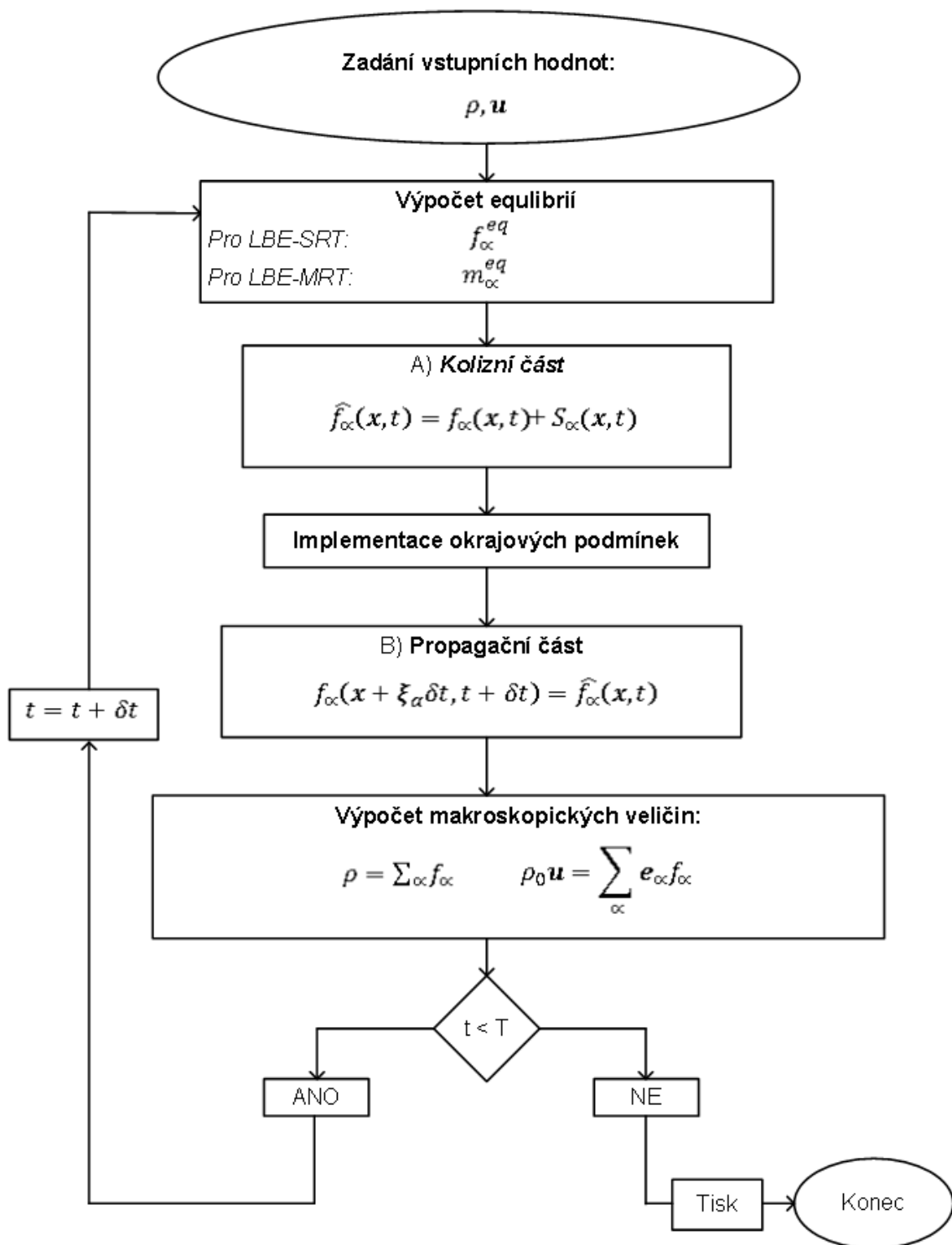
$$\text{Pro LBR-BGK: } \hat{f}_\alpha(\mathbf{x}, t) = f_\alpha(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau}(f_\alpha - f_\alpha^{eq}), \quad (3.53)$$

$$\text{Pro LBR-MRT: } \hat{f}_\alpha(\mathbf{x}, t) = f_\alpha(\mathbf{x}, t) - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{S}[|m(\mathbf{x}, t)\rangle - |m^{eq}(\mathbf{x}, t)\rangle]. \quad (3.54)$$

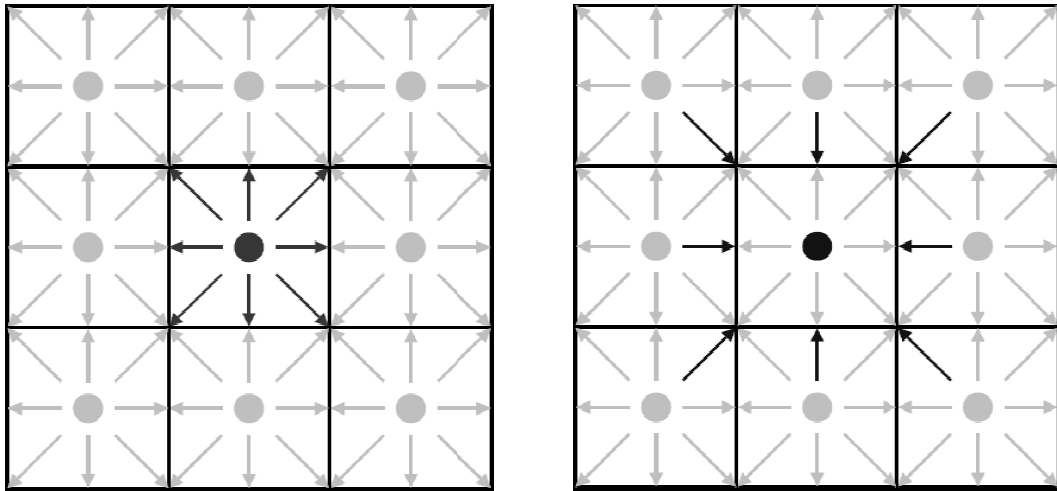
- **Propagační část**

Tato část iteračního kroku fyzikálně reprezentuje konvekční jevy v kapalině, a tedy posunuje hodnoty všech distribučních funkcí f_α , $\alpha = 1, \dots, Q$ sousedním uzlům, které se nacházejí ve směru příslušné mikroskopické rychlosti ξ_α podle rovnice

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \xi_\alpha \delta t, t + \delta t) = \hat{f}_\alpha(\mathbf{x}, t). \quad (3.55)$$



Obr. 15: Grafické znázornění základního algoritmu LBM



Obr. 16: Grafické znázornění kolizní a propagační části algoritmu

3.7 Okrajové podmínky

Hranici výpočtové oblasti chápeme jako pevnou nepropustnou stěnu, na které dochází k velmi složitě popsatelným interakcím částic. Tyto interakce závisí na mikroskopických vlastnostech stěny a kapaliny a pro jejich popis se používají různé aproximační modely. Pomocí nich je snaha minimalizovat matematickou složitost s podmínkou zachování základní fyzikální podstaty.

V této části práce se budeme zabývat způsoby implementace okrajových podmínek pro lattice Boltzmannovu metodu. Obecně jsou okrajové podmínky specifikovány makroskopickými hodnotami. V rámci LBM musí být tyto hodnoty transformovány na distribuční funkce. V okrajových uzlech jsou, po propagační části algoritmu, distribuční funkce odpovídající mikroskopickým rychlostem směřujícím z hranice výpočtové oblasti neznámé.

Problematika okrajových podmínek tedy spočívá ve hledání vztahu mezi částicemi opouštějícími oblast a těmi, co do ní vstupují

$$f_{\alpha_1}^{in} = \sum_{\alpha_1} \sum_{\alpha_2} K_{\alpha_1 \alpha_2} f_{\alpha_2}^{out}, \quad (3.56)$$

kde $K_{\alpha_1 \alpha_2}$ je tzv. jádro daného modelu.

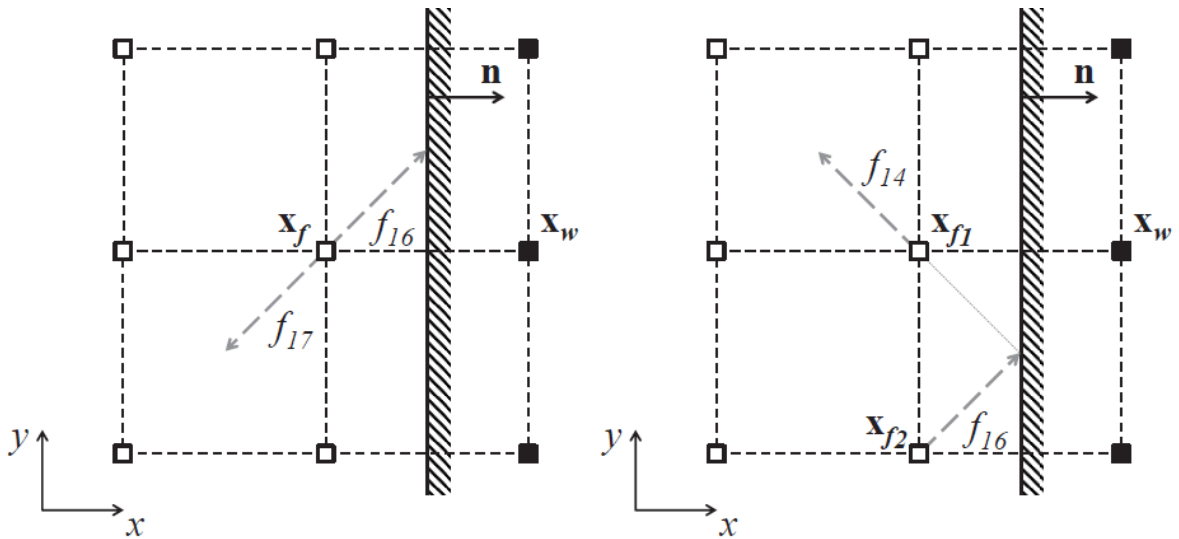
Okrajové podmínky tedy poskytují korektní sadu distribučních funkcí pro všechny hraniční uzle výpočtové oblasti. Výčet různých typů okrajových podmínek zde nebudeme uvádět. V následujících odstavcích rozebereme pouze ty, které jsou implementovány v našem programu.

3.7.1 Bounce-Back schéma

Intuitivní způsob, jak modelovat pevnou nepropustnou stěnu, je přímo odrazit molekuly na ni dopadající. V pracích zabývajících se problematikou LBM je toto obecně známo jako bounce-back schéma. Fyzikální podstata tohoto schématu je velmi jednoduchá. Molekuly, které interagují s hranicí (nepropustná stěna), jsou odraženy zpět směrem do místa, ze kterého přicházejí. Schematicky je toto znázorněno ve 2D na obr. 17. Distribuční funkce, které odpovídají mikroskopickým rychlostem směřujícím ven z oblasti, jsou přímo přiřazeny neznámým hodnotám směřující v opačném směru, tedy dovnitř oblasti. Matematicky je bounce-back schéma dáno následovně

$$f_{\bar{\alpha}}(\mathbf{x}_f, t + \delta t) = f_{\alpha}(\mathbf{x}_f, t), \quad (3.57)$$

pro všechny směry $\bar{\alpha}$, pro které platí $\xi_{\bar{\alpha}} \cdot \mathbf{n} < 0$, tzn. $\xi_{\bar{\alpha}}$ směřuje ze stěny do kapaliny. Dále platí $\xi_{\bar{\alpha}} = \xi_{\alpha}$.



Obr. 17: Grafické znázornění okrajových podmínek typu bounce-back

Protože uvedené lattice Boltzmannovo schéma je navrženo tak, že molekuly, či příslušné distribuční funkce, se přesouvají z uzlů do jejich sousedních za jeden časový krok, je bounce-back schéma geometricky omezené pouze na rovné stěny rovnoběžné s rovinami souřadnicového systému. Stěna musí být umístěna přesně mezi prvním uzlem vně a uvnitř výpočtové oblasti, viz obr. 17, tzn. mezi uzly x_f a x_w . Z tohoto důvodu je často tento typ okrajové podmínky nazýván také jako *half way* bounce back. Pokud bychom chtěli modelovat stěnu s nenulovou rychlostí (např. test proudění v kavitě) je do schématu přidán další člen

$$f_{\bar{\alpha}}(\mathbf{x}_f, t + \delta t) = f_{\alpha}(\mathbf{x}_f, t) - 2\omega_{\alpha}\rho(\mathbf{x}_f, t) \frac{\xi_{\alpha} \cdot \mathbf{u}_w}{c_s^2}. \quad (3.58)$$

Na rovných stěnách umístěných v uprostřed dvou hraničních uzlů výpočtové oblasti je bounce-back schéma druhého řádu přesnosti v prostoru. Pokud bude poloha stěny jinde než přesně uprostřed, vzniklá diskretizační chyba je řádu $O(\Delta\mathbf{x})$ a tudíž se přesnost v prostoru redukuje pouze na první řád (např. na šikmých stěnách, které jsou degradovány na jakýsi schodovitý tvar).

Pro modelování symetrické podmínky je nutné formulovat okrajovou podmínku, která hybnost ve směru normály otáčí zpět a tangenciální ponechává nezměněnou. Pro tento typ existuje jiná forma bounce-back schématu, tzv. specular reflection, viz obr. 17, která je matematicky vyjádřena následovně

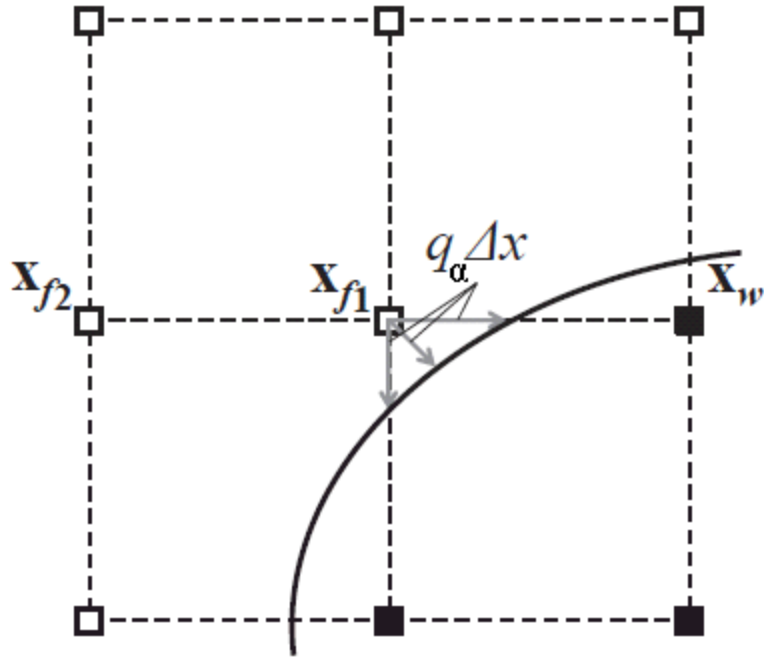
$$f_{\bar{\alpha}}(\mathbf{x}_{f1}, t + \delta t) = f_{\alpha}(\mathbf{x}_{f2}, t), \quad (3.59)$$

kde $\bar{\xi}_{\alpha} = \xi_{\alpha} - 2(\xi_{\alpha} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n}$. Tímto způsobem se tedy nemění hybnost v tangenciálním směru a schéma modeluje ideálně hladkou stěnu. Podmínka má stejná geometrická omezení jako výše uvedený bounce-back. Schéma je tedy druhého řádu přesnosti pouze v případě, kdy hranice je přesně uprostřed vnějšího stěnového a prvního tekutinového uzlu.

3.7.2 Yu schéma

V praktických úlohách proudění a také ve výpočtech uvnitř palivových souborů jaderné elektrárny se vyskytují převážně nerovné plochy. Geometrické omezení výše popsaných okrajových podmínek typu bounce-back tedy silně limituje jeho použití u těchto typů úloh. Proto zde uvedeme Yu schéma [58], které patří do skupiny OP zvaných „interpolation bounce-back“.

Hlavní myšlenka Yu schématu je s pomocí obr. 18 popsána následovně. Stěna je považována za propustnou hranici a tedy molekuly jdoucí z bodu \mathbf{x}_{f1} ve směru α do stěny ji protnou v místě $\mathbf{q}_{\alpha}\delta\mathbf{x}$ a dorazí do bodu \mathbf{x}_w na konci časového kroku $t + \delta t$. Následně je provedena interpolace α -té distribuční funkce do bodu přímo na stěně $\mathbf{x}_b = \mathbf{x}_{f1} + \xi_{\alpha}\mathbf{q}_{\alpha}\delta t$ z hodnot v bodech \mathbf{x}_{f1} a \mathbf{x}_w v čase $t + \delta t$.



Obr. 18: Grafické znázornění principu Yu schématu

Tato interpolace je matematicky vyjádřena následovně.

$$f_{\alpha}(\mathbf{x}_b, t + \delta t) = f_{\alpha}(\mathbf{x}_{f1}, t + \delta t) + q_{\alpha} \left(f_{\alpha}(\mathbf{x}_w, t + \delta t) - f_{\alpha}(\mathbf{x}_{f1}, t + \delta t) \right). \quad (3.60)$$

Interpolovaná distribuční funkce je poté odražena zpět. Stejně jako podle pravidla bounce-back schématu dostaneme

$$f_{\bar{\alpha}}(\mathbf{x}_b, t + \delta t) = f_{\alpha}(\mathbf{x}_b, t + \delta t) - 2\omega_{\alpha}\rho(\mathbf{x}_{f1}, t) \frac{\xi_{\alpha} \cdot \mathbf{u}_w}{c_s^2}. \quad (3.61)$$

Chybějící distribuční funkce po propagační části algoritmu, která přichází z vnější oblasti do bodu \mathbf{x}_{f1} v čase $t + \delta t$, jsou získány lineární interpolací z bodů \mathbf{x}_b a \mathbf{x}_{f2} podle

$$f_{\bar{\alpha}}(\mathbf{x}_{f1}, t + \delta t) = f_{\bar{\alpha}}(\mathbf{x}_b, t + \delta t) + \frac{q_{\alpha}}{1+q_{\alpha}} \left(f_{\bar{\alpha}}(\mathbf{x}_{f2}, t + \delta t) - f_{\bar{\alpha}}(\mathbf{x}_b, t + \delta t) \right). \quad (3.62)$$

Je možné ukázat jednoduchým dosazením, že výše uvedené schéma pro $q_{\alpha} = 0,5$ nepřejde přímo na tvar bounce-back schématu. Uvedené schéma je přesto také druhého řádu přesnosti v čase [58].

3.7.3 Okrajová podmínka se zadaným třením

Okrajové podmínky, které byly popsány výše, jsou Dirichletova typu. V problematice turbuletního proudění, které vykazuje chladivo v oblasti palivových prouků, je nutné formulovat na stěnách tzv. Neumannovy okrajové podmínky. Tyto slouží pro implementaci

smykového napětí na stěně je dáno rovnicí

$$\tau_w = \mu \frac{\partial \mathbf{u}_t}{\partial \mathbf{n}}. \quad (3.63)$$

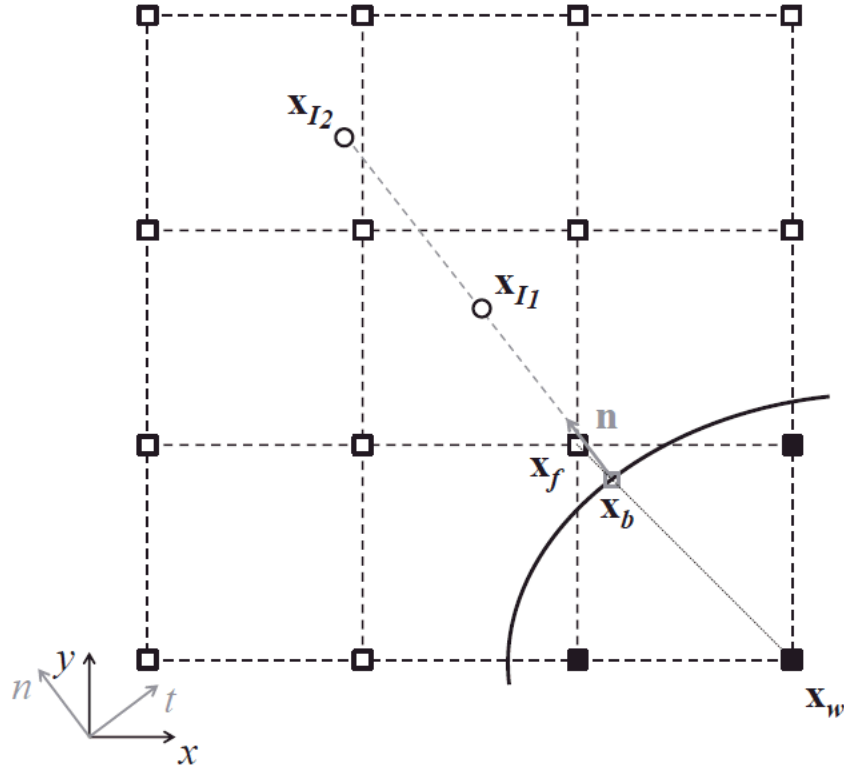
Existuje více způsobů, jak implementovat Neumannovy okrajové podmínky pro LBM. Nejjednodušším způsobem je lineární kombinace bounce-back schématu s jeho alternativou pro stěny s nulovým třením tzv. specular reflection [17]. Tento přístup má ale zásadní nedostatek neexistence vazby koeficientů lineární kombinace na hodnotu zadávaného smykového napětí na stěně. Jiný způsob implementace Neumannovy okrajové podmínky, stejný, jako se používá v klasických diferencních metodách, je založen na extrapolaci hodnot na stěnu podle zadané derivace. Pro potřeby smykového napětí to znamená, že rychlosti z vnitřku výpočtové oblasti jsou extrapolovány na hranici, kde je formulována dirichletova okrajová podmínka [60].

Prvním krokem pro realizaci této okrajové podmínky je stanovení rychlosti stěny podle zadaného smykového napětí, které je derivací tangenciální rychlosti \mathbf{u}_t ve směru normály \mathbf{n} . Pro toto provedeme Taylorův rozvoj tangenciální rychlosti. Poznamenejme, že je použit souřadnicový systém určený normálovým vektorem, obr. 19.

$$\mathbf{u}_t(\mathbf{x}_{I1}) = \mathbf{u}_t(\mathbf{x}_b + h\mathbf{n}) = \mathbf{u}_t(\mathbf{x}_b) + h \frac{\partial \mathbf{u}_t}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{x}_b) + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 \mathbf{u}_t}{\partial \mathbf{n}^2}(\mathbf{x}_b) + O(h^3), \quad (3.64)$$

$$\mathbf{u}_t(\mathbf{x}_{I2}) = \mathbf{u}_t(\mathbf{x}_b + 2h\mathbf{n}) = \mathbf{u}_t(\mathbf{x}_b) + 2h \frac{\partial \mathbf{u}_t}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{x}_b) + \frac{4h^2}{2} \frac{\partial^2 \mathbf{u}_t}{\partial \mathbf{n}^2}(\mathbf{x}_b) + O(h^3), \quad (3.65)$$

kde bod \mathbf{x}_b je dán spojnicí \mathbf{x}_f a \mathbf{x}_w ve směru opačném k počítané chybějící distribuční funkci. Jak bylo již uvedeno LBM je metoda druhého řádu v prostoru, a proto je i Taylorův rozvoj v pomocných bodech proveden až do druhého řádu. Pomocné body \mathbf{x}_{I1} a \mathbf{x}_{I2} jsou situovány ve vzdálenosti h a $2h$ ve směru normály z bodu \mathbf{x}_b . Volba parametru h je volitelná, ale je vhodné ji nastavit podle kroku sítě jako $h = \delta x$.



Obr. 19: Grafické znázornění principu okrajových podmínek se zadaným třením

Z uvedených Taylorových rozvoju se stanoví vztah pro určení tangenciální rychlosti na stěně podle

$$\mathbf{u}_t(\mathbf{x}_b) = \frac{4\mathbf{u}_t(\mathbf{x}_{I1}) - \mathbf{u}_t(\mathbf{x}_{I2}) - 2\delta x \frac{\partial \mathbf{u}_t}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{x}_b)}{3}. \quad (3.66)$$

Druhým krokem pro realizaci Neumannovy okrajové podmínky je určení tangenciálních rychlostí v bodech \mathbf{x}_{I1} a \mathbf{x}_{I2} . Pro udržení druhého řádu přesnosti je nutné tyto hodnoty určit na základě interpolace druhého řádu. To výrazně zvyšuje náročnost výpočtu v okrajových uzlech obzvláště při paralelním počítání, protože je k tomu potřeba informace od sousedů sousedních uzlů. Ve [59] je ve 2D navržen způsob, jak provést interpolaci druhého řádu pouze pomocí jedné vrstvy sousedních uzlů. K tomu je použita informace o lokálních gradientech, kterou je možno získat z nerovnovážných částí distribučních funkcí.

Posledním krokem je pomocí interpolované rychlosti na stěně $\mathbf{u}_t(\mathbf{x}_b)$ implementovat některou z Dirichletových okrajových podmínek popsanych výše.

Na závěr tohoto odstavce poznamenejme, že je možné pro určení tangenciální rychlosti na stěně použít lineární interpolaci, která je dána rovnicí

$$\mathbf{u}_t(\mathbf{x}_b) = \mathbf{u}_t(\mathbf{x}_{I1}) - \delta x \frac{\partial \mathbf{u}_t}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{x}_b). \quad (3.67)$$

Lineární interpolace výrazně snižuje výpočtové nároky na formulaci okrajových podmínek, především při paralelním výpočtu. Avšak je nutno přijmout jistou nepřesnost, způsobenou vznikem numerické viskozity, která degraduje lattice Boltzmannovo schéma.

4 Large Eddy Simulation

Chladivo jaderného reaktoru je pod velkým tlakem a pohybuje se s relativně velkou rychlostí, tudíž s velkým Reynoldsovým číslem v řádech 10^5 . Z tohoto důvodu má proudění uvnitř palivového souboru turbulentní charakter.

Koncepčně nejjednodušším přístupem řešení turbulentního proudění je přímé modelování, založené na přímém řešení klasických Navierových-Stokesových rovnic a jejich rozřešení až do nejmenších měřítek. Tato metoda, nazývána také DNS, je velmi výpočtově náročná a pro většinu praktických úloh nepoužitelná. V současnosti nejpoužívanějším přístupem pro simulaci turbulentního proudění jsou metody typu RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes). Základním principem těchto metod je tzv. Reynoldsovo průměrování a následný rozklad řešených veličin na složku v čase průměrnou a flukтуаční

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{u}'(\mathbf{x}, t), \quad (4.1)$$

kde platí

$$\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) = \int_0^T \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) dt \quad \text{a} \quad \bar{\mathbf{u}}'(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (4.2)$$

Reynoldsovo průměrování je pak aplikováno na Navierovy-Stokesovy rovnice a ty jsou poté řešeny pro v čase průměrné veličiny. Výsledkem RANS simulace je tedy v čase průměrné veličiny.

V této práci se budeme zabývat metodou modelování turbulence zvanou Large Eddy Simulation, kde jsou velké víry reprezentovány přímo, zatímco malé víry jsou modelovány. Z hlediska výpočetní náročnosti je tedy metoda LES někde mezi metodami RANS a DNS. Protože turbulentní útvary velkých měřítek jsou reprezentovány přímo, lze od metody LES očekávat větší přesnost než od metody RANS právě pro případy proudění, v nichž jsou útvary velkých měřítek silně nestacionární. Metoda DNS je výpočetně velmi náročná a převážná většina času se spotřebuje právě na rozřešení velice malých disipativních vírů i přesto, že většina energie a anizotropie turbulencí je obsažena ve vírech velkých měřítek. Metoda LES právě tyto velké víry, které jsou ovlivněny geometrií, a tudíž nejsou univerzální, reprezentuje explicitně a vliv turbulentních vírů nejmenších měřítek, jenž mají až na výjimky univerzální charakter, modeluje. Nedochozí k přímé reprezentaci malých vírů, a proto je tedy metoda LES o poznání méně výpočetně náročná než metoda DNS.

Hlavní myšlenka metody LES spočívá v separaci energie obsažené ve vírech velkých měřítek od malých disipativních vírů. Tato separace se provede pomocí filtrace rychlostního

pole. Po této filtraci velká měřítka, tj. nízké prostorové frekvence, zůstanou zachována a útvary malých měřítek (vysoké prostorové frekvence) se tímto odstraní. Řeší se tedy filtrované Navierovy-Stokesovy rovnice, kde rychlostní pole je rozloženo na filtrované a flukтуаční složky rychlosti.

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) + \acute{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t), \quad (4.3)$$

kde platí

$$\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) = G * \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \int G(\mathbf{r}, \mathbf{x}, \Delta) \mathbf{u}(\mathbf{x} - \mathbf{r}, t) d\mathbf{r}. \quad (4.4)$$

Funkce $G(\mathbf{r}, \mathbf{x}, \Delta)$ se nazývá jádrem filtru, kde parametr Δ je tzv. šířka filtru. Velikost toho parametru definuje oblasti malých měřítek, která budou modelována, a tedy velmi ovlivňuje přesnost řešení. Čím větší tato šířka bude, tím větší bude oblast malých měřítek odseparovaných od původního pole rychlostí. Modelování odseparovaných malých vírů se provádí pomocí tzv. *subgridních modelů*. Název subgridní vznikl z neschopnosti postihnout tyto útvary vysokých frekvencí rozlišením výpočetní sítě, a protože šířka buňky se často pokládá ekvivalentní šířce filtru Δ .

4.1 Smagorinského subgridní model

Smagorinského model [5] je prvním subgridním modelem a vychází z předpokladu, že nejmenší víry v proudu je možné považovat za izotropické. Model uvažuje, že subgridní tenzor napjatosti je úměrný tenzoru napjatosti $\bar{\mathbf{S}}_{ij}$, počítaného pomocí rozřešené oblasti proudu

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right). \quad (4.5)$$

Konstanta úměrnosti mezi těmito dvěma tenzory je tzv. kinematická subgridní viskozita ν_t

$$\nu_t = (C_s \Delta)^2 |\bar{\mathbf{S}}|, \quad (4.6)$$

kde

$$\bar{\mathbf{S}} := \sqrt{2\mathbf{S} : \mathbf{S}}. \quad (4.7)$$

Subgridní viskozita ν_t je závislá na tzv. Smagorinského konstantě C_s . Hodnota této konstanty závisí na řadě faktorů a neexistuje žádná univerzální hodnota použitelná pro všechny případy proudění.

4.2 Implementace LES do LBM

Při odvození LES pro metodu LBM je nutné, pro udržení základních principů LES, zavést filtrovanou distribuční funkci. Tu zavádíme následujícím předpisem

$$\bar{f}_\alpha(\mathbf{x}, t) = \int f_\alpha(\mathbf{x}, t) G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') d\mathbf{x}'. \quad (4.8)$$

Uvedený integrální filtr v předchozí rovnici použijeme na celou lattice Boltzmannovu rovnici, viz rovnice (3.30), a dostaneme

$$\int [f_\alpha(\mathbf{x} + \xi_\alpha \delta t, t + \delta t) - f_\alpha(\mathbf{x}, t) = S_\alpha(t, \mathbf{x})] G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') d\mathbf{x}', \quad (4.9)$$

Filtrace levé strany rovnice (4.9) je triviální. Problém nastává v případě, chceme-li aplikovat filtr na kolizní parametr, nebo na rovnovážnou hodnotu distribuční funkce na pravé straně rovnice. Proto se předpokládá, že filtrované hodnoty distribučních funkcí se budou blížit k lokálně filtrovaným rovnovážným hodnotám distribučních funkcí, které jsou voleny pouze v závislosti na filtrovaných makroskopických hodnotách. Tedy na místo

$$\overline{f_\alpha^{eq}}(\mathbf{x}, t) = \int f_\alpha^{eq}(\mathbf{x}, t) G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') d\mathbf{x}', \quad (4.10)$$

použijeme předpis pro výpočet equilibria jako v rovnici (3.37), nebo podle rovnic (3.45)-(3.51), s tím rozdílem, že makroskopické hodnoty v použitých vzorcích budou filtrované.

Stejně, jak bylo popsáno výše, i zde se zavádí tzv. subgridní (turbulentní) složka viskozity. Tato složka viskozity má vliv na relaxaci v kolizní části algoritmu a může být různá v každém bodě výpočtové oblasti.

Pro Smagorinského model je považována za konstantu úměrnosti mezi tenzorem napjatosti počítaným z filtrovaných složek rychlostí a subgridním tenzorem napjatosti a je určena z rovnice (4.6). K určení celkové viskozity v daném bodě a čase je tato turbulentní složka přičtena k molekulární, která je dána fyzikálními vlastnostmi média

$$\nu = \nu_t + \nu_m. \quad (4.11)$$

Určení míry relaxace je poté dáno podle rovnice (3.38) pro LBR-BGK, popřípadě (3.52) pro LBR-MRT.

4.3 Turbulentní okrajové podmínky

Při výpočtech turbulentního proudění pomocí metody velkých vírů je nutné se důkladněji zabývat okrajovými podmínkami na stěnách výpočtové oblasti. Turbulentní chování v mezní

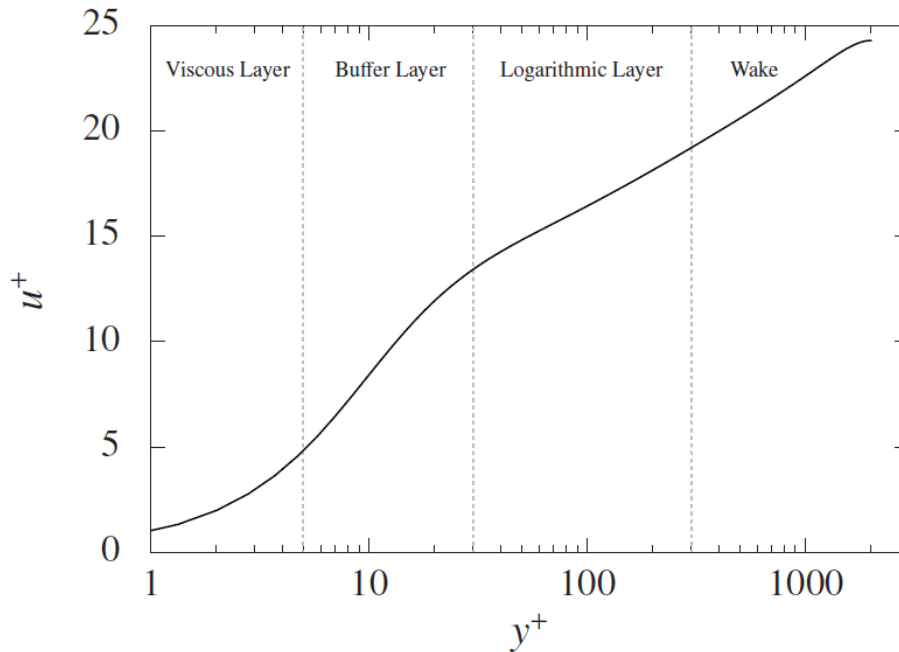
vrstvě významně ovlivňuje některé důležité charakteristiky proudění, jako je například třecí odporový součinitel, či tepelný tok z okolí. Tento odstavec tedy popisuje způsob, jak implementovat vhodné okrajové podmínky pro řešení LES pomocí metody LBM.

Nejprve, pro pochopení požadavků na formulaci okrajových podmínek pro LES, uvedeme základní charakteristiky turbulentní mezní vrstvy.

4.3.1 Turbulentní mezní vrstva

Na obr. 20 je uveden graf, popisující průměrný rychlostí profil, který je získán DNS výpočtem turbulentního proudění kanálem. Graf zobrazuje závislost bezrozměrné rychlosti u^+ na bezrozměrné vzdálenosti od stěny y^+ , kde

$$u^+ = \frac{\langle u \rangle}{u_\tau}, \quad y^+ = \frac{y u_\tau}{\nu}, \quad u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}. \quad (4.12)$$



Obr. 20: Turbulentní mezní vrstva

Celkové smykové napětí τ_{total} se skládá z viskózní τ_v a Reynoldsovo τ_R složky napětí, pro které platí vztahy

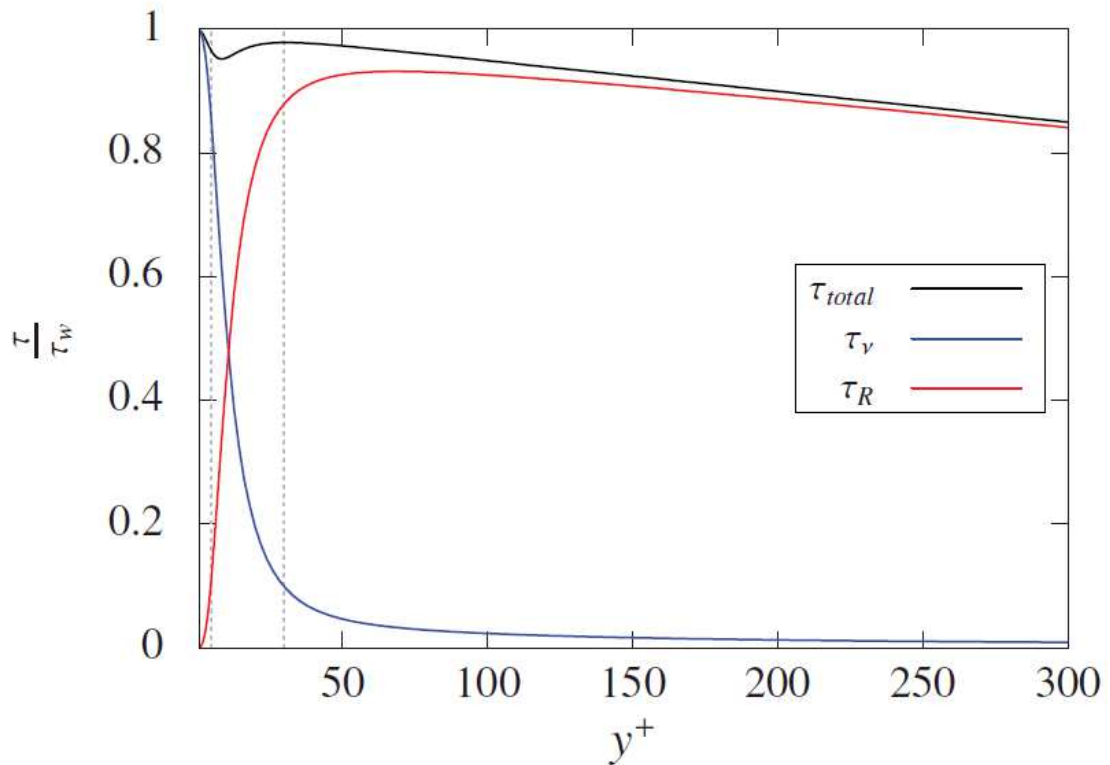
$$\tau_v = \mu \frac{d\langle u \rangle}{dy}, \quad \tau_R = \rho u'v', \quad (4.13)$$

kde u' a v' jsou flukтуаční složky rychlostního vektoru. Poznamenejme, že střední rychlost $\langle u \rangle$ a flukтуаční složky plynou z Reynoldsovo dekompozice a nesmí být zaměňovány s filtrováním ve smyslu metody LES. Platí tedy pro ně

$$\langle u(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} u(\mathbf{x}, t) dt, \quad (4.14)$$

$$u'(\mathbf{x}, t) = u(\mathbf{x}, t) - \langle u(\mathbf{x}) \rangle. \quad (4.15)$$

Na obr. 21 je graf porovnávající příspěvky jednotlivých komponent celkového smykového napětí pro různá y^+ .



Obr. 21: Složky smykového napětí

Bezrozměrný rychlostní profil v grafu na obr. 20 je rozdělen na vnitřní a vnější vrstvu. Vnitřní vrstva se podle hodnoty y^+ dále dělí na regiony:

- Viskózní podvrstva („Viscous Layer“)
 - Tento region je definován pro $y^+ \leq 5$. Viskózní síly od smykového napětí jsou zde dominantní a Reynoldsovo složka napětí může být vůči nim zanedbána, viz obr. 21. V této oblasti je tedy možné předpokládat platnost závislosti (tzv. „lin law“)

$$u^+ = y^+. \quad (4.16)$$

- Tlumící podvrstva („Buffer Layer“)
 - Tento region je definován pro $5 < y^+ \leq 30$ a je charakteristický rychlým utlumováním turbuletních vírů. Viskózní síly i Reynoldsovo napětí v této oblasti

přispívá k výsledné hodnotě smykového napětí. Podle [57] je možné závislost bezrozměrné rychlosti popsat následovně (tzv. „buffer law“)

$$u^+ = A \cdot \ln(y^+) + B, \quad (4.17)$$

kde konstanty jsou rovny $A = 5,0$ a $B = -3,05$.

- Logaritmická podvrstva („Logarithmic Layer“)
 - Tento region je definován je pro $30 < y^+ \leq y_{max}^+$, přičemž horní mez y_{max}^+ závisí na hodnotě Reynoldsova čísla. Tato oblast je charakteristická lineární závislostí růstu velikosti turbulentních útvarů na vzdálenosti od stěny. Celkové smykové napětí je zde ovlivněno především Reynoldsovo složkou. Platí zde závislost (tzv. „log law“)

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(y^+) + B, \quad (4.18)$$

kde konstanta κ je tzv. „Karmanova konstanta“ a je obvykle rovna 0,41. Konstanta $B = -5,5$.

V oblasti vnější vrstvy je možné viskózní efekty zcela zanedbat.

Pro korektní výpočet rychlostního gradientu v mezní vrstvě je potřeba mít první uzel umístěn v oblasti viskózní podvrstvy. Z tohoto předpokladu a z numerické praxe je doporučeno mít první uzel výpočtové sítě ve vzdálenosti $y^+ \sim 1$.

4.3.2 Stěnové funkce

Jak jsme uvedli v předchozím odstavci, požadavky na správné rozřešení rychlostního gradientu v blízkosti stěn jsou velmi vysoké a podstatně limitují použití LES pro proudění s vysokými Re . Podmínka vzdálenosti prvního uzlu na stěně $y^+ \sim 1$ způsobuje při generaci sítě obrovské množství uzlů, či vznik příliš velké hodnoty poměru vzdáleností sousedních uzlů v jednotlivých osách, s následným snížením numerické přesnosti.

V inženýrské praxi se proto mezní vrstva modeluje. První uzel na stěně se poté umísťuje do logaritmické podvrstvy, čímž je ušetřeno obrovské množství výpočetních uzlů. Jak jsme uvedli výše, rozdělením vnitřní vrstvy na jednotlivé podvrstvy formulujeme funkční závislosti mezi u^+ a y^+ . Protože obě veličiny jsou závislé na $\langle \tau_w \rangle$, tyto předpoklady poskytují potřebnou korelaci $\langle \tau_w \rangle = \mathcal{F}(\langle u \rangle, y, \dots)$, která je známá jako stěnová funkce. Vzhledem k definici uvedené výše jsou závislosti, platné pouze pro průměrnou bezrozměrnou rychlost u^+ a průměrnou bezrozměrnou vzdáleností y^+ . Při výpočtu LES ale potřebujeme závislost

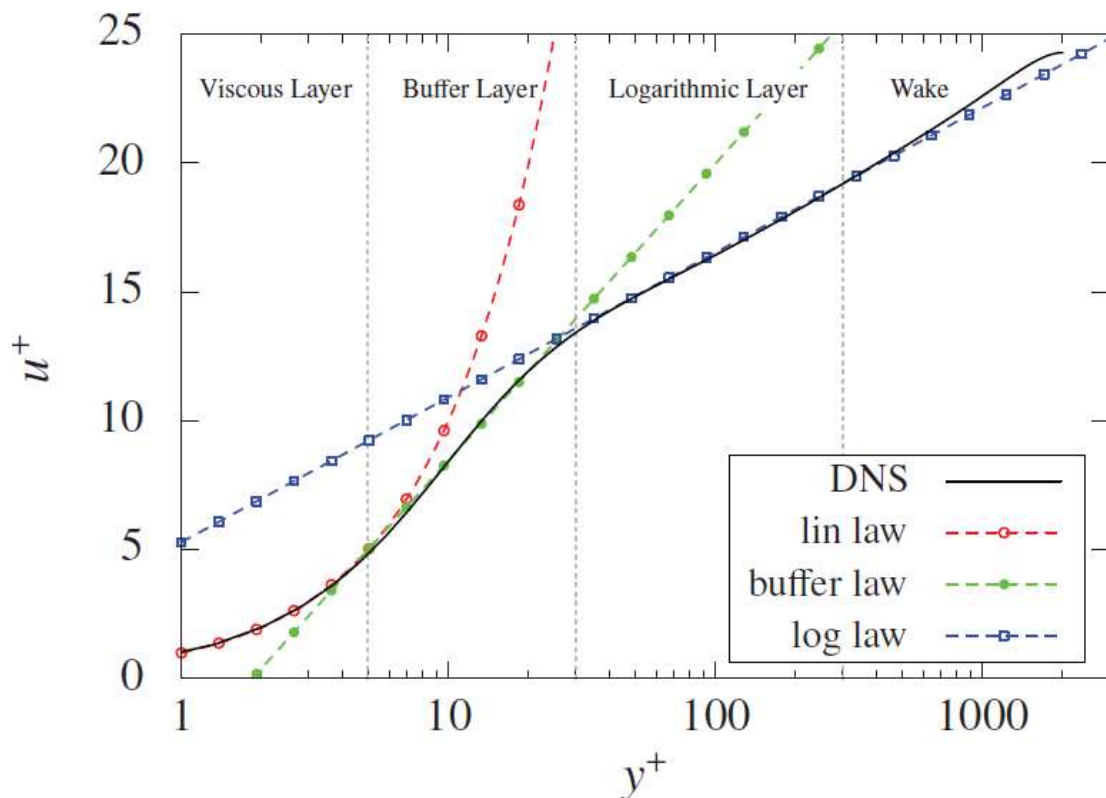
okamžitých veličin u^+ a y^+ . Werner a Wengle [61] uvádí, že stěnové funkce jsou platné i pro okamžité veličiny. V odpovídajících vztazích tedy pouze nahradíme $\langle u \rangle$ a $\langle \tau_w \rangle$ za u a τ_w . Dále stěnové funkce vrací pouze absolutní hodnotu smykového napětí na stěně. Pro specifikaci směru je využit směr tangenciální rychlosti [61]

$$\tau_w = \frac{u_t}{|u_t|} \tau_w. \quad (4.19)$$

Při řešení komplexních úloh proudění není vždy možné splnit podmínku umístění prvních uzlů na stěně v logaritmické podvrstvě. Pro platnost stěnových funkcí i pro případ, kdy první uzel se nachází ve viskózní, či tlumící podvrstvě je vhodné definovat tuto závislost po částech. Z předchozích vztahů obdržíme

$$u^+ = \begin{cases} y^+, & y^+ \leq 5, \\ 5 \cdot \ln(y^+) - 3,05, & 5 < y^+ \leq 28,178, \\ \frac{1}{\kappa} \ln(y^+) + 5,5, & y^+ > 28,178. \end{cases} \quad (4.20)$$

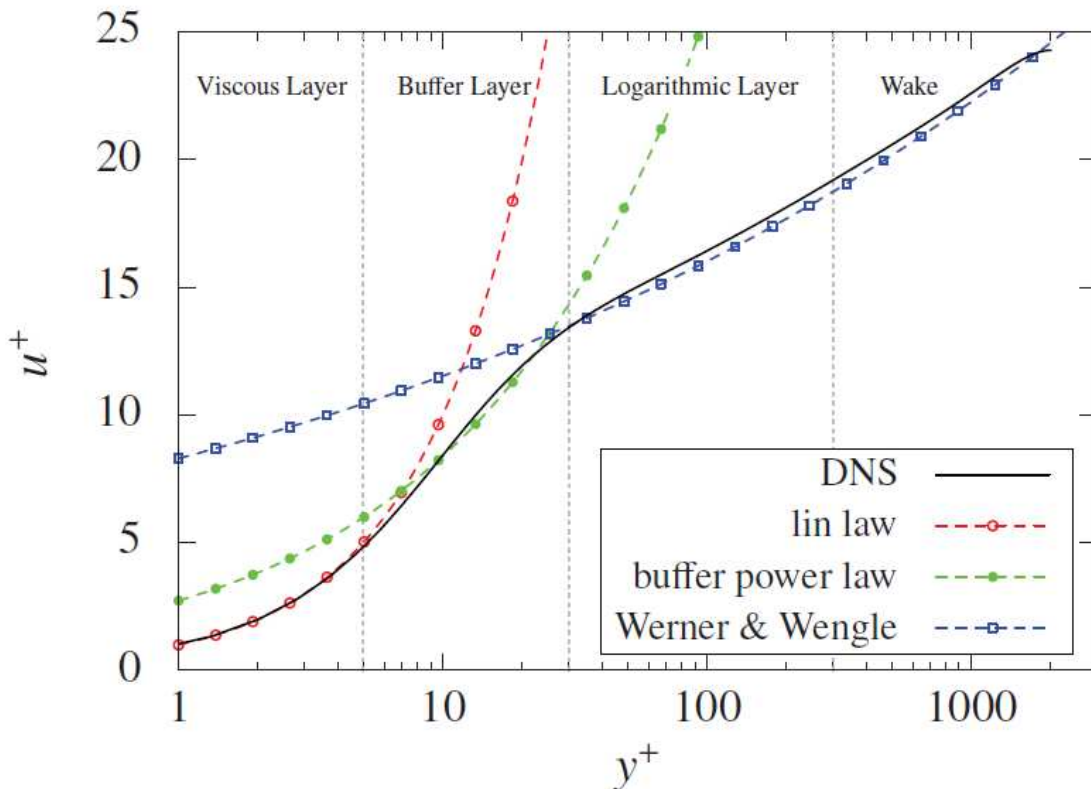
Na obr. 22 je uvedeno porovnání rychlostního profilu získaného dosazením do stěnových funkcí s rychlostním profilem daným výpočtem DNS.



Obr. 22: Porovnání stěnových funkcí s výpočtem DNS – log law

Werner a Wengle [61] navrhuji použití tvz „power law“ pro aproximaci rychlostního profilu v logaritmické podvrstvě. Matematicky je tato závislost vyjádřena jako $u^+ = A \cdot y^{+B}$, kde A a B jsou konstanty. Po rozdělení této funkce do tří vrstev dostaneme, viz obr. 23

$$u^+ = \begin{cases} y^+, & y^+ \leq 7,1, \\ 2,73247y^{+0,487215}, & 7,1 < y^+ \leq 25,19, \\ 8,3y^{+1/7}, & y^+ > 25,19. \end{cases} \quad (4.21)$$



Obr. 23: Porovnání stěnových funkcí s výpočtem DNS – power law

Rozdíl „power law“ oproti DNS je lehce vyšší než pro „log law“, ale je zde výhoda možnosti explicitního vyjádření τ_w z rovnice (4.21). Není tedy zapotřebí iteračního přístupu a dalších zjednodušování, proto je tento přístup implementován v našem programu.

Pokud je první uzel na stěně umístěn v logaritmické podvrstvě, znamená to, že všechny turbulentní útvary pod touto vzdáleností budou modelovány. Protože je známo, že pro korektní řešení LES musí být alespoň 80% turbulentní kinetické energie řešeno přímo, není toto kritérium v prvním bodě splněno. Aby se předešlo tomuto nedostatku, je v prvním uzlu použit přístup nestacionárních RANS. Více informací k tomuto je k nalezení v [62].

Nestacionární RANS přístup vyžaduje jiné předpoklady. Opět je zde užita myšlenka turbulentní viskozity, ale ne pro modelování subgridního tenzoru napjatosti, ale pro tenzor

Reynoldsových napětí. Turbulentní viskozita bude v blízkosti stěny tedy určena modelem zvaným „mixing length“ daným vztahem

$$\nu_t = (\kappa y)^2 \left| \frac{\partial u}{\partial y} \right|, \quad (4.22)$$

kde κ je tzv. „Karmanova konstanta“ obvykle rovna 0,41 a y je vzdálenost od stěny. Derivaci rychlosti z důvodu hrubé sítě v mezní vrstvě není možné počítat přímo, proto ji určíme ze stěnové funkce (4.21). Pouhým dosazením tedy dostaneme vztah pro výpočet turbulentní viskozity v blízkosti stěny následovně

$$\nu_t = \kappa^2 AB \frac{u_\tau^{B+1}}{\nu^B} y^{B+1}, \quad (4.23)$$

kde konstanty A a B jsou stejné jako v rovnici (4.21).

Na závěr této kapitoly zde uvedeme ještě explicitní vyjádření u_τ z rovnice (4.21).

$$u_\tau = \begin{cases} \sqrt{\frac{u_\tau \nu}{h}}, & y^+ \leq 7,1, \\ \left[\frac{u_\tau}{2,73247(h/\nu)^{0,487215}} \right]^{1/1,487215}, & 7,1 < y^+ \leq 25,19, \\ \left[\frac{u_\tau}{8,3(h/\nu)^{1/7}} \right]^{7/8}, & y^+ > 25,19. \end{cases} \quad (4.24)$$

Ze známé hodnoty u_τ pak snadno určíme z rovnice (4.12) hodnotu smykového napětí τ_w , které do modelu implementujeme pomocí okrajové podmínky se zadaným třením, viz odstavec 3.7.3.

5 Regularizace a stabilizace

Hranice stability lattice Boltzmannovy metody je mimo jiné dána vznikem nežádoucích oscilací. Tyto mohou vznikat v okolí ostrých gradientů, způsobené například rázovými vlnami či nespojitostmi v okrajových podmínkách. Tyto jevy jsou analogické oscilacím popsaných tzv. Gibbsovo jevem. Dalším typem nestability mohou být jevy zvané „*salt and peper noise*“ nebo „*speckel noise*“. Tyto typy poruch jsou typické například i v problémech analýzy obrazu.

Tyto disperzní oscilace představují problém zejména pro úlohy s vysokými Reynoldsovými čísly, kde není z důvodu velké výpočetní náročnosti mnohdy možné použití dostatečně jemné sítě. Navíc pro nelineární systémy a výpočty rázových vln dostatečně zjemnění sítě nezaručuje konvergenci ke správnému řešení. Tyto problémy se vyskytují i v úlohách v oblasti simulace proudění chladiva v palivových souborech. Vznik takových oscilací může způsobit úplnou divergenci úlohy, popřípadě naruší řešení natolik, že dojde k nečitelnosti výsledných hodnot.

Popsané problémy stability se vyskytují i ve většině metod v oblasti výpočtové dynamiky tekutin. Již v roce 1959 Godunov formuloval následující větu:

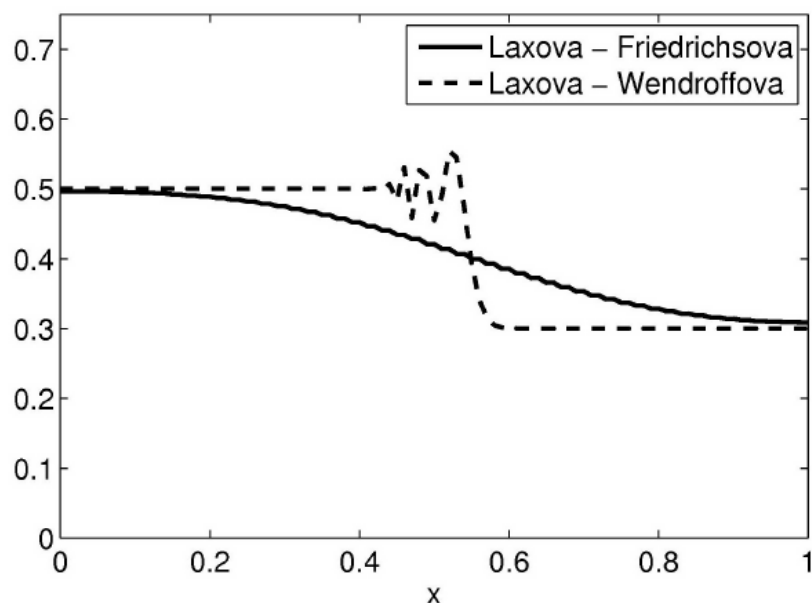
Lineární monotónní numerické schéma určené pro řešení počáteční úlohy je maximálně prvního řádu přesnosti.

Věta říká, že neexistuje lineární monotónní diferenční schéma vyššího řádu přesnosti, než prvního (v čase i prostoru).

Metody prvního řádu mají výhodu v jednodušší implementaci a také v tom, že zachovávají monotonii řešení a neprodukují další lokální extrémy oproti přesnému řešení. Numerické simulace ukazují, že schémata prvního řádu přesnosti v sobě obsahují příliš mnoho umělé vazkosti a jsou tedy pro praktické výpočty nevhodná.

Metody druhého řádu se vyznačují vyšší přesností v místech, kde je řešení hladké. V případě nespojitého řešení však tyto metody produkují umělé oscilace, které přesné řešení neobsahuje, viz obr. 24.

Cílem je tedy sestavit metodu, která bude vyššího řádu v bodech, ve kterých je řešení hladké a zároveň bude dostatečně přesně aproximovat řešení v bodech nespojitosti mimo jiné také tak, že nebude produkovat umělé oscilace. Takové metody se nazývají metody s vysokým rozlišením.



Obr. 24: Porovnání řešení šíření rázové vlny Laxovo-Friedrichsovo metodou prvního řádu přesnosti s Laxovo-Wendroffovo metodou druhého řádu přesnosti

Například jeden ze způsobů konstrukce metody s vysokým rozlišením může být přidání tzv. korekčních toků k metodě prvního řádu. Tyto korekční toky v místech s hladkým řešením způsobí, že se zvýší řád přesnosti, zatímco v místech nespojitosti se jejich vliv na řešení bude blížit nule a metoda tak zůstane pouze prvního řádu a nebude vytvářet nežádoucí oscilace.

Při konstrukci metod vyšších řádů hraje klíčovou roli tzv. omezovací funkce (limiter) ϕ . Je definována jako funkce podílu po sobě jdoucích diferencí, viz rovnice 22, a je mírou lokální hladkosti řešení.

Myšlenka limiterů může být ilustrována v 1D výpočtem toku konzervativní veličiny u mezi výpočetním uzlem označeným 0 a jedním z jeho sousedních uzlů označenými ± 1 následovně

$$F_{0,1} = (1 - \phi(r))f_{0,1}^{low} + \phi(r)f_{0,1}^{high}, \quad (5.1)$$

kde $f_{0,1}^{low}$, $f_{0,1}^{high}$ jsou toky nižšího a vyššího řádu přesnosti. Funkce r je definována jako

$$r = \frac{u_0 - u_{-1}}{u_1 - u_0}. \quad (5.2)$$

Je zřejmé, že pro r blízké 1 je hodnota limiteru také blízká 1.

V posledních dvou desetiletích bylo prezentováno mnoho typů limiterů [36]. Obecně nelze říci, že nějaký z limiterů pracuje lépe pro všechny problémy a je potřeba vždy pomocí testovacích úloh vybrat ten nejvhodnější. Pro příklad zde uvedeme některé používané v metodách konečných objemů, konečných prvků, či konečných diferencí, známých jako *flux limiters* [4,21,29].

$$\phi_{mm}(r) = \max[0, \min(r, 1)], \text{ (minmod [111])}, \quad (5.3)$$

$$\phi_{os}(r) = \max[0, \min(r, \beta)], \text{ (} 1 \leq \beta \leq 2 \text{), (Osher [111])}, \quad (5.4)$$

$$\phi_{sb}(r) = \max[0, \min(2r, 1), \min(r, 2)], \text{ (superbee [111])}. \quad (5.5)$$

Protože lattice Boltzmannova metoda pracuje s polem distribučních funkcí, můžeme sestavit velmi jednoduché limitory. Ty, které používáme pro regularizaci LBM v této práci patří do skupiny tzv. entropických limiterů a jsou obdobou klasických limiterů toku (*flux limiters*). Jejich základní princip je popsán v následujícím odstavci. Entropické limitory pro LBM ve své podstatě dělají stejnou věc, jako limitory toku v metodě konečných diferencí, konečných objemů nebo konečných prvků. Rozdílem je, že pro LBM je hlavní myšlenkou omezení skalární veličiny (tzv. nerovnovážné entropie), místo vektorových, či tenzorových prostorových derivací.

Alternativou, jak předejít nežádoucím oscilacím v LBM, je použití entropické lattice Boltzmannovy metody (ELBM). ELBM byla poprvé použita v roce 1998. V tomto přístupu je kolizní operátor modifikován tak, aby splnil podmínku kladného přírůstku entropie a tedy respektoval druhý termodynamický zákon. Základní rozdíl od použití entropických limiterů je provedení regularizace v každém uzlu výpočtové oblasti. Při použití entropických limiterů pracujeme pouze přibližně s 1 % buněk, které jsou vybírány podle předepsaných kritérií.

Účelem filtrace a regularizace je ponechat nízkofrekvenční charakteristiky proudění a přitom eliminovat vysokofrekvenční oscilace.

5.1 Entropická filtrace

Entropická filtrace je nástroj, kterým se mění míra relaxace, tak aby byly potlačeny nefyzikální oscilace. Slovo entropický je zde z důvodu použití diskrétní entropické funkce jako indikátoru nestabilní oblasti v proudění. Zjednodušeně lze říci, že entropická filtrace využívá stejné metodiky jako ELBM, ale za jiným účelem. Kolize je modifikována tak, aby v systému byl zajištěn kladný přírůstek entropie a to s ohledem na zvolenou entropickou funkci. Pro filtrování jsou použity stejné entropické funkce jako pro ELBM, ale pouze pro stanovení vzdálenosti od rovnovážného stavu. Smyslem kvantifikování této vzdálenosti je následné přiblížení v místech, kde je příliš velká. Poznamenejme, že z důvodu aplikování filtrační techniky pouze lokálně, nemusí být, na rozdíl od ELMB, všude splněna podmínka kladného přírůstku entropie.

Většina entropických limiterů pro LBM je založená na reprezentaci distribuční funkce ve formě

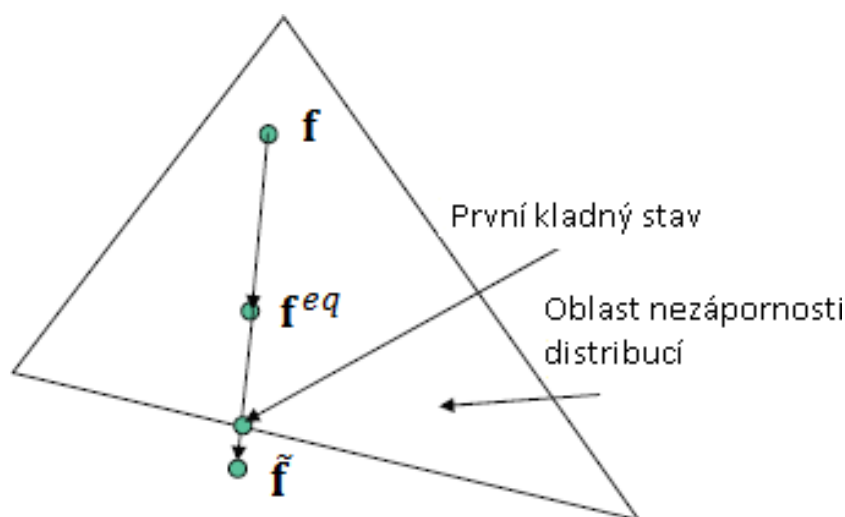
$$\mathbf{f} = \mathbf{f}^{eq} + \|\mathbf{f} - \mathbf{f}^{eq}\| \frac{\mathbf{f} - \mathbf{f}^{eq}}{\|\mathbf{f} - \mathbf{f}^{eq}\|}, \quad (5.6)$$

kde \mathbf{f} sloupcový vektor všech distribučních funkcí odpovídající mikroskopickým rychlostem definovaných voleným rychlostním modelem a \mathbf{f}^{eq} je vektor jejich rovnovážných stavů. Rozdíl $\mathbf{f} - \mathbf{f}^{eq}$ tedy představuje nerovnovážnou část distribučních funkcí a $\|\mathbf{f} - \mathbf{f}^{eq}\|$ je její norma (ve většině případů entropická). Limitery mění hodnotu této normy, ale ponechávají stejné makroskopické hodnoty. Limitery transformují distribuční funkce následovně

$$\mathbf{f} \rightarrow \mathbf{f}^{eq} + \phi \times (\mathbf{f} - \mathbf{f}^{eq}), \quad \phi > 0. \quad (5.7)$$

Ještě, než se zaměříme na jednotlivé typy entropických limiterů, uvedeme pro příklad lokální filtraci velmi jednoduchý limiter, který pracuje na principu zachování kladnosti distribučních funkcí [6,27,37]. Aplikuje se na výpočtové uzle, které mají některé z diskrétních distribučních funkcí $\tilde{\mathbf{f}}$ po kolizní části algoritmu záporné. Sada distribučních funkcí v tomto bodě se poté upraví tak, že se nahradí prvním stavem se všemi kladnými hodnotami distribucí při pohybu po přímce, viz obr. 27

$$\{\lambda \mathbf{f} + (1 - \lambda) \mathbf{f}^{eq} | \lambda \in \mathbf{R}\}. \quad (5.8)$$



Obr. 25: Ilustrace pravidla kladných hodnot

Tato technika zajišťování nezápornosti distribucí se nazývá pravidlo kladných hodnot. Jinými slovy toto pravidlo poměruje výraz $\mathbf{f} - \mathbf{f}^{eq}$ a považuje tuto vzdálenost od rovnovážné hodnoty za přijatelnou, pokud jsou všechny distribuce v \mathbf{f} nezáporné.

Entropický přístup pro filtrování nežádoucích oscilací tedy probíhá v místech, kde

nastane příliš velká hodnota nerovnovážné entropie, která je definována pro každý výpočtový uzel následujícím předpisem

$$\Delta S = S(\mathbf{f}^{eq}) - S(\mathbf{f}). \quad (5.9)$$

Protože ne každý matematický model lattice Boltzmannovy metody je entropický jako ELBM, je nutné pro sestavení entropických limiterů definovat vztah mezi entropií a neentropickými rovnovážnými stavy distribučních funkcí. K tomu použijeme tzv. Kullbackovu entropii [20]

$$S_K(\mathbf{f}) = -\sum_i f_i \ln\left(\frac{f_i}{f_i^{eq}}\right). \quad (5.10)$$

Pro Kullbackovu entropii platí

$$-S_K = \Delta S. \quad (5.11)$$

Podle rovnice (5.10) a (5.11) je možné vyjádřit nerovnovážnou entropii pomocí standardních polynomiálních rovnovážných distribučních funkcí následovně

$$\Delta S = \sum_i f_i \ln\left(\frac{f_i}{f_i^{eq}}\right). \quad (5.12)$$

Použitelnou aproximací relativní nerovnovážné entropie je kvadratická entropie vyjádřená následovně

$$\Delta S = \sum_i \frac{(f_i - f_i^{eq})^2}{f_i^{eq}}. \quad (5.13)$$

Výhodou je, že tento výraz může být použit bez nutnosti kontroly positivity distribučních funkcí.

5.2 Ehrenfestova regularizace

Jedná se o nejjednodušší limiter založený na entropickém přístupu. Hlavním předpokladem je, že každý výpočtový uzel, ve kterém hodnota nerovnovážné entropie přesahuje předem stanovený práh, je kmitem disperzní oscilace. V takovém uzlu je tudíž vhodné modifikovat míru relaxace pro přiblížení hodnot distribučních funkcí zpět k rovnovážnému stavu a tím snížit nefyzikální výkmit.

$$\mathbf{f} \rightarrow \mathbf{f}^{eq}. \quad (5.14)$$

Tato regularizace distribuční funkce v uzlech s těmito extrémami se přímo nahrazuje jejich rovnovážnými hodnotami. Pokud ale požadujeme udržet nízkofrekvenční charakteristiky proudění, je třeba použít adekvátní *low-pass filter* pro nastavení přípustných hodnot.

5.3 Medián filtr

Během výpočtu některých úloh se mohou vyskytnout problémy stability velmi podobné jevům známých jako „salt and peper noise“ nebo „speckel noise“. Tento typ poruch je typicky pozorovaný v problematice zpracovávání obrazu, kde se projevuje například náhodným výskytem černých a bílých pixelů. Na jeho korekci klasické „low-pass“ filtry, jako je například filtr podle průměrné hodnoty či Gaussovské vyhlazování jsou neúčinné. Nežádoucí hodnoty šumu se totiž mohou významně odchylovat od počáteční či střední hodnoty a výsledná korekce by jimi mohla být významně ovlivněna. Z tohoto důvodu se často a efektivně využívá filtru založeného na hodnotě mediánu. Například velmi často se využívá právě v problematice zpracovávání obrazu, pro vyhlazování signálu a potlačení nežádoucích impulsů.

Nefyzikální hodnoty v okolí výpočtového uzlu, které se velmi odchyľují od průměru, mají na hodnotu mediánu malý vliv. Z tohoto důvodu se jedná o robustnější metodu vyhlazování než klasický průměr, či průměr vážený.

Tento filtr byl úspěšně implementován například pro BGK-LBM v [8]. Filtrování je provedeno úpravou distribučních funkcí po kolizním kroku algoritmu metody. Nejprve určíme ΔS ve všech sousedních uzlech k místu filtrování, které nejsou okrajovými. Následně jejich seřazením podle velikosti a výběrem hodnoty ležící uprostřed této řady je určen medián nerovnovážné entropie ΔS_{med} . Poté stanovíme korekční koeficient opravy distribucí podle rovnice

$$\sigma = \sqrt{\frac{\Delta S_{med}}{\Delta S}}. \quad (5.15)$$

Hodnoty distribučních funkcí v uzlu s vysokou hodnotou nerovnovážné entropie jsou pak přepočteny podle

$$\mathbf{f} \rightarrow \mathbf{f}^{eq} + \sigma(\mathbf{f} - \mathbf{f}^{eq}). \quad (5.16)$$

Hodnotu koeficient σ tedy určuje kvadratická aproximace diskrétního tvaru funkce entropie a vrací hodnoty v silně nerovnovážných oblastech (ve smyslu nerovnovážné entropie) zpět k hodnotě mediánu z jeho sousedů. Z důvodu respektování druhého zákona termodynamiky při filtraci uvažujeme pouze disipativní korekce. Opravy distribučních funkcí jsou tedy provedeny pouze tehdy, je-li $\Delta S_{med} < \Delta S$ a tudíž vyústí v pokles ΔS .

6 Zjemnění výpočetní sítě

Tato kapitola se zabývá způsoby implementace zjemněné sítě do metody LBM. Popíšeme zde dva základní přístupy.

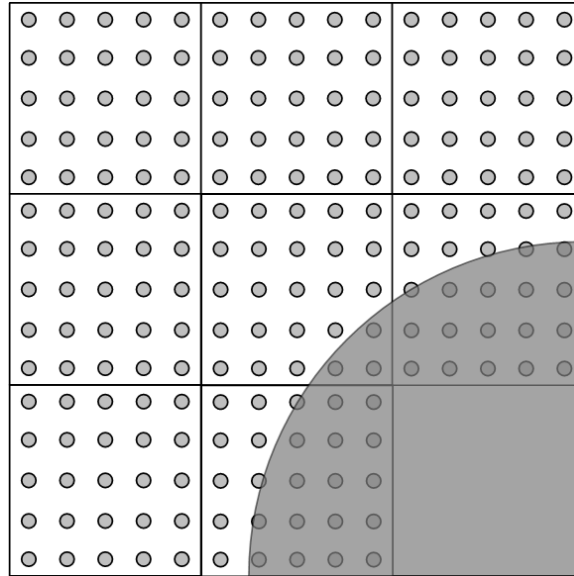
První přístup, lokálně zjemněná síť se stejným koeficientem ve všech třech směrech, je motivována základní potřebou jemné sítě u stěn ve všech třech směrech. Poznamenejme, že tento požadavek se také snaží odstranit různé modifikace a hybridní modely RANS/LES, jak je uvedeno v odstavci 4.3.

Druhým přístupem je implementace neuniformní sítě. Potřeba deformace (natažení, popř. zhuštění) kartézské výpočetní sítě v některém ze tří směrů plyne například z geometrie palivového souboru. Jeho rozměr v axiálním směru je podstatně větší, než v radiálním.

6.1 Hierarchicky zjemněná síť

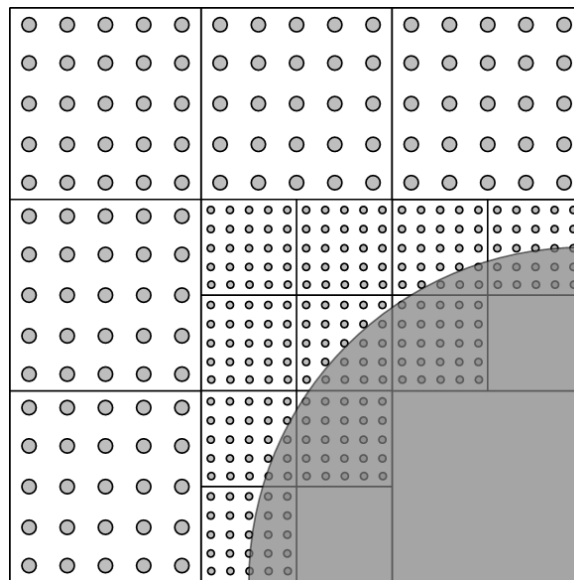
Potřebného rozměru sítě v problematických místech, v našem případě na hranicích výpočetní oblasti, je možno dosáhnout pomocí hierarchického blokového zjemnění. Velkou výhodou této metody je velmi snadná a efektivní následná paralelizace algoritmu. Podle klasifikace v [1] a [23] se jedná o tzv. *multidomain* přístup. Myšlenka rozdělení oblasti do pravidelných bloků byla pro tuto práci motivována článkem [2].

Celá výpočetní oblast je nejprve rozdělena do tzv. bloků tak, aby každý obsahoval stejný počet uzlů ve všech třech směrech, viz obr. 26.



Obr. 26: Ilustrace rozdělení výpočetní oblasti do bloků

V případě, že některý blok obsahuje uzly, které se nacházejí na hranici výpočtové oblasti, je rovnoměrně rozdělen na osm nových bloků. Tyto bloky obsahují stejný počet bodů, jako blok před rozdělením. Rozdílem je poloviční vzdáleností mezi všemi uzly ve všech třech směrech, viz obr. 27. Tento postup opakujeme až k dosažení potřebné úrovně zjemnění výpočetní sítě. Poznamenejme, že veškerá teorie bude popsána, pro jednoduchost, pouze pro dvě úrovně velikosti sítě. Rozšíření na více úrovní lze provést analogickým postupem.



Obr. 27: Ilustrace rozdělení blokového zjemnění okolo stěny výpočtové oblasti

V LBM metodě se pracuje s jednotkami, které jsou dány časovou a prostorovou diskretizací (tzv. mřížkové jednotky). Je tedy zřejmé, že každá úroveň zjemnění má své vlastní jednotky. Omezíme-li se na změnu sítě pouze koeficientem dva a označíme-li indexem

f hodnoty na jemné síti a indexem c na hrubé, bude platit

$$\delta x_f = \frac{\delta x_c}{2}. \quad (6.1)$$

Poznamenejme, že stále pracujeme s rovnoměrnou sítí a tedy $\delta x = \delta y = \delta z$. Pro poměr velikosti časového kroku na jednotlivých úrovních existují dvě základní techniky, které ovládají závislost prostorové a časové diskretizace.

Pro první, tzv. konvektivní techniku, platí $\delta t \approx \delta x$. Jinými slovy, zjemníme-li síť například koeficientem n , stejným koeficientem podělíme i časový krok. Výhodou tohoto přístupu je rychlost a spojitost rychlostního a tlakového pole definovaného v mřížkových jednotkách na hranici různých úrovní.

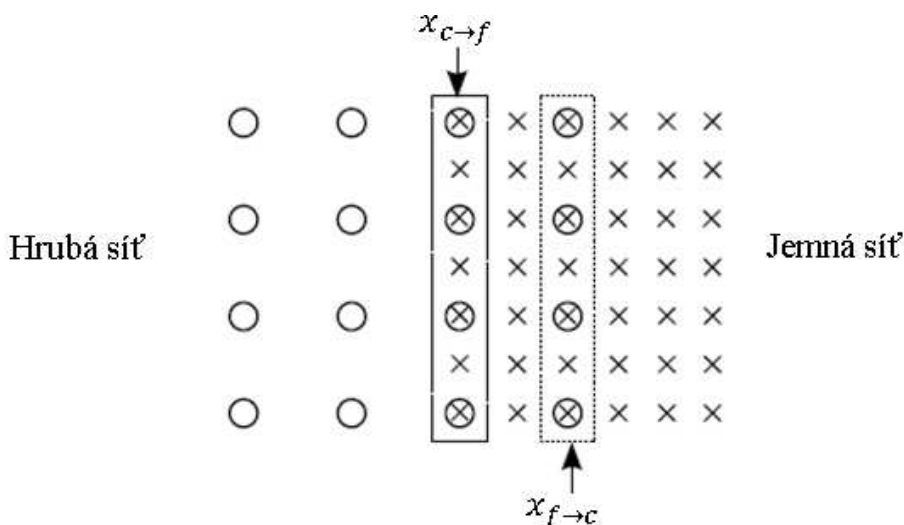
Pro druhou, tzv. difuzní techniku, platí $\delta t \approx \delta x^2$. Výhodou tohoto přístupu je přesnější popis stlačitelnosti. Velkou nevýhodou je její větší výpočtová náročnost.

Pro konvektivní přístup, který je použit v této práci platí

$$\frac{\delta t_f}{\delta x_f} = \frac{\delta t_c}{\delta x_c} = konst., \quad (6.2)$$

a tudíž na jemné síti musí být proveden dvojnásobný počet iterací oproti hrubé.

Na konci propagačního kroku algoritmu jsou na hranicích bloků, stejně jako u okrajových podmínek výpočetní oblasti, viz odstavec 3.7, neznámé hodnoty distribučních funkcí směřujících dovnitř bloku. Tedy je nutné, pro komunikaci mezi dvěma sousedními bloky stejné, popřípadě různé úrovně zjemnění, jistá velikost překrytí sítě na rozhraní bloků. Výměna informací před každým iteračním krokem pak probíhá oboustranně, z jednoho bloku na druhý a naopak. Příklad takového rozhraní pro dvě různé úrovně zjemnění je znázorněn na obr. 28.



Obr. 28: Ilustrace rozhraní dvou sousedících bloků

Body v obr. 28 označené jako $\mathbf{x}_{f \rightarrow c}$ představují hodnoty na rozhraní hrubého bloku, které musí být na konci každého iteračního kroku aktualizovány pomocí hodnot z jemného bloku na odpovídajících místech. Body $\mathbf{x}_{c \rightarrow f}$ jsou hodnoty z jemného aktualizovány hodnotami z hrubého bloku. V následujících odstavcích si podrobněji rozebereme jednotlivé směry aktualizace. Poznamenejme, že jsme využili přístup poprvé prezentovaný v práci [4] s rozdílem, že aktualizace rozhraní je prováděna před kolizní částí algoritmu, viz [1], [25].

6.1.1 Aktualizace rozhraní hrubé sítě

Nadbytečné množství informace reprezentované jemnou sítí v $\mathbf{x}_{f \rightarrow c}$ musí být redukováno při aktualizaci rozhraní bloku s hrubou sítí. Existuje mnoho způsobů filtrace, například v [24], [7]. V této práci, stejně jako v [1] aplikujeme jednoduchý filtr z důvodu přílišné disipace řešení pouze na nerovnovážnou část distribuční funkce f_{α}^{neq} . Pro $d3q19$ je ve tvaru

$$f_{\alpha}^{neq}(\mathbf{x}_{f \rightarrow c}, t) = \frac{1}{19} \sum_{\alpha=0}^{18} f_{\alpha}^{neq}(\mathbf{x}_{f \rightarrow c} + \xi_{\alpha} \delta t, t). \quad (6.3)$$

Po provedení filtrace přebytečné informace do bodu koincidentního s bodem hrubé sítě, je pro dokončení aktualizace rozhraní nutné ještě přepočítat hodnoty distribučních funkcí tak, aby odpovídaly prostorové a časové diskretizaci dané hrubou sítí.

Pro hodnotu distribuční funkce f_{α} na libovolné úrovni zjemnění n platí

$$f_{\alpha, n} = f_{\alpha}^{eq}(\rho, \mathbf{u}) + f_{\alpha, n}^{neq}(\nabla \mathbf{u}). \quad (6.4)$$

Z rovnice (6.4) je zřejmé, že rovnovážná část distribuční funkce je stejná pro všechny úrovně zjemnění. Toto vyplývá z konvektivní závislosti časové a prostorové diskretizace popsané výše a tedy kontinuity makroskopických hodnot na rozhraní různých sítí. Protože nerovnovážná část již závisí na gradientu rychlosti, musí být její hodnota přepočítána pro danou úroveň zjemnění jistým koeficientem. Pro LBR-MRT platí následující vztah, který je odvozen například v [9]

$$\mathbf{f}^c = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{m}^{eq} + \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{S}^c) \mathbf{T}^f (\mathbf{I} - \mathbf{S}^f)^{-1} [(\mathbf{M} \mathbf{f}^f) - \mathbf{m}^{eq}], \quad (6.5)$$

kde \mathbf{f}^c je sloupcový vektor všech devatenácti distribučních funkcí a \mathbf{m}^{eq} jejich momentů v equilibriu. Matice \mathbf{S}^c , popř. \mathbf{S}^f je diagonální relaxační matice hrubé, popř. jemné sítě. Matice \mathbf{T}^f je diagonální, tzv. transformační matice z jemné sítě na hrubou a je pro $d3q19$ ve tvaru

$$T^f = \text{diag} \left(1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, n \frac{s_9^f}{s_9^c}, 1, n \frac{s_9^f}{s_9^c}, 1, n \frac{s_9^f}{s_9^c}, n \frac{s_9^f}{s_9^c}, n \frac{s_9^f}{s_9^c}, 1, 1, 1 \right), \quad (6.6)$$

6.1.2 Aktualizace rozhraní jemné sítě

Při aktualizaci hranice jemného bloku $x_{c \rightarrow f}$ pomocí hodnot z hrubého budeme rozlišovat dva možné případy. Prvním je aktualizace hodnot v bodech jemné sítě, které mají na odpovídajícím místě uzel z bloku na hrubé síti. Pro aktualizaci hodnot v takovém uzlu jsou využity přímo hodnoty v uzlu z hrubé sítě. Problém nastává u druhého případu, kdy uzel jemné sítě nemá odpovídající hodnotu na hrubém bloku. Zde je nutné chybějící informaci na hrubé síti nejprve prostorově interpolovat. Pro třídimenziální případ interpolujeme v rovině hraničních stěn zúčastněných bloků. Jedná se tedy o 2D interpolaci, kterou v této práci provedeme polynomiálně třetího řádu. Například pro rovinu xy dostaneme

$$P(x, y) = \sum_{i=0}^3 \sum_{j=0}^3 a_{ij} x^i y^j, \quad (6.7)$$

Po provedení prostorové interpolace máme pro každý uzel na hranici jemného bloku hodnoty všech distribučních funkcí, které jsou definované v mřížkových jednotkách odpovídající hrubé síti. K dokončení aktualizace rozhraní je tedy nutné přepočítat tyto hodnoty tak, aby odpovídaly prostorové a časové diskretizaci dané jemnou sítí.

Stejně jako pro f^c , je stejným způsobem odvozen vztah pro výpočet hodnot f^f následovně

$$f^f = M^{-1} m^{eq} + M^{-1} (I - S^f) T^c (I - S^c)^{-1} [(M f^c) - m^{eq}], \quad (6.8)$$

kde

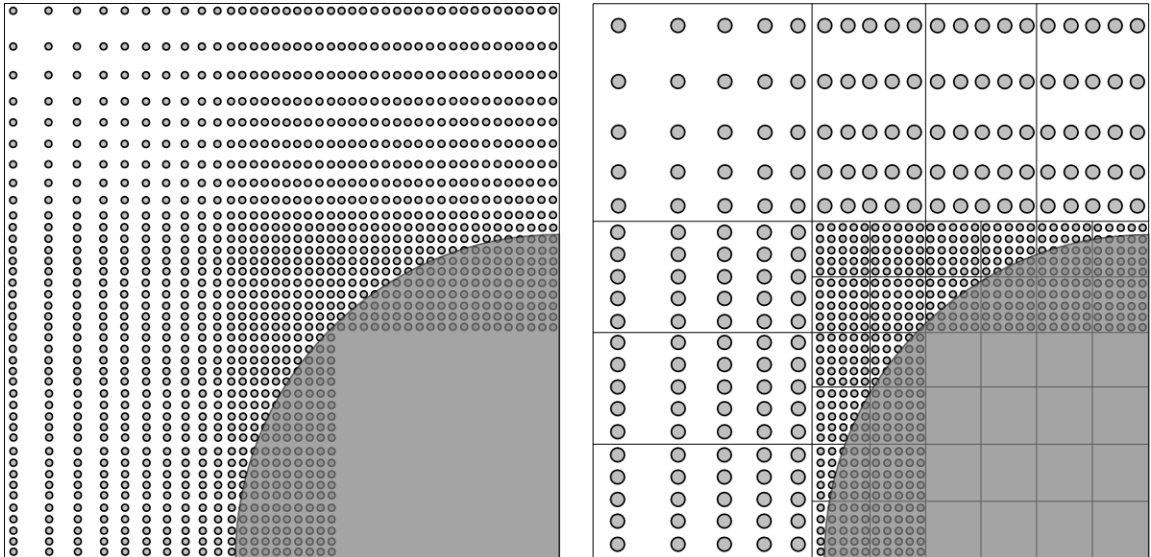
$$T^c = \text{diag} \left(1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, \frac{s_9^c}{ns_9^f}, 1, \frac{s_9^c}{ns_9^f}, 1, \frac{s_9^c}{ns_9^f}, \frac{s_9^c}{ns_9^f}, \frac{s_9^c}{ns_9^f}, 1, 1, 1 \right). \quad (6.9)$$

Z důvodu polovičního časového kroku na jemné síti je pro aktualizaci jejího rozhraní dále nutné provádět časovou interpolaci hodnot hrubé sítě. V této práci používáme jednoduchou lineární interpolaci.

6.2 Neuniformní síť

Lattice Boltzmannova metoda je definována pouze pro použití na pravidelné síti. Pro výpočet proudění v palivovém souboru a i pro většinu jiných aplikačních úloh je nutné použití

neuniformní výpočetní síť. Na obr. 29 je vlevo příklad použití neuniformní výpočetní sítě pro dosažení přesnějšího popisu mezní vrstvy na stěně objektu. Na pravé straně obrázku je příklad takové sítě po rozdělení oblasti do bloků, viz odstavec 6.1.



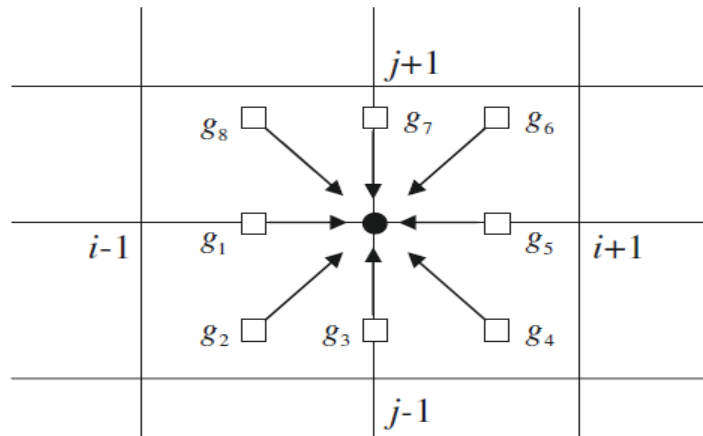
Obr. 29: Příklad nerovnoměrné sítě a následného rozdělení oblasti do výpočetních bloků

Pro tuto problematiku byly vyvinuty různé metody, viz [26] ÷ [29]. V této práci jsme použili metodu zvanou ISLMB (Interpolation supplemented LBM) s lagrangeovou interpolací, která je, v současném stavu vývoje výpočtu LBM na nerovnoměrné síti, výpočetně a implementačně nejméně náročná, viz [27], [30]. Rozepíšeme-li lattice Boltzmannovu rovnici (3.30) následovně

$$f_\alpha(t, \mathbf{x}) = g_\alpha(t - \Delta t, \mathbf{x} - \xi_\alpha \Delta t) v = v_t + v_m, \quad (6.10)$$

$$g_\alpha(t - \Delta t, \mathbf{x} - \xi_\alpha \Delta t) = f_\alpha(t - \Delta t, \mathbf{x} - \xi_\alpha \Delta t) + \Omega_\alpha, \quad (6.11)$$

je zřejmé, že pro neuniformní síť, bod $\mathbf{x} - \xi_\alpha \delta t$ nemusí ležet přímo na uzlu výpočetní sítě. Tudíž hodnota g_α je neznámá a musí být interpolována před propagační částí algoritmu. Principem metody je tedy po vypočtení kolizní části algoritmu ve všech uzlech výpočetní sítě pomocí lagrangeovy interpolace druhého řádu určit hodnoty v g_α v bodě $\mathbf{x} - \xi_\alpha \delta t$ (pozice znázorněná v obr. 30 pomocí „□“). Propagační krok algoritmu je poté realizován posunem hodnot distribučních funkcí z bodů „□“ do „●“, viz rovnice (6.10).



Obr. 30: Ilustrace základní myšlenky metody ISLBM s lagrangeovou interpolací

Podrobnější popis interpolace pomocí lagrangeových koeficientů je k nalezení například v [27].

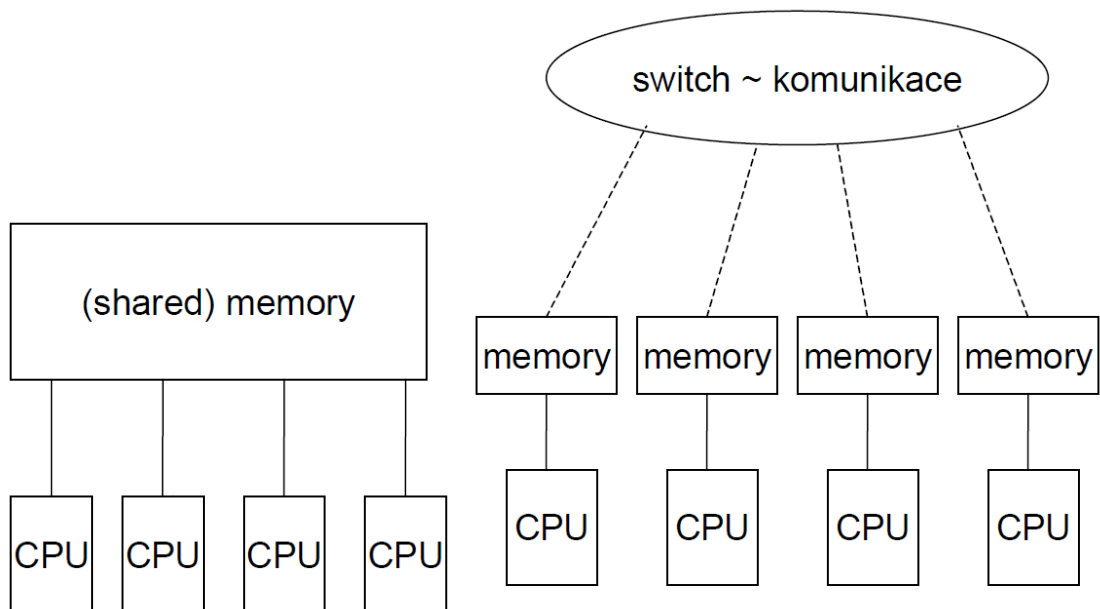
7 Paralelizace a optimalizace výpočtového kódu

Nároky kladené na úlohy v oblasti 3D nestacionárních numerických simulací turbulentního proudění jsou, z hlediska výpočetního času značné. Důvodem je požadavek na velkou hustotu výpočetních uzlů a na dlouhý časový úsek numerické simulace pro smysluplné zpracování získaných výsledků. Jak jsme již zmínili v úvodu práce, mezi hlavní přednosti lattice Boltzmannovy metody patří její snadná a efektivní paralelizovatelnost. Tato kapitola je proto věnována paralelizaci a optimalizaci algoritmu výše popsané lattice Boltzmannovy metody.

7.1 Úvod do paralelního programování

V této části práce popíšeme způsob paralelizace algoritmu výše popsané lattice Boltzmannovy metody v prostředí jazyka FORTRAN (Intel(R) Visual Fortran Composer XE 2013).

Způsob paralelizace výpočtu závisí na architektuře paralelních počítačů. V současnosti se nejvíce používají dva typy architektur. Paralelní počítače se sdílenou pamětí (shared memory) a paralelní počítače s distribuovanou pamětí (distributed memory), viz obr. 31.



Obr. 31: Znárodnění paralelního počítače se sdílenou (vlevo) a distribuovanou pamětí (vpravo)

Z hlediska způsobu paralelizace je výhodnější architektura se sdílenou pamětí, neboli sdílení a výměna informací mezi procesory během výpočtu se děje přes sdílenou (společnou) paměť. Paralelizace na "shared-memory" počítačích lze provést pomocí tzv. OpenMP, viz [47], [48].

7.1.1 OpenMP

OpenMP je rozhraní sloužící pro explicitní programování paralelních aplikací na jednom počítači s více procesory a sdílenou pamětí. Realizuje vláknovou paralelizaci (multithreading) pro jeden spuštěný hlavní proces (master thread) na vstupu do paralelní oblasti (parallel region). Vytváří skupinu vláken, která se dělí o práci a na konci paralelní oblasti po synchronizaci zaniká. Dále pak pokračuje pouze samotný hlavní proces. Vlákna se mohou podělit jak o provádění týchž instrukcí na různých datech (data parallelism), tak i o nezávislé větve programu (functional parallelism). O softwarová vlákna se dělí hardwarové procesory. Je obvyklé, že počet vláken odpovídá počtu volných procesorů. OpenMP programování spočívá především v doplnění vhodně připraveného sekvenčního zdrojového kódu o tzv. direktivy (interpretovatelné komentáře), které navedou překladač k vytvoření vláken a rozdělení práce mezi ně. Někdy vyvstává potřeba přidat do zdrojového kódu i volání různých dotazovacích a konfiguračních funkcí a procedur. Typické pro OpenMP je nastavování některých vlastností spouštěných programů z vnějšku pomocí proměnných prostředí. Je možno dosáhnout stavu, kdy zdrojový kód OpenMP programu lze bez úprav přeložit jak pro sekvenční, tak pro paralelní běh. Specifikace umožňuje získání shodných výsledků v obou případech. Úkolem programátora je nalézt paralelizovatelné oblasti sekvenčního kódu, správně rozvrhnout proměnné v paralelní oblasti na ty, co jsou sdílené (originály přístupné všem vláknům) a soukromé (kopie vytvořené pro každé vlákno) a zajistit synchronizaci vláken i přístupu do paměti. Při nedodržení základních pravidel se mohou vyskytnout tzv. datové dostihy (data race), nejčastější chyba v OpenMP programech. Obr. 32 ilustruje jednoduchý algoritmus, jako příklad užití OpenMP.

Detailněji nyní rozebereme různé možnosti paralelizace DO-cyklu, jelikož je stěžejní z hlediska výkonu našeho algoritmu založeného na metodě LBM. Knihovna OpenMP nabízí následující čtyři možnosti volané pomocí direktivy

!\$OMP DO SCHEDULE(type,chunk)

- *STATIC*

Iterace paralelizovaného cyklu jsou rozděleny mezi vlákna v pořadí, v jakém jsou číslovány. Toto rozdělení je provedeno na začátku cyklu a zůstává nezměněné po celou dobu jeho běhu. Implicitně je počet iterací rozdělen rovnoměrně mezi všechny jádra, pracovní části. Pomocí parametru *chunk* lze specifikovat, kolik iterací připadne na jednu pracovní část, neboli lze stanovit, na kolik částí bude cyklus rozdělen.

Poznamenejme jen, že poslední část nemusí být rovna počtu *chunk* z důvodu zahrnutí všech iterací do výpočtu.

- *DYNAMIC*

Iterace cyklu jsou rozdělovány mezi jednotlivá vlákna dynamicky. Na počátku je cyklus rozdělen podle parametru *chunk*, který vlastně vyjadřuje velikost pracovní části. Implicitně je velikost pracovní části rovna jedné iteraci. Každému jádru je poté přidělena jedna pracovní část. Jakmile nějaké vlákno dokončí svoji úlohu, bude mu přidělena nová. To se opakuje, dokud nebudou všechny pracovní části vyřešeny.

- *GUIDED*

Dynamický přístup popsany výše má určitě lepší potenciál oproti jednoduchému statickému. Nese s sebou ale jisté výpočetní nároky vzniklé manipulací a rozdělováním pracovních částí cyklu. Tyto nároky sice klesají s rostoucí velikostí částí, ale pak zase narůstá nerovnováha vykonané práce jednotlivých vláken. Z těchto důvodů existuje ještě jiný dynamický přístup *GUIDED*. Tento přístup na počátku rozdělí cyklus na počet pracovních částí rovných počtu jader. Velikost části se stále zmenšuje až do doby, kdy je znovu přerozdělena. Parametr *chunk* definuje nejmenší velikost jedné pracovní části. Implicitně je roven jedné.

- *RUNTIME*

Tato možnost umožňuje nastavit, kterýkoliv z výše popsanych přístupů při běhu programu.

Další výhody použití OpenMP, například oproti MPI (Message Passing Interface), je její jednoduchost, přenositelnost a možnost paralelizovat pouze kritické části kódu. Výhodou je také možnost přeložení kódu neparalelně i překladačem, který nepodporuje syntaxi OpenMP. Tento způsob paralelního programování má ale i své nevýhody. Mezi hlavní bych zmínil potřebu překladače s podporou OpenMP, omezení pouze na počítače se sdílenou pamětí a většinou nižší škálovatelnost než pro MPI.

```

SUBROUTINE SIMPLE(N, A, B)

    INTEGER I, N
    REAL B(N), A(N)

    !$OMP PARALLEL DO !I is private by default
    DO I=2,N
        B(I) = (A(I) + A(I-1)) / 2.0
    ENDDO
    !$OMP END PARALLEL DO

END SUBROUTINE SIMPLE

```

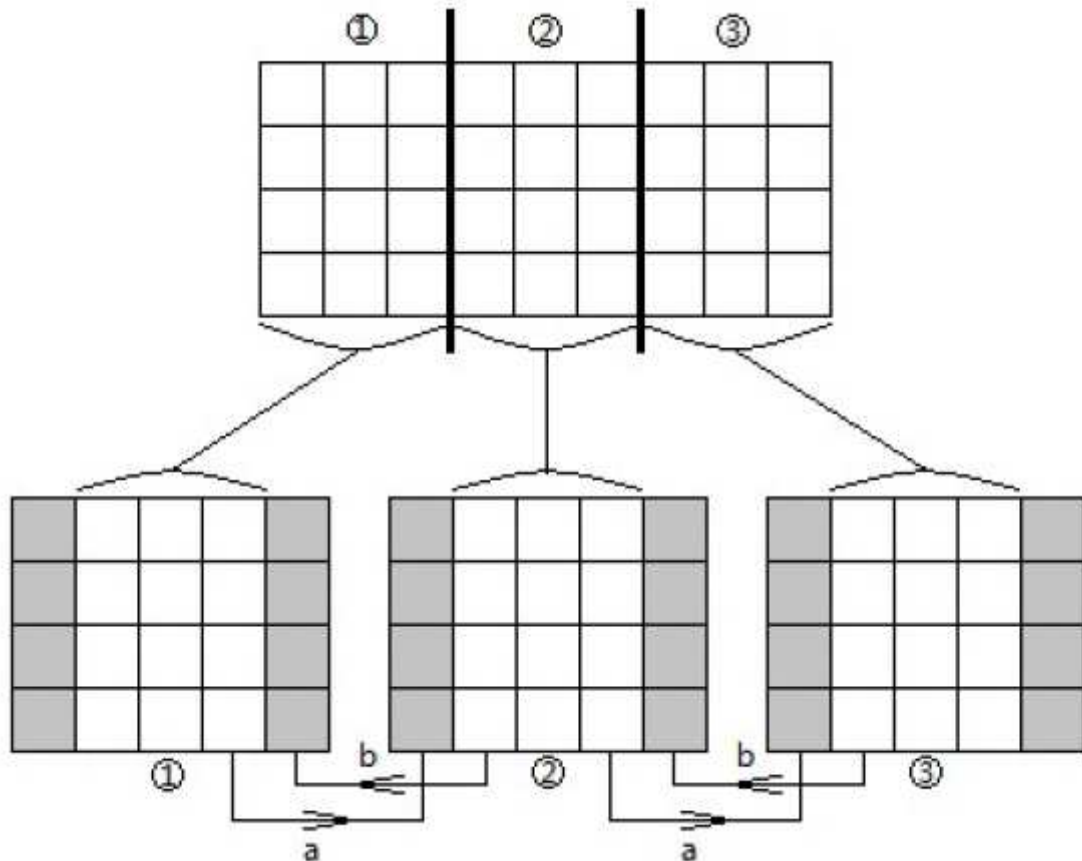
Obr. 32: Ukázka jednoduchého kódu v jazyce FORTRAN paralelizovaného s využitím OpenMP

Protože počet možných jader pro vyrobení paralelního počítače se sdílenou pamětí je omezen, rozvíjí se tendence ke spojování jednoprocessorových či víceprocessorových počítačů do klastrů pomocí rychlé komunikační sítě tzv. switch. Pozornost v oblasti hardwaru se proto převážně zaměřuje na vývoj switchů, které umožňují rychlost meziprocessorové komunikace srovnatelnou s rychlostí komunikace mezi procesorem a vnitřní pamětí počítače.

7.2 Paralelizace algoritmu

V tomto odstavci stručně popíšeme, jakým způsobem jsme s využitím OpenMP provedli paralelizaci algoritmu LBM, popsané v předchozích kapitolách.

Hlavním cílem je využití výhodného rozdělení výpočtové oblasti na konečný počet stejně velkých podoblastí (bloků), které jsou vedlejším produktem implementace metody hierarchického zjemňování sítě, viz odstavec 6.1. Na obr. 33 je zjednodušeným způsobem pro představu znázorněno dělení výpočtové oblasti v 2D.



Obr. 33: Ilustrace blokového rozdělení výpočtové oblasti pro 2D případ

Tímto způsobem je dosaženo velmi dobré účinnosti paralelní simulace, která je dána vztahem

$$\zeta = \frac{T_1}{N \cdot T_N} \cdot 100, \quad (7.1)$$

kde T_1 je čas simulace při běhu na jednom CPU a T_N je čas při běhu na N procesorech. Je totiž zásadně snížen výskyt rozdělování a slučování vláken, který může při nevhodně napsaném programu převýšit zisk dosažený jeho paralelizací.

Rychlost výpočtu iteračního kroku pro jeden blok se liší od jeho typu. Rychlost bude jiná, zahrnuje-li podoblast pouze tekutinové buňky, či obsahuje-li nátok, výtok nebo jiný typ hranice výpočtové oblasti. Je tedy velmi výhodné při paralelizaci použít pro cyklus jiné rozdělení, než pouhé přiřazení stejného počtu bloků každému vláknu. Knihovna OpenMP nabízí čtyři možnosti paralelizace DO-cyklu, které jsou popsány v předchozím odstavci.

Testováním jednotlivých přístupů jsme vyhodnotili, že nejvyššího zrychlení sekvenčního algoritmu je dosaženo použitím volby GUIDED pro rozdělení práce jednotlivých vláken během výpočtu.

Vytvoření paralelní části kódu a s ním spojených dalších operací, jako například vytváření kopií potřebných polí, je pro blokovou strukturu výpočtové oblasti uděláno vždy na

začátku každého iteračního cyklu. Jednotlivé bloky, respektive výpočtové podoblasti se zadanými okrajovými podmínkami, jsou poté řešeny na různých vláknech najednou. Na konci iteračního cyklu jsou spočtená data jednotlivými jádry uložena a paralelní sekce zaniká. Poznamenejme, že před dalším iteračním krokem je ještě nutné provést aktualizaci okrajových podmínek na hranicích všech podoblastí pomocí jejich sousedů. Tato část představuje pouze editaci prvků v jednorozměrném poli a je tedy jednoduše paralelizovatelná.

Typicky se měření výkonu různých simulačních kódů reprezentuje rychlostí operací prováděných s čísly s plovoucí řádovou čárkou. Měří se pomocí známé jednotky MFLOPS (počet miliónů operací s plovoucí řádovou čárkou za jednu sekundu). Samozřejmě, že zjednodušení popisu komplexního pojmu výkonnosti algoritmu na jediné číslo má svá omezení. Vyšší hodnota MFLOPS totiž nemusí nutně znamenat, že výsledky simulace budeme mít rychleji. Zbytečné, či bezvýsledné kalkulace mohou totiž zvýšit MFLOPS a současně prodloužit čas simulace.

V praxi se proto pro lattice Blotzmannovu metodu měří rychlost programu v jednotkách MLUPS (Mega Lattice Site Updates Per Second). Tato hodnota silně závisí na detailní implementaci metody, dimenzi úlohy, zvoleném rychlostním modelu (počtu distribučních funkcí v každém bodě), na aproximaci kolizního operátoru atd. Znalost této veličiny může být pro uživatele LBM aplikace velmi přínosná, protože z ní lze snadno získat celkový čas simulace pro danou výpočetní síť a daný počet iteračních kroků. Hodnota je určena podle vztahu

$$MLUPS = \frac{N_x \cdot N_y \cdot N_z \cdot N_i}{10^6 \cdot T}, \quad (7.2)$$

kde N_x , N_y a N_z jsou počty buněk v jednotlivých směrech výpočetní oblasti a N_i je počet iterací. T udává dobu běhu simulace.

V našich výpočtech, i při paralelizaci na maximálně šesti procesorech, jsme dosahovali rychlosti do 10 MLUPS. Na zcela jiné škále jsou rychlosti simulací využívajících paralelní výpočetní schopnosti grafických karet, kde je pro LBM dosahováno stovek MLUPS.

Následující graf porovnává hodnoty dosažené námi vyvinutým výpočetním kódem na 1÷6 jádrech. Plnými čarami jsou v grafu zobrazeny závislosti hodnot MLUPS na počtu použitých výpočetních jader pro validační úlohy podrobně popsané v kapitole 8. Konkrétně byly provedeny testy na úloze proudění ve čtvercové kavitě (odstavec 8.1) a kanálu se skokovým rozšířením (odstavec 8.3). Přerušované čáry v grafu reprezentují ideální situaci, kdy počet MLUPS roste lineárně s počtem výpočetních jader. Z grafu je patrná velmi kvalitní škálovatelnost použitého algoritmu.



Obr. 34: Graf zobrazující hodnoty MLUPS při výpočtech našim kódem

7.3 Optimalizace algoritmu

Jak bylo uvedeno v odstavci 3.6, základní algoritmus metody se skládá ze dvou po sobě jdoucích kroků (kolizní a propagační). V následujících odstavcích ukážeme, jakým způsobem je možné vhodnou algoritmizací výrazně zvýšit výpočetní efektivitu programu.

7.3.1 Optimalizace kolizního kroku

Kolizní část iteračního kroku popisující difúzní jevy v kapalině představuje kolizní operátor $S(f)$, který lokálně modifikuje hodnoty distribučních funkcí v každém bodě výpočtové oblasti podle rovnice (3.54). Z hlediska výpočetní náročnosti kolizní krok výrazně převyšuje, z důvodu velkého množství operací nad čísly s plovoucí desetinou čárkou, výpočetní náročnost propagačního kroku. Pro aproximaci kolizního operátoru v našich výpočtech používáme, vzhledem k vyšším stabilizačním schopnostem a jiným výhodám, viz odstavec 3.5, kinetický model typu Multiple-Relaxation-Time (MRT). U tohoto přístupu je nutnost transformace mezi prostorem momentů distribučních funkcí M , vymezeným podle $\{m_\beta | \beta = 0, 1, \dots, Q\}$ a rychlostním prostorem $V \{f_\alpha | \alpha = 0, 1, \dots, Q\}$, ve kterém probíhá propagační část algoritmu. Oproti kinetickému modelu zvanému Bhatnagarův-Grossův-Krookův (BGK) je výpočtově více náročný. Pro porovnání komplexnosti jednotlivých přístupů jsou zde znovu uvedeny příslušné rovnice z odstavce 3.6

$$\text{Pro LBR-BGK: } \hat{f}_\alpha(\mathbf{x}, t) = f_\alpha(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau}(f_\alpha - f_\alpha^{eq}), \quad (7.3)$$

$$\text{Pro LBR-MRT: } \hat{f}_\alpha(\mathbf{x}, t) = f_\alpha(\mathbf{x}, t) - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{S}[|m(\mathbf{x}, t)\rangle - |m^{eq}(\mathbf{x}, t)\rangle]. \quad (7.4)$$

- První krok optimalizace algoritmu je zaměřen na vyvarování se časově náročným maticovým operacím při transformaci mezi prostorem momentů distribučních funkcí \mathbf{M} a rychlostním prostorem \mathbf{V} . Vychází ze skutečnosti, že inverzní matice \mathbf{M}^{-1} je po celou dobu výpočtu konstantní. Dále platí, že v diagonální matici \mathbf{S} se mění pouze hodnoty připadající na relaxační koeficient s_ν , který je spjat s kinematickou viskozitou kapaliny podle rovnice (3.52). Řešíme-li úlohu s konstantní kinematickou viskozitou kapaliny, je zřejmé, že může být součin matic $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{S}$ napočten již při inicializaci výpočtu [6]. Výsledný součin matic je uveden v rovnici (7.5).

$$\begin{pmatrix} 0 & c_1 & c_4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_2 & c_5 & 0 & c_7 & 0 & 0 & 0 & c_9 & c_{10} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_2 & c_5 & 0 & c_7 & 0 & 0 & 0 & c_9 & -c_{10} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -c_2 & -c_5 & 0 & 0 & 0 & -c_7 & 0 & -c_{11} & c_{12} & c_{13} & -c_{15} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -c_2 & -c_5 & 0 & 0 & 0 & c_7 & 0 & -c_{11} & c_{12} & c_{13} & -c_{15} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -c_2 & -c_5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -c_7 & -c_{11} & c_{12} & -c_{13} & c_{15} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -c_2 & -c_5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_7 & -c_{11} & c_{12} & -c_{13} & c_{15} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_3 & c_6 & 0 & c_8 & 0 & c_8 & 0 & c_{11} & c_{14} & c_{13} & c_{16} & c_{17} & 0 & 0 & c_{18} & -c_{18} & 0 \\ 0 & c_3 & c_6 & 0 & -c_8 & 0 & c_8 & 0 & c_{11} & c_{14} & c_{13} & c_{16} & -c_{17} & 0 & 0 & -c_{18} & -c_{18} & 0 \\ 0 & c_3 & c_6 & 0 & c_8 & 0 & -c_8 & 0 & c_{11} & c_{14} & c_{13} & c_{16} & -c_{17} & 0 & 0 & c_{18} & c_{18} & 0 \\ 0 & c_3 & c_6 & 0 & -c_8 & 0 & -c_8 & 0 & c_{11} & c_{14} & c_{13} & c_{16} & c_{17} & 0 & 0 & -c_{18} & c_{18} & 0 \\ 0 & c_3 & c_6 & 0 & c_8 & 0 & 0 & 0 & c_8 & c_{11} & c_{14} & -c_{13} & -c_{16} & 0 & 0 & c_{17} & -c_{18} & 0 & c_{18} \\ 0 & c_3 & c_6 & 0 & -c_8 & 0 & 0 & 0 & c_8 & c_{11} & c_{14} & -c_{13} & -c_{16} & 0 & 0 & -c_{17} & c_{18} & 0 & c_{18} \\ 0 & c_3 & c_6 & 0 & c_8 & 0 & 0 & 0 & -c_8 & c_{11} & c_{14} & -c_{13} & -c_{16} & 0 & 0 & -c_{17} & -c_{18} & 0 & -c_{18} \\ 0 & c_3 & c_6 & 0 & -c_8 & 0 & 0 & 0 & -c_8 & c_{11} & c_{14} & -c_{13} & -c_{16} & 0 & 0 & c_{17} & c_{18} & 0 & -c_{18} \\ 0 & c_3 & c_6 & 0 & 0 & 0 & c_8 & 0 & c_8 & -c_9 & -c_{12} & 0 & 0 & 0 & c_{17} & 0 & 0 & c_{18} & -c_{18} \\ 0 & c_3 & c_6 & 0 & 0 & 0 & -c_8 & 0 & c_8 & -c_9 & -c_{12} & 0 & 0 & 0 & -c_{17} & 0 & 0 & -c_{18} & -c_{18} \\ 0 & c_3 & c_6 & 0 & 0 & 0 & c_8 & 0 & -c_8 & -c_9 & -c_{12} & 0 & 0 & 0 & -c_{17} & 0 & 0 & c_{18} & c_{18} \\ 0 & c_3 & c_6 & 0 & 0 & 0 & -c_8 & 0 & -c_8 & -c_9 & -c_{12} & 0 & 0 & 0 & c_{17} & 0 & 0 & -c_{18} & c_{18} \end{pmatrix}. \quad (7.5)$$

kde

$$\begin{aligned} c_1 &\equiv \frac{5s_1}{399}, & c_2 &\equiv \frac{11s_1}{2394}, & c_3 &\equiv \frac{4s_1}{1197}, \\ c_4 &\equiv \frac{s_2}{21}, & c_5 &\equiv \frac{s_2}{63}, & c_6 &\equiv \frac{s_2}{252}, \\ c_7 &\equiv \frac{s_4}{10}, & c_8 &\equiv \frac{s_4}{40}, & c_9 &\equiv \frac{s_9}{18}, \\ c_{10} &\equiv \frac{s_2}{18}, & c_{11} &\equiv \frac{s_9}{36}, & c_{12} &\equiv \frac{s_2}{36}, \\ c_{13} &\equiv \frac{s_9}{12}, & c_{14} &\equiv \frac{s_2}{72}, & c_{15} &\equiv \frac{s_2}{12}, \\ c_{16} &\equiv \frac{s_2}{24}, & c_{17} &\equiv \frac{s_9}{4}, & c_{18} &\equiv \frac{s_{16}}{8}. \end{aligned}$$

- Druhým krokem optimalizace algoritmu je vyvarování se násobení nulovými čísly. Matice $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{S}$ obsahuje velké množství nulových pozic. Také platí $m_{10}^{eq} = m_{12}^{eq} =$

$m_{16}^{eq} = m_{17}^{eq} = m_{18}^{eq} = 0$ a že konzervativní momenty jsou kolizními invarianty $m_0^{neq} = m_3^{neq} = m_5^{neq} = m_7^{neq} = 0$. Z výše uvedeného je tedy patrné, že je velmi výhodné pro napočtení členu $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{S}[|m(\mathbf{x}, t)\rangle - |m^{eq}(\mathbf{x}, t)\rangle]$ přepočítat vždy jen ty členy, které se mění a nepoužívat cyklus přes všechny mikroskopické rychlosti.

7.3.2 Optimalizace propagačního kroku

Propagační krok představuje přesun jednotlivých distribučních funkcí každé výpočetní buňky k jejich odpovídajícím sousedům. Zajímavé je, že ačkoli tento krok neobsahuje žádnou operaci nad čísly s plovoucí desetinou čárkou, zabírá i tato část algoritmu relativně velký podíl výpočtového času. Pro odstranění tohoto nedostatku jsme využili metody popsané v [49].

Následující část algoritmu, viz obr. 35, ilustruje nejjednodušší způsob algoritmizace propagační části.

```

real(kind = 8),dimension(nq,0:nx+1,0:ny+1,0:nz+1) :: f, ftemp
real(kind = 8),dimension(3,nq) :: c = reshape( source = &
(/ 0, 0, 0, &
  1, 0, 0, &
  0, 1, 0, &
  ...
 -1, 1, -1, &
  1, -1, -1 /), shape = (/ 3, nq/))
integer :: a,i,j,k

do k = 1,nz
do j = 1,ny
do i = 1,nx
do a = 1,nq
ftemp(a,i,j,k) = f(a,i-c(1,a),j-c(2,a),k-c(3,a))
end do
end do
end do
end do
f = ftemp

```

Obr. 35: Nejjednodušší algoritmizace propagační části

Pro každý výpočetní uzel a každý směr (jejich počet odpovídá zadanému rychlostnímu modelu) je distribuční funkce kopírována na příslušnou pozici pomocného pole. Po provedení této operace na všech výpočetních uzlech jsou distribuční funkce kopírovány zpět do původního pole. Je zřejmé, že tento způsob značně zvyšuje nároky na paměť a výkon. Nabízí se řešení provést propagační část bez potřeby pomocného pole. Abychom toto mohli provést, je nutno pro každý uzel zajistit, aby distribuční funkce přesunuté z okolních uzlů nebyly již

hodnoty aktualizované. K tomu poslouží pochopení uspořádání paměti jazyku FORTRAN.

Pro určení i -té hodnoty v jednorozměrném poli kompilér jednoduše přičte i k adrese s ukazatelem na začátek pole. Uložení vícerozměrného pole již není tak jednoduché a existuje více způsobů. Zde ukážeme způsob, jakým to dělá FORTRAN. Pokud máme pole dimenze (n_x, n_y, n_z, n_q) , tzn. tři prostorové a jedna rychlostní dimenze, potom je zapotřebí funkce, která pro daný bod a vektor (i, j, k, l) vrátí jednoznačné, nezáporné číslo sloužící jako relativní adresa pro tento daný bod. Ve FORTRANu je toto číslo dáno následovně

$$Adresa_{rel}(i, j, k, l) = (i - 1, j - 1, k - 1, l - 1) \cdot (1, n_x, n_x \times n_y, n_x \times n_y \times n_z), \quad (7.6)$$

kde " \cdot " značí skalární součin vektorů. Tato myšlenka může být rozšířena na pole o více, či méně dimenzích. Např., je-li potřeba přesunout prvek pole o velikosti (n_x, n_y, n_z, n_q) , kde $n_x=4, n_y=5, n_z=6$ a $n_q=2$ ve směru $(1, -1, 2, 0)$, je relativní pohyb v paměti $(1, -1, 2, 0) \cdot (1, n_x, n_x \times n_y, n_x \times n_y \times n_z) = (1, -1, 2, 0) \cdot (1, 4, 20, 120) = -37$.

Na základě principu uspořádání paměti vícerozměrných polí rozdělíme distribuční funkce na dopředné a zpětné následujícím způsobem. Dopřednou označíme tu, jejíž hodnota v propagační části se posouvá v paměti dopředu. Například ve 2D případě pro distribuční funkci odpovídající mikroskopické rychlosti $(1, 1)$ se hodnota v paměti posune o $(1, 1) \cdot (1, n_x) = 6 \cdot n_x$ pozic. Zpětnou označíme tu distribuční funkci, jejíž hodnota se v paměti posouvá dozadu, např. připadající vektoru $(1, -1)$, kde dojde k posunu v paměti o $(1, -1) \cdot (1, n_x) = -4n_x$. Pracujeme-li tedy na výpočtové oblasti (n_x, n_y, n_z) , distribuční funkce je dopředná, resp. zpětná, pokud platí $\xi_\alpha \cdot (1, n_x, n_x \times n_y) > 0$, resp. $\xi_\alpha \cdot (1, n_x, n_x \times n_y) < 0$. Následující část algoritmu, viz obr. 36, ilustruje propagační část provedenou nad jedním polem distribučních funkcí.


```

integer, dimension((nq - 1)/2) :: forward,backward
! inicializace "forward" and "backward" je dle techniky popsané výše
do k = nz,1,-1
  do j = ny,1,-1
    do i = nx,1,-1
      do a = 1, (nq-1)/2
        q = forward(a)
        f(q,i,j,k) = f(q,i-c(1,q),j-c(2,q),k-c(3,q))
      end do
    end do
  end do
end do
do k = 1,nz
  do j = 1,ny
    do i = 1,nx
      do a = 1, (nq-1)/2
        q = backward(a)
        f(q,i,j,k) = f(q,i-c(1,q),j-c(2,q),k-c(3,q))
      end do
    end do
  end do
end do

```

Obr. 36: Algoritmus propagační části nad jedním polem distribučních funkcí

Na obr. 36 je znázorněn algoritmus, který je platný pro všechny rychlostí modely (tj. *D3Q15*, *D3Q19*, atd.). Pro další optimalizaci je vhodné cyklus procházející jednotlivé distribuční funkce výpočetního uzlu, viz červeně zvýrazněná algoritmu na obr. 36, ručně rozepsat, viz obr. 37.

```

do k = nz,1,-1
  do j = ny,1,-1
    do i = nx,1,-1
      f(2 ,i,j,k) = f(2 ,i-1,j ,k )
      f(7 ,i,j,k) = f(7 ,i+1,j-1,k )
      ...
      f(10,i,j,k) = f(10,i ,j-1,k-1)
    end do
  end do
end do
do k = 1,nz
  do j = 1,ny
    do i = 1,nx
      f(3 ,i,j,k) = f(3 ,i+1,j ,k )
      f(4 ,i,j,k) = f(4 ,i ,j-1,k+1)
      ...
      f(19,i,j,k) = f(19,i ,j+1,k+1)
    end do
  end do
end do

```

Obr. 37: Algoritmus propagační části nad jedním polem s ručním rozepsáním distribučních funkcí

8 Validační úlohy

Pro ověření správnosti implementace navržených algoritmů výše popsaných metod, jež jsou základem vyvinutého řešiče, jsou v této kapitole diskutovány a numericky řešeny tři často používané testovací úlohy.

8.1 Proudění ve čtvercové kavitě

Tato úloha, která se často používá k testování numerických metod, nám poslouží k ověření implementace způsobu zjemnění výpočetní sítě popsaného v odstavci 6.2. Jedná se o numerické řešení proudění uvnitř čtvercové kavitě pro hodnoty Reynoldsova čísla $Re=100$, 400 a 1000 . Poznamenejme, že Re závisí v tomto případě na rychlosti horní plochy, rozměru kavitě a kinematické viskozitě kapaliny, tedy $Re = \frac{U_{\infty}L}{\nu}$. V našem případě je charakteristický rozměr kavitě $L = 1 \cdot 10^{-1}\text{m}$ a kinematická viskozita $\nu = 1 \cdot 10^{-3}\text{m}^2/\text{s}$. Rychlost horní plochy byla volena tak, aby bylo dosaženo uvedených hodnot Reynoldsova čísla. Na všech ostatních hranicích výpočtové oblasti je předepsána nulová rychlost.

Pro výpočty byla použita nerovnoměrná strukturovaná síť, jejíž uzly jsou rozmístěny stejně ve všech třech dimenzích, podle funkce

$$x_i = 0,5(1 - \eta \tan^{-1}((1 - \kappa_i) \cdot \tan(1/\eta))), \quad (8.1)$$

$$\kappa_i = (I_i - 1)/(Im_i - 1)2, \quad i = 1,2,3, \quad (8.2)$$

kde x_1 , x_2 a x_3 jsou souřadnice výpočetních uzlů sítě podél souřadnicových os x , y a z . I_i je index uzlu a Im_i je počet uzlů v dané ose. η je parametr ovlivňující zjemnění sítě. Pro tuto úlohu byl nastaven na hodnotu $\eta = 0,85$.

Na obr. 38 je pro ilustraci vytvořené mezní vrstvy zobrazeno rozmístění uzlů pro jednu dimenzi. Jsou zobrazeny pouze uzly od stěny kavitě do jejího středu (symetrická polovina). Celkový rozměr sítě je $81 \times 81 \times 81$.



Obr. 38: Symetrická polovina výpočetní sítě pro jednu dimenzi

Poznamenejme, že rychlost horní plochy je ve směru osy x .

Na následujícím obr. 39 jsou uvedeny profily x -ové složky rychlosti podél vertikální a z -ové složky rychlosti podél horizontální středové osy pro jednotlivá Re . Porovnání

rychlostních profilů získaných pomocí vlastního vyvinutého řešiče založeného na LBM je provedeno vůči hodnotám získaným v [26]. Na obr. 40 jsou zobrazeny proudnice ve třech středových rovinách pro variantu s hodnotou Reynoldsova čísla $Re=400$. Pro porovnání námi získaných hodnot jsou na obr. 40 současně znázorněny výsledky z [26]. Pro ostatní hodnoty Reynoldsových čísel jsme z důvodu zjednodušení toto porovnání již neprováděli.

Získané výsledky vykazují dobrou shodu s těmi, které jsou uvedeny v [26]. Použitý algoritmus metody pro užití LBM na nerovnoměrných sítích zvaný ISLMB (Interpolation supplemented LBM) se tedy jeví jako správný. Drobné odlišnosti při porovnání dosažených hodnot s hodnotami publikovanými v [26] mohou být způsobeny jiným přístupem k řešení. V [26] je pro užití LBM na nerovnoměrné síti použita metoda zvaná "Taylor series expansion and least squares-based lattice Boltzmann" (TLLBM). Tato metoda je robustnější a umožňuje použití obecnějších sítí, oproti ISLMB, která je omezena pouze na neuniformní kartézské síť. Nevýhoda TLLMB je ale v její náročnosti na paměť počítače a výpočetní čas.

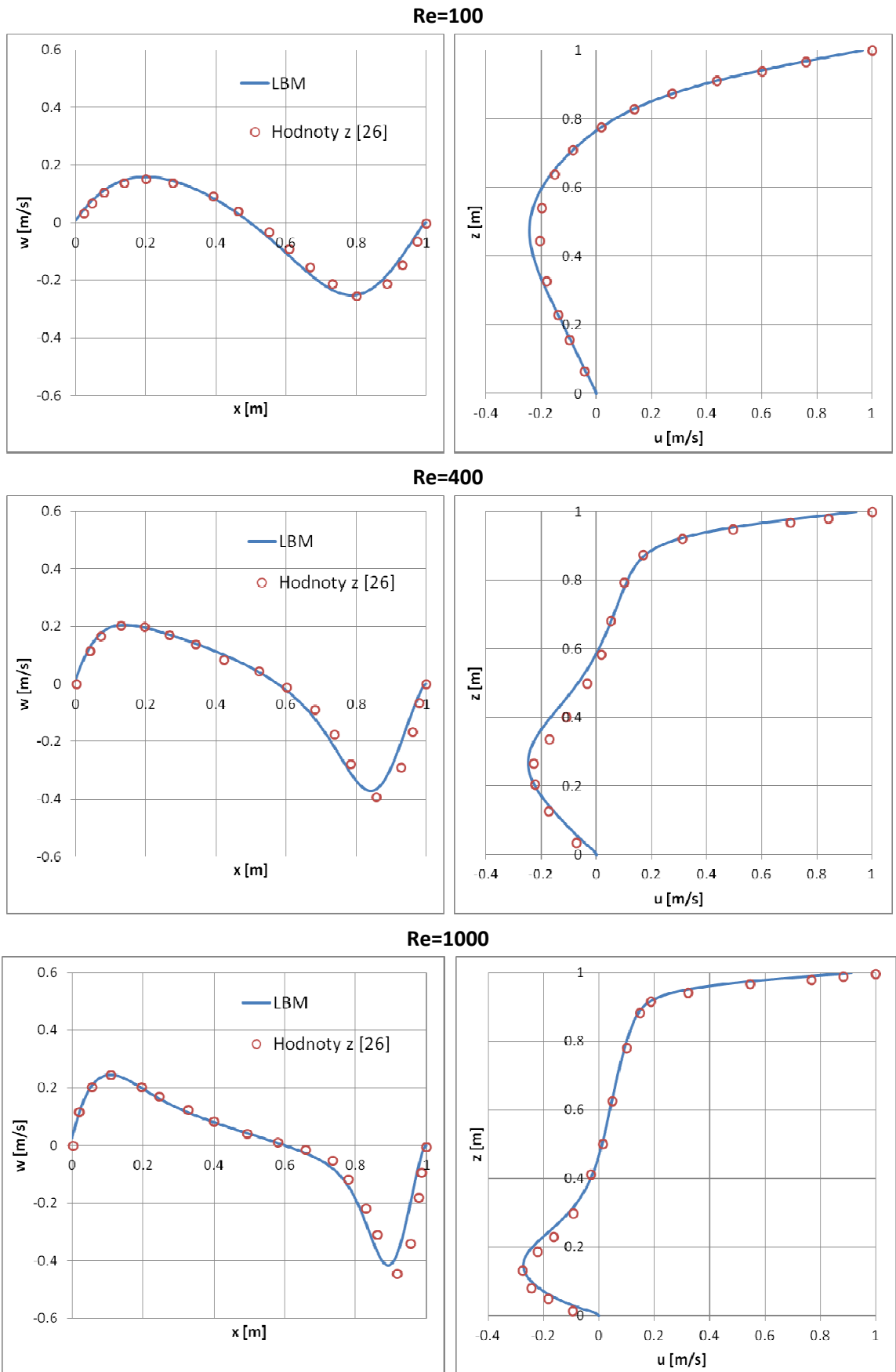
8.2 Obtékání koule

Další často používanou úlohou pro testování numerických metod je úloha obtékání koule. Tato úloha byla mnohokrát numericky i experimentálně řešena pro různé režimy proudění. V námi provedených numerických simulacích byla určena proudová pole pro hodnoty $Re=50,100,150,200$ a 250 . Hodnota Reynoldsova čísla je zde určena v závislosti na průměru koule, kinematické viskozitě kapaliny a vstupní rychlosti. V našem případě je průměr koule $D = 1 \cdot 10^{-1} \text{m}$ a kinematická viskozita $\nu = 1 \cdot 10^{-3} \text{m}^2/\text{s}$. Hodnota vstupní rychlosti je volena tak, aby bylo dosaženo uvedených hodnot Reynoldsova čísla. Na výstupu z výpočtové oblasti je předepsána referenční hodnota tlaku a na ostatních stěnách je nastavena nulová rychlost.

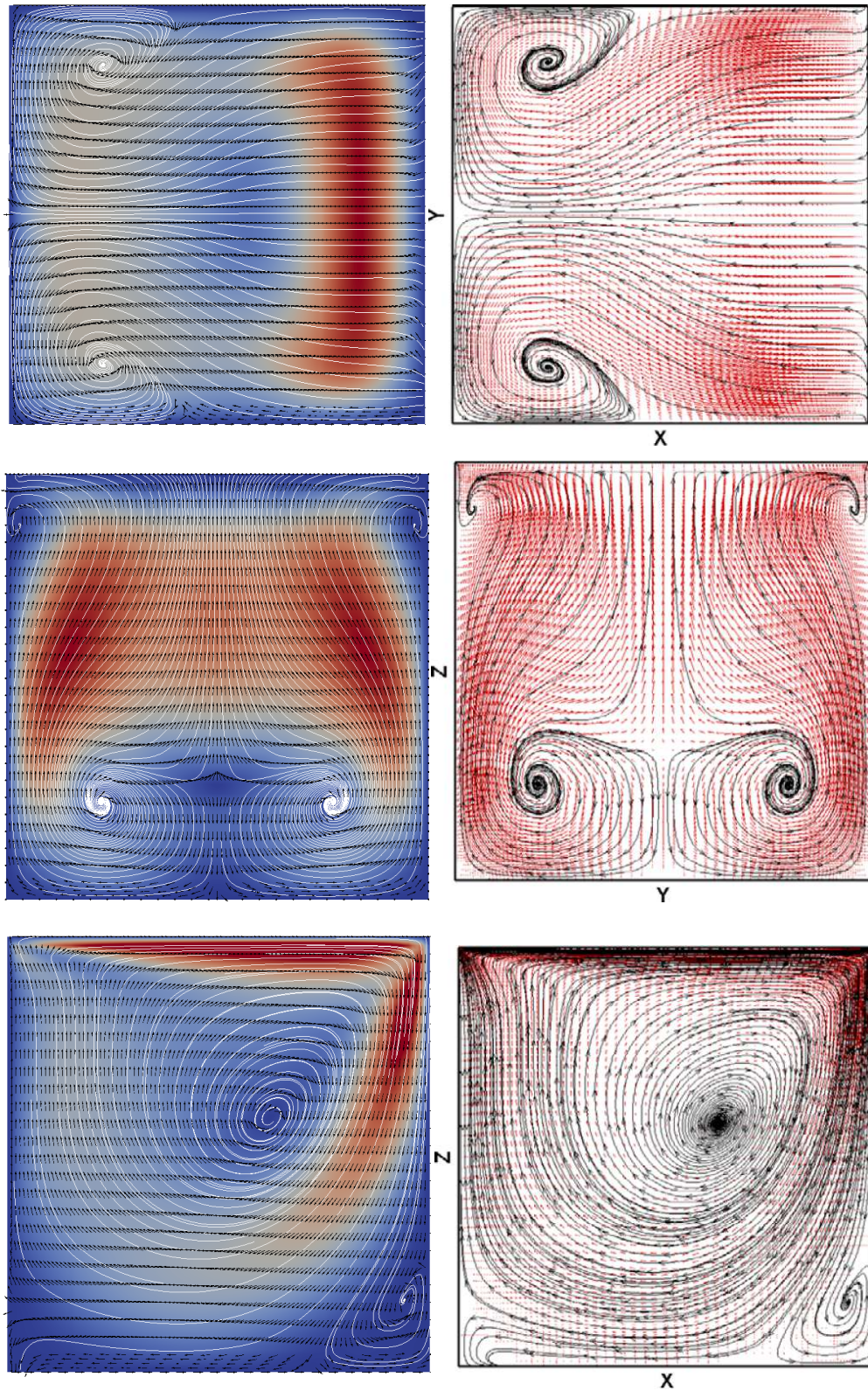
Obtékání koule s nízkými Reynoldsovými čísly může být obecně rozděleno do tří základních režimů:

- stacionární osově symetrické proudění pro $Re < 200$,
- stacionární nesymetrické proudění pro $210 < Re < 270$,
- nestacionární proudění $280 < Re < 375$, viz [54].

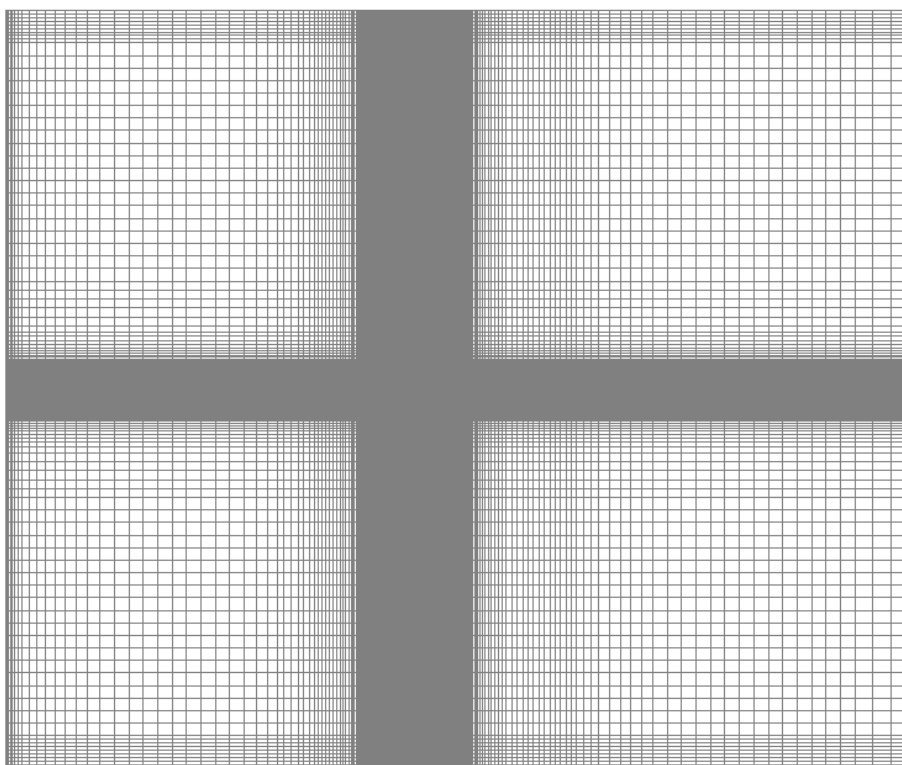
Výpočtovou oblastí je kvádr o rozměrech $(n_x, n_y, n_z) = (25D, 20D, 20D)$, kde D je průměr koule, jejíž střed je umístěn v bodě $(10D, 10D, 10D)$. Oblast je diskretizována neuniformní sítí o rozměrech $230 \times 150 \times 150$, viz obr. 41. V blízkém okolí koule je síť rovnoměrná s krokem $0.025D$, viz obr. 42.



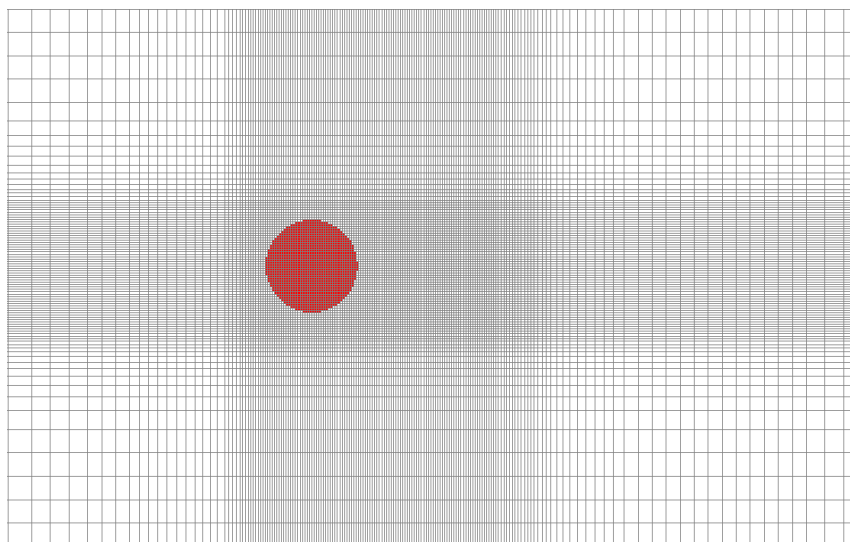
Obr. 39: Porovnání rychlostních profilů podél středových os při $Re=100$ (nahore), $Re=400$ (uprostřed), $Re=1000$ (dole)



Obr. 40: Proudnice ve třech středových rovinách pro $Re=400$. Výsledky získané pomocí vlastního vyvinutého řešiče založeného na LBM (vlevo), výsledky publikované v [26] (vpravo)



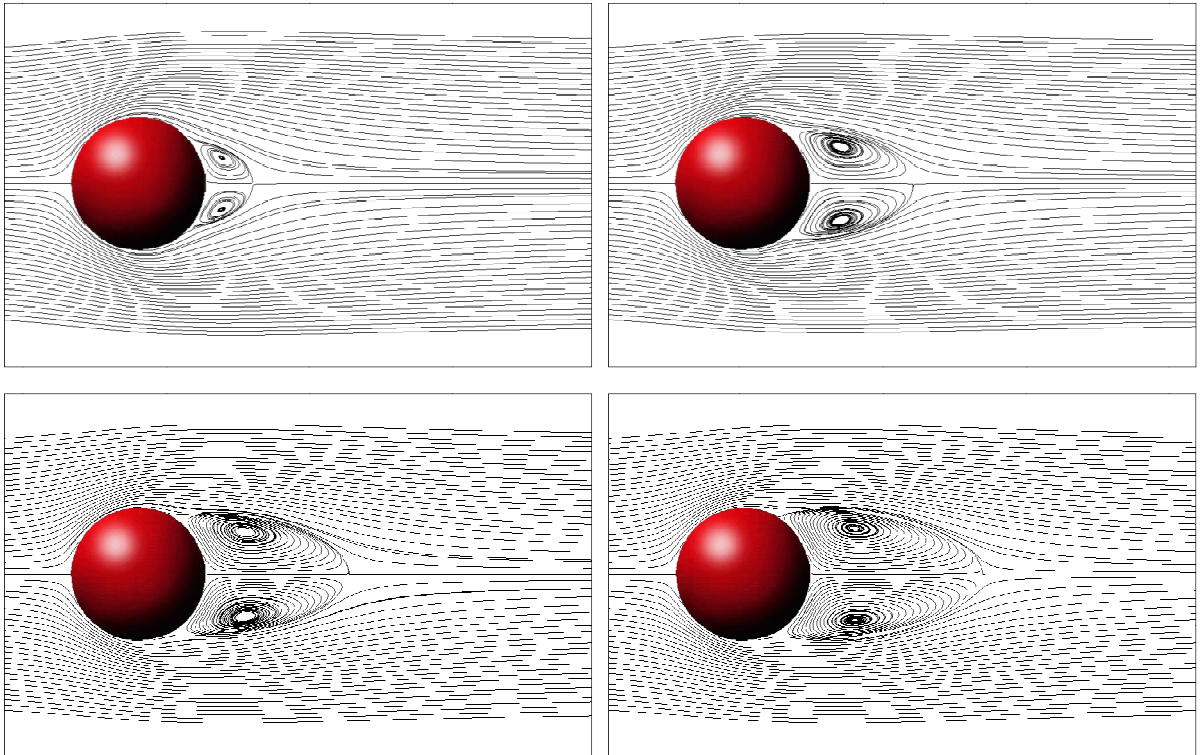
Obr. 41: Výpočetní síť v řezu x-z



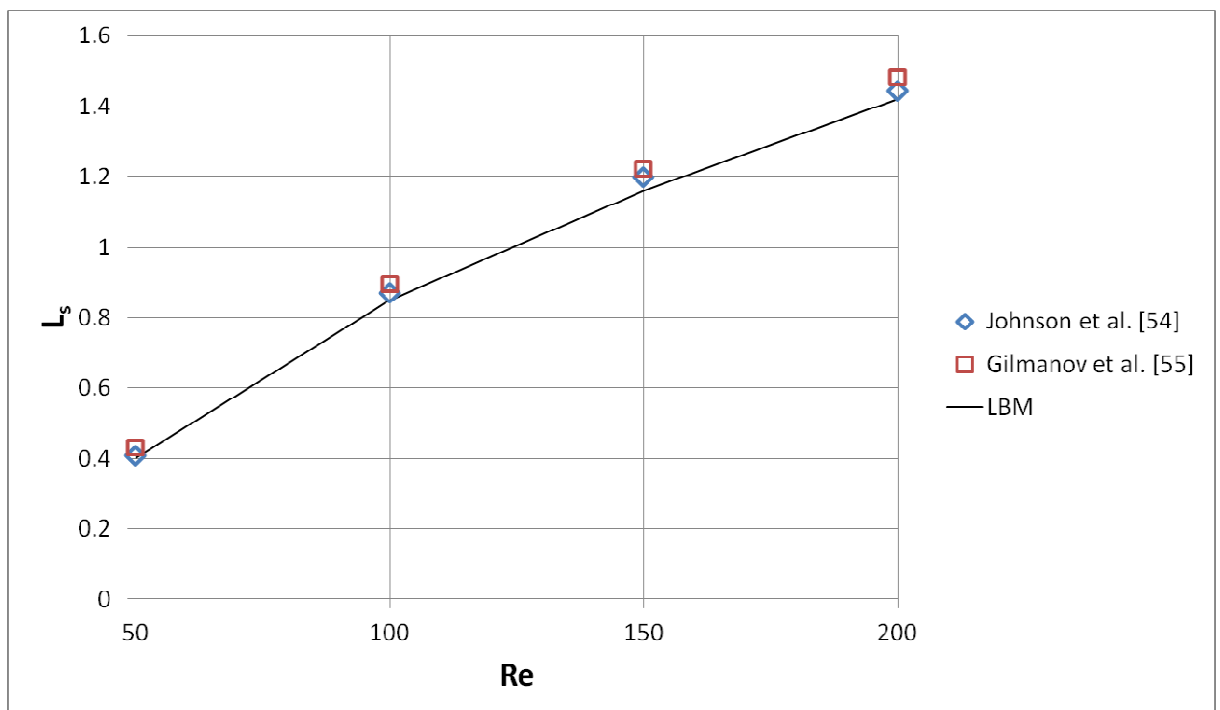
Obr. 42: Detail výpočetní sítě v řezu x-z

Na obr. 43 jsou znázorněny proudnice výsledného proudového pole v blízkém okolí koule pro $Re=50,100,150$ a 200 . Protože proudění je v tomto režimu osově symetrické, jsou proudnice zobrazeny pouze v jedné rovině. Z obrázků je patrné rozdělení hlavního proudu v oblasti za koulí a vzniku tzv. recirkulační zóny. Jak je známo, délka recirkulační zóny se rovnoměrně zvyšuje s roustoucím Re . Tento jev je patrný z grafu na obr. 44, kde jsou pro porovnání uvedeny hodnoty délek recirkulačních zón z našeho výpočtu provedeného pomocí

vlastního vyvinutého řešiče založeného na LBM a délek recirkulačních zón převzatých z prací [54] a [55].



Obr. 43: Proudnice v rovině x-y pro $Re=50, 100, 150$ a 200



Obr. 44: Porovnání délek recirkulačních zón

V následující tab. 1 jsou porovnány hodnoty odporových součinitelů pro kouli v proudovém poli s $Re=100$ a $Re=200$, získané výpočtem provedeným pomocí vlastního

vyvinutého řešiče založeného na LBM s odporovými součiniteli z prací [54] a [55].
Poznamenejme, že odporový součinitel je definován jako

$$C_D = \frac{F_D}{(1/2)\rho U_\infty^2 S} = \frac{8F_D}{\rho U_\infty^2 \pi D^2}, \quad (8.3)$$

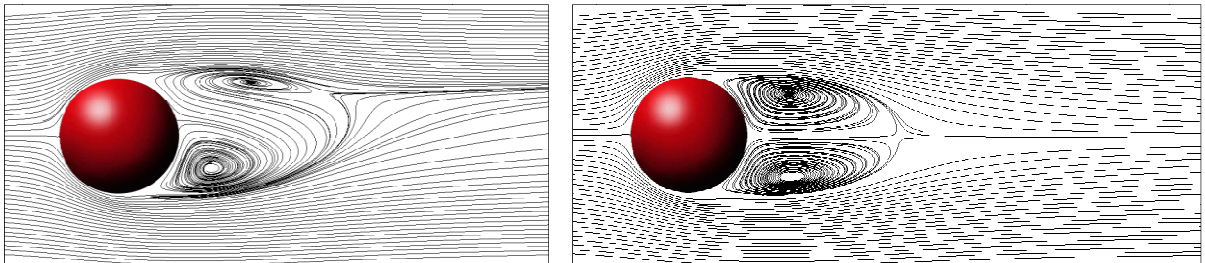
$$F_D = \oint f_x^B dl, \quad (8.4)$$

kde f_x^B je x-ová složka síly působící na kouli. Stanovit sílu působící na objekt v proudovém poli je možné pro lattice Boltzmannovu metodu pomocí změny hybnosti kapaliny. Tato metoda je podrobně popsána například v [56].

	Jonson a Patel [54]	Gilmanov et al. [55]	Vlastní řešič založený na LBM
Re = 100	1,112	1,153	1,168
Re = 200	0,790	-	0,81

Tab. 1: Porovnání odporových součinitelů pro $Re=100$ a 200

Pro hodnotu $Re=250$ již proudové pole není osově symetrické, jak je patrné z výsledků na obr. 45, kde jsou zobrazeny proudnice v rovinách x - y a x - z . Poznamenejme, že s dalším nárůstem Re se proudění stává nestacionárním.

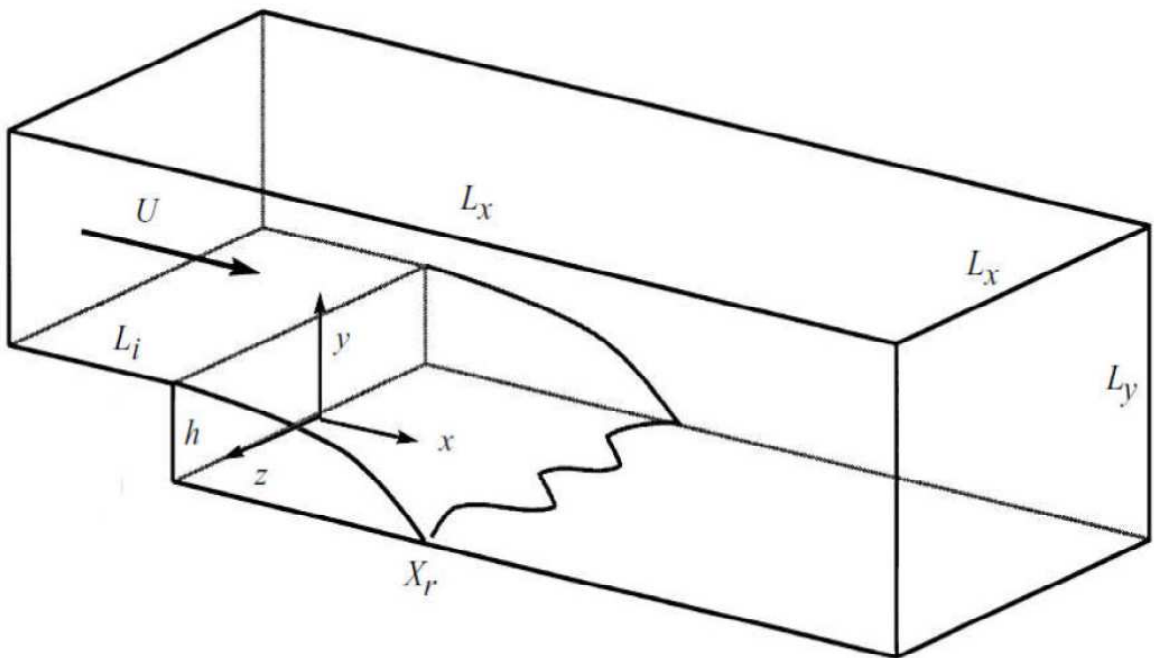


Obr. 45: Proudnice v rovině x - y a x - z pro $Re=250$

Získané výsledky vykazují relativně dobrou shodu s těmi, které jsou uvedeny v [54] a [55]. Drobné odlišnosti mohou být způsobeny použitím jiných přístupů k numerickému řešení v uvedených publikacích. Výsledné hodnoty odporových součinitelů obdržené námi vyvinutým řešičem založeným na LBM se více přibližují hodnotám odporových součinitelů publikovaných v [55]. V práci [55] autoři používají pro řešení Navierových-Stokesových rovnic metodu konečných diferencí.

8.3 Proudění kanálem s náhlým rozšířením

Další úloha, která se často používá k testování numerických metod, popisuje proudění kanálem s náhlým rozšířením (backward facing step). Geometrie úlohy je zobrazena na obr. 46. Výpočtová oblast ve směru proudění (osa x) je délky $L_x=30h$, včetně nátokové oblasti před náhlým rozšířením o délce $L_i=10h$. Výška kanálu je $L_y=6h$ a šířka $L_z=4h$. Index h určuje výšku schodu. Souřadnicový systém je umístěn k dolní hraně schodu, viz obr. 46. Reynoldsovo číslo pro tuto úlohu je $Re = 5100$. Hodnota Reynoldsova čísla je zde určena v závislosti na výšce schodu h , kinematické viskozitě kapaliny ν a průměrné vstupní rychlosti U_∞ podle $Re = \frac{U_\infty h}{\nu}$. V našem případě je výška schodu $h = 1 \cdot 10^{-2} \text{m}$ a kinematická viskozita $\nu = 1 \cdot 10^{-3} \text{m}^2/\text{s}$. Hodnota vstupní rychlosti je volena tak, aby bylo dosaženo uvedené hodnoty Reynoldsova čísla. Pro výpočet byla použita rovnoměrná výpočetní síť o velikosti $(N_x \times N_y \times N_z)=(300 \times 60 \times 40)$.



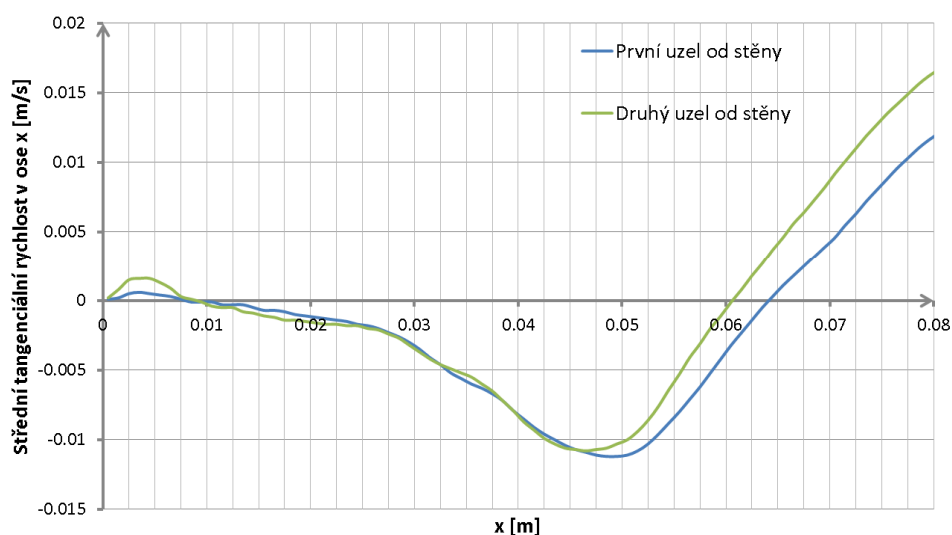
Obr. 46: Geometrie pro úlohu proudění kanálem s náhlým rozšířením

Okrajové podmínky úlohy jsou voleny v souladu s [52]. V příčném směru je proudění považováno za homogenní a na bočních stěnách je použita Neumannova okrajová podmínka $\frac{\partial \mathbf{u}_t}{\partial \mathbf{n}} = 0$, kde \mathbf{n} je normálový vektor stěny a \mathbf{u}_t je vektor tangenciální rychlosti. Její realizace je podrobně popsána v odstavci 3.7.3. Konstantní rychlostní profil $u = (U_\infty, 0, 0)$ je nastaven na vstupu do oblasti. Na výstupu z výpočtové oblasti je předepsána referenční hodnota tlaku.

Na všech ostatních stěnách ($y=0$, $y=Ly$) se generují stěnové funkce, viz odstavec 4.3.2, které použitím empirických formulí přemostňují vrstvu proudu u stěny. Poskytují tak okrajové podmínky pro oblast proudu vně mezní vrstvy.

Nejprve byl řešen časový úsek simulace roven $50T_0$, který odpovídá době potřebné k rozvinutí turbulence (T_0 je tzv. “turn over time” a je dán vztahem h/U_∞). Simulace byla dále provedena pro časový úsek odpovídající $150T_0$, pro který byla stanovena průměrná rychlost.

Při modelování tohoto problému je kladen důraz na určení délky recirkulační zóny x_r za schodem, která je častým parametrem používaným k ověření správnosti simulace tohoto typu úloh. Hodnota je dána vzdáleností ve směru proudění od paty schodu k místu v těsné blízkosti stěny $y=0$, ve kterém se tangenciální rychlost mění ze záporné na kladnou. Na následujícím grafu na obr. 47 je znázorněn průběh tangenciální rychlosti v prvním a druhém uzlu od stěny $y=0$. Je zřejmé, že požadovanou hodnotu učíme místem průniku osy x . Výsledné x_r je poté stanoveno průměrem dvou takto získaných hodnot.



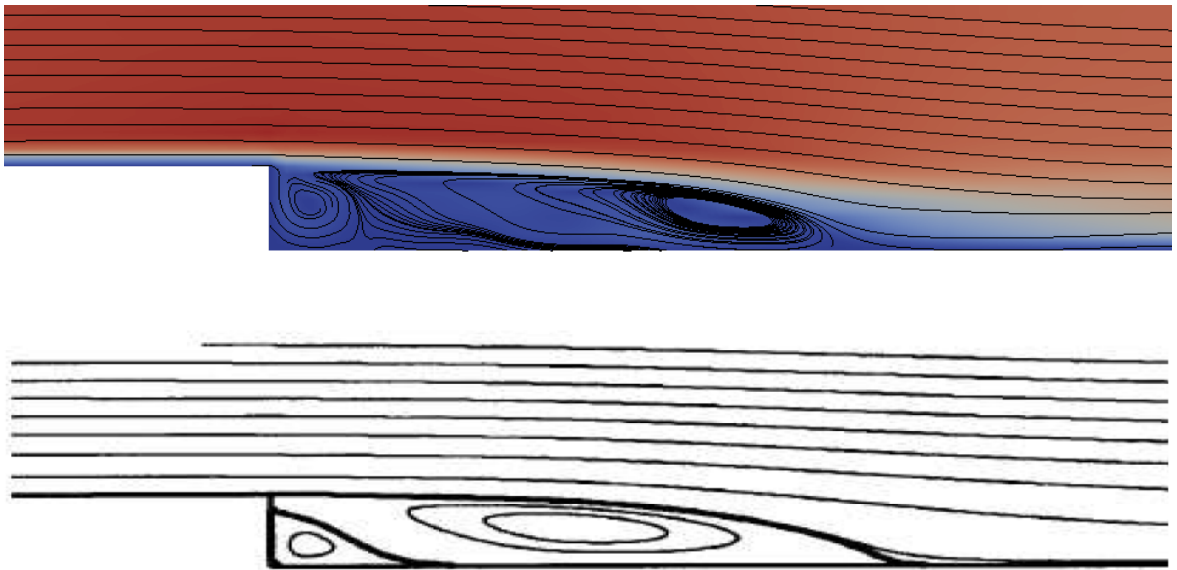
Obr. 47: Graf průběhu tangenciální rychlosti v prvním a druhém uzlu od stěny $y=0$

Níže uvedá tab. 2 porovnává výslednou hodnotu délky recirkulační zóny získané vlastním vyvinutým řešičem založeným na LBM s hodnotami délek recirkulačních zón publikovaných v jiných pracích.

Metoda	Recirkulační zóna (x_r/h)
Vlastní řešič založený na LBM	6,20
DNS podle Le et al. [52]	6,28
Experiment - Jovic a Driver [53]	6,05

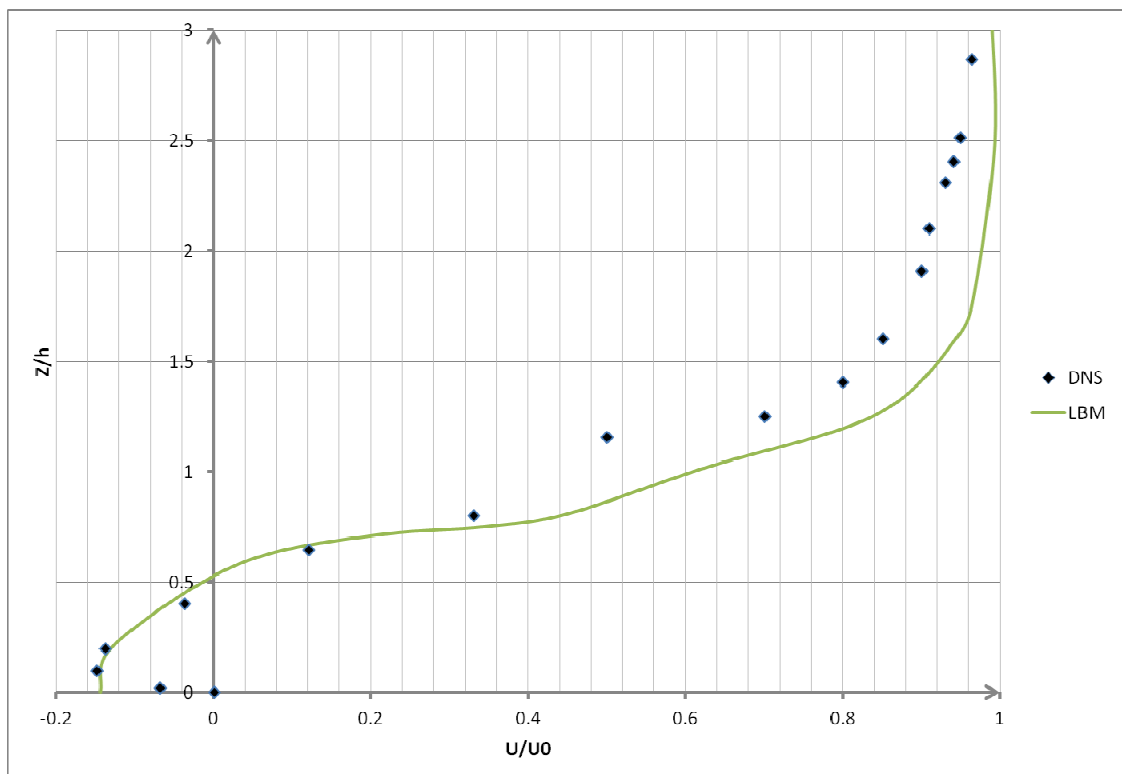
Tab. 2: Porovnání délky recirkulační zóny

Na následující obr. 48 jsou pro porovnání znázorněny proudnice průměrných rychlostí.

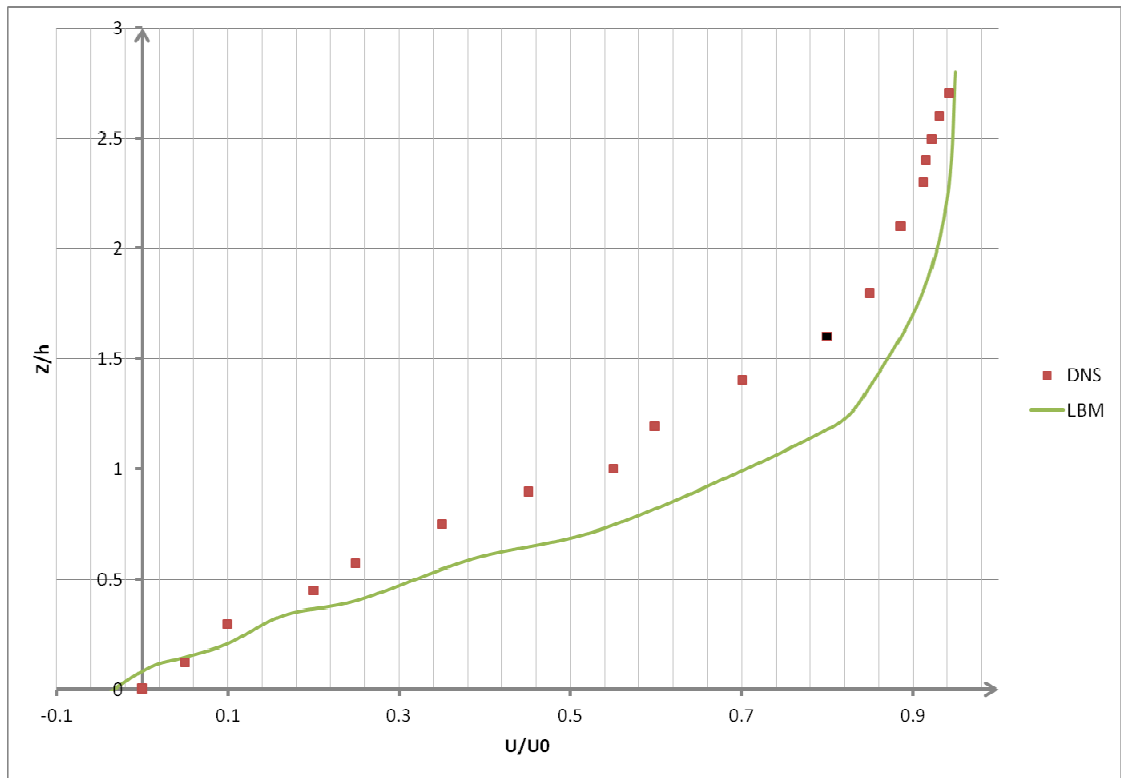


Obr. 48: Porovnání proudnic pole průměrné rychlosti v oblasti za schodem získaných vlastním řešičem založeným na LBM (nahore) a DNS [52] (dole)

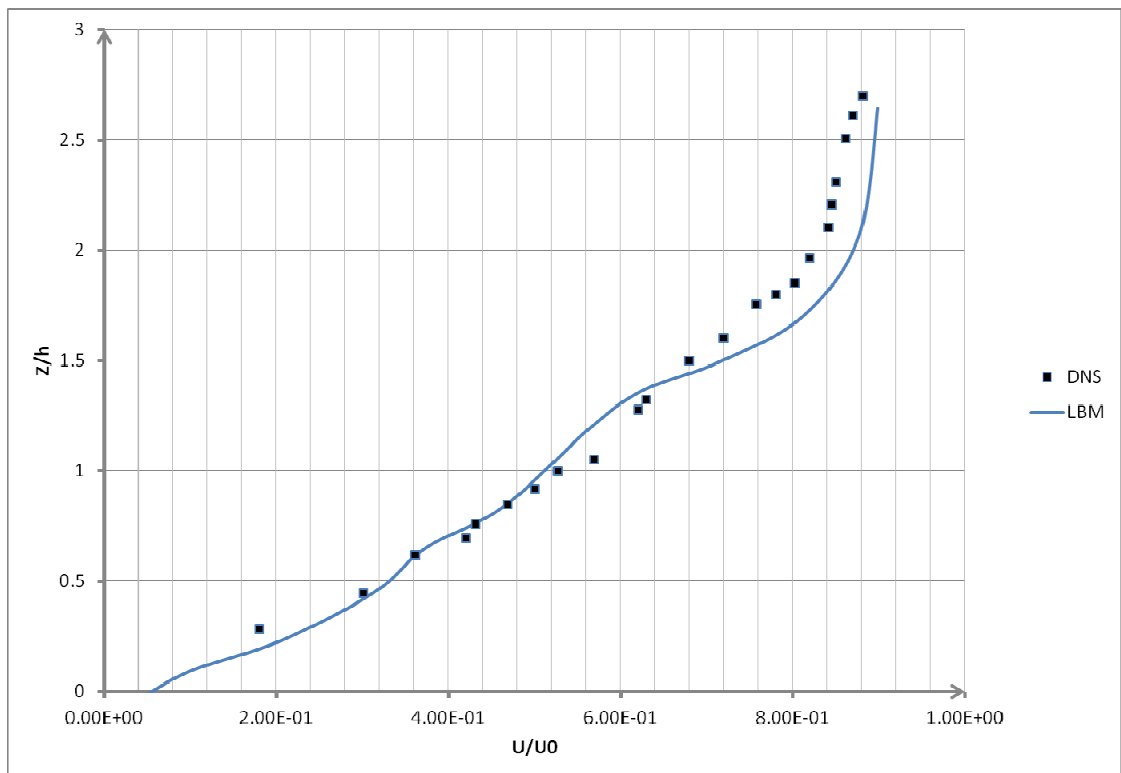
Následuje série grafů zobrazující bezrozměrný rychlostní profil v blízkosti spodní stěny výpočtové oblasti v místech $x/h=4, 6, 10$ a 19 . Hodnoty jsou porovnány opět s výsledky DNS publikované v [52].



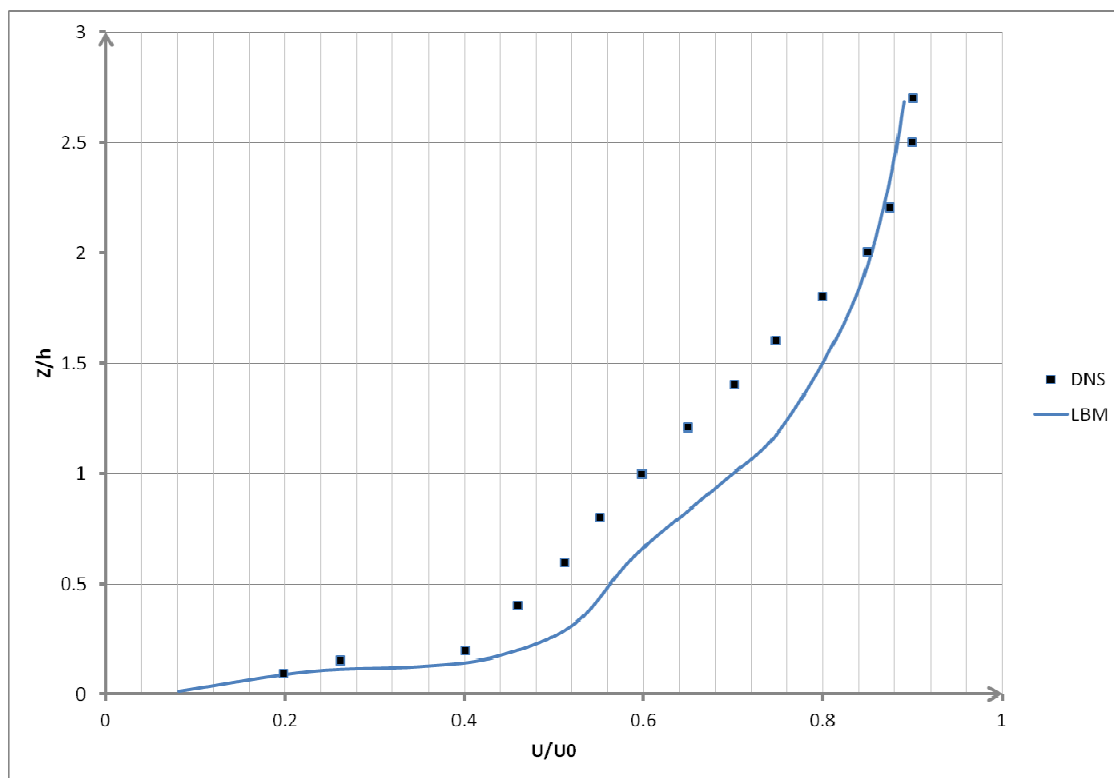
Obr. 49: Graf rychlostního profilu v místě $x/h=4$



Obr. 50: Graf rychlostního profilu v místě $x/h=6$



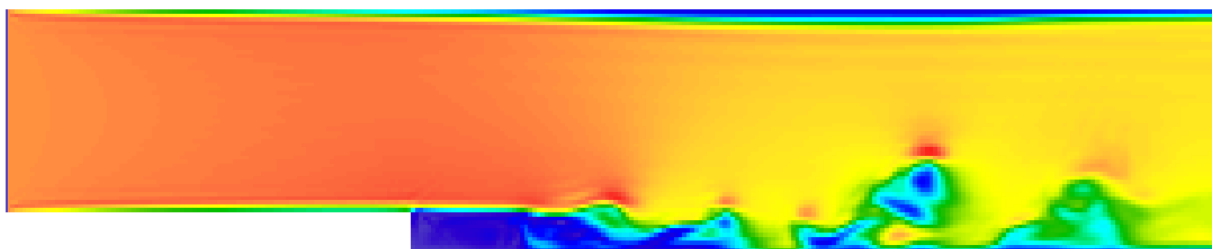
Obr. 51: Graf rychlostního profilu v místě $x/h=10$



Obr. 52: Graf rychlostního profilu v místě $x/h=19$

Získané výsledky výpočtu turbulentního proudění metodou LES uvnitř kanálu s náhlým rozšířením pomocí námi vyvinutého řešiče založeného na LBM, vykazují relativně dobrou shodu s přímou numerickou simulací (DNS) publikovanou v [52]. Odlišnosti, které jsou patrné z grafů na obr. 49 ÷ obr. 52 a z tab. 2, mohou být způsobeny chybou aproximace řešení malých vírů pomocí Smagorinského subgridního modelu použitého pro metodu LES, viz odstavec 4.1. Dále mohou být odlišnosti zapříčiněny použitím stěnových funkcí pro modelování turbulentní mezní vrstvy, viz odstavec 4.3.

Na závěr této úlohy je na obr. 53 zobrazen pro ilustraci řez polem okamžitých rychlostí v čase $T=100T_0$.



Obr. 53: Rychlostní pole v rovině $z=0$ a čase $T=100T_0$

9 Výpočet proudění chladiva v palivovém souboru

V této kapitole je popsána problematika numerické simulace proudění uvnitř palivového souboru TVSA-T.mod.1 a TVSA-T.mod.2. Vzhledem ke komplexnosti geometrie palivového souboru a omezeným výpočetním prostředkům není možné řešit úlohu nestacionárního turbulentní proudění chladiva v celém rozsahu palivového souboru. Je tedy nutné ve výpočtovém modelu provést velkou míru zjednodušení oproti skutečné geometrii palivového souboru a omezit se pouze na jeho vybranou část.

Jak již bylo popsáno v úvodní části této disertační práce, prouděním chladiva palivovými soubory jsou silami od turbulentních struktur vybuzeny kmity palivových proudků. Odezvy palivových proudků od těchto budících sil jsou pokládány za jednu z hlavních příčin vzniku poškození Grid-to-Rod fretting. Protože mřížky palivových souborů, převážně deflektory mísících mřížek, významně navyšují intenzitu turbulencí, zaměřili jsme se při vytváření výpočtového modelu palivového souboru právě na okolí mřížek palivového souboru.

Pro nestacionární výpočet izotermického proudění nestlačitelné vazké kapaliny pomocí vlastního vyvinutého řešiče založeného na LBM se v této disertační práci omezíme na oblast zahrnující sedm palivových proudků, jednu distanční a jednu mísící mřížku (případně jednu kombinovanou mřížku pro řešení proudění v palivovém souboru TVSA-T.mod.1).

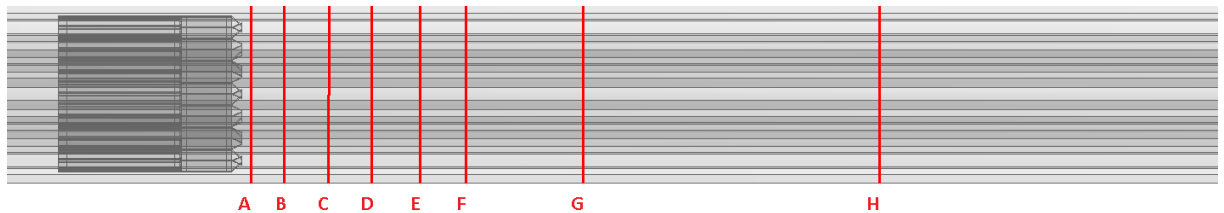
Provedené numerické simulace jsou cíleny na analýzu charakteru proudového pole v oblasti za deflektory mísících mřížek. Výsledky slouží k ověření použitelnosti lattice Boltzmannovy metody na tyto typy úloh.

9.1 Výpočtový model

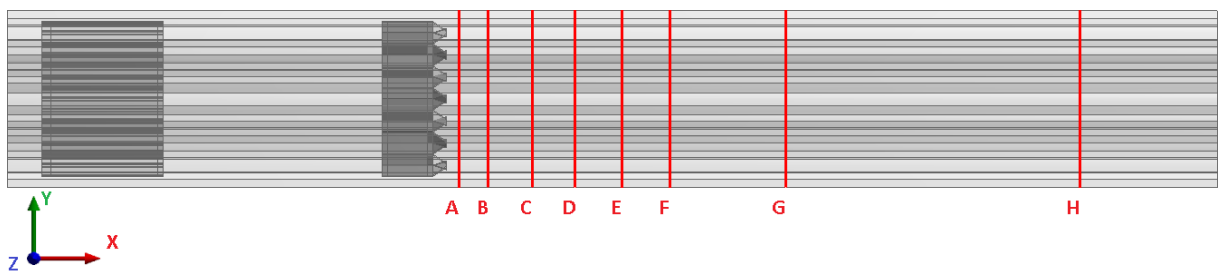
Pro numerické simulace byly vytvořeny dva odlišné geometrické modely. První zachycuje oblast za deflektory mísící mřížky palivového souboru TVSA-T.mod.1, viz obr. 54, a druhý za deflektory mísící mřížky palivového souboru TVSA-T.mod.2, viz obr. 55.

Hlavním rozdílem uvedených modelů je axiální poloha mísících mřížek. V případě palivového souboru TVSA-T.mod.1 je mísící mřížka přímo spojena s distanční a dohromady tvoří tzv. kombinovanou distanční mřížku na rozdíl od palivového souboru TVSA-T.mod.2, kde jsou jednotlivé mřížky od sebe odděleny. Další rozdíl jednotlivých modelů je v deflektorech mísících mřížek. Deflektory mísících mřížek palivového souboru TVSA-

T.mod.1 a TVSA-T.mod.2 se od sebe liší orientací a úhlem náklonu, viz obr. 56 a obr. 57. Detailněji je jejich geometrie popsána v kapitole 2 této disertační práce. Uvedené výpočtové modely jsou znázorněny na obr. 54, obr. 55 a obr. 57. V obrázcích jsou červenými čarami znázorněny polohy a označení příčných řezů, ve kterých je provedeno vyhodnocení získaných výsledků. Přesné polohy příčných řezů dané vzdálenostmi od konce deflektorů jsou uvedeny v tab. 4.

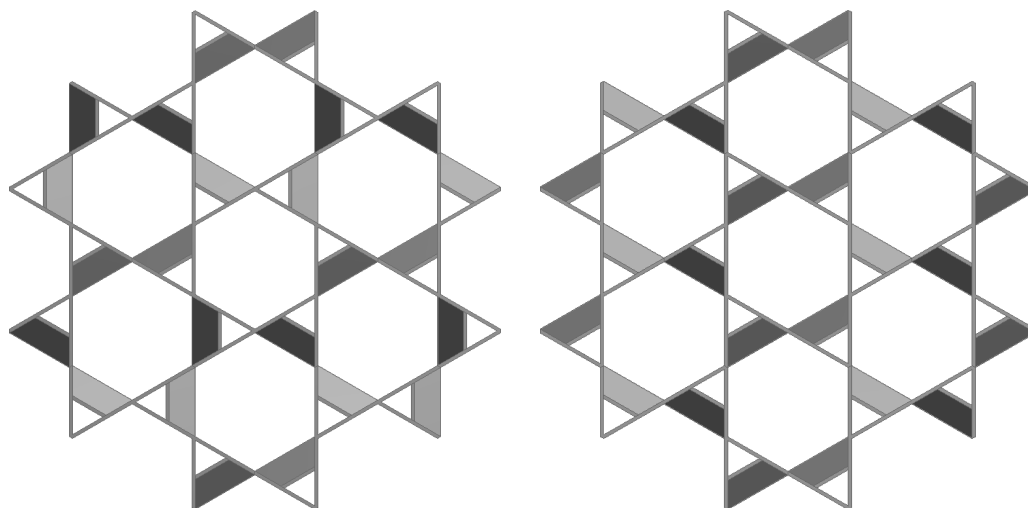


Obr. 54: Geometrie modelu TVSA-T.mod.1

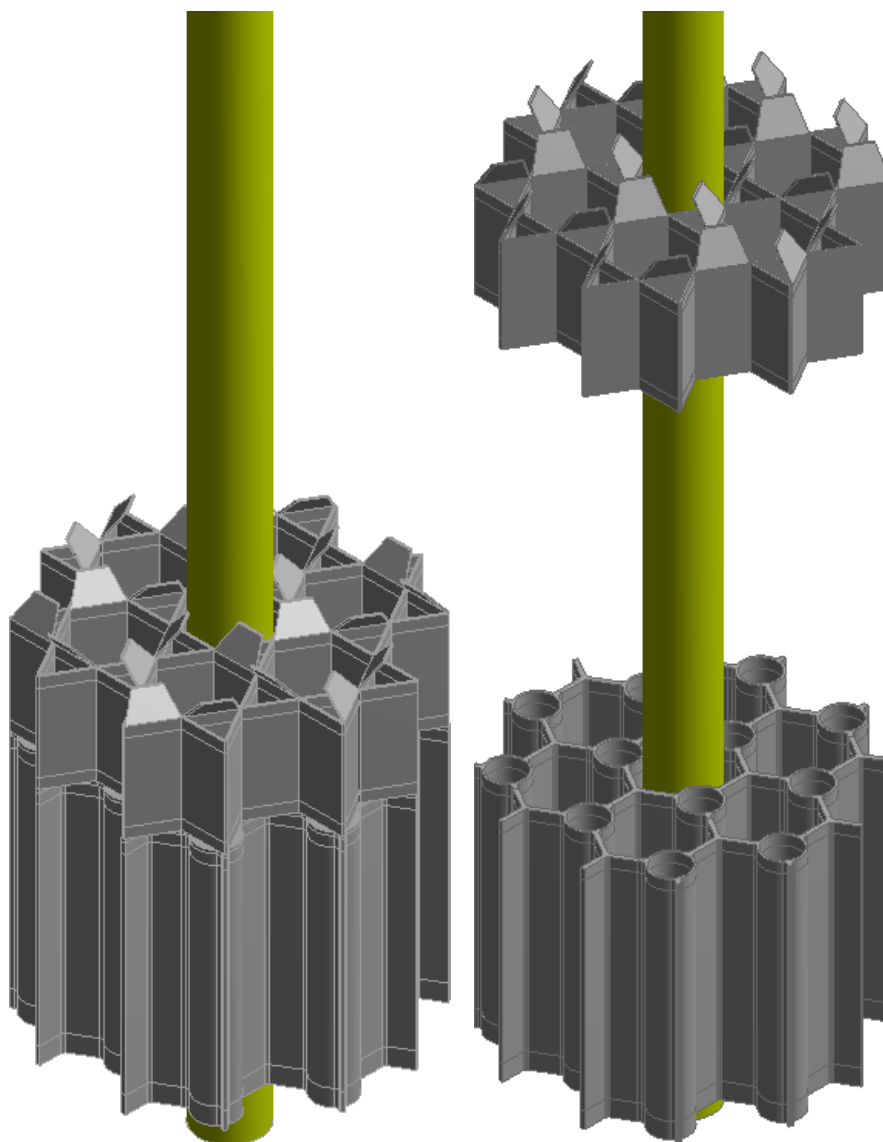


Obr. 55: Geometrie modelu TVSA-T.mod.2

Rozměry výpočtové oblasti jsou pro oba modely $350 \times 51 \times 44,17 \text{ mm}$. V prvním modelu pro palivový soubor TVSA-T.mod.1 je distanční mřížka umístěna na axiální souřadnici $x=20 \text{ mm}$ a mísící mřížka na $x=55 \text{ mm}$. Tyto dvě leží přímo na sobě a dohromady tvoří tzv. kombinovanou distanční mřížku. Ve druhém modelu pro palivový soubor TVSA-T.mod.2 je distanční mřížka umístěna na souřadnici $x=15 \text{ mm}$ a mísící na $x=115 \text{ mm}$. Vzdálenost mezi nimi je tedy 100 mm . Toto rozložení odpovídá rozložení mřížek v horní části palivového souboru TVSA-T.mod.2. Konkrétně tedy geometrie modelu palivového souboru TVSA-T.mod.2 zahrnuje sedmou a osmou mřížku, viz obr. 8 vpravo.



Obr. 56: Geometrie mísících mřížek modelu TVSA-T.mod1 (vlevo) a TVSA-T.mod.2 (vpravo)



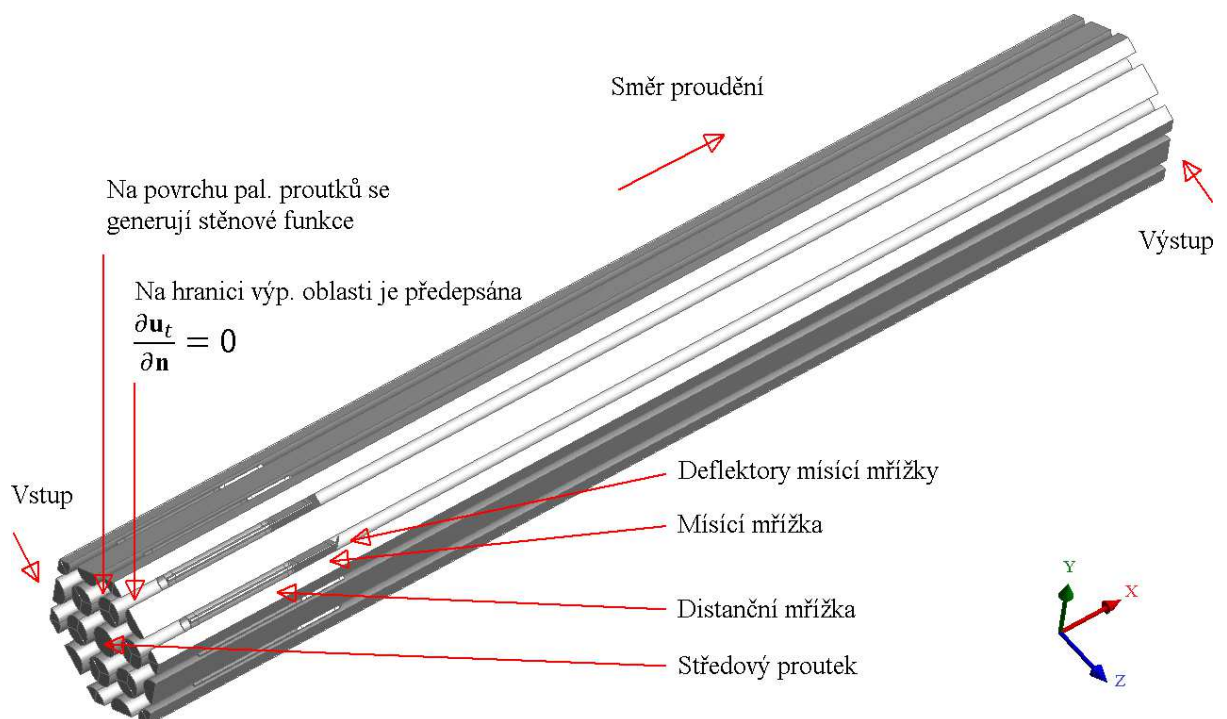
Obr. 57: Geometrie rozmístění jednotlivých mřížek modelu TVSA-T.mod1 (vlevo) a TVSA-T.mod.2 (vpravo) a zobrazení umístění středového proutku

Prostorová diskretizace výpočtového modelu je provedena pomocí neuniformní sítě, viz odstavec 6.2. Vzdálenost uzlů sítě v axiálním směru je měněna tak, aby byly přesněji popsány důležité části modelu (mřížky palivových souborů a oblast za deflektory mísících mřížek). Nejmenší krok sítě v x-ové ose je $\delta_x=2\text{ mm}$ a je použit na axiální oblasti dlouhé 75 mm , začínající od paty mísící mřížky. Od této souřadnice axiální krok sítě rovnoměrně narůstá až do velikosti $\delta_x=10\text{ mm}$. V příčných řezech je síť rovnoměrná s krokem $\delta_y=\delta_z=2\text{ mm}$. Tímto způsobem jsou síťovány oba uvedené modely. V tab. 3 jsou uvedeny počty uzlů sítě pro obě varianty.

Varianta	Počet uzlů
TVSA-T.mod.1	16 714 782
TVSA-T.mod.2	17 225 341

Tab. 3: Počty uzlů pro model TVSA-T.mod.1 a TVSA-T.mod.2

Při numerické simulaci byly použity standardní okrajové podmínky, viz obr. 58. Na vstupu do výpočtové oblasti byl předepsán konstantní rychlostní profil a na výstupu referenční tlak. Na palivových proutcích a na mřížkách se generují stěnové funkce, které použitím empirických formulí přemostňují vrstvu proudu u stěny, viz odstavec 4.3. Poskytují tak okrajové podmínky pro oblast proudu vně mezní vrstvy. Na ostatních hranicích výpočtové oblasti je uvažována Neumannova okrajová podmínka $\frac{\partial \mathbf{u}_t}{\partial \mathbf{n}} = 0$, kde \mathbf{n} normálový vektor stěny a \mathbf{u}_t je vektor tangenciální rychlosti. Její realizace je podrobně popsána v odstavci 3.7.3.



Obr. 58: Geometrie a okrajové podmínky

Reynoldsovo číslo v uvedených numerických simulacích je $Re=966\,336$. Hodnota je určena podle $Re = \frac{u \cdot D_h}{\nu}$ v závislosti na hydraulickém průřezu $D_h = 23,28\text{ mm}$, který byl stanoven v příčném řezu provedeném v místě mimo mřížky, na kinematické viskozitě kapaliny $\nu = 1,20455 \cdot 10^{-7}\text{ m}^2/\text{s}$ a na vstupní rychlosti $u = 5\text{ m/s}$ chladiva. Uvedená kinematická viskozita chladiva byla stanovena pro tlak 15.7 MPa a teplotu $306\text{ }^\circ\text{C}$, což nejlépe odpovídá provoznímu stavu.

9.2 Výsledky numerických simulací

Při numerických simulacích proudění v obou uvedených modelech jsme postupovali následujícím způsobem. Nejprve byla pro rozvinutí turbulence provedena simulace proudění po dobu $0,1\text{ s}$. Výsledná rychlostní a tlaková pole byla následně použita jako počáteční podmínka pro další výpočet po dobu $0,5\text{ s}$. Pro analýzu výsledných polí bylo zvoleno osm příčných řezů rozmístěných na úseku od konce deflektorů mísících mřížek k výstupu z výpočtové oblasti, viz obr. 54, obr. 55 a tab. 4. V každém z uvedených řezů byly ve dvanácti bodech, viz obr. 59, v průběhu výpočtu ukládány hodnoty rychlostí chladiva, které byly dále zpracovány.

Označení příčného řezu	Vzdálenost od konce deflektorů [mm]
A	2,0
B	12,0
C	24,2
D	35,8
E	48,0
F	60,2
G	100,0
H	186,0

Tab. 4: Souřadnice příčných vyhodnocovacích řezů

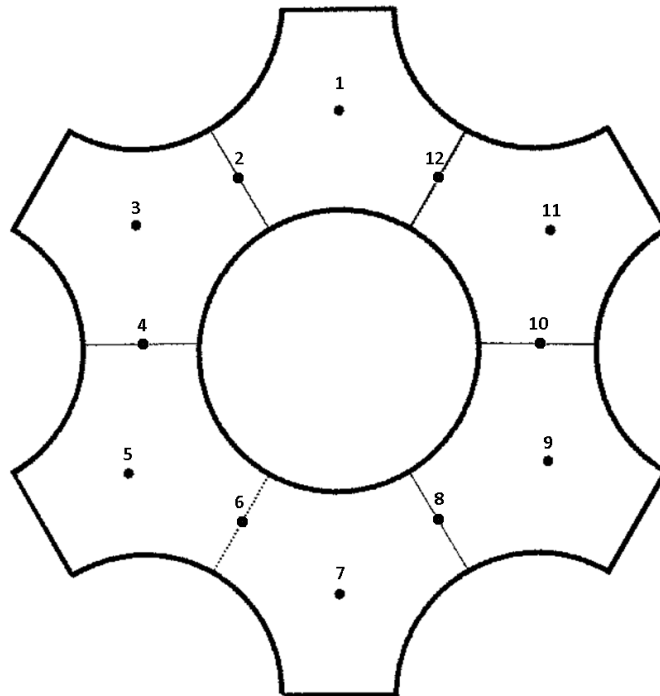
V každé iteraci numerické simulace byla určována síla, kterou příčné toky chladiva zatěžují palivový proutek umístěný uprostřed výpočtové oblasti, viz obr. 57 a obr. 58. K určení této síly byl povrch středového proutku, v úseku od konce deflektorů až k výstupu z výpočtové oblasti, rozdělen na 30 ekvidistantních axiálních úseků. Síla zatěžující proutek byla počítána a ukládána pro každý úsek zvlášť. Celkovou sílu působící na daný povrch

umístěný v proudovém poli nestlačitelné vazké kapaliny, jejíž dynamika je popsána pomocí Navierových-Stokesových rovnic, lze stanovit integrací vektoru napětí určeného normálou elementární plochy po tomto povrchu, viz rovnice (9.1),

$$\mathbf{F} = \int_{\partial\Omega} (-p\mathbf{I} + \nu(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T))\mathbf{n}dA, \quad (9.1)$$

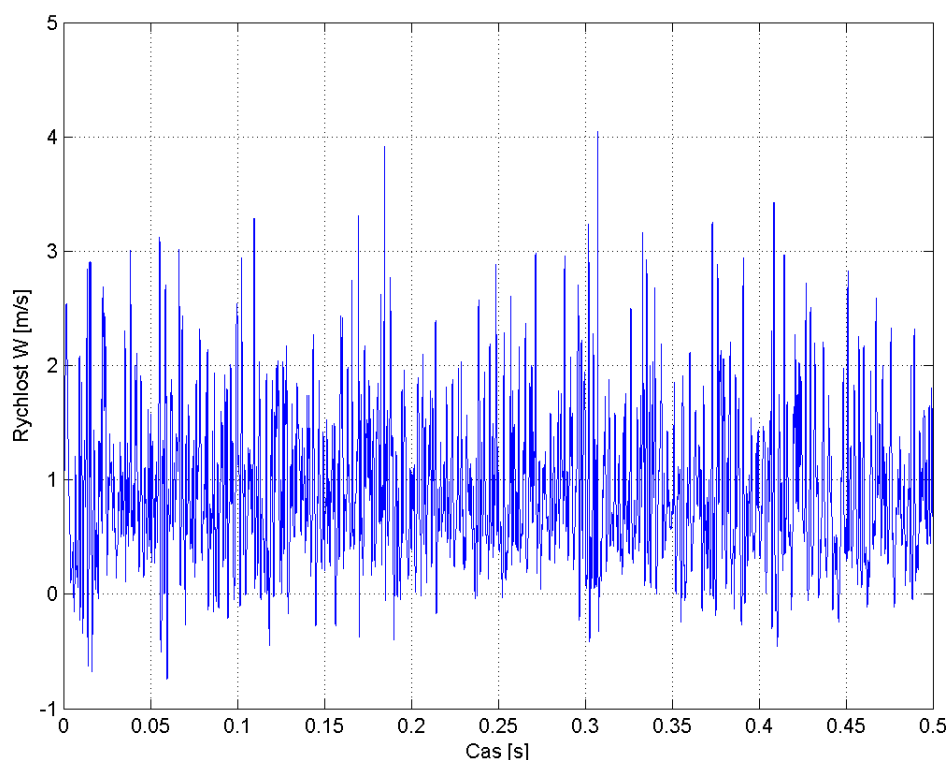
kde \mathbf{n} je jednotkový normálový vektor hranice oblasti $\partial\Omega$ směřující do proudového pole, \mathbf{I} je jednotkový tenzor druhého řádu a $\nabla\mathbf{u}$ je tenzor druhého řádu, jehož komponenty jsou $\partial_i u_j$.

Pro lattice Boltzmannovu metodu je přímé řešení uvedeného integrálu, viz rovnice (9.1), vzhledem k jednoduchosti ostatních částí algoritmu relativně komplikované. V práci [63] autoři přišli s metodou aproximace uvedeného integrálu založenou na změně hybnosti. Tato metoda umožňuje určit interakci kapaliny s pevnou stěnou přímo z hodnot distribučních funkcí a je implementována v námi vyvinutých algoritmech. Podrobně je popsána například v [56], kde ji autoři porovnávají s přímým řešením integrálu (9.1).



Obr. 59: Rozmístění vyhodnocovacích bodů

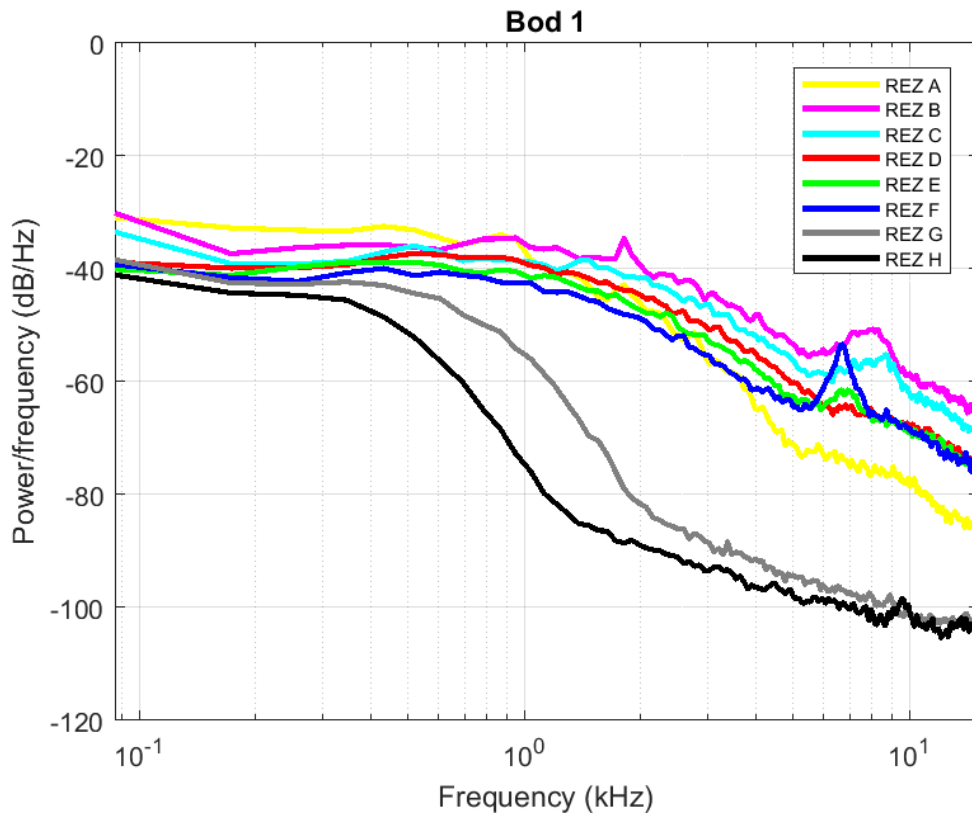
Výsledné hodnoty rychlostí chladiwa, které byly ukládány v každé iteraci, jak bylo popsáno výše, byly dále statisticky zpracovány. Na obr. 60 je pro ilustraci uveden časový záznam výsledné y-ové složky rychlosti v jednom z vyhodnocovacích bodů, konkrétně bod číslo 1 řezu B.



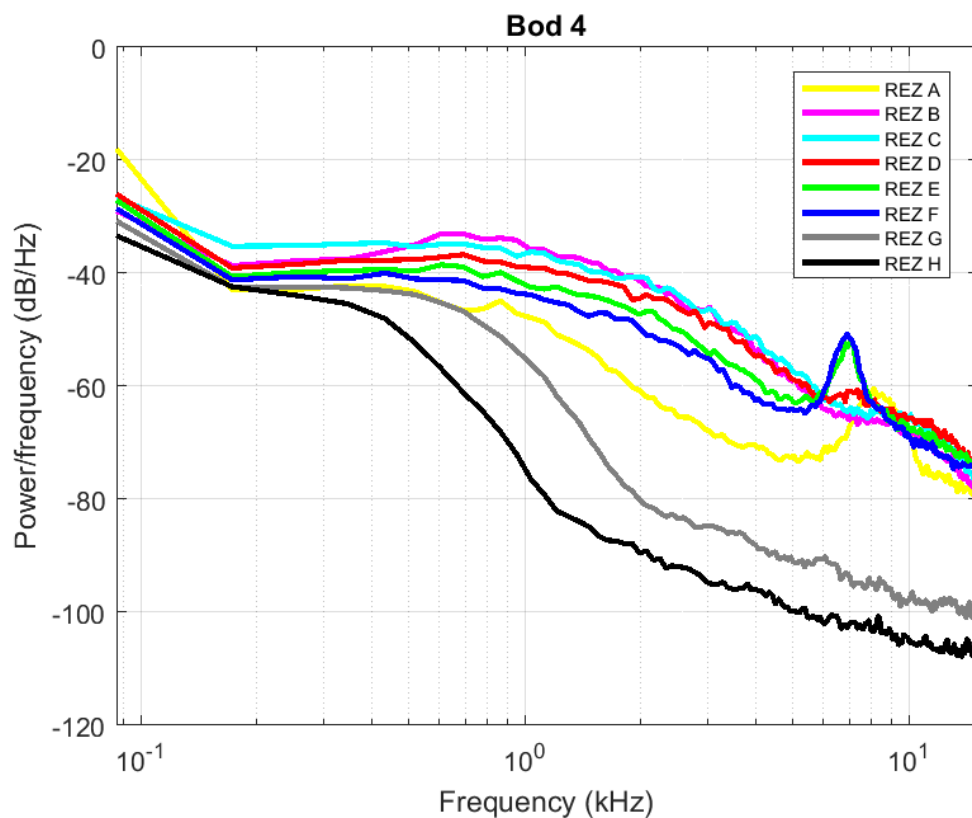
Obr. 60: Časový průběh y-ové složky rychlosti v bodě 1 a řezu B

Pro analýzu výsledných příčných rychlostí chladiva byla použita tzv. spektrální výkonová hustota. Výpočet spektrální výkonové hustoty jednotlivých složek rychlostí je proveden pomocí Welchovy metody, která je dostupná ve výpočtovém prostředí MATLAB. Tato metoda v podstatě rozdělí signál na více úseků s daným překryvem a z těchto úseků pak počítá spektrum pomocí Fourierovy transformace (FT). Výsledné spektrum je pak průměrem těchto jednotlivých spekter. Před výpočtem FT je signál ještě násoben tzv. okénkovou funkcí, v našem případě bylo použito tzv. Hammingovo okno.

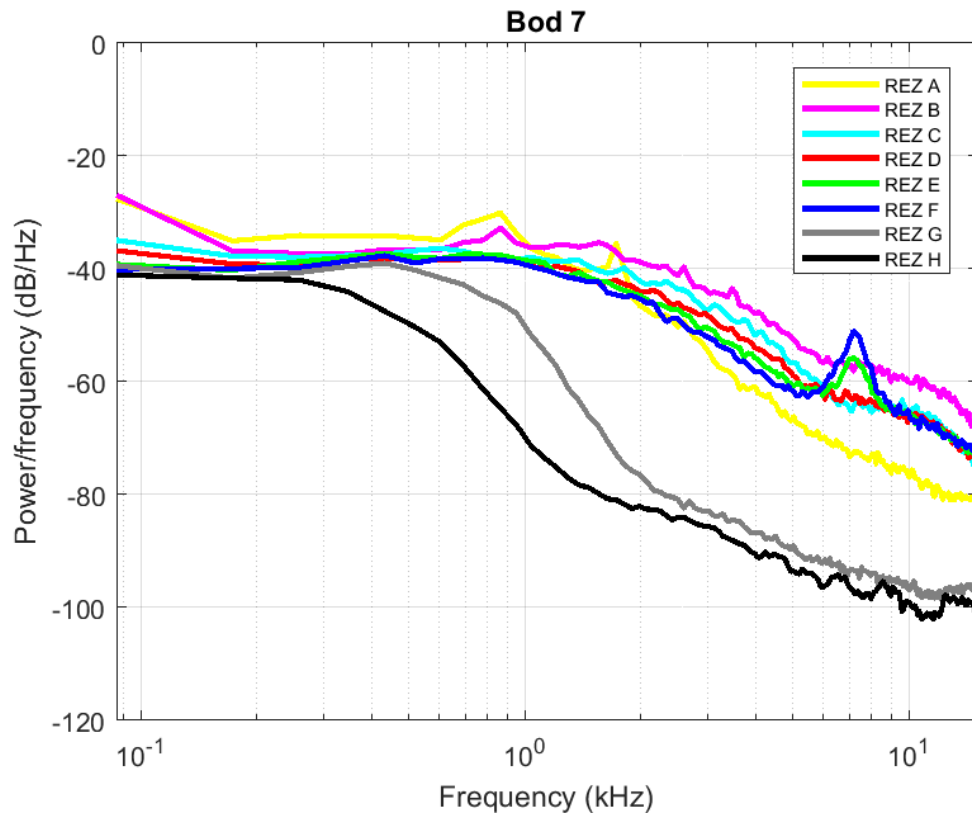
Spektrální výkonová hustota byla určena pro y-ovou a z-ovou složku příčné rychlosti ve všech dvanácti bodech a všech osmi řezech. Toto bylo provedeno pro oba výše uvedené modely palivových souborů. Celkem tedy bylo určeno v prostředí MATLAB 192 spekter. Na následujících obr. 61 ÷ obr. 68 jsou pro zjednodušení prezentována pouze některá vybraná spektra výkonové hustoty y-ové složky příčné rychlosti chladiva. Poznamenejme, že pro z-ovou složku rychlosti je charakter výsledných spekter velmi podobný, a proto je neuvádíme. Jednotlivé grafy jsou rozděleny podle vyhodnocovacích bodů a modelu palivového souboru. Každý graf obsahuje vždy osm spekter v logaritmickém měřítku, které odpovídají jednotlivým vyhodnocovacím příčným řezům, viz obr. 54, obr. 55 a tab. 4.



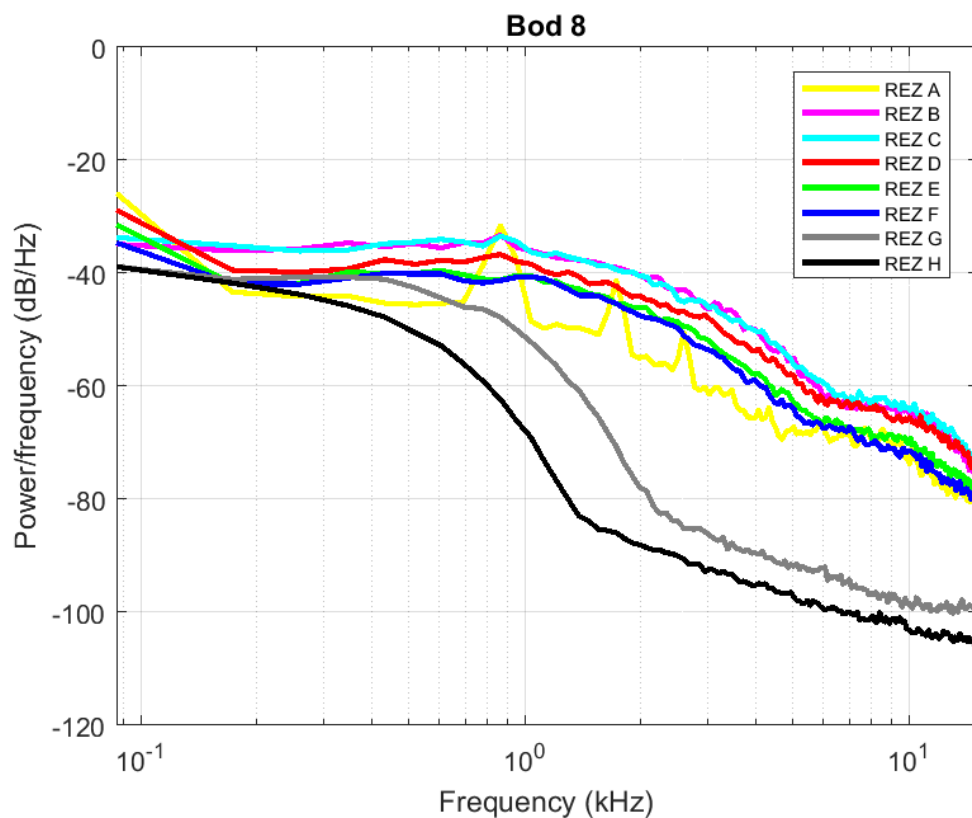
Obr. 61: Spektrální výkonová hustota pro y-ovou složku rychlosti chladiva ve vyhodnocovacím bodě číslo 1 pro TVSA-T.mod1



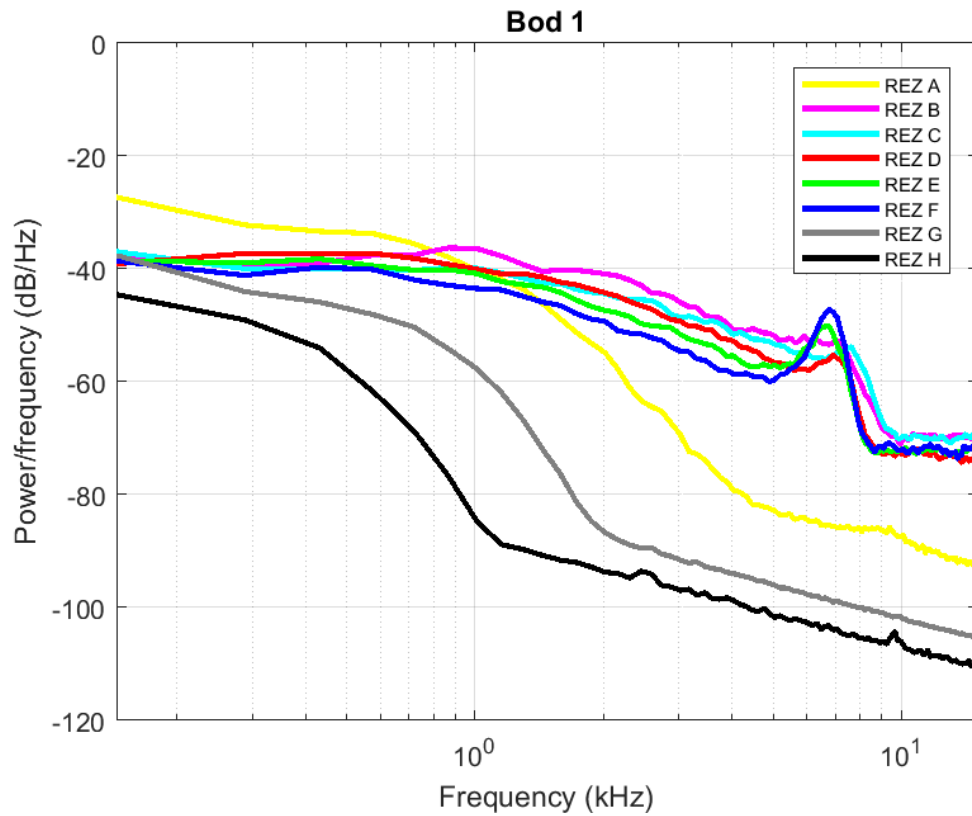
Obr. 62: Spektrální výkonová hustota pro y-ovou složku rychlosti chladiva ve vyhodnocovacím bodě číslo 4 pro TVSA-T.mod1



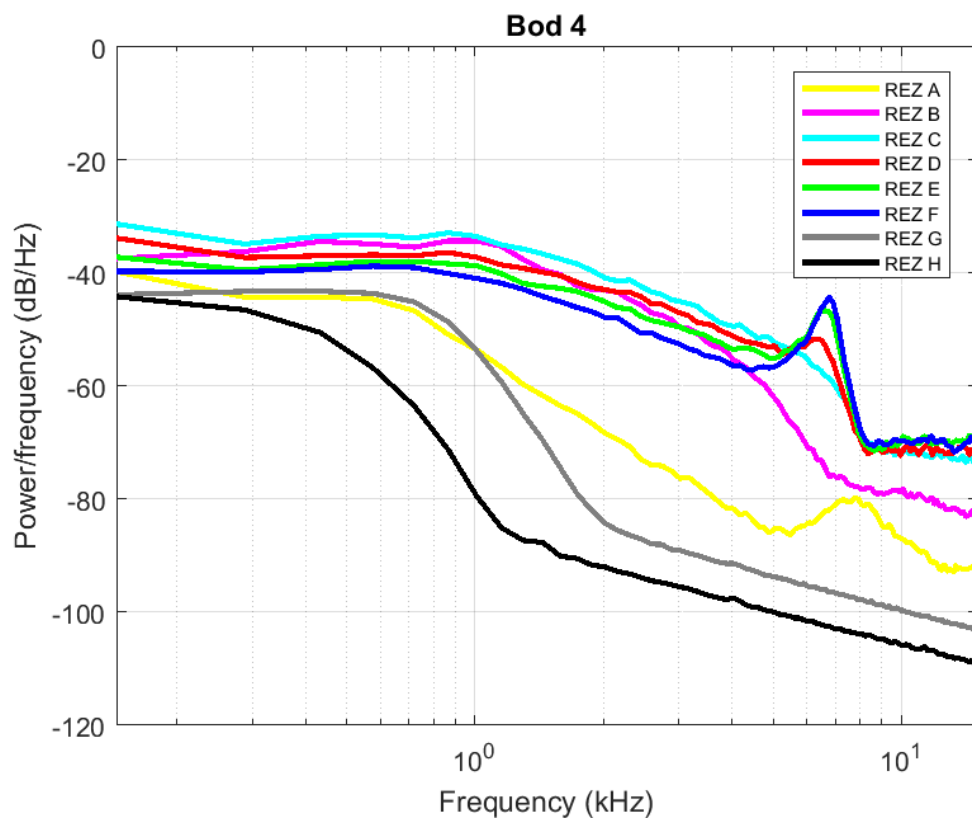
Obr. 63: Spektrální výkonová hustota pro y-ovou složku rychlosti chladiva ve vyhodnocovacím bodě číslo 7 pro TVSA-T.mod1



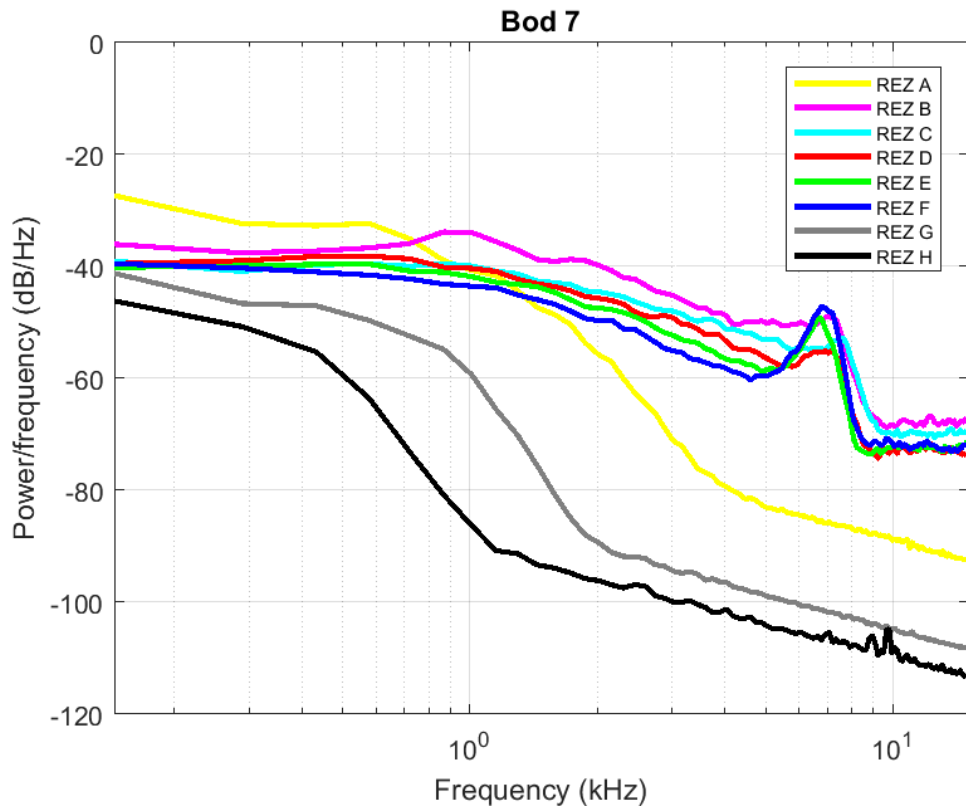
Obr. 64: Spektrální výkonová hustota pro y-ovou složku rychlosti chladiva ve vyhodnocovacím bodě číslo 8 pro TVSA-T.mod1



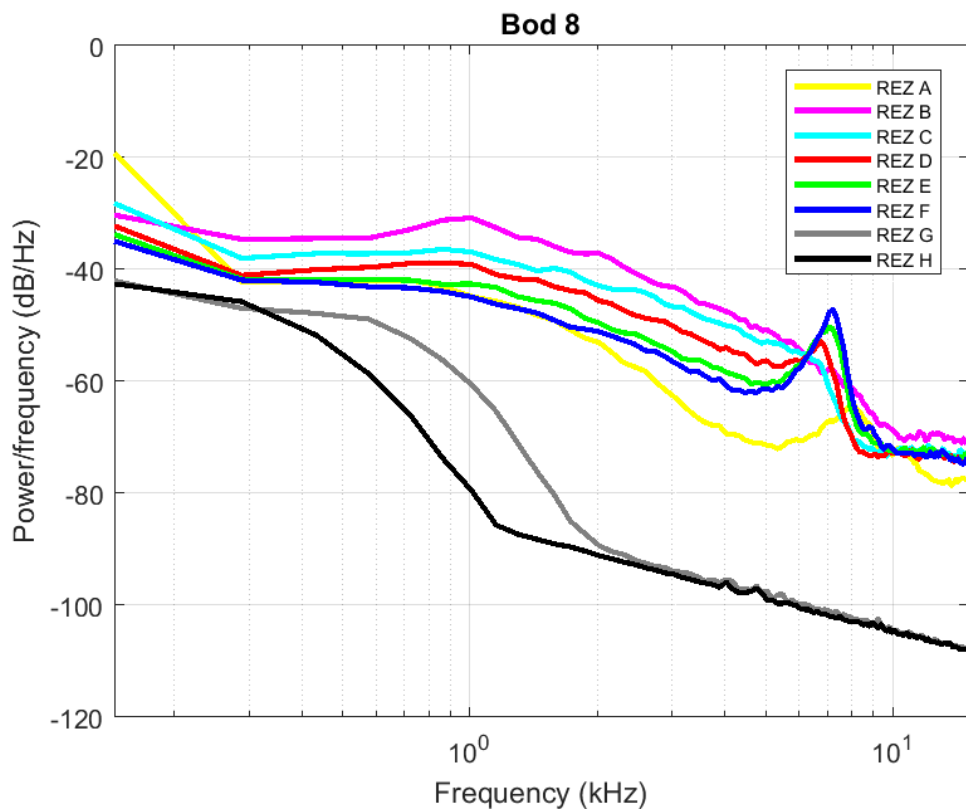
Obr. 65: Spektrální výkonová hustota pro y-ovou složku rychlosti chladiva ve vyhodnocovacím bodě číslo 1 pro TVSA-T.mod2



Obr. 66: Spektrální výkonová hustota pro y-ovou složku rychlosti chladiva ve vyhodnocovacím bodě číslo 4 pro TVSA-T.mod2



Obr. 67: Spektrální výkonová hustota pro y-ovou složku rychlosti chladiva ve vyhodnocovacím bodě číslo 7 pro TVSA-T.mod2



Obr. 68: Spektrální výkonová hustota pro y-ovou složku rychlosti chladiva ve vyhodnocovacím bodě číslo 8 pro TVSA-T.mod2

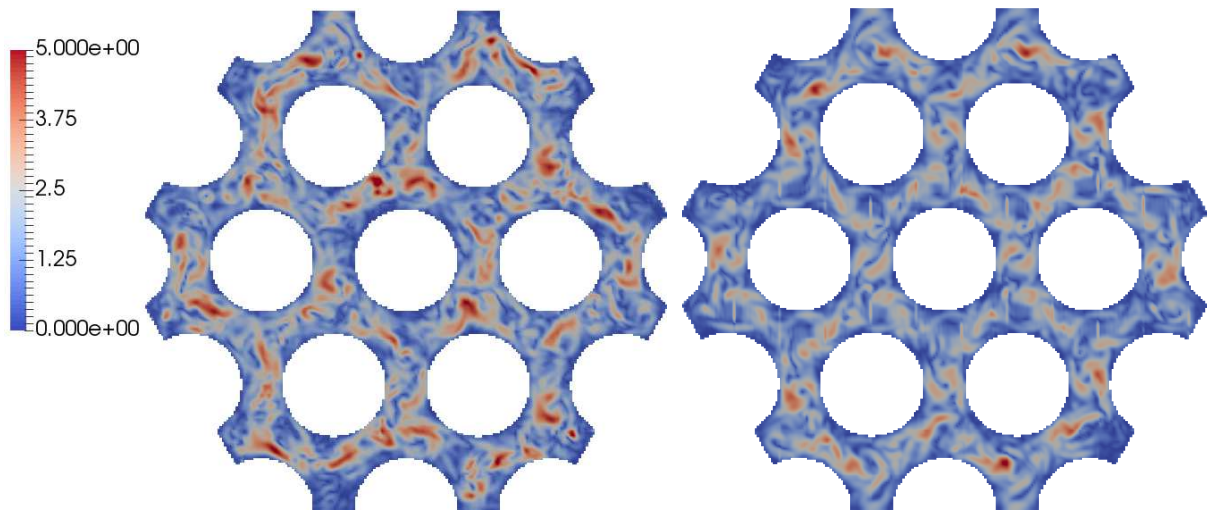
Vyhodnocením spektrální výkonové hustoty ve všech 192 spektrech v nich nebyly nalezeny žádné významné frekvence. Většina energie je relativně rovnoměrně rozprostřena mezi frekvencemi do 10 kHz. Z uvedených grafů spektrální výkonové hustoty, viz obr. 61 ÷ obr. 68 je zřejmá klesající amplituda s rostoucí vzdáleností od deflektorů mísících mřížek. Ve výsledcích prezentovaných např. v [34] a [37] byl pozorován stejný charakter proudového pole. Uvedené dokumenty tedy potvrzují správnost tohoto trendu v námi provedených simulacích proudění chladiva v modelu palivového souboru TVSA-T.mod.1 a TVSA-T.mod.2. Poznamenejme, že výjimkou je spektrum získané v příčném řezu s označením A, které neobsahuje vždy vyšší amplitudy oproti následným řezům B až H. Důvodem je, že tento řez je umístěn pouze ve vzdálenosti 2 mm od konce deflektorů, a proto zde ještě není plně rozvinutý turbulentní charakter proudového pole.

Jak bylo popsáno v kapitole 4, metoda LES reprezentuje turbulentní útvary velkých měřítek přímo, zatímco malé jsou modelovány pomocí Smagorinského subgridního modelu. Tuto skutečnost lze pozorovat ze spektrální výkonové hustoty provedené v bodech řezu G a H. Ve spektrech určených v bodech řezů G a H je celkový podíl energie obsažený v nižších frekvencích (do 1kHz) větší než v předchozích řezech. Jeden z důvodů je, že jsou tyto řezy umístěny ve větší vzdálenosti od konce deflektorů mísících mřížek. Dalším důvodem ale je, že je zde použit větší prostorový krok sítě v axiálním směru než v předchozích příčných řezech. Ze vztahu (4.6) pro výpočet subridní viskozity plyne její závislost na δ_x^2 . S rostoucím krokem sítě tedy významně narůstá oblast malých měřítek s vysokou prostorovou frekvencí, která nejsou přímo rozřešena, a proto nejsou zachycena v grafech spektrální výkonové hustoty příčných rychlostí chladiva. Větší krok sítě v těchto příčných řezech je použit z předpokladu, že v této vzdálenosti od konce deflektorů mísících mřížek je již většina energie a anizotropie turbulencí obsažena ve vírech velkých měřítek, a tedy modelování větší oblasti malých disipativních vírů zde významně neovlivní amplitudy sil příčných toků chladiva působící na palivové proutky. Porovnání vlivu velikosti sítě na spektra v jednotlivých řezech by mohlo být dalším navazujícím krokem na tuto disertační práci.

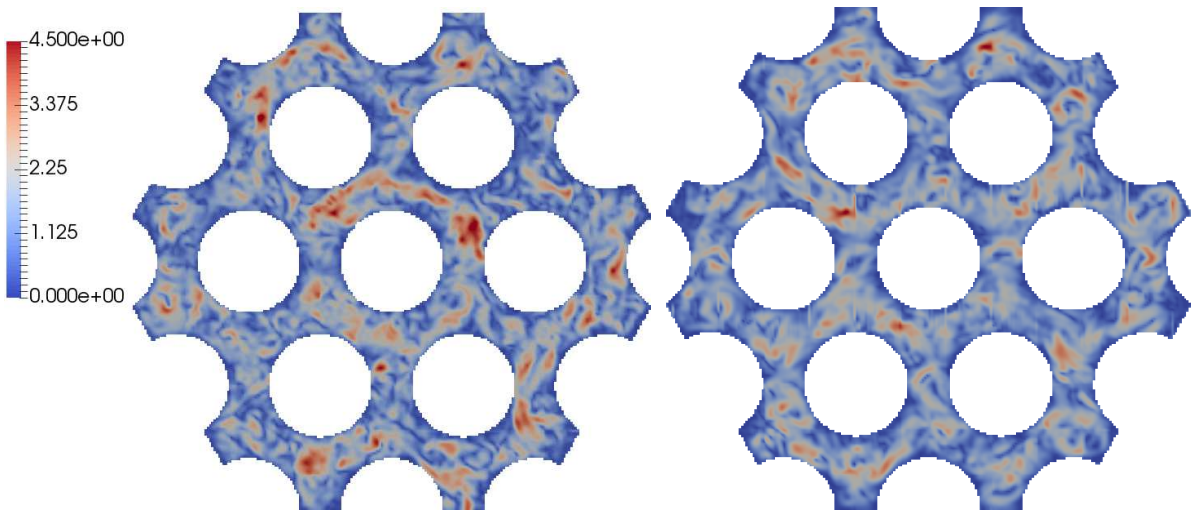
Následující obr. 69 ÷ obr. 76 zobrazují velikosti příčných rychlostí ve zvolených vyhodnocovacích řezech, viz obr. 54, obr. 55 a tab. 4. Zobrazeny jsou vždy okamžité hodnoty příčné rychlosti, viz (9.2), v čase 0.5 s pro model TVSA-T.mod.1 a TVSA-T.mod.2.

$$|\mathbf{vw}| = \sqrt{v^2 + w^2}, \quad (9.2)$$

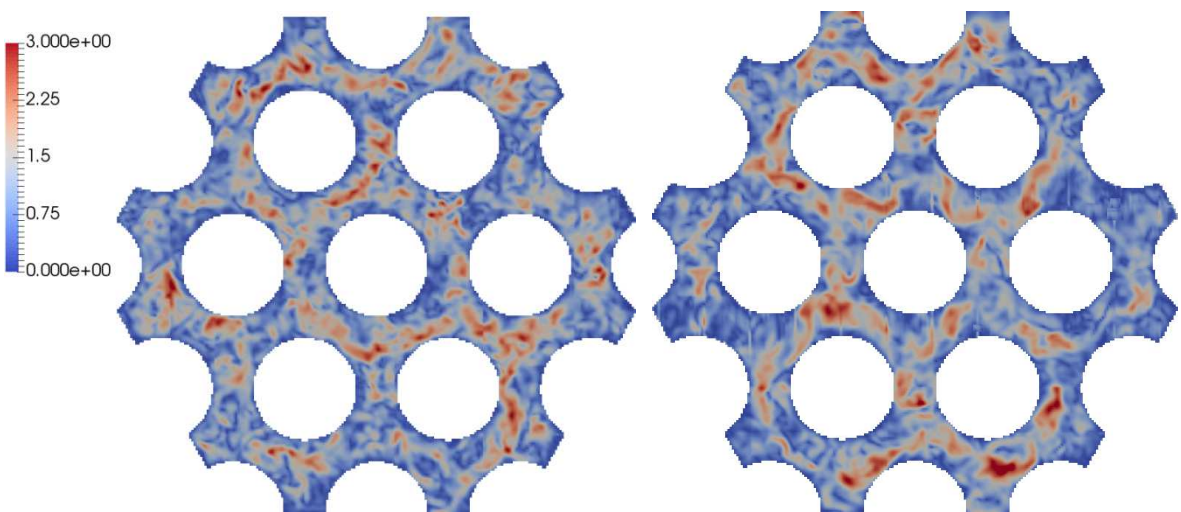
Poznamenejme, že barevná škála je v obr. 69 ÷ obr. 76 vždy přizpůsobena lokálním hodnotám příčných rychlostí daného řezu uvedených v jednotkách m/s.



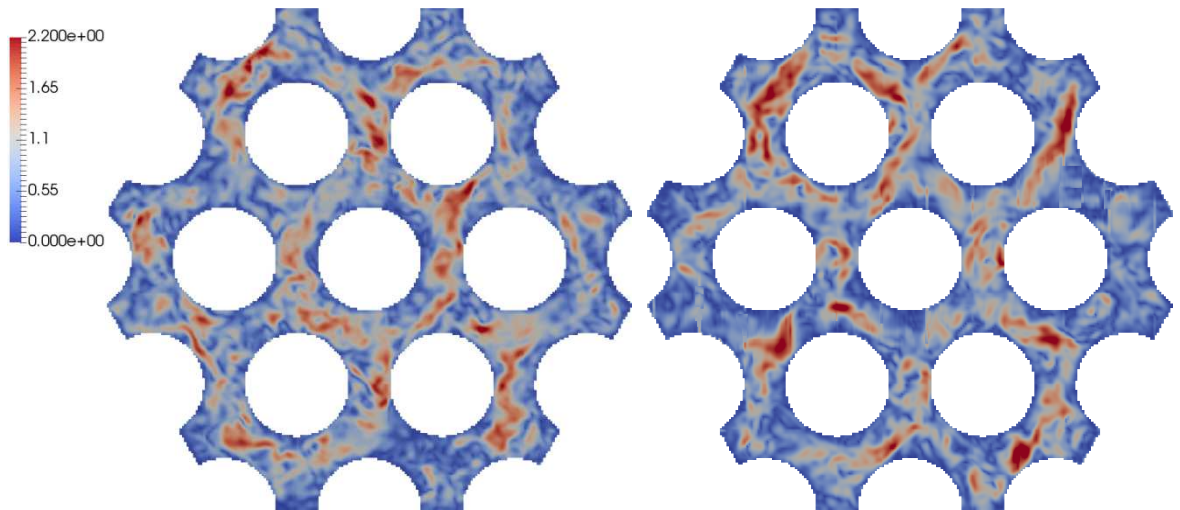
Obr. 69: Velikost příčné rychlosti [m/s] v řezu A pro TVSA-T.mod1 (vlevo) a TVSA-T.mod2 (vpravo)



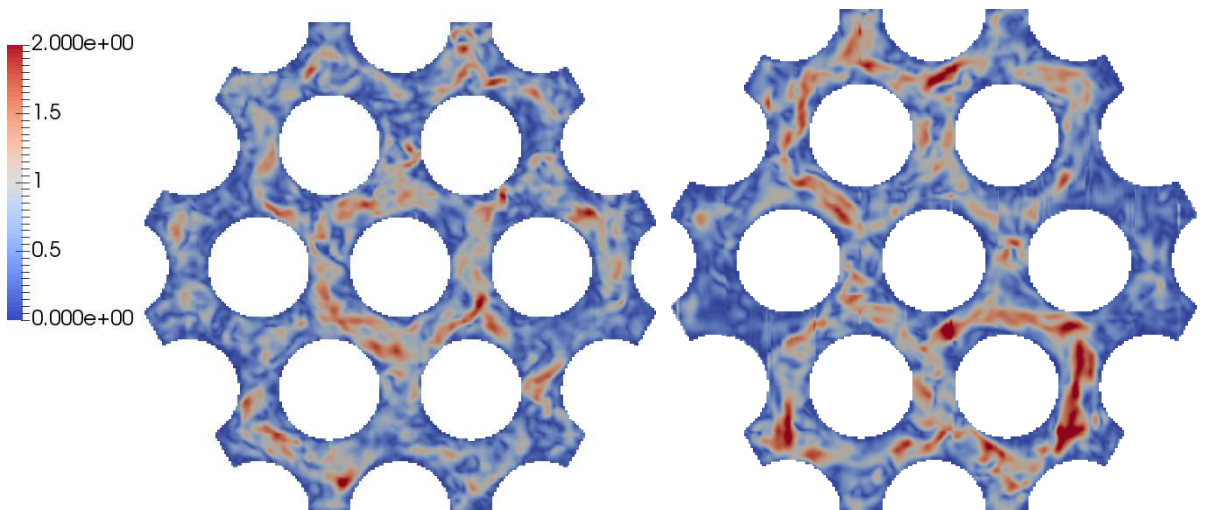
Obr. 70: Velikost příčné rychlosti [m/s] v řezu B pro TVSA-T.mod1 (vlevo) a TVSA-T.mod2 (vpravo)



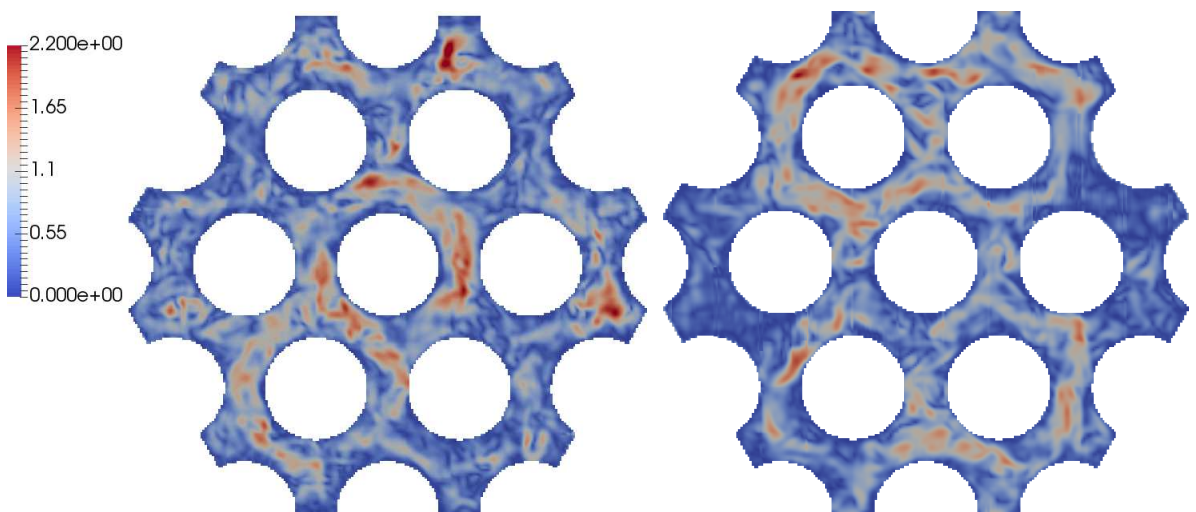
Obr. 71: Velikost příčné rychlosti [m/s] v řezu C pro TVSA-T.mod1 (vlevo) a TVSA-T.mod2 (vpravo)



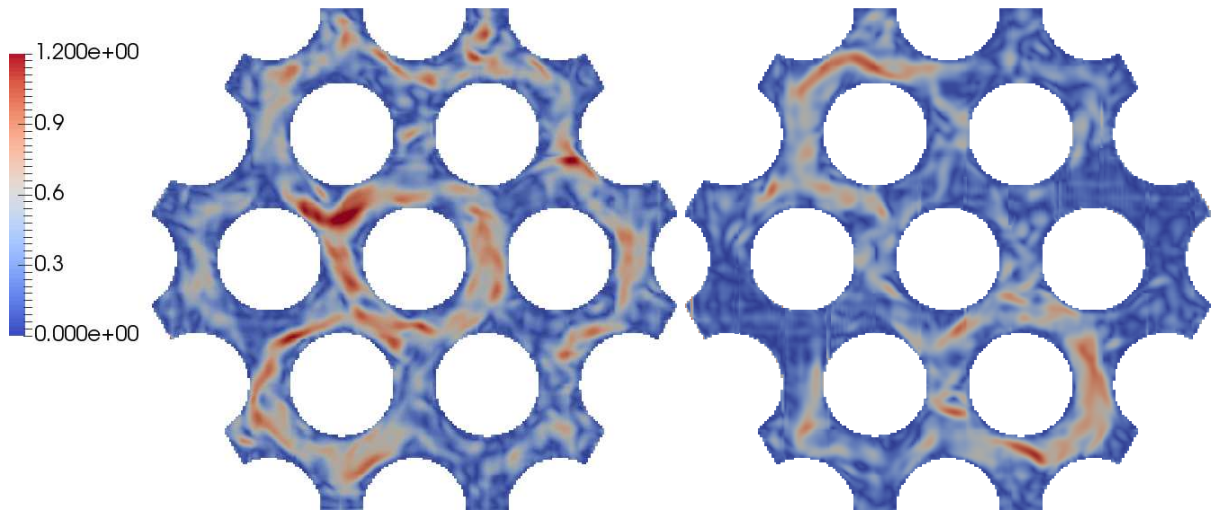
Obr. 72: Velikost příčné rychlosti [m/s] v řezu D pro TVSA-T.mod1 (vlevo) a TVSA-T.mod2 (vpravo)



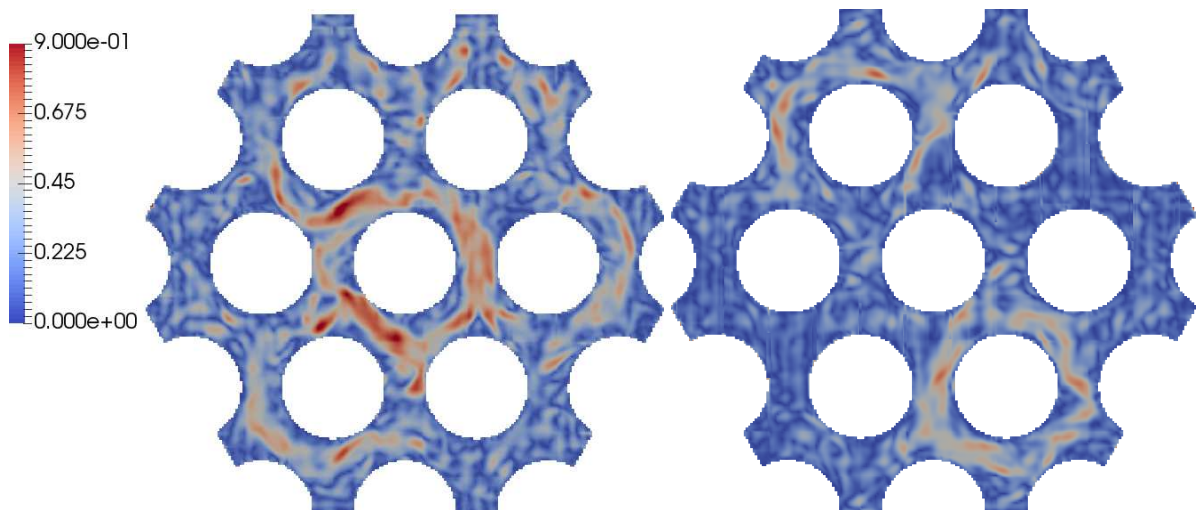
Obr. 73: Velikost příčné rychlosti [m/s] v řezu E pro TVSA-T.mod1 (vlevo) a TVSA-T.mod2 (vpravo)



Obr. 74: Velikost příčné rychlosti [m/s] v řezu F pro TVSA-T.mod1 (vlevo) a TVSA-T.mod2 (vpravo)



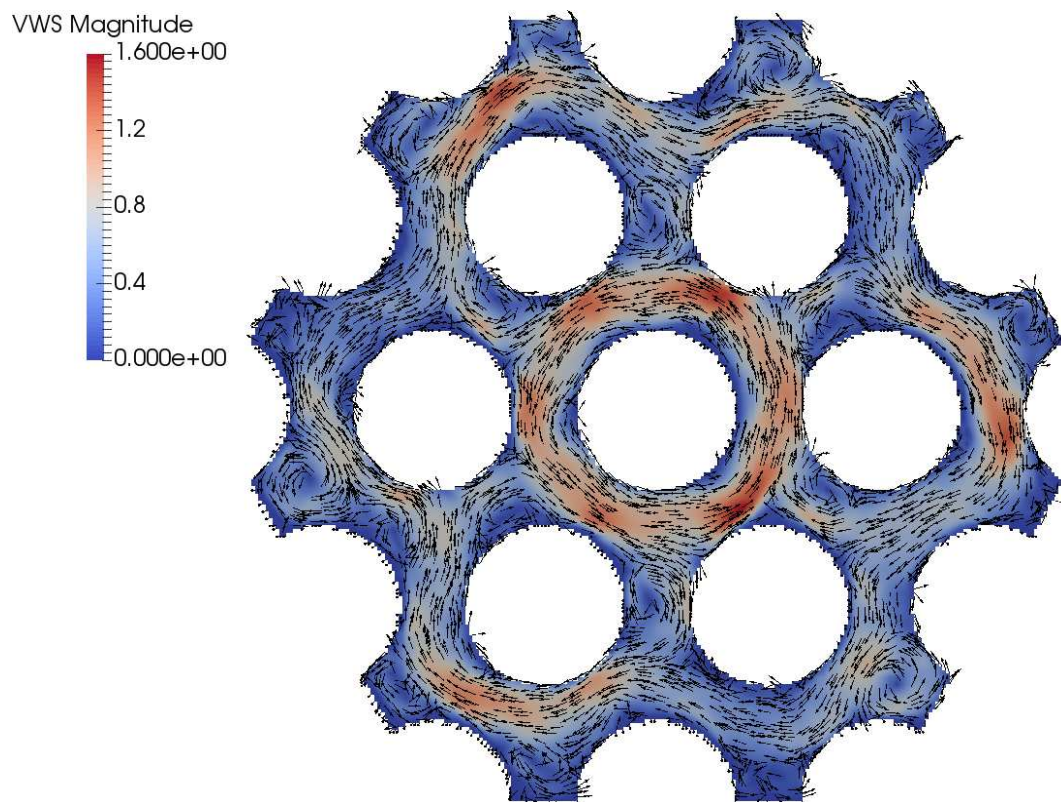
Obr. 75: Velikost příčné rychlosti [m/s] v řezu G pro TVSA-T.mod1 (vlevo) a TVSA-T.mod2 (vpravo)



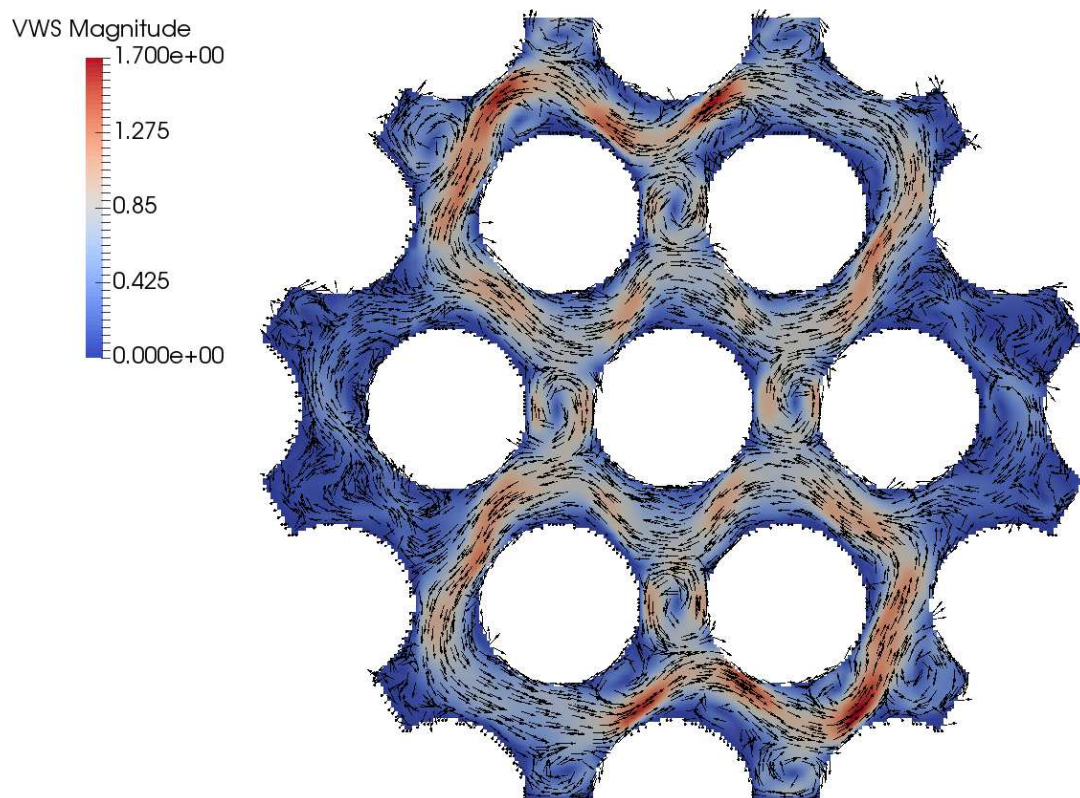
Obr. 76: Velikost příčné rychlosti [m/s] v řezu H pro TVSA-T.mod1 (vlevo) a TVSA-T.mod2 (vpravo)

Z výsledných hodnot okamžitých příčných rychlostí chladiva v jednotlivých vyhodnocovacích řezech uvedených na obr. 69 ÷ obr. 76 je zřejmé, že maximální hodnoty příčných rychlostí klesají s rostoucí vzdáleností od konce deflektorů mísících mřížek. Tento trend byl potvrzen jak u modelu palivového souboru TVSA-T.mod.1, tak u modelu palivového souboru TVSA-T.mod.2 a je v souladu s výsledky prezentovanými např. v [34] a [37]. Z obr. 69 ÷ obr. 76 je dále patrný vliv menšího axiálního kroku sítě v oblasti řezů G a H na charakter proudového pole. Jak bylo uvedeno výše, větší diskretizační prostorový krok rozšiřuje oblast vírů malých měřítek s vysokou prostorovou frekvencí, která nejsou přímo rozřešena. V proudovém poli příčných rychlostí na obr. 75 a obr. 76 tedy převládají vírové struktury větších měřítek oproti proudovému poli v předchozích řezech.

Na obr. 77 a obr. 78 jsou znázorněny časově středované hodnoty a vektory příčných rychlostí, viz (9.2), v příčném řezu D modelu TVSA-T.mod.1 a TVSA-T.mod.2.

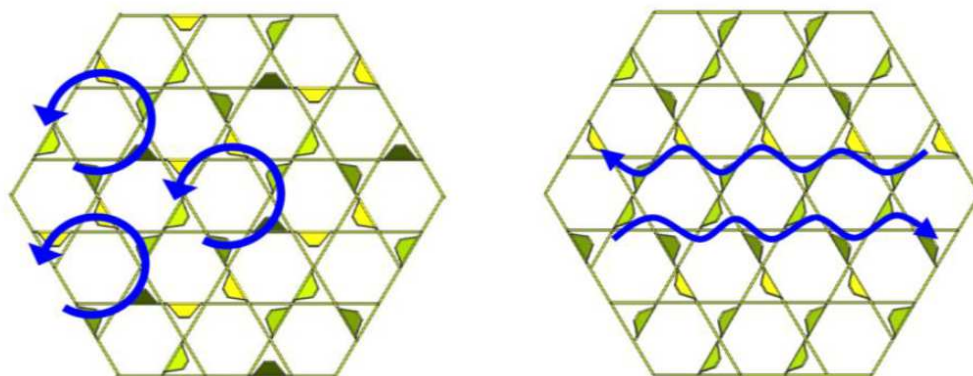


Obr. 77: Časově středované hodnoty příčných rychlostí [m/s] v řezu D pro TVSA-T.mod.1



Obr. 78: Časově středované hodnoty příčných rychlostí [m/s] v řezu D pro TVSA-T.mod.2

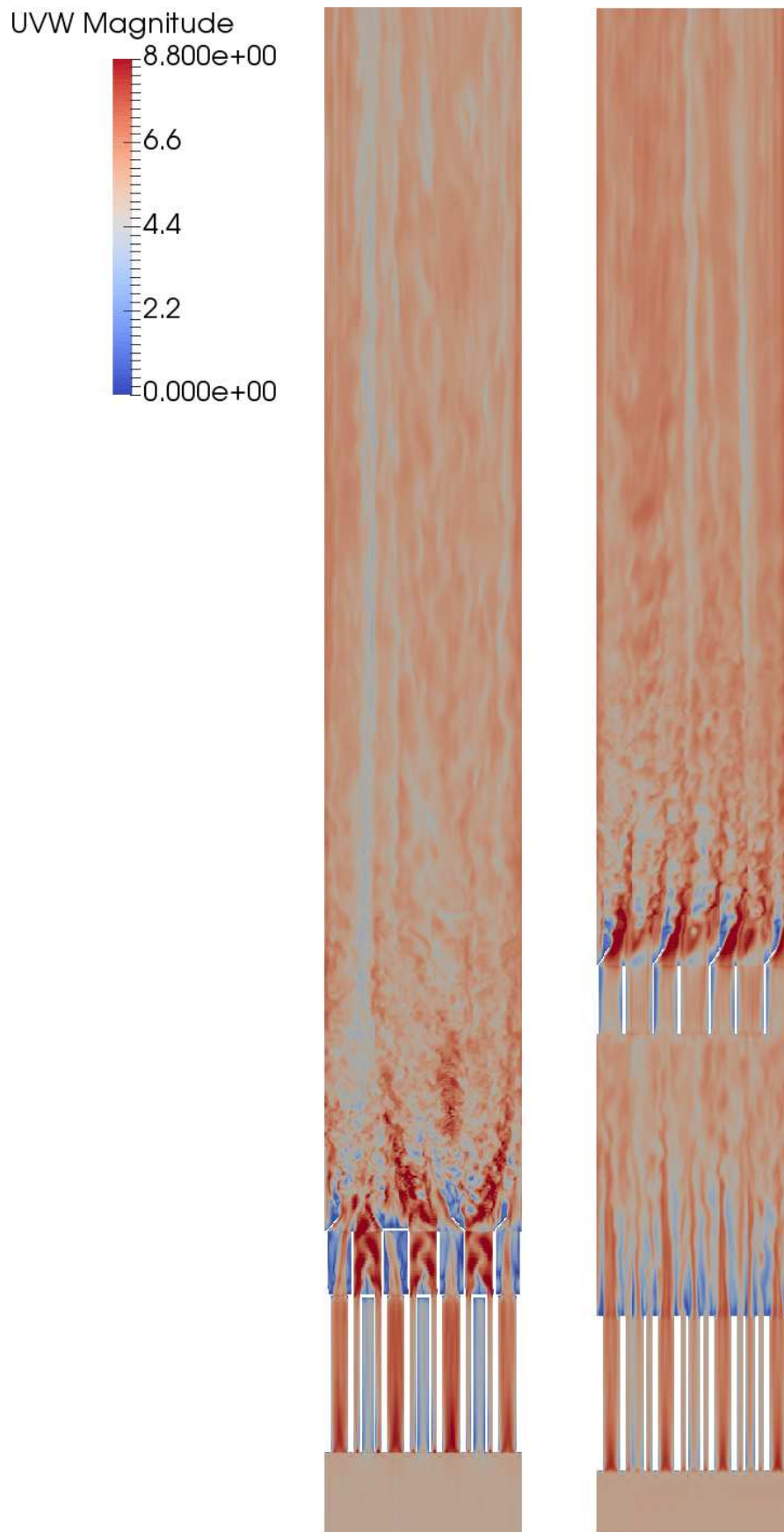
Z výsledných hodnot časově středovaných příčných rychlostí chladiva, viz obr. 77 a obr. 78 je patrný vliv odlišné orientace deflektorů mísících mřížek jednotlivých typů palivových souborů. Výsledný charakter proudového pole velmi dobře odpovídá predikovanému, který byl popsán kapitole 2 a je znovu uveden pro přehlednost na obr. 79.



Obr. 79: Očekávaný vliv deflektorů mřížek PS TVSA-T.mod.1 (vlevo) a TVSA-T.mod.2 (vpravo) na charakter proudového pole

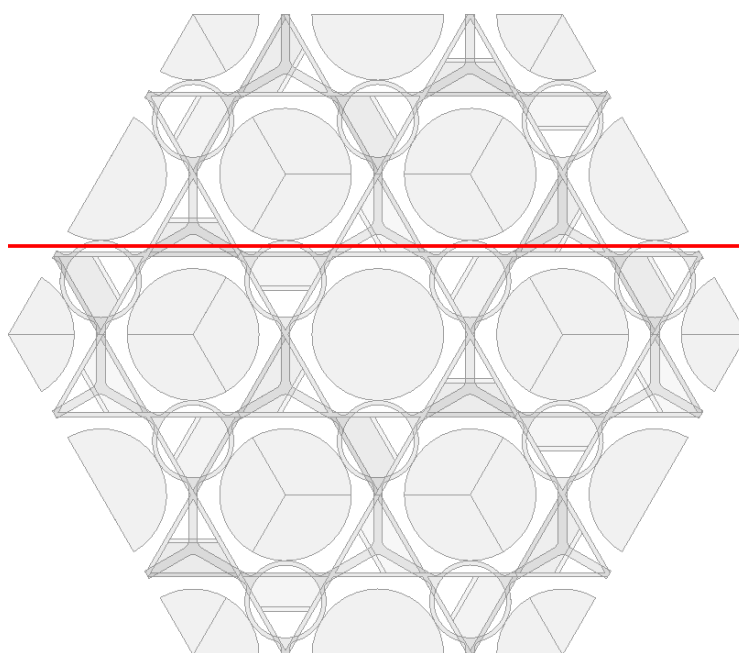
Dosažené výsledky tedy potvrzují skutečnost, že je chladivo po výstupu z mísící mřížky palivového souboru TVSA-T.mod.1 jejími deflektory „roztáčeno“ kolem osy obtékaného palivového prouku, obr. 77. Zatímco odlišná orientace a úhel náklonu deflektorů mísící mřížky palivového souboru TVSA-T.mod.2 způsobuje, že chladivo je v přemísťováno v rámci jednotlivých řad palivových prouků, obr. 78. Poznamenejme, že v obr. 77 a obr. 78 jsou hodnoty časově středovaných příčných rychlostí chladiva znázorněny v řezu s označením D. Tento řez byl zvolen, protože je v něm výše popsán charakter proudového pole nejvíce patrný.

Na obr. 80 je pro ilustraci znázorněn axiální řez výsledného pole okamžitých rychlostí chladiva $|\mathbf{u}| = \sqrt{u^2 + v^2 + w^2}$ v čase 0.5 s pro model palivového souboru TVSA-T.mod.1 a TVSA-T.mod.2.



Obr. 80: Velikost okamžitých rychlostí [m/s] v axiálním řezu modelu TVSA-T.mod.1 (vlevo) a TVSA-T.mod.2 (vpravo)

Z obr. 80 je patrné rozdělení distanční a mísící mřížky v modelu palivového souboru TVSA-T.mod.2 oproti palivovému souboru TVSA-T.mod.1, kde je distanční a mísící mřížka spojena v jednu kombinovanou distanční mřížku. Obrázek je zde uveden pro ilustraci turbulentních struktur v proudovém poli chladiva a potvrzuje předpoklad, že mřížky palivových souborů jejich intenzitu značně navyšují. Poloha řezu znázorněného na obr. 80 je vyznačena červenou čarou na obr. 81.



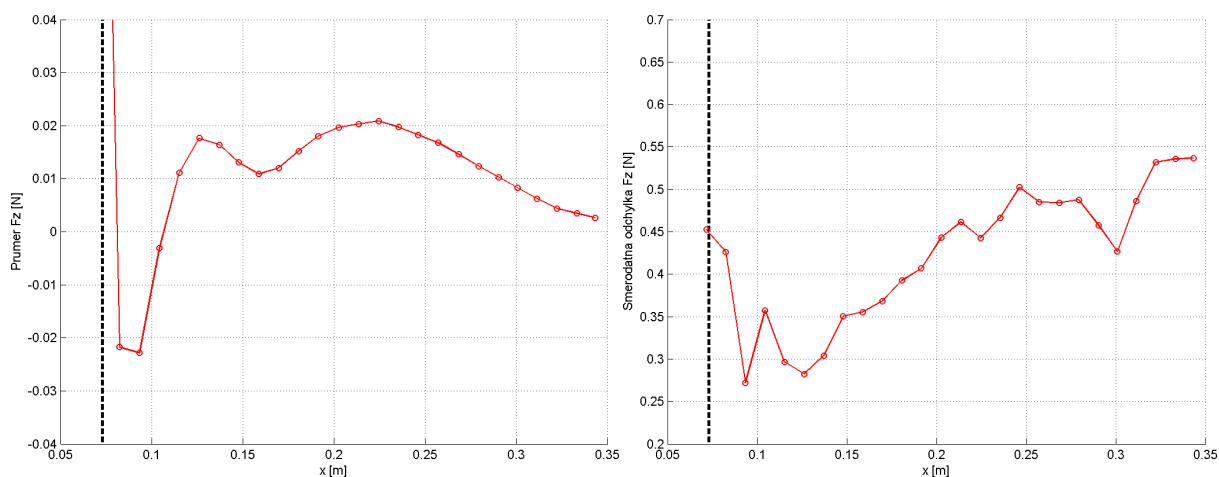
Obr. 81: *Ilustrace polohy axiálního řezu pro vykreslení proudového pole*

V poslední části zpracování numerických výsledků byla provedena analýza silového působení příčných rychlostí chladiva na středový proutek výpočtové oblasti, viz obr. 57 a obr. 58. Jak jsme již uvedli, středový proutek, v úseku od konce deflektorů až k výtoku, je rozdělen na 30 ekvidistantních axiálních úseků, ve kterých byla v každé iteraci počítána výsledná působící síla od příčných rychlostí chladiva. Tato síla byla určena, jak jsme uvedli v úvodu této kapitoly, metodou založenou na změně hybnosti, která aproximuje integrál uvedený v rovnici (9.1), [56].

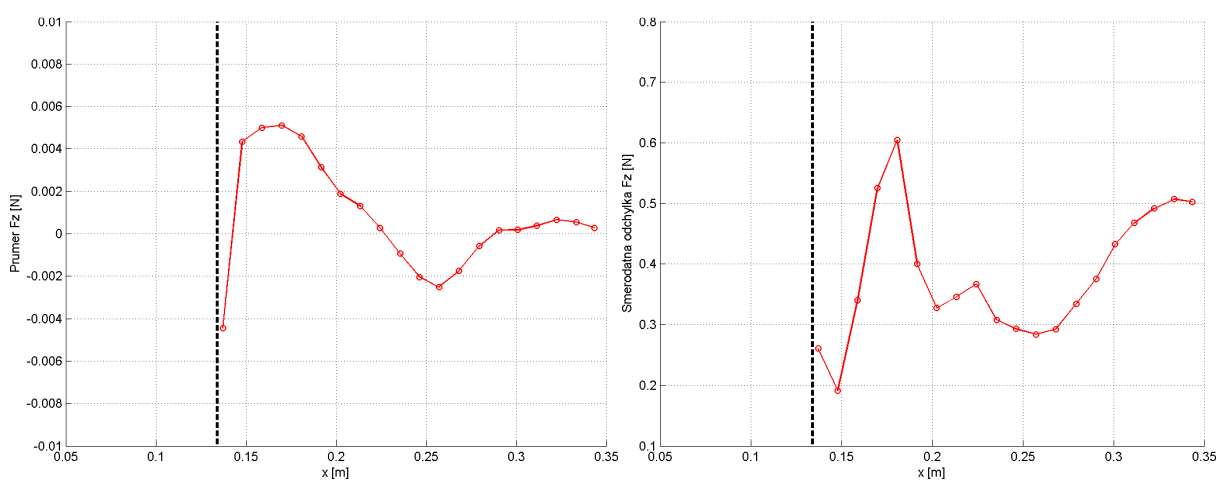
Na obr. 82 a obr. 83 jsou znázorněny v čase průměrné hodnoty z-ové složky výsledných sil působících na povrch středového palivového proutku v jednotlivých axiálních úsecích. Dále je zde uvedena jejich směrodatná odchylka určená podle vzorce

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}, \quad (9.3)$$

kde \bar{x} je střední hodnota a N je počet záznamů. Přerušovaná vertikální čára značí polohu konce deflektorů mísících mřížek.

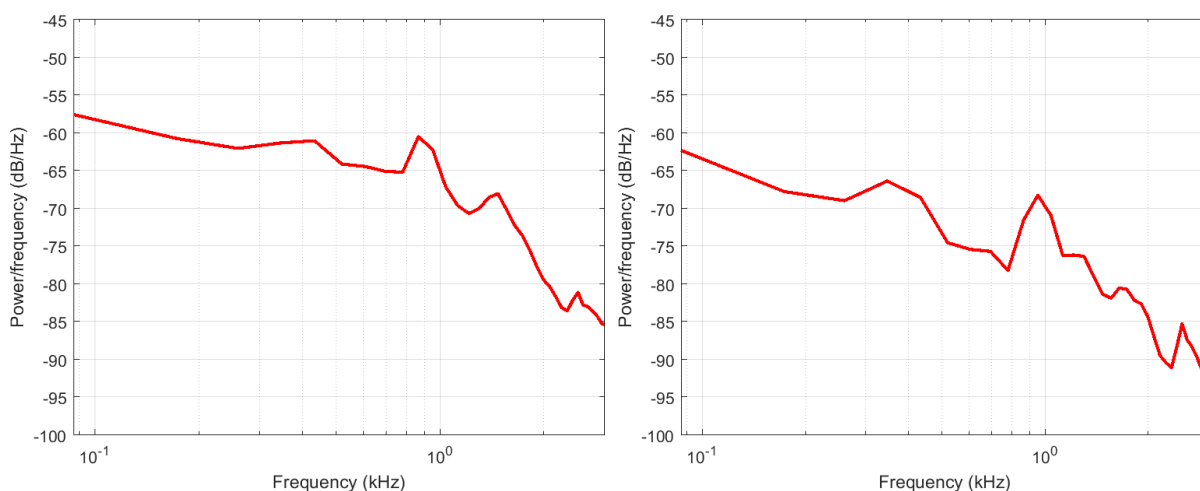


Obr. 82: Střední hodnota a směrodatná odchylka z-ové složky síly pro TVSA-T.mod.1

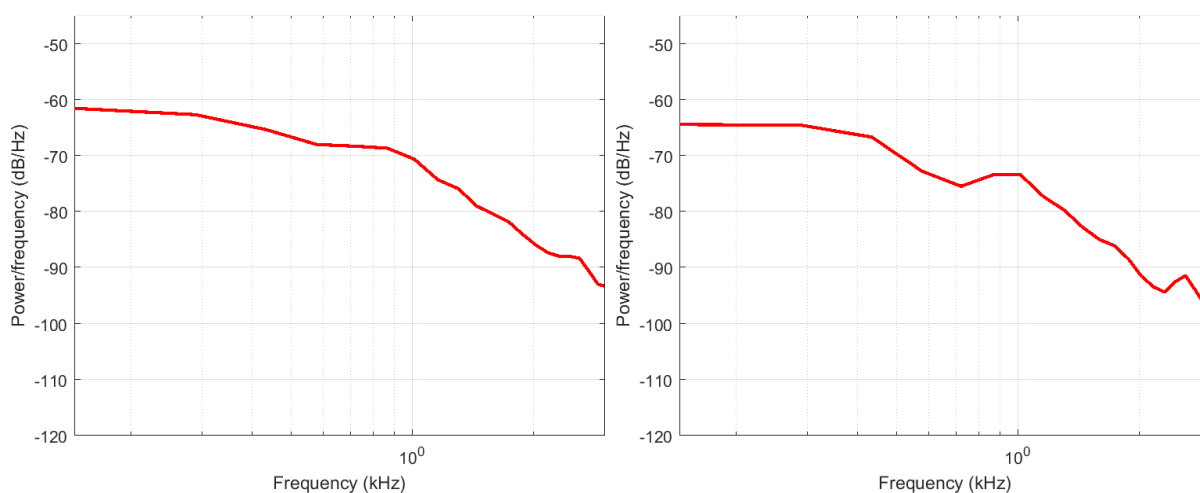


Obr. 83: Střední hodnota a směrodatná odchylka z-ové složky síly pro TVSA-T.mod.2

Pro další zhodnocení výsledných sil příčných toků chladiva působících na středový proutek byla určena jejich spektrální výkonová hustota. Toto bylo provedeno pro všech 30 axiálních úseků, na které je pro vyhodnocení sil, rozdělen povrch středového palivového proutku. Na následujících obr. 84 a obr. 85 jsou pro zjednodušení prezentována pouze některá vybraná spektra výkonové hustoty z-ové složky působící síly.



Obr. 84: Spektrální výkonová hustota z-ové složky síly pro TVSA-T.mod.1 v axiálním úseku číslo 6 (vlevo) a 14 (vpravo)



Obr. 85: Spektrální výkonová hustota z-ové složky síly pro TVSA-T.mod.2 v axiálním úseku číslo 6 (vlevo) a 14 (vpravo)

Spektrální výkonová hustota, jednoduše řečeno, charakterizuje, které oscilace s danou frekvencí jsou energeticky více významné a které méně. Díky tomu je z uvedených spekter výsledné působící síly na vybraných axiálních úsecích středového palivového proutku, viz obr. 84 a obr. 85, zřejmé, že většina energie je relativně rovnoměrně rozprostřena mezi frekvencemi do 1 kHz. Od této hodnoty amplitudy pro vyšší frekvence relativně rychle klesají. Toto je opět v souladu s výsledky prezentovanými např. v [34] a [37].

Ve výsledných spektrech je dále opět potvrzen pokles amplitudy s rostoucí vzdáleností od konce deflektorů mísících mřížek, jako bylo pozorováno ve spektrech provedených pro příčné složky rychlostí chladiva, viz obr. 61 ÷ obr. 68. Tento trend dále potvrzují i výsledné průměrné hodnoty sil prezentované na obr. 82 a obr. 83. Z těchto obrázků je dále zřejmé, že maximální hodnota síly působí na proutek v blízkosti deflektorů mísících mřížek. V práci [34]

a [37] byl ve výsledných silách pozorován pokles fluktuací kolem střední hodnoty s rostoucí vzdáleností od mřížek. Poznamenejme, že tato skutečnost není v námi dosažených výsledcích patrná z důvodu příliš krátké výpočtové oblasti v axiálním směru.

Simulace nestacionárního izotermického turbulentního proudění nestlačitelné vazké kapaliny pomocí metody LES jsou velmi výpočetně náročné. Ve výše uvedených modelech, z důvodu omezených výpočetních zdrojů, jsme se proto museli omezit na relativně malou oblast palivového souboru. Provedené numerické simulace tedy slouží pouze k ověření základních charakteristik a trendů proudového pole chladiva v oblasti palivového souboru za mísicími mřížkami získaného pomocí námi vyvinutého řešiče založeného na lattice Boltzmannově metodě.

Výše prezentované výsledky potvrzují použitelnost LBM pro numerické simulace nestacionárního turbulentního proudění chladiva uvnitř palivového souboru v okolí jeho distančních mřížek. Tyto simulace jsou velmi žádoucí při řešení úloh v oblasti problematiky vzniku netěsností palivového prouku typu GTRF. Znalost nestacionárního proudového pole chladiva, a tím i sil působících na palivové proutky, umožňuje následně řešit úlohu kmitání palivových proutků a míru opotřebení jejich pokrytí. Tyto výpočty, kterými se tým odborníků na katedře mechaniky na Fakultě aplikovaných věd ZČU v Plzni zabývá např. v pracích [39], [40], však přesahují rámec předkládané disertační práce a jsou jednou z možných perspektiv dalšího výzkumu směřujícího k pochopení vzniku poškození nazývaného v jaderně-energetickém průmyslu GTRF.

LBM je mimo jiné známá pro svou relativně velkou iterační rychlost a velmi efektivní paralelizovatelnost, a proto by bylo v budoucnu možné pouhým navýšením výpočetního výkonu významně zlepšit vypovídající hodnotu simulací proudění chladiva pomocí námi vyvinutých algoritmů. Tyto simulace by modelováním podstatně větší části palivového souboru přinesly širší vhled do problematiky GTRF a byly by lépe využitelné pro následné analýzy otěru pokrytí povrchu palivových proutků. Velmi rozsáhlou simulací se např. zabývali autoři práce [38], kde bylo řešeno proudění chladiva na oblasti o rozsahu 5×5 palivových proutků s 96 miliony konečných objemů.

Závěr

Disertační práce je zaměřena na simulaci turbulentního proudění chladiva v palivovém souboru TVSA-T pomocí metody simulace velkých vírů. Pro numerické řešení této složité úlohy bylo použito vlastní softwarové vybavení v jazyce FORTRAN, založené na implementaci relativně nové lattice Boltzmannově metodě. Cílem práce bylo analyzovat nestacionární proudové pole chladiva primárního okruhu, zejména hydrodynamické síly zatěžující palivové proutky. Odezvy palivových proutků od těchto budících sil jsou pokládány za jednu z hlavních příčin vzniku poškození Grid-to-Rod fretting. Tento typ poškození palivových proutků vzniká nadměrným otěrem jejich povrchů v místech kontaktů s distančními mřížkami a v současné době představuje nejčastější příčinu vzniku netěsností palivových proutků. Pro validaci vyvinutých algoritmů a celého řešiče byl vytvořený software nejprve testován na třech známých testovacích úlohách, u nichž je k dispozici experimentální řešení. Vyvinutý řešič byl následně použit pro simulaci nestacionárního izotermického turbulentního proudění chladiva uvnitř PS.

Protože řešit nestacionární úlohu turbulentního proudění v rozsahu celé aktivní zóny reaktoru, či pouze jednoho palivového souboru je v současné době, z důvodu omezených výpočetních zdrojů, téměř nerealizovatelné, bylo nutné z tohoto důvodu přijmout jistá geometrická zjednodušení. V této práci jsme se tedy omezili pouze na vybranou část jednoho palivového souboru a zanedbali jsme nepodstatné detaily v geometrii, které významně neovlivňují charakter proudového pole.

Vírové struktury turbulentního proudového pole chladiva uvnitř PS vznikají především při obtékání distančních a mísících mřížek. Nejsilnější jsou v jejich těsné blízkosti a intenzita klesá se vzdáleností. Deflektory mísících mřížek navíc tuto intenzitu ještě zvyšují. Z tohoto důvodu jsme se pro výpočet proudění uvnitř PS, zaměřili právě na oblast za mísíci mřížkami. Pro tento výpočet byly vytvořeny dva odlišné geometrické modely. Nejprve pro PS TVSA-T.mod.1, který obsahuje jednu kombinovanou distanční mřížku. Poté pro PS TVSA-T.mod.2 obsahující jednu mísící a jednu distanční mřížku. Vzhledem ke komplexnosti geometrie a velké výpočtové náročnosti LES zahrnuje výpočtový model oblast pouze se sedmi palivovými proutky.

Z výsledných nestacionárních polí rychlostí a tlaků byla provedena analýza proudového pole v oblasti za deflektory mísících mřížek. Konkrétně byl proveden výpočet spektrální

výkonové hustoty příčných složek rychlostí ve vybraných bodech a řezech. Vyhodnocením nebyly v získaných spektrech nalezeny žádné významné frekvence. Většina energie je relativně rovnoměrně rozprostřena mezi frekvencemi do 10 kHz. Spektra výkonové hustoty a jednoduchá analýza proudového pole v různých příčných řezech potvrdily klesající intenzitu příčných toků chladiva s rostoucí vzdáleností od konce deflektorů mísících mřížek. Dále byl potvrzen z výsledných časově středovaných příčných rychlostí chladiva predikovaný vliv odlišné orientace deflektorů mísících mřížek palivových souborů TVSA-T.mod.1 a TVSA-T.mod.2 na charakter proudového pole. Nakonec byly stanoveny a analyzovány hydraulické síly a analyzovány od příčných toků chladiva zatěžující palivové proutky. Dosažené numerické výsledky jsou podrobně zpracovány v odstavci 9.2.

Získané výsledky výpočtů proudění uvnitř PS jaderné elektrárny Temelín prokazují použitelnost lattice Boltzmannovy metody na typy úloh směřující k bližšímu pochopení vzniku poškození palivových proutků typem GTRF.

Za hlavní přínos této práce autor považuje provedení, podle jemu dostupných informací první, aplikace relativně nové, rychle se rozvíjející lattice Boltzmannovy metody na řešení úloh v oblasti GTRF. Tato metoda je rychlá a vyznačuje se velmi efektivní paralelizovatelností. Díky těmto přednostem je možné provádět simulace turbulentního proudění na větších částech PS a pro větší časové intervaly. Aplikace lattice Boltzmannovy metody pro řešení úloh v oblasti Grid-to-Rod fretting je z tohoto důvodu významným přínosem.

Další perspektivy výzkumu

Dalším krokem navazujícím na tuto práci by mohlo být přidání difuzní rovnice popisující vedení tepla v kapalině a tím možnost zahrnutí vlivu vztakových sil v chladivu proudícím aktivní zónou reaktoru. Dále pokračovat v neustálém zefektivňování lattice Boltzmannovy metody, která, jak už bylo zmíněno, je relativně novou a rychle se rozvíjející metodou v oblasti výpočtové dynamiky tekutin (CFD).

Další využití vyvinutých algoritmů a celého řešiče, založeného na lattice Boltzmannově metodě, je podle autora této práce rovněž možné i pro jiné úlohy z oblasti jaderně-energetického průmyslu, které se v současné době řeší komerčními softwarovými balíky. Jedná se například o numerickou simulaci nestacionárního proudění chladiva v sestupné šachtě reaktoru VVER 440, nebo o numerické simulace proudění chladiva v hlavici palivové kazety reaktoru VVER 440.

V oblasti GTRF je zajímavou perspektivou dalšího výzkumu následné řešení kmitání palivových proutek vybuzené výslednými nestacionárními silami od příčných rychlostí chladiwa. Tímto by bylo možné přispět k práci týmu odborníků z katedry mechaniky na Fakultě aplikovaných věd ZČU v Plzni, který ve spolupráci s ÚJV Řež řeší úlohy v oblasti GTRF.

Literatura

- [1] Sandoval, L., Walter, D.: Revisiting grid refinement algorithms for the lattice Boltzmann method. Thèse de doctorat, Univ. Genève, 2012.
- [2] Tölke, J., Krafczyk, M., Schulz, M.: Lattice Boltzmann simulations of binary fluid flow through porous media. *Philos Trans Roy. Soc. Lond. A*, 360(1792):535–45, 2002.
- [3] D’Humières, D., Ginzburg, I., Krafczyk, M., Lallemand, P., Luo, L-S.: Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three dimensions. *Philos. Trans. Roy. Soc. Lond. A*. 360:437–51, 2002.
- [4] Filippova, O., Hänel, D.: Grid refinement for Lattice-BGK models. *Journal of Computational Physics*, 147:219-228, 1998.
- [5] Smagorinsky, J.: General circulation experiments with the primitive equations: I. The basic equations. *Mon Weather Rev*, 91:99–164, 1963.
- [6] Yu, H., Luo, L-S.: LES of turbulent square jet flow using an MRT lattice Boltzmann model. *Comput. Fluids* 35(8): 957-965, 2006.
- [7] Ricot, D., Marié, S., Sagaut, P., Bailly, C.: Lattice Boltzmann method with selective viscosity filter. *J. Comp. Physics*, 228:4478-4490, 2009.
- [8] Billerey, A.: Evolution of Fuel Rod Support under Irradiation – Impact on the Mechanical Behaviour of Fuel Assemblies. *Structural behaviour of fuel assemblies for water cooled reactors*, IAEA-TECDOC, 1454:101-111, 2005.
- [9] Peng, Y., Shu, C., Chew, Y.T., Niu, X.D., Lu, X.Y.: Application of multi-block approach in the immersed boundary-lattice Boltzmann method for viscous fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 218: 460-478, 2006
- [10] Harris, S.: An introduction to the theory of the Boltzmann equation. New York, Holt Rinehart and Winston INC, 1970.
- [11] He, X., Luo, L-S.: Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation. *Physical Review E.*, 56:6811-6817, 1997.
- [12] Qian, Y.H., D’Humières, D., Lallemand, P.: Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equation. *EPL (Europhysics Letters)*, 17(6):479, 1992.
- [13] Iglberger, K.: Lattice Boltzmann Simulation of Flow around moving Particles. Master’s thesis, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, 2005.
- [14] Chapman, S., Cowling, TG.: *The mathematical theory of non-uniform gases* (3rd ed.), London, 1970.
- [15] Lallemand, X., Luo, L-S.: Theory of the lattice Boltzmann method: dispersion, dissipation, isotropy, Galilean invariance, and stability. *Phys. Rev. E*, 61:6549-62, 2000.
- [16] Lallemand, X., Luo, L-S.: Theory of the lattice Boltzmann method: acoustic and thermal properties in two and three dimensions. *Physical Review E*, 68:036706-1-25, 2003.
- [17] Succi, Q., He, X.: *The lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond*. Oxford University Press, 2013.
- [18] Zou, Q.S., He, X.Y.: On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model. *Physics of Fluids*, 9:1591, 1997.
- [19] Hecht, M., Harting, J.: Implementation of on-site velocity boundary conditions for D3Q19 lattice Boltzmann simulations. Institute for Computational Physics, University of Stuttgart, 2010.
- [20] Kyu-Tae, K.: The study on grid-to-rod fretting wear models for PWR fuel. *Nuclear Engineering and Design*, 239(12):2820-2824, 2009.
- [21] Pernice, M.: Considerations for Sensitivity Analysis. Uncertainty Quantification and Data Assimilation for Grid-to-Rod Fretting, Idaho National Laboratory, 2012.

-
- [22] IAEA Nuclear Energy Series No. NF-T-2.1.: Review of Fuel Failures in Water Cooled Reactors. International Atomic Energy Agency, Vienna, 2010.
- [23] Sagaut, P., Deck, S., Terracol, M.: Multiscale and multiresolution Approaches in Turbulence. Imperial College Press, 2006.
- [24] Quéméré, P., Sagaut, P., Coulailler, V.: A new multidomain/multiresolution method for large eddy simulation. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 36:391-416, 2001.
- [25] Dupuis, A., Chopard, B.: Theory and applications of an alternative lattice Boltzmann grid refinement algorithm. *Physical Review E*, 67: 066707, 2003.
- [26] Shu, C., Niu, X.D., Chew, Y.T.: Taylor-series expansion and least squares-based lattice Boltzmann method: Three-dimensional formulation and its applications. *International Journal of Modern Physics C*, 14(7):925-944, 2003.
- [27] Jie, W.: Development of a novel immersed boundary-lattice Boltzmann method and its applications. Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, China, 2010.
- [28] He, X., Doolen, G.: Lattice Boltzmann Method on Curvilinear Coordinates System: Flow Around a Circular Cylinder. *Journal of Computational Physics*, 134:306-315, 1997.
- [29] Lu, Z., Liao, Y., Qian, D., McLaughlin, J.B., Derksen, J., Kontomaris, K.: Large Eddy Simulations of a Stirred Tank Using the Lattice Boltzmann Method on a Nonuniform Grid. *Journal of Computational Physics*, 181:675-704, 2002.
- [30] Taymaz, I., Aslan, E., Benin, A.: Numerical investigation of incompressible fluid flow and heat transfer across a bluff body in a channel flow. Department of Mechanical Engineering, University of Sakarya, Turkey, 2010.
- [31] Rubiolo, P., Young, M.: On the factors affecting the fretting-wear risk of PWR fuel assemblies. *Nuclear Engineering and Design*, Elsevier, 2008.
- [32] Elmahdi, A.M., Lu, R., Conner, M.E., Karoutas, Z., Baglietto, E.: Flow Induced Vibration Forces on Fuel Rod by LES CFD Analysis. Westinghouse Electric Company LLC, Columbia, 2013.
- [33] Tan-Torres, S.A.: Coupled Fluid Structure Simulations for Application to Grid-to-Rod Fretting. Department of Nuclear Science and Engineering, Massachusetts Institute of Technology, 2014.
- [34] Benhamadouche, S., Moussou, P., Maitre, C.L.: CFD estimation of the flow-induced vibrations of a fuel rod downstream of a mixing grid. *Proceedings ASME Pressure Vessels and Piping*, Praha, 4:489-497, 2009.
- [35] Kim, K.T.: The study on grid-to-rod fretting wear models for PWR fuel. *Nuclear Engineering and Design*, 239:2820-2824, 2009.
- [36] Delafontaine, S., Ricciardi, G.: Fluctuating pressure calculation induced by axial flow through mixing grid. *Nuclear Engineering and Design* 242: 233–246, 2012.
- [37] Nourgaliev, R.R., Christon, M.A., Bakosi, J., Lowrie, R.B., Pritchett-Sheats, L.A.: Hydra-TH: A Thermal-Hydraulics code for Nuclear Reactor Applications. *Proceedings of The 15th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics*, Pisa, 2013.
- [38] Christon, M.A., Lu, R., Bakosi, J., Nadiga, B.T., Karoutas, Z., Berndt, M.: Large eddy simulation, fuel rod vibration and grid-to-rod fretting in pressurized water reactors. *Journal of Computational Phys.* 322:142-161, 2016.
- [39] Dyk, Š., Zeman, V.: Impact vibrations of guide thimbles in nuclear fuel assembly. *Archive of Applied Mechanics*, 87(2): 231–244, 2016.
- [40] Hlaváč, Z., Zeman, V.: Vibration of nuclear fuel assemblies. Modeling, methods, applications, LAP Lambert Academic Publishing, Saarbrücken, 2013.

-
- [41] Pečínka, L., Svoboda, J., Zeman, V.: Fretting wear of the Zr Fuel Rod Cladding. Proceedings of the 22nd International Conference of Nuclear Engineering ICONE22, ASME, 2014, pp.V001T03A027.
- [42] Lui, Z.G., Liu, Y., Lu, J.: Numerical simulation of the fluid-structure interaction for two simple fuel assemblies. *Nuclear Engineering and Design*, 258:1-12, 2013.
- [43] Chapmann, S., Cowling, T.G.: *The mathematical theory of non-uniform Gases* (3rd ed.). London, Cambridge University Press, 1970.
- [44] Reichl, L.E.: *A modern course in statistical physics*. New York, Edward Arnold (Publishing) LTD, 1980.
- [45] Yu, H.: *Lattice Boltzmann Equation Simulations of Turbulence, Mixing, and Combustion*. Dissertation, Texas University, 2004.
- [46] Pečínka, L., Švrček, M.: A study of fuel rod vibration induced by coolant cross flow in the reactor core. *Proc. Engineering Mechanics 2013*.
- [47] Massaioli, F., Amati, G.: Achieving high performance in a LBM code using OpenMP, CASPUR, Italy, 2002.
- [48] Hermans, M.: *Parallel Programming in Fortran 95 using OpenMP*. School of Aeronautical Engineering, Spain, 2002.
- [49] Murphy, S.: *Performance of Lattice Boltzmann Kernels*. The University of Edinburgh, 2005.
- [50] Výkresová dokumentace TEM-MC-06.DW, ŠKODA JS a.s.
- [51] Výkresová dokumentace 03-TEM-MC-06.DW, ŠKODA JS a.s.
- [52] Le, H., Moin, P., Kim, J.: Direct numerical simulation of turbulent flow over a backward-facing step. *Journal of Fluid Mechanics*, 330(1):349-374, 1997.
- [53] Jovic, S., Driver, D.M.: Reynolds number effects on the skin friction in separated flows behind a backward facing step. *Experiments in Fluids*, 18(6):464-467, 1995.
- [54] Johnson, T., Patel, V.: Flow past a sphere up to a Reynolds number of 300. *Journal of Fluid Mechanics*, 378:19–70, 1999.
- [55] Gilmanov, A., Sotiropoulos, F., Balaras, E.: A general reconstruction algorithm for simulating flows with complex 3D immersed boundaries on Cartesian grids. *Journal of Comput. Phys.*, 191:660–669, 2003.
- [56] Mei, R., Yu, D., Shyy, W., Luo, L-S.: *Force Evaluation in the Lattice Boltzmann Method Involving Curved Geometry*. University of Florida, 2002.
- [57] Roman, F., Armenio, V., Fröhlich, J.: A simple wall-layer model for large eddy simulation with immersed boundary method. *Physics of Fluids (1994-present)*, 21(10):101701, 2009.
- [58] Yu, D., Mei, R., Shyy, W.: *A Unified Boundary Treatment in Lattice Boltzmann Method*. University of Florida, Gainesville, 2003.
- [59] Tölke, J., Krafczyk, M.: Second order interpolation of the flow field in the lattice Boltzmann method. *Computers and Mathematics with Applications*, 58(5):898-902, 2009.
- [60] Izquierdo, S., Fueyo, N.: Momentum transfer correction for macroscopic gradient boundary conditions in lattice Boltzmann methods. *Journal of Computational Physics*, 229(7):2497–2506, 2010.
- [61] Werner, H., Wengle, H.: Large-eddy simulation of turbulent flow over and around a cube in a plate channel. *Turbulent Shear Flows*, 8:155–168, 1993.
- [62] Schneider, A.: *A Consistent Large Eddy Approach for Lattice Boltzmann Methods and its Application to Complex Flows*. Dissertation, Technische Universität Kaiserslautern, 2015.
- [63] Ladd, A. J. C.: Numerical simulations of particular suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 2 (numerical results). *J. Fluid Mech.*, 271:311–339, 1994.

Vlastní publikace autora úzce související s tématem disertační práce

- [VH1] Heidler, V., Vimmr, J.: Lattice Boltzmann Method for the Numerical Solution of the Shallow Water Flows. In: Book of Extended Abstracts of the 27th Conference Computational Mechanics 2011, ZČU v Plzni, 2011. ISBN 978-80-261-0027-0.
- [VH2] Heidler, V.: LES Application for Evaluation of the Coolant Mixing in VVER-440 Downcomer. Presentation at the meeting of AER working Group C and G, Paks, Hungary, 2014.
- [VH3] Heidler, V., Vimmr, J., Bublík, O.: CFD Analysis of the Coolant Flow in Fuel Assembly of the VVER1000 Type Reactor. In: Proceedings of the International Conference Engineering Mechanics 2015, Faculty of Mechanical Engineering, Brno, 2015. ISSN 1805-8256.
- [VH4] Heidler, V.: LBM simulation of falling drop with adaptively refined grid. Poster, ICMMES-2016, Hamburg.
- [VH5] Heidler, V., Vimmr, J., Bublík, O.: Lattice Boltzmann Simulation of Coolant Flow Inside VVER1000 Fuel Assembly, 2017. (zasláno k publikaci do redakce časopisu Applied and Computational Mechanics).