

CHALMERS



GÖTEBORGS UNIVERSITET

Lattice Boltzmanns metod för diffusion

*Examensarbete för kandidatexamen i matematik vid Göteborgs universitet
Kandidatarbete inom civilingenjörsutbildningen vid Chalmers*

Tim Cardilin
Fredrik Krafft
Per Nyman
Anton Stokes

Institutionen för matematiska vetenskaper
Chalmers tekniska högskola
Göteborgs universitet
Göteborg 2012

Lattice Boltzmanns metod för diffusion

Examensarbete för kandidatexamen i tillämpad matematik inom matematikprogrammet vid Göteborgs universitet

Tim Cardilin Anton Stokes

Kandidatarbete i matematik inom civilingenjörsprogrammet Kemiteknik vid Chalmers

Per Nyman

Kandidatarbete i matematik inom civilingenjörsprogrammet Maskinteknik vid Chalmers

Fredrik Krafft

Handledare: Alexei Heintz
Examinator: Carl-Henrik Fant

Institutionen för matematiska vetenskaper
Chalmers tekniska högskola
Göteborgs universitet
Göteborg 2012

Sammanfattning

Att lösa partiella differentialekvationer, PDE, med hjälp av numeriska metoder har blivit vitalt det senaste århundradet. Det finns flera metoder tillgängliga och lattice Boltzmanns metod, LBM, har visat sig vara ett kraftfullt verktyg för att lösa Navier-Stokes, N-S ekvation. Metoden är beräkningsmässigt effektiv i jämförelse med andra numeriska metoder under rätt förhållanden. Mängden datorkraft som behövs för att lösa en PDE är viktig och detta gör LBM intressant just på grund av dess beräkningseffektivitet. En studie om möjligheterna att använda LBM till att lösa andra sorters PDE än N-S ekvation är spännande och utbildande. I detta arbete tar vi reda på om LBM kan användas till att lösa och modellera diffusionsekvationen, och om fallet är sådant validera att resultatet är tillräckligt korrekt. Om LBM kan användas för att lösa och modellera diffusionsekvationen, kan den även lösa den anisotropa diffusionsekvationen? Vi börjar med att härleda LBM för diffusion i en dimension. Under denna arbetsprocess tittar vi på ordning av fel och den numeriska stabiliteten hos metoden. När vi har färdigställt detta och metoden har blivit numeriskt implementerad, valideras resultatet med hjälp av den analytiska lösningen. Den anisotropa diffusionsekvationens lösningen är svår att validera och vi har begränsat vår artikel till att endast beskriva teorin. Artikeln är också begränsad till att endast lösa diffusion och inte advektion av ett flöde. Resultaten från den teoretiska och numeriska lösningen visar att LBM är en stabil och tillräckligt exakt lösning till diffusionsekvationen.

Abstract

Solving partial differential equations, PDE, with the help of numerical methods have become essential in the last century. There are different methods available and the lattice Boltzmann method, LBM has proven to be a powerful tool for solving the Navier-Stokes, N-S, equation. The method is efficient with regard to the number of calculations needed to solve the N-S equation compared to other numerical methods. The amount of computer power used for solving partial differential equations is important and this makes the LBM very interesting since it is effective in this regard. A study of the possibilities for further use of the LBM in solving PDEs other than the N-S equation is both intriguing and educational. In this paper we investigate if LBM could be used to model and solve the diffusion equation, and if so validate that the results are adequate. Furthermore, if LBM could be used to model and solve the diffusion equation, can it also solve the anisotropic diffusion equation? We start by deriving the LBM equation for diffusion in one spatial variable. During the work process we are also looking at the order of convergence and numerical stability of the method. When this has been accomplished and the method has been numerically implemented, it is validated using the exact solution, which is an analytical one. In two spatial variables we proceed in a very similar manner and the solution is again validated using an analytical solution. The solution to the anisotropic diffusion equation is hard to validate and we have limited our paper to only explaining the theory. Still, we plot a few graphs to confirm that the derived LBM does indeed display anisotropic behavior. The paper is also limited to solving only the diffusion and not the advection of a flow. The results from the theoretical and numerical solutions show that LBM is a stable and precise solution to the diffusion equation.

Innehåll

1	Inledning	1
1.1	Bakgrund	1
1.2	Diffusionsekvationen	1
1.3	Syfte	3
1.4	Frågeställning	3
1.5	Metod	3
2	Teori	4
2.1	Inledande kinetik	4
2.1.1	Kollisionsinvarianter	6
2.1.2	Boltzmanns H-teorem	6
2.1.3	BGK kollisionsintegral	7
2.1.4	Lattice Boltzmanns metod	7
2.2	Jämviktsfördelning	7
2.3	Jämvikt i olika gitter	10
2.3.1	D1Q3	10
2.3.2	D2Q9	11
2.4	Entropisk lattice Boltzmann	12
2.4.1	Positivitetsregeln	15
2.4.2	Ehrenfests regularisering	15
2.5	Diffusiv skalning	15
2.6	Härledning 1D	16
2.7	Härledning i högre dimensioner	17
2.8	LBM för anisotrop diffusion	18
2.8.1	Utvidgning av jämviktsfunktionerna	19
2.8.2	Härledning - anisotropi	19
2.8.3	D2Q5	21
2.8.4	D2Q9	21
2.9	Numeriskt fel	23
2.10	Stabilitet av LBM-metoder för isotropisk diffusion	24
2.10.1	Stabilitetsstruktur	24
2.10.2	D1Q3	25
2.10.3	D2Q9	26
3	Resultat	27
3.1	Implementering	27
3.1.1	Implementering av randvillkor	28
3.2	Verifiering av LBM	30
3.2.1	Diffusionsekvationen i en dimension	31
3.2.2	Diffusionsekvationen i två dimensioner	34
3.2.3	Anisotrop diffusion i två dimensioner	39
4	Diskussion och slutsats	40
	Referenser	41
	Appendix A	43

Förord

- Tim är huvudförfattare till följande avsnitt: Inledande kinetik: Avsnitt 2.1.1-2.1.3 Jämviktsfördelning: 2.2 Jämvikt i olika gitter: 2.3 Entropisk lattice Boltzmann: 2.4 Anisotrop LBM: 2.8
- Fredrik är huvudförfattare till följande avsnitt: Abstract Inledning: 1.2-1.5 Resultat: 3.2.1 -3.2.3
- Per är huvudförfattare till följande avsnitt: Inledning: 1-1.1 Inledande kinetik: 2.1.4 Diffusiv skalning: 2.5 Härledning 1d: 2.6 Härledning 2d: 2.7 Numeriskt fel 2.9 Diskussion: 4
- Anton är huvudförfattare till följande avsnitt: Resultat: 3.1-3.1.1 Stabilitet 2.10 Appendix A Diffusionsekvationen i en dimension: 3.2.1

Per har haft redaktionellt ansvar för rapporten och har agerat koordinator för gruppen.

Anton har haft huvudansvar för programmeringen av LBM. Fredrik och Anton har tillsammans haft ansvar implementering av de analytiska lösningarna.

En loggbok har förts över de enskilda medverkandes prestationer under arbetet. I denna framgår det i mer detalj vem som har gjort vad.

1 Inledning

Matematiker, fysiker och ingenjörer har länge använt matematik som ett verktyg för att förklara naturvetenskapliga fenomen och ofta har den matematiska analysen gett upphov till partiella differentialekvationer, PDE. Dessa ekvationer är ofta svårlösta och det är vanligt att analytiska lösningar saknas helt. Därför är det vanligt att man löser dessa ekvationer approximativt.

Trots utvecklingen av datorer blir de numeriska beräkningarna snabbt stora och ställer stora krav på datorernas prestanda. Därför krävs det numeriska metoder som inte bara löser problemet utan också löser det inom en rimlig tid. Ofta blir detta krav en balansgång mellan acceptabelt fel och rimlig tid för beräkningen.

Många numeriska metoder har utvecklats med tiden, alla med olika egenskaper, men den som vi ska fokusera på i detta arbete kallas lattice Boltzmanns metod, härafter kallad LBM och ser ut som följande

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t + \delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)]. \quad (1)$$

Funktionen $f_i(\mathbf{x}, t)$ är en fördelningsfunktion som beskriver fördelningen av partiklar vid tidpunkten t och \mathbf{c}_i är diskreta hastigheter dessa partiklar kan anta. De sista termerna i (1), τ och f_i^{eq} är relaxationstid respektive jämviktsfördelning.

1.1 Bakgrund

LBM i sig har sina rötter i statistisk mekanik som går ut på att beskriva makroskopiska egenskaper, som till exempel temperatur, för en gas utifrån egenskaper hos atomerna eller molekylerna i gasen. Matematiskt beskrivs detta med hjälp av fördelningsfunktioner som beskriver en mikroskopisk dynamik och utifrån detta kan man visa på makroskopiska egenskaper. Denna typ av beskrivning av ett system kallas en bottom-up-metod [1]. LBM syftar till att göra precis detta genom att låta en mängd fiktiva partiklar röra sig med diskreta hastigheter över ett gitter (eng. lattice) och utifrån detta beskriva makroskopiska egenskaper. Att en sådan förenkling skulle kunna förklara komplicerade fysikaliska system kan vara något kontraintuitivt men det har visat sig att LBM kan göra just detta. Detta är intressant både från ett matematiskt och fysikaliskt perspektiv.

Ett av de första områden man försökte tillämpa LBM på var flödesmekanik, ett viktigt område inom den tillämpade matematiken. Den centrala delen av flödesdynamik handlar om att lösa den så kallade Navier-Stokes ekvation, N-S ekvation, en PDE som beskriver en fluids beteende. Detta kan användas för att modellera en rad olika fenomen och ekvationen har därför en stor praktisk nytta. Till exempel kan den användas för att modellera aerodynamiska effekter som är viktigt vid design av byggnader och fordon. Trots dess stora användning och många tillämpningsområden är den matematiska teorin bakom N-S ekvation ännu inte fullt förstådd. Ekvationen saknar analytiska lösningar förutom för ett fåtal specialfall och därför är numeriska lösningar av ekvationen viktiga för praktisk användning. Detta motiverade forskning på hur LBM fungerade som lösningsmetod och det visade sig att i vissa fall var den bättre än tidigare använda metoder. Om man till exempel jämför LBM med finita volymmetoden (FVM) ser man att för N-S ekvation vid låga MACH-tal är LBM överlägsen [2].

I det här arbetet ska vi undersöka om LBM kan användas för att simulera andra fysikaliska system. Så istället för att lägga fokus på N-S ekvation så koncentrerar vi oss på en annan viktig PDE, nämligen diffusionsekvationen. Diffusionsekvationen har även den stor praktisk nytta och kan användas för att modellera en rad olika fysikaliska processer, och trots dess namn inte bara diffusionsfenomen.

1.2 Diffusionsekvationen

Diffusionsekvationen formulerades ursprungligen av Adolf Fick år 1855 [3] och kan användas för att modellera spridningen av en koncentration över rummet.

$$\frac{d\phi}{dt} + \nabla(-D(\phi))\nabla\phi = 0 \quad (2)$$

där ϕ betecknar koncentrationen och D är diffusionskoefficienten. Genom att utgå från kontinuitetsekvationen (3) kan diffusionsekvation enkelt härledas. Kontinuitetsekvationen (KE) beskriver ett strömningsförlopp genom en kontrollvolym och uttrycker att densiteten i ett system är beroende av in och utflöden av partiklar. Den innebär också att inget material kan försvinna från kontrollvolymen

Nedan gör vi en kort härledning

$$\frac{d\phi}{dt} + \nabla\mathbf{j} = 0. \quad (3)$$

Fick härledde ett uttryck för flödet \mathbf{j} som kallas för Ficks första lag [3] och ser ut som

$$\mathbf{j} = -D(\phi)\nabla(\phi(r, t)) \quad (4)$$

Om detta nu sätts in i kontinuitetsekvationen får vi diffusionsekvationen.

$$\frac{d\phi}{dt} + \nabla(-D(\phi))\nabla\phi = 0. \quad (5)$$

Termen D i ekvationen ovan tar hänsyn till att diffusion kan ske på två olika sätt. Antingen isotropt, vilket innebär diffusionen är lika stor i alla riktningar eller anisotropt, som innebär att diffusionen tillåts vara olika stor i olika riktningar. Anisotrop diffusion är ett vanligare fenomen i naturen och även svårare att modellera än den isotropa diffusionen.

För att illustrera skillnaden mellan de två olika diffusionen kan vi ta ett praktiskt exempel. Då en koncentration partiklar diffunderar i ett homogent material kommer diffusionen ske isotropt eftersom det diffusiva motståndet lika stort i hela materialet. Om vi istället betraktar en situation då materialet istället är inhomogent kommer diffusionen ske anisotropt då det diffusiva motståndet kommer variera i materialet. Detta kommer ge upphov till en diffusion som sker olika snabbt i olika riktningar.

På senare år har även den anisotropa diffusionsekvationen använts för att modellera fenomen som inte är direkt kopplade till diffusion. Exempelvis används den för att beskriva sociala och biologiska samband. En annan oväntad tillämpning men minst lika intressant är digital bildbehandling [4]. Bruset i en bild kan tas bort genom att använda den anisotropa diffusionsekvationen. Detta är en teknik som idag används i stor skala exempelvis vid magnetröntgen, där det är viktigt att bilden blir så skarp som möjlig [5].

I det fall då vi har en linjär diffusion med en konstant diffusionskoefficient D kommer diffusionsekvationen vara identisk med värmeledningsekvationen.

$$\frac{d\phi}{dt} - D\Delta\phi = 0. \quad (6)$$

För att ekvationen nu skall se ut exakt som det ingenjörer kallar värmeledningsekvationen ändrar vi på notationen. $D = \alpha, \phi = u$

Vilket ger värmeledningsekvationen:

$$\frac{du}{dt} - \alpha\Delta u = 0. \quad (7)$$

Denna enkla ekvation har länge använts av forskare och ingenjörer för att modellera problem. Som ingenjör är värmeledningsekvationen en av de viktigaste ekvationer att känna till då alla beräkningar av värmeöverföring sker med hjälp av den. En majoritet av all el som produceras sker genom en värmeprocess i ett kraftverk, exempelvis kärnkraft, kolkraft och gaskraftverk [6]. Dessa kraftverk måste konstrueras utifrån de ingående delarnas värmeledande egenskaper. Värmeledningsekvationen kan då ge insikt om hur dessa delar bör konstrueras.

Fourier lyckades lösa värmeledningsekvationen analytiskt med hjälp av så kallade Fourierserier [3]. Detta är en metod som än idag lärs ut till studenter för att lösa värmeledningsekvationen. Idag används dock inte längre Fouriers metod mer än i undervisningen för att lösa PDE eftersom vi idag har datorer och numeriska metoder som kan lösa mycket mer

avancerade problem. Vi kommer dock i det här arbetet att använda oss av Fouriers analytiska lösningar för att verifiera våra numeriska lösningar.

Vid tillämpningar av den anisotropa diffusionsekvationen är det praktiskt att använda sig av numeriska metoder då det ofta är svårt att finna analytiska lösningar. Att då använda LBM som numerisk metod är intressant ur ett beräkningsmässigt perspektiv, då metoden har potential att köras effektivt [2]. Detta har att göra med LBMs förmåga att kunna parallelliseras, vilket innebär att koden kan köras på flera datorer samtidigt och på så sätt minska beräkningstiden.

1.3 Syfte

Arbetet syftar till att undersöka hur LBM kan användas för att modellera diffusionsproblem genom att använda metoden för att numeriskt lösa diffusionsekvationen.

1.4 Frågeställning

Inledningsvis är vi intresserade av hur den bakomliggande teorin ser ut för LBM och vad kopplingen är mellan kinetisk teori och LBM. En annan fråga är, kan vi använda LBM för att modellera diffusionsekvationen. Om det i så fall är möjligt, är det intressant att veta hur stabiliteten och konvergensen ser ut och även vilken ordning av fel vi får från metoden. Till sist frågar vi oss också om LBM även kan användas för att lösa den anisotropa diffusionsekvationen.

1.5 Metod

Arbetet delas in i tre olika delar. I den första delen av arbetet härleds LBM för diffusionsekvationen i en dimension, för att sedan implementeras för att lösa diffusionsekvationen. Eftersom diffusionsekvationen kan lösas analytiskt, med till exempel Fouriers metod, kan det framtagna programmet verifieras.

I den andra delen studeras diffusion i två dimensioner. Här finns också analytiska lösningar som kan användas till att verifiera de skrivna programmen. I det teoretiska arbetet ingår undersökning av det numeriska felet och numerisk stabilitet för de framtagna metoderna.

I sista delen utvidgas teorin till att gälla för den anisotropa diffusionsekvationen.

Den numeriska lösning verifieras genom att jämföra med andra existerande metoder. På så sätt kan det styrkas att målet med arbetet är uppnått.

Teoretiska samband mellan den diskreta modellen och den differentialekvation som önskas lösas identifieras och härleds för de specifika ekvationer som studeras.

Den största avgränsningen i de betraktade fallen är att enbart diffusion studeras (och en generalisering av denna), inte t.ex. någon form av flöden, som var den ursprungliga tillämpningen av LBM. Vi begränsar oss till linjära diffusionsekvationer med konstanta koefficienter.

2 Teori

Det här avsnittet ägnas åt den teori som ligger bakom LBM. Detta innefattar bakomliggande kinetisk teori, övergång från Boltzmanns ekvation till den diskreta lattice Boltzmann. Vi tar även fram jämviktsfördelningar och visar en förenkling av kollisionsteget. Vi betraktar också en variant av LBM kallad entropisk LBM.

Slutligen härleder vi LBM för diffusionsekvationen i en och två dimensioner samt gör en utvidgning till anisotrop diffusion.

2.1 Inledande kinetik

Som grundläggande postulat ligger molekylärhypotesen, som hävdar att all materia till grunden består utav diskreta objekt vi låter kalla molekyler. Dessa är de minsta partiklar som behåller sina kemiska egenskaper och är identiska för en given substans. Substansens tillstånd (gas, vätska eller solid) har ett intimt samband med molekylernas rörelser och täthet. [7].

Betrakta således en gas bestående av ändligt många, N , identiska sådana partiklar i en ändlig eller oändlig behållare $X \subseteq \mathbb{R}^3$. Om vi tänker oss partiklarna som punktmassor kan vi studera partiklarnas rörelser ur ett klassiskt perspektiv med rörelseekvationer för varje individuell partikel. Dessa kan skrivas som

$$\ddot{\mathbf{x}}_i = \frac{\mathbf{F}(\mathbf{x}_i)}{m} \quad (8)$$

där \mathbf{x}_i är position för partikel i , m är massa, som är samma för alla partiklar, och \mathbf{F} den nettokraft som verkar på partikel i . I \mathbb{R}^3 leder detta till $6N$ ekvationer med $6N$ bivillkor, svarande mot $6N$ begynnelsevärden vid tid $t = 0$. I praktiska tillämpningar är N för stort för att det skall vara möjligt att lösa så många ekvationer tillräckligt fort. Dessutom är vi i allmänhet oftast intresserade av hur gasen beter sig som på en makroskopisk nivå och den enskilda partikelns beteende är således av underordnad betydelse [8].

Istället angriper vi problemet med statistisk mekanik. I så fall fokuserar vi på medelvärden, som vi kan relatera till typiska makroskopiska parametrar såsom densitet, temperatur och tryck istället, för att ta hänsyn till alla partiklar individuellt. Dessa blir approximationer med fel som vi kan betrakta som statistiska. Vi tänker oss en fördelningsfunktion $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ där $x \in X$, $v \in \mathbb{R}^3$ är hastighet, och $t \in [0, T] \subseteq \mathbb{R}^+$. Givet en tid t beskriver då $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)d\mathbf{x}d\mathbf{v}$ partikeldensiteten i området $[\mathbf{x}, \mathbf{x} + d\mathbf{x}] \times [\mathbf{v}, \mathbf{v} + d\mathbf{v}]$.

Om partiklarna aldrig kolliderar kan evolutionen beskrivas med hjälp av transportekvationen

$$f_t + v \cdot \nabla_x f + F(x) \cdot \nabla_v f = 0, \quad (9)$$

där $F(x)$ är en (extern) kraft som verkar på partiklarna. I ett slutet system (utan externa krafter) försvinner den sista termen i vänsterledet och vi kan således skriva ekvationen som

$$f_t + v \cdot \nabla_x f = 0. \quad (10)$$

Rimligtvis interagerar partiklarna dock via kollisioner och (10) får ett högerled

$$f_t + v \cdot \nabla_x f = Q(f, f). \quad (11)$$

Ekvation (11) kallas för Boltzmanns ekvation för den slutna systemet och högerledet Q benämns Boltzmanns kollisionoperator.

Med en kollision menar vi att två eller fler partiklar kommer tillräckligt nära för att påverka varandra mer än försumbart mycket. I allmänhet innebär detta att partiklarnas hastigheter efter kollisionen ändras. För kollisionerna görs följande antaganden [9]

1. Tvåpartikelkollisioner dominerar kollisioner mellan tre eller fler partiklar. Med detta menar vi att vi endast tar hänsyn till kollisioner mellan två partiklar och negligerar

kollisioner mellan tre eller fler partiklar. Motiveringen är att kollisioner mellan två partiklar är tillräckligt mycket vanligare än flerpartikelkollisionerna.

2. Kollisionerna är elastiska, det vill säga både rörelsemängd (momentum) och kinetisk energi bevaras. Om (v_1, v_2) betecknar partiklarnas hastigheter före kollisionen och (v'_1, v'_2) hastigheterna efter kollisionen gäller följande likheter

$$\begin{aligned}v_1 + v_2 &= v'_1 + v'_2 \\v_1^2 + v_2^2 &= v_1'^2 + v_2'^2.\end{aligned}$$

3. Gasen befinner sig i så kallat Boltzmann kaos, eller även kallat molekylärt kaos. Detta innebär att två partiklars hastigheter före en kollision är okorrelerade. Detta medför faktiskt att partiklarnas hastigheter efter kollisionen i allmänhet är korrelerade. Således uppstår en asymmetri mellan dåtid och framtid [9].
4. Partikelkollisionerna är mikroreversibla processer. Ur ett sannolikhetsteoretiskt synsätt betyder detta att sannolikheten att de två partiklarna med hastigheter (v_1, v_2) har hastigheterna (v'_1, v'_2) efter kollisionen är densamma som att två partiklar med hastigheterna (v'_1, v'_2) har hastigheterna (v_1, v_2) efter kollisionen.
5. Inga externa krafter inverkar på kollisionen. En följd av att systemet är slutet.
6. Kollisionerna är lokala och sker under korta tidsintervall relativt den tid system observeras $[0, T]$.

Under dessa antaganden kunde Boltzmann [10] härleda en kollisionsoperator given av

$$Q(f, f) = \int_{\mathbb{R}^3} dv_2 \int_{S^2} B(|v_1 - v_2|, \cos \theta) (f(v_1)f(v_2) - f(v'_1)f(v'_2)) d\sigma, \quad (12)$$

där v_1, v_2 och v'_1, v'_2 är partiklarnas hastigheter före respektive efter kollisionen, θ är vinkeln mellan hastigheterna före och efter kollisionen, S^2 är enhetssfären i \mathbb{R}^2 dvs. enhetscirkeln och B är Boltzmanns kollisionskärna.

Boltzmanns kollisionskärna kan väljas på olika sätt. Till exempel kan man betrakta kollisionerna likt kollisioner mellan biljardbollar (hårda sfärer) då ges B av

$$B(|v_1 - v_2|, \cos \theta) = K|v_1 - v_2|, \quad K > 0. \quad (13)$$

Kollisionskärnan kan också identifieras med hjälp av tvärsnittet eller *träffytan* (arean där partiklarna interagerar) via likheten

$$B(|v_1 - v_2|, \cos \theta) = \alpha|v_1 - v_2|, \quad (14)$$

där α betecknar tvärsnittet. Således har kollisionerna i fallet med hårda sfärer konstant tvärsnitt.

Vi behöver även veta hur partiklar beter sig när de möter randen (om X inte är hela \mathbb{R}^3). Här kan vi välja förenklade versioner av beteende, som ändå kan ge goda resultat vid tillämpningar. Två enkla möjligheter är s.k. bounce-back randvillkor dvs. en partikel som träffar randen studsar tillbaka med motsatt hastighet

$$f(x, v, t) = f(x, -v, t), \quad x \in \partial X. \quad (15)$$

Trots att denna typen av randvillkor ej är särdeles realistiskt, kan de ändå ge goda resultat vid simuleringar. Därför kommer vi delvis att använda oss av den här sortens randvillkor i våra simuleringar som presenteras i senare avsnitt.

Den andra sortens randvillkor vi också använder är analog med Snells lag inom optik. Partiklar som kolliderar med randen (väggen) har samma vinkel mot väggen före som efter kollision.

2.1.1 Kollisionsinvarianter

Vi säger att en funktion $\phi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ är *kollisionsinvariant* om

$$\int_{\mathbb{R}^3} Q(f, f) \phi(v) dv = 0. \quad (16)$$

Det har visats [8] att detta uppfylls för de fem elementära funktionerna $\phi_0(v) = 1$, $\phi_1(v) = v_1$, $\phi_2(v) = v_2$, $\phi_3(v) = v_3$ och $\phi_4(v) = v^2$. Eftersom integrationsoperatoren är linjär följer det att linjärkombinationer av dessa fem också måste vara kollisionsinvarianta, alltså funktioner på form

$$\phi(v) = a + b \cdot v + cv^2, \quad (17)$$

för $a, c \in \mathbb{R}$, $b \in \mathbb{R}^3$.

Med hjälp av dessa går det att finna positiva funktioner f sådana att $Q(f, f) = 0$. Detta görs genom att först visa Boltzmanns olikhet

$$\int_{\mathbb{R}^3} Q(f, f) \ln f dv \leq 0 \quad (18)$$

och sedan att likhet sker omm

$$f = \exp(a + b \cdot v + cv^2), \quad (19)$$

med a, b, c som ovan. Ett specialfall av (19) är Maxwell-Boltzmann fördelningen definierad i nästa avsnitt.

2.1.2 Boltzmanns H-teorem

Om vi definierar funktionalen H som

$$H(f) := \int_X \int_{\mathbb{R}^3} f \ln f dv dx, \quad (20)$$

för f som satisfierar Boltzmanns ekvation (11), säger Boltzmanns H-teorem att

$$\frac{dH}{dt} \leq 0 \quad (21)$$

H kallas ofta för entropin och kan betraktas analogt till entropi inom termodynamiken (upp till teckenkonvention). H-teoremet säger då att entropin aldrig ökar, vilket svarar mot termodynamikens andra lag. För att få rätt tecken är det inte ovanligt att man inför $S := -H$ som entropi. Då är S konkav och man säger att entropin aldrig minskar. Vi väljer att härnäst använda den förstnämnda konventionen. H-teoremet är något kontroversiellt eftersom icke-ökande entropi implicerar någon form av irreversibilitet i tiden (see också antagandet om Boltzmannskaos). Dock är partikelinteraktionerna på mikronivå samtliga reversibla. Vi tänker inte diskutera detta närmare här, men det finns mycket skrivet om ämnet. Se till exempel [9].

Det går vidare att visa [8] att likhet i H-teoremet, under svaga antaganden, inträffar precis då f antar Maxwell-Boltzmanns jämviktsfördelning

$$f^{eq} = \rho \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{-mv^2}{2kT} \right), \quad (22)$$

för ett slutet system i vila. Där T är temperatur, m är massa, v fart definierad som $v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$, k är Boltzmanns konstant och ρ är densitet.

2.1.3 BGK kollisionsintegral

Centralt för LBM i senare kapitel är förenklingen av kollisionsoperatoren Q till den s.k. Bhatnagar, Gross och Krook approximationen, förkortad BGK, [11]

$$Q(f) := -\frac{1}{\tau}(f - f^{eq}), \quad (23)$$

där τ är relaxationsparametern, som mäter tiden mellan kollisioner. Det är viktigt att notera att för denna förenkling går systemet fortfarande mot jämvikt (Maxwell-Boltzmann fördelning) enligt H-teoremet. BGK-approximationen bevarar också kollisionsinvarianterna ϕ från tidigare avsnitt, dvs. likheten

$$\int_{\mathbb{R}^3} \phi(v)Q(f)dv = 0 \quad (24)$$

håller. Från detta följer att Maxwell-Boltzmann fördelningen måste ha samma densitet, temperatur och hastighet som f .

2.1.4 Lattice Boltzmanns metod

Nedan följer övergången från Boltzmanns ekvation till LBM.

Vi erinrar att Boltzmanns ekvation för ett slutet system utan externa krafter ges av

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f = Q(f, f). \quad (25)$$

I det första steget för att diskretisera införs fördelningsfunktionen f_i som är definerad som en distributionsfunktion av en partiklarna.

Därefter diskretiseras partikarnas hastigheter genom att välja ett ändligt antal hastigheter som partiklarna tillåts ha.

$$\partial_t f_i + \mathbf{c}_i \cdot \nabla f_i = Q_i. \quad (26)$$

Om vi nu integrerar längs en lösningkurva får vi

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t + \delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) + \int_0^{\delta t} Q_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i s, t + s) ds. \quad (27)$$

För att lösa integralen ovan kan en lämplig numerisk metod tillämpas, som till exempel rektangelregeln [12]. Detta ger

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t + \delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) + Q_i(\mathbf{x}, t). \quad (28)$$

Om vi nu använder oss av BGK-förenklingen av kollisionsoperatoren får vi den variant av LBM som används i detta arbete

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t + \delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau}[f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)]. \quad (29)$$

2.2 Jämviktsfördelning

Vi kommer till frågan hur vi skall välja jämviktsfördelning f^{eq} . Eftersom jämvikt i Boltzmann-ekvationen svarar mot Maxwell-Boltzmann fördelningen, vill vi ha något motsvarande för lattice-Boltzmann. Eftersom vi betraktar ren diffusion och systemet därmed har advektionshastighet noll, gör vi en ansättning [13]

$$f_i^{eq} = CW_i, \quad i = 0, 1, \dots, n_d. \quad (30)$$

$$\sum_{i=0}^{n_d} W_i = 1 \quad (31)$$

$$W_i \geq 0, \quad i = 0, 1, \dots, n_d, \quad (32)$$

där C är en konstant oberoende av i och W_i konstanter beroende på i . Man ser enkelt att

$$C = \sum_{i=0}^{n_d} CW_i = \sum_{i=0}^{n_d} f_i^{eq} = \rho. \quad (33)$$

För att få analogi med Maxwell-Boltzmanns täthetsfunktion sätter vi att hastighetsmomenten upp till och med ordning fyra väljs så att de sammanfaller med motsvarande för Maxwell-Boltzmanns täthetsfunktion [11]. Vi erinrar att denna, i d rumsvariabler, definieras som

$$f_d = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{d/2} \exp\left(\frac{-mv^2}{2kT}\right). \quad (34)$$

Hastighetsmomenten ges utav

$$\sum_{i=1}^{n_d} W_i = \langle 1, f_d \rangle \quad (35)$$

$$\sum_{i=1}^{n_d} c_{i\alpha} W_i = \langle v_\alpha, f_d \rangle \quad (36)$$

$$\sum_{i=1}^{n_d} c_{i\alpha} c_{i\beta} W_i = \langle v_\alpha v_\beta, f_d \rangle \quad (37)$$

$$\sum_{i=1}^{n_d} c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} W_i = \langle v_\alpha v_\beta v_\gamma, f_d \rangle \quad (38)$$

$$\sum_{i=1}^{n_d} c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} W_i = \langle v_\alpha v_\beta v_\gamma v_\delta, f_d \rangle, \quad (39)$$

där $\langle \cdot, \cdot \rangle$ är standardskalärprodukten på L_2 och α, β och γ indikerar projektion på en godtycklig kartesisk koordinataxel.

Högerleden i (35) - (39) beräknas till

$$\langle 1, f_d \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} f_d d\mathbf{v} = \rho^{-(d-1)} \langle 1, f_1 \rangle^d, \quad (40)$$

eftersom f_d är täthetsfunktion för produkten av d fullständigt oberoende normalfördelade variabler med medelvärde 0 och varians $\frac{kT}{m}$, så när som på en konstant ρ . Observera nu att

$$\int_{\mathbb{R}} \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{-mx^2}{2kT}\right) dx \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{-my^2}{2kT}\right) dy = \quad (41)$$

$$\frac{m}{2\pi kT} \int_{\mathbb{R}^2} \exp\left(\frac{-m(x^2 + y^2)}{2kT}\right) dx dy = \frac{m}{2\pi kT} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty r \exp\left(\frac{-mr^2}{2kT}\right) dr d\theta \quad (42)$$

$$= \frac{m}{kT} \left[-\frac{kT}{m} \exp\left(\frac{-mr^2}{2kT}\right) \right]_0^\infty = 1, \quad (43)$$

varvid det tillsammans med (40) ger

$$\langle 1, f_d \rangle = \rho. \quad (44)$$

För det första momentet gäller

$$\langle v_\alpha, f_d \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} v_\alpha f_d d\mathbf{v} = 0, \quad (45)$$

ty f_d är en jämn funktion och v_α udda, vilket medför att produkten är udda. Betrakta härnäst

$$\langle v_\alpha v_\beta, f_d \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} v_\alpha v_\beta f_d d\mathbf{v}. \quad (46)$$

Nu finns (högst) två fall: (i) $\alpha = \beta$ och (ii) $\alpha \neq \beta$.

(i) $\alpha = \beta$:

$$\int_{\mathbb{R}^d} v_\alpha v_\beta f_d d\mathbf{v} = \int_{\mathbb{R}^d} v_\alpha^2 f_d d\mathbf{v} = \int_{\mathbb{R}^d} \rho \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{d/2} \exp\left(\frac{-mv^2}{2kT}\right) v_\alpha^2 d\mathbf{v} \quad (47)$$

$$= \int_{\mathbb{R}^d} \rho \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{d/2} \exp\left(\frac{-m \sum_{i \neq \alpha} v_i^2}{2kT}\right) \exp\left(\frac{-mv_\alpha^2}{2kT}\right) v_\alpha^2 d\mathbf{v} \quad (48)$$

$$= \rho \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{d/2} \int_{\mathbb{R}^{d-1}} \exp\left(\frac{-m \sum_{i \neq \alpha} v_i^2}{2kT}\right) d\mathbf{v}' \int_{\mathbb{R}} \exp\left(\frac{-mv_\alpha^2}{2kT}\right) v_\alpha^2 dv_\alpha \quad (49)$$

$$= \langle 1, f_{d-1} \rangle \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{-mv_\alpha^2}{2kT}\right) v_\alpha^2 dv_\alpha, \quad (50)$$

där den första integralen är lika med ρ enligt (40). Genom att partialintegrera den senare integralen fås att (50) är lika med

$$\langle 1, f_{d-1} \rangle \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} \left(\left[-\exp\left(\frac{-mv_\alpha^2}{2kT}\right) v_\alpha \frac{kT}{m} \right]_{-\infty}^{\infty} + \int_{\mathbb{R}} \frac{kT}{m} \exp\left(\frac{-mv_\alpha^2}{2kT}\right) dv_\alpha \right) \quad (51)$$

$$= \rho \frac{kT}{m}, \quad (52)$$

där den sista likheten följer från räkningarna tillhörande 0:te momentet.

(ii) $\alpha \neq \beta$:

$$\langle v_\alpha v_\beta, f_d \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} v_\alpha v_\beta f_d d\mathbf{v} = \langle 1, f_{d-2} \rangle \int_{\mathbb{R}^d} \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{-mv_\alpha^2}{2kT}\right) v_\alpha dv_\alpha \quad (53)$$

$$\int_{\mathbb{R}^d} \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{-mv_\beta^2}{2kT}\right) v_\beta dv_\beta = 0, \quad (54)$$

med samma resonemang som för förstamomentet.

Tredjementet

$$\langle v_\alpha v_\beta v_\gamma, f_d \rangle, \quad (55)$$

kan också delas in i fall efter vilka av α, β, γ sammanfaller och vilka som ej sammanfaller. Oavsätt indelning kan det, efter en enkel omskrivning som i fall (ii) ovan, konstateras att resultatet blir noll, återigen med samma resonemang som för förstamomentet.

Betrakta slutligen fjärdementet. Det är enkelt att se (på samma sätt som ovan) att om någon utav $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ sammanfaller med ett jämnt antal utav de övriga, blir momentet noll. Efter detta återstår två fall: (i) $\alpha = \beta = \gamma = \delta$ och (ii) $\alpha = \beta \neq \gamma = \delta$.

(i) $\alpha = \beta = \gamma = \delta$:

$$\langle v_\alpha v_\beta v_\gamma v_\delta, f_d \rangle = \langle v_\alpha^4, f_d \rangle = \rho \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{d/2} \int_{\mathbb{R}^d} v_\alpha^4 \exp\left(\frac{-mv^2}{2kT}\right) d\mathbf{v} \quad (56)$$

$$= \langle 1, f_{d-1} \rangle \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} \int_{\mathbb{R}} v_\alpha^4 \exp\left(\frac{-mv_\alpha^2}{2kT}\right) dv_\alpha. \quad (57)$$

Genom dubbel partialintegration fås nu ur (57)

$$\langle 1, f_{d-1} \rangle \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} \left[-\frac{kT}{m} \exp \left(\frac{-mv_\alpha^2}{2kT} v^3 \right) \right]_{-\infty}^{\infty} + \quad (58)$$

$$\langle 1, f_{d-1} \rangle \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} \left[-\frac{kT}{m} \exp \left(\frac{-mv_\alpha^2}{2kT} 3v \right) \right]_{-\infty}^{\infty} + \quad (59)$$

$$3 \langle 1, f_{d-1} \rangle \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} \int_{\mathbb{R}} \exp \left(\frac{-mv_\alpha^2}{2kT} \right) dv_\alpha = 3\rho \left(\frac{kT}{m} \right)^2. \quad (60)$$

(ii) $\alpha = \beta \neq \gamma = \delta$:

$$\langle v_\alpha v_\beta v_\gamma v_\delta, f_d \rangle = \langle v_\alpha^2 v_\gamma^2, f_d \rangle = \langle 1, f_{d-2} \rangle \langle v_\alpha^2, f_1 \rangle \langle v_\gamma^2, f_1 \rangle \quad (61)$$

$$= \rho \left(\frac{kT}{m} \right)^2. \quad (62)$$

Genom att använda notation med Kroneckerdelta, $\delta_{ij} = 1$, om $i = j$. $\delta_{ij} = 0$ om $i \neq j$ sammanfattas hastighetsmomenten som

$$\rho \sum_{i=1}^{n_d} W_i = \langle 1, f_d \rangle = \rho \quad (63)$$

$$\rho \sum_{i=1}^{n_d} c_{i\alpha} W_i = \langle v_\alpha, f_d \rangle = 0 \quad (64)$$

$$\rho \sum_{i=1}^{n_d} c_{i\alpha} c_{i\beta} W_i = \langle v_\alpha v_\beta, f_d \rangle = \rho \frac{kT}{m} \delta_{\alpha\beta} \quad (65)$$

$$\rho \sum_{i=1}^{n_d} c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} W_i = \langle v_\alpha v_\beta v_\gamma, f_d \rangle = 0 \quad (66)$$

$$\rho \sum_{i=1}^{n_d} c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} W_i = \langle v_\alpha v_\beta v_\gamma v_\delta, f_d \rangle \quad (67)$$

$$= \rho \left(\frac{kT}{m} \right)^2 (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta}). \quad (68)$$

Vi går nu vidare till att behandla några specifika gitter och väljer jämviktsfunktioner för dessa.

2.3 Jämvikt i olika gitter

Det gitter som används betecknas ofta som $DXQY$, där $X \in \{1, 2, 3\}$ är dimensionen för problemet och $Y \in \mathbb{Z}_+$ är antalet hastigheter i gittret.

2.3.1 D1Q3

I ett $D1Q3$ gitter finns de normaliserade hastigheterna

$$c_0 = 0$$

$$c_1 = 1$$

$$c_2 = -1.$$

Hastighetsmomenten beräknas till

$$\sum_{i=0}^2 W_i = 1 \quad (69)$$

$$\sum_{i=0}^2 c_i W_i = 0 \quad (70)$$

$$\sum_{i=0}^2 c_i^2 W_i = \frac{kT}{m} \quad (71)$$

$$\sum_{i=0}^2 c_i^3 W_i = 0 \quad (72)$$

$$\sum_{i=0}^2 c_i^4 W_i = 3 \left(\frac{kT}{m} \right)^2 \quad (73)$$

dvs.

$$\sum_{i=0}^2 W_i = 1 \quad (74)$$

$$W_1 + W_2 = \frac{kT}{m} \quad (75)$$

$$W_1 + W_2 = 3 \left(\frac{kT}{m} \right)^2. \quad (76)$$

Av symmetriskäl, antagande om isotropi, vet vi att det måste gälla $W_1 = W_2$. Därför kan W_i beräknas till

$$W_0 = 2/3 \quad (77)$$

$$W_1 = W_2 = 1/6. \quad (78)$$

Vi får då jämviktsfunktionerna

$$f_0^{eq} = \rho \frac{2}{3} \quad (79)$$

$$f_1^{eq} = f_2^{eq} = \rho \frac{1}{6}. \quad (80)$$

2.3.2 D2Q9

För ett tvådimensionellt gitter med nio hastigheter ges hastigheterna av

$$c_0 = (0, 0)$$

$$c_1 = (1, 0)$$

$$c_2 = (0, 1)$$

$$c_3 = (-1, 0)$$

$$c_4 = (0, -1)$$

$$c_5 = (1, 1)$$

$$c_6 = (-1, -1)$$

$$c_7 = (1, -1)$$

$$c_8 = (-1, 1).$$

Av symmetriskäl gäller att $W_1 = W_2 = W_3 = W_4$ samt $W_5 = W_6 = W_7 = W_8$. Således fås att

$$W_0 + 4W_1 + 4W_5 = 1 \quad (81)$$

$$2W_1 + 4W_5 = \frac{kT}{m} \quad (82)$$

$$2W_1 + 4W_5 = 3 \left(\frac{kT}{m} \right)^2 \quad (83)$$

$$4W_5 = \left(\frac{kT}{m} \right)^2. \quad (84)$$

Genom att lösa detta ekvationssystem får vi sedan W_i som

$$W_0 = 4/9 \quad (85)$$

$$W_1 = W_2 = W_3 = W_4 = 1/9 \quad (86)$$

$$W_5 = W_6 = W_7 = W_8 = 1/36. \quad (87)$$

Vi får alltså jämviktsfunktionerna

$$f_i^{eq} = \rho W_i, i = 0, 1, \dots, 8. \quad (88)$$

Det går enkelt att bestämma vikterna för andra gitter till exempel D3Q19.

2.4 Entropisk lattice Boltzmann

Det finns flera andra varianter av LBM som används och i detta avsnitt introducerar vi en av dessa, entropisk LBM. Det här avsnittet bygger kraftigt på artiklarna [14] och [15]. Vi kommer således göra frekventa hänvisningar till båda dessa. Den redovisade teorin kommer tillämpas för diffusionsfallet och vi har således en entropisk LBM.

Vi erinrar från avsnitt 2.1.2 att till Boltzmannekvationen finns en Lyapunovfunktional H , som i någon mening mäter entropin för en given fördelning f . Boltzmanns H-teorem säger sedan att entropin är icke-ökande med tiden för en lösning f till Boltzmanns ekvation. I det här kapitlet kommer vi konstruera någonting liknande för det diskreta lattice Boltzmann fallet. Fokus är på kollisionssteget, där vi vill införa en funktional H sådan att entropin som H definierar inte ökar. H kommer att vara gitterberoende.

Låt n_d vara antalet populationer f_i . Då finns $n \leq n_d$ makroskopiska parametrar (såsom densitet, rörelsemängd, energi...) som vi vill ska bevaras under kollision. Låt \mathbb{D} vara mängden av konserverade parametrar. Från avsnitt 2.1.3 vet vi t.ex. att densitet, rörelsemängd och temperatur är kollisionsinvarianta under BGK-kollisioner. Låter vi M beteckna vektorrummet av alla möjliga populationer, får vi alltså \mathbb{R}^n . Med tanke på att f_i faktiskt skall representera populationer är vi enbart intresserade av konen $\Theta := \{f; f_i \geq 0, i = 1, \dots, n\}$.

Varje makroskopisk parameter $d \in \mathbb{D}$ kan nu på ett naturligt sätt skrivas som $d = f \cdot \xi$ där $\xi \in M$. Här betecknar \cdot standardskalärprodukten på \mathbb{R}^n . Till exempel skrivs densitet ρ som $\rho = f \cdot 1^n$, där vi med 1^n menar vektorn med enbart ettor i \mathbb{R}^n .

Vi definierar nu det *hydrodynamiska delrummet* [15] \mathbb{H} till M som

$$\mathbb{H} := \text{Span}\{\xi \in M; \forall d \in \mathbb{D} : d = f \cdot \xi\}, \quad (89)$$

samt det *kinetiska delrummet* \mathbb{K} som det ortogonala komplementet till \mathbb{H}

$$\mathbb{K} := \mathbb{H}^\perp, \quad (90)$$

dvs. det rum som spänns upp av alla vektorer som är ortogonala mot samtliga vektorer i \mathbb{H} . Notera att $\dim \mathbb{H} = n_d$ och $\dim \mathbb{K} = n - n_d$.

Eftersom M är ett Hilbertrum och \mathbb{H} är slutet kan vi nu åberopa ortogonala projektionssatsen som säger att varje element $m \in M$ entydigt kan skrivas som $m = h + k$, med $h \in \mathbb{H}$ och $k \in \mathbb{K}$. Detta skrivs oftast som en direkt summa

$$M = \mathbb{H} \oplus \mathbb{K}. \quad (91)$$

Det följer att varje element i vår kon Θ också kan dekomponeras i hydrodynamisk och kinetisk del. Skriver vi således $f \in \Theta$ som $f = h + k$ vet vi att h inte ändras vid kollision och det räcker därför med att applicera kollisionsteget på k .

När vi väljer kollisionoperator Q finns det ett antal kriterier som bör vara uppfyllda [14].

1. Som vi precis har nämnt skall Q lämna den hydrodynamiska delen av f oförändrad. Detta är ekvivalent med att de önskade konserveringslagarna gäller. Uttryckt på ett annat sätt så skall Q vara ortogonal mot \mathbb{H} .
2. Ytterligare vill vi att kollisionen skall lämna hela f oförändrad om och endast om vi befinner oss i jämvikt. Alltså $Q(f) = 0 \Leftrightarrow f = f^{eq}$.
3. Ingen entropi får skapas under kollisionsprocessen! Enligt [14] är entropiproduktionen σ

$$\sigma := \nabla H(f) \cdot Q(f) \leq 0, \quad f \in \Theta. \quad (92)$$

Notera att entropiproduktionen blir noll i jämvikt enligt kriterie 2.

För ren diffusion bevaras endast densitet ρ . Beväpnade med samma vikter W_i som vi härledde i avsnitt 2.2 definierar vi nu en funktional

$$H(f) := \sum_i f_i \ln \frac{f_i}{W_i}. \quad (93)$$

Det finns många sätt att definiera H och alla ger upphov till något olika resultat när de används i beräkningarna. Det H som vi har valt har tydliga likheter med det H som introducerades i samband med Boltzmanns H-teorem.

H är en Lyapunovfunktional, som antar sitt minimum 0 precis då $f = f^{eq}$. Vi ska nu visa detta. Betrakta först

$$Hess(H) = diag(f_i^{-1}) \quad (94)$$

varför $Hess(H)$ är positivt definit vilket medför att H är konvex.

Med det linjära bivillkoret $g(f) := \sum_i f_i - \rho = 0$ dvs. given fix densitet ρ vet vi att f är minimum till H omm f är KKT-punkt till H . Vi kan nu ställa upp KKT-villkoren som: f är en KKT-punkt till H omm det finns $\lambda \in \mathbb{R}$ sådant att

$$\nabla H(f) + \lambda \nabla g(f) = 0, \quad (95)$$

eller ekvivalent

$$\ln \frac{f_i}{W_i} + 1 + \lambda = 0, \quad i = 1, \dots, n. \quad (96)$$

Man ser tydligt att det är nödvändigt att $f_i/W_i = C$, där C är en (positiv) konstant oberoende av i . Skriver vi om villkoret får vi

$$f_i = CW_i, \quad i = 1, \dots, n. \quad (97)$$

Summerar vi över alla i får vi enligt vårt bivillkor g att det nu måste gälla att

$$C = C \sum_i W_i = \sum_i f_i = \rho, \quad (98)$$

varför vi kan konstatera att

$$f_i^{min} = \rho W_i =: f_i^{eq} \quad (99)$$

och vi kan se analogin till Maxwell-Boltzmann fördelningen från tidigare.
Den vanliga BGK kollisionen i vår LBM ser ut som

$$f \mapsto \omega (f^{eq} - f), \quad (100)$$

där ω är kollisionsfrekvensen. Notera att kollisionsfrekvensen ω är relaterad till relaxions-tiden τ som $\omega = -1/\tau$. Vi skall nu verifiera att den här typen av kollisioner uppfyller kraven 1-3 ovan.

1. Som enda konserverade parameter har vi densitet ρ . Betrakta således $1^n \cdot Q(f) = \omega \sum_i f_i^{eq} - f_i = \omega (\sum_i f_i^{eq} - \sum_i f_i) = \omega(\rho - \rho) = 0$. Alltså är Q ortogonal mot det hydrodynamiska vektorrummet.
2. Att $Q(f) = 0$ omm $f = f^{eq}$ är trivialt.
3. Vi betraktar $\sigma := \nabla H(f) \cdot Q(f) = \omega \sum_i \left(\ln \frac{f_i}{W_i} + 1 \right) (f_i^{eq} - f_i) \leq \omega \sum_i (f_i^{eq} - f_i) = 0$. Så entropin ökar inte under kollisionen.

Vi definierar vidare *spegelbilden* [22] av f som

$$f^{mir} = f + \alpha Q(f), \quad (101)$$

där α är den icke-triviala lösningen till

$$H(f) = H(f + \alpha Q(f)). \quad (102)$$

Benämningen spegelbild kommer från att f^{mir} per definition är den fördelning med samma mängd entropi som f . Eftersom H är konvex, kommer f^{mir} befinna sig på andra sidan f^{eq} . När vi senare etablerar att entropin är icke-ökande längs en lösning, kan f^{mir} således betraktas som det maximala tillåtna förflyttningen förbi f^{eq} . Man talar om överrelaxering, när kollisionssteget för populationen förbi jämvikt och därav blir spegelbilden den maximala överrelaxeringen. Begreppet entropisk involution förekommer också för spegelbilden.

För entropisk LBM, ELBM kan ett steg beskrivas som en konvexkombination av f och f^{mir}

$$f \mapsto \beta f + (1 - \beta) f^{mir}, \quad (103)$$

med $\beta \in [0, 1]$.

Enbart kollisionsprocessen kan skrivas som

$$f \mapsto \alpha\beta (f^{eq} - f), \quad (104)$$

med α, β som ovan. Produkten $\alpha\beta$ beskriver nu den effektiva kollisionsfrekvensen ω .

Notera också att jämviktstillståndet f^{eq} ej förekommer i uppdateringen. Därför behöver vi inte nödvändigtvis beräkna f^{eq} vid varje tidssteg.

Det har uppkommit [16] att ett icke-trivialt α inte nödvändigtvis alltid existerar i (102). Detta är självklart i jämvikt, men problemet uppstår även när vi är tillräckligt långt ifrån jämvikt. Frågan uppstår vad man skall göra om man inte befinner sig i den omgivning då ett sådant α kan hittas.

I [17] diskuterar möjliga sätt att lösa denna problematik. Vi presenterar här två enkla sätt att utföra kollisionsprocessen, när α inte går att finna.

2.4.1 Positivitetsregeln

Positivitetsregeln är en enkel regel, vars primära syfte är att bibehålla positiva populationer f_i . Tanken är att överrelaxera så mycket som möjligt under förutsättning vi fortfarande har positiva populationer. Om vi inte kan finna α låter vi alltså kollisionsteget beskrivas som

$$f \mapsto \arg \min_{g \in \Theta'} H(g), \quad (105)$$

där $\Theta' = \{g \in \Theta; g = \beta f + (1 - \beta)f^{eq}, \beta \in \mathbb{R}\}$. Vi letar alltså efter den positiva populationsvektor \hat{f} med lägst värde på H längs linjen som går genom f och f^{eq} . En viktig sak att notera är att det vid användandet av positivitetsregeln är möjligt att vi bryter mot regeln om ingen entropiproduktion under kollisionsprocessen.

2.4.2 Ehrenfests regularisering

För att kunna formulera Ehrenfests regulariseringen behöver vi införa begreppet *icke-jämviktcentropi* ΔH som vi definierar som

$$\Delta H(f) := H(f) - H(f^{eq}). \quad (106)$$

Ehrenfests regularisering säger sedan att för värden på ΔH större än någon given tolerans TOL, tvingar vi f till jämvikt

$$f \mapsto f^{eq}. \quad (107)$$

2.5 Diffusiv skalning

När man ska modellera processer som sker i olika skalor kan det underlätta analysen om variablerna görs dimensionslösa. Genom att först göra variablerna dimensionslösa kan man jämföra olika fenomen oavsett storleksordning.

I vårt fall har vi inte flera processer av olika storleksordning men däremot en långsam transportprocess, diffusion. Eftersom det fysikaliska systemet går långsamt måste vi korrigera den mikroskopiska dynamiken så denna också sker långsamt. Detta gör vi genom att skala variablerna enligt diffusiv skalning. Diffusiv skalning är en skalning av variablerna som först togs fram av Sone och härleds som följande [18].

Vi inför först de dimensionslösa variablerna

$$\begin{aligned} x &= \frac{x}{L} \\ t &= \frac{Ut}{L}, \end{aligned}$$

där L är en karaktäristisk längd och C är en referenshastighet. För den karaktäristiska längden kan storleken på gittret användas och referenshastigheten definieras enligt

$$C = \frac{\Delta x}{\Delta t}. \quad (108)$$

Som ovan nämnt behöver vi skala hastigheten så det mikroskopiska stämmer med det makroskopiska. Detta görs genom att införa en parameter ϵ i referenshastigheten. Vi får en ny referenshastighet U som ges av följande

$$U = C\epsilon, \quad (109)$$

där ϵ ges av

$$\epsilon = \frac{\Delta x}{L} \quad (110)$$

och kan tolkas som avståndet mellan de olika punkterna på gittret.

Vi visar nu att denna skalning kommer att påverka tidssteget δt .

Om vi definierar tidssteget som

$$\delta t = \frac{\Delta t}{T}, \quad (111)$$

där T är en referenstid och definieras

$$T = \frac{L}{U}. \quad (112)$$

Om vi nu använder definitionerna ovan

$$T = \frac{L}{U} = \frac{L}{\epsilon C} = \frac{\Delta x}{\epsilon^2 \Delta x} \Delta t = \frac{\Delta t}{\epsilon^2}. \quad (113)$$

Det dimensionslösa tidssteget, δt , blir

$$\delta t = \frac{\Delta t}{T} = \epsilon^2. \quad (114)$$

Alltså kommer LBM med diffusiv skalning skrivas som

$$f_i(x + c_i \epsilon, t + \epsilon^2) = f_i(x, t) - \frac{1}{\tau} [f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)]. \quad (115)$$

2.6 Härledning 1D

Vi vill nu visa att LBM

$$f_i(x + c_i \delta t, t + \delta t) = f_i(x, t) - \frac{1}{\tau} [f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)], \quad (116)$$

kan lösa

$$u_t = D u_{xx},$$

där D är diffusionskoefficienten. Alltså diffusionsekvationen i en dimension.

Vi inleder med att införa den diffusiva skalningen. Vi får då

$$f_i(x + c_i \epsilon, t + \epsilon^2) = f_i(x, t) - \frac{1}{\tau} [f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)]. \quad (117)$$

Därefter Taylorutvecklar vi vänsterledet upp till ordning 2

$$f_i(x + c_i \epsilon, t + \epsilon^2) = f_i(x, t) + \epsilon \partial_x f_i(x, t) + \epsilon^2 \partial_t f_i + \frac{1}{2} (\epsilon \partial_x + \epsilon^2 \partial_t)^2 f_i(x, t) + O(\epsilon^3). \quad (118)$$

Insättning av (118) i (117) ger

$$\epsilon \partial_x c_i f_i(x, t) + \epsilon^2 \partial_t f_i + \frac{1}{2} (\epsilon \partial_x c_i + \epsilon^2 \partial_t)^2 f_i(x, t) + O(\epsilon^3) = -\frac{1}{\tau} [f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)]. \quad (119)$$

Vi expanderar f_i som en potensserie kring ett jämviktstillstånd. Detta ger

$$f_i = f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)} + \epsilon^2 f_i^{(2)} + O(\epsilon^3). \quad (120)$$

Om vi sätter in (120) i (119) och därefter ordnar ekvationerna efter ordning av ϵ
Ordning 0:

$$f_i^{eq} = f_i^{(0)}. \quad (121)$$

Ordning 1:

$$\partial_x c_i f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(1)}. \quad (122)$$

Ordning 2:

$$\partial_x c_i f_i^{(1)} + \partial_t f_i^{(0)} + \frac{1}{2} \partial_x^2 c_i^2 f_i^0 = \frac{1}{\tau} f_i^{(2)}. \quad (123)$$

Använd (122) i (123) och summera över alla f_i . Högerledet summerar till 0 vilket ger

$$\partial_t u - \left(\tau - \frac{1}{2}\right) c^2 \partial_x^2 u = 0,$$

med $D = \left(\tau - \frac{1}{2}\right) c^2$ som vår diffusionskoefficient

2.7 Härledning i högre dimensioner

För härledningen i 2D påminner vi oss om tidigare definierade symmetrikrav

$$\sum_i W_i = 1 \quad (124)$$

$$\sum_i W_i c_{i\alpha} = 0 \quad (125)$$

$$\sum_i W_i c_{i\alpha} c_{i\beta} = c_s^2 \delta_{\alpha\beta}, \quad (126)$$

där c_s är ljudhastigheten, som definieras

$$c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad (127)$$

där α och β är koordinaternas riktning och $\delta_{\alpha\beta}$ är Kroeneckers deltafunktion. LBM i två dimensioner ser ut som

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \epsilon, t + \epsilon^2) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] \quad (128)$$

och vi vill visa att

$$u(\mathbf{x}, t) = \sum_i f_i(\mathbf{x}, t)$$

uppfyller

$$u_t = D \Delta u, \quad (129)$$

där Δ betecknar Laplaceoperatoren.

Vi Taylorutvecklar f_i i punkten (\mathbf{x}, t) och tar med termer upp till och med ordning 2. Detta ger

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \epsilon, t + \epsilon^2) = f_i(\mathbf{x}, t) + \sum_{\alpha} \partial_{\alpha} \epsilon c_{i\alpha} f_i(\mathbf{x}, t) + \epsilon^2 \partial_t f_i(\mathbf{x}, t) \quad (130)$$

$$+ \frac{\epsilon^2}{2} \sum_{\alpha, \beta} \partial_{\alpha} \partial_{\beta} c_{i\alpha} c_{i\beta} \epsilon^2 f_i(\mathbf{x}, t) + O(\epsilon^3). \quad (131)$$

Sätter vi in Taylorutvecklingen i (128) får vi

$$\epsilon \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \partial_{\alpha} f_i(\mathbf{x}, t) + \epsilon^2 \partial_t f_i(\mathbf{x}, t) + \frac{\epsilon^2}{2} \sum_{\alpha, \beta} c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_{\alpha} \partial_{\beta} f_i(\mathbf{x}, t) + O(\epsilon^3) = -\frac{1}{\tau} (f_i - f_i^{eq}) \quad (132)$$

Vi utvecklar nu precis som i det endimensionella fallet f_i som en potensserie i en liten parameter ϵ . Tar vi med termer upp till och med ordning 2 får vi

$$f_i = f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)} + \epsilon^2 f_i^{(2)} + O(\epsilon^3). \quad (133)$$

Vi sätter in (154) i (128) och sorterar efter ordning på ϵ . Detta ger Ordning 0:

$$f_i^{(0)} = f_i^{eq}. \quad (134)$$

Ordning 1:

$$\sum_{\alpha} c_{i\alpha} \partial_{\alpha} f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(1)}. \quad (135)$$

Ordning 2:

$$\sum_{\alpha} c_{i\alpha} \partial_{\alpha} f_i^{(1)} + \partial_t f_i^{(0)} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_{\alpha} \partial_{\beta} f_i^{(0)} = \frac{1}{\tau} f_i^{(2)}. \quad (136)$$

Vi utnyttjar nu (155) och (156) i (157) och summerar över alla populationer f_i . Detta ger

$$\sum_i \left(-\tau \sum_{\alpha, \beta} c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_{\alpha} \partial_{\beta} f_i^{eq} + \partial_t f_i^{eq} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_{\alpha} \partial_{\beta} f_i^{eq} \right) = 0 \quad (137)$$

och vi får

$$D \Delta u = u_t, \quad (138)$$

där D är diffusionskoefficienten.

$$D = \sum w_i \left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_{i\alpha} c_{i\beta}. \quad (139)$$

Detta kan förenklas till, med hjälp av symmetrivillkor,

$$D = c_s^2 \left(\tau - \frac{1}{2} \right). \quad (140)$$

2.8 LBM för anisotrop diffusion

Den anisotropa diffusionsekvationen med konstanta koefficienter och utan källor kan skrivas som

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n d_{ij} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j}, \quad (141)$$

där $n = 2, 3$ är antalet rumsvariabler och $D = \{d_{ij}\}$ är diffusionsmatrisen (diffusionstensor), som är symmetrisk, positivt definit och har icke-negativa diagonalelement. Notera att vi får isotrop diffusion om D är en skalär multipel av enhetsmatrisen I_n .

I det här avsnittet skall vi utveckla den variant av LBM som presenterats i tidigare avsnitt för att kunna simulera (141). Vi väljer att göra detta genom att utvidga de jämviktsfördelningar som introducerats för det isotropa fallet med nya, anisotropa egenskaper. Vi kan sedan välja dessa anisotropa delar så att Chapman-Enskog expansionen ger en önskad diffusionsmatris. Slutligen bestäms parametrarna i uttrycken för jämviktsfördelningarna från diffusionstensor. Det visar sig att vissa gitter har för få hastigheter för att representera en diffusionstensor i full generalitet. Det visar sig däremot att D2Q9 modellen har tillräckligt många hastigheter för detta ändamål. Det finns till och med flera olika jämviktsuppsättningar för en given diffusionstensor. Vi noterar slutligen att inte riktigt alla tensorer är uppnåeliga, bland annat eftersom vi har vissa restriktioner på relaxionsparametern τ för stabilitet.

2.8.1 Utvidgning av jämviktsfunktionerna

Vi erinrar att jämviktsfunktionerna för ett $DXQY$ gitter, under isotrop diffusion, beskrivs utav

$$f_i^{eq} = \rho W_i, \quad i = 1, 2, \dots, Y, \quad (142)$$

där ρ är densitet och likheterna $\rho = \sum f_i$ och $\sum W_i = 1$ håller. Isotropiantagandet implicerar likhet mellan vikter för hastigheter med samma belopp. Detta symmetrikrav kan skrivas som

$$W_i = W_j, \quad \text{om } |c_i| = |c_j|. \quad (143)$$

Introducera nu en utvidgning av de isotropa jämviktsfunktionerna genom att relaxera symmetrikravet (143). Vi introducerar notation för de anisotropa jämviktsfunktionerna f_i^{anis} genom

$$f_i^{anis} := f_i^{eq}, \quad i = 1, 2, \dots, Y. \quad (144)$$

Precis som för de isotropa jämviktstermerna gör vi ett antagande om den anisotropa jämviktens struktur.

$$f_i^{anis} = \rho \chi_i, \quad i = 1, 2, \dots, Y, \quad (145)$$

där χ_i är vikter som behövas bestämmas. Konservativ av massa ger återigen

$$\sum_i f_i^{anis} = \rho, \quad (146)$$

vilket ger ett bivillkor på våra χ_i

$$\sum \chi_i = 1. \quad (147)$$

Betrakta nu diffusionsmatrisen $D = \{d_{ij}\}$. För att göra förklaringarna tydligare antar vi att vi endast har två rumsvariabler, vilket gör D till en 2×2 matris. Inför det typiska kartesiska koordinatsystemet med x och y som horisontell respektive vertikal koordinataxel. Vi kan nu löst tolka d_{11} som diffusion längs x -axeln och d_{22} som diffusion i y -riktning. $d_{12} = d_{21}$ kan tolkas som diffusion i linjen $\alpha(1, 1)$, $\alpha \in \mathbb{R}$ om elementet är positivt, respektive diffusion längs linjen $\beta(1, -1)$, $\beta \in \mathbb{R}$ om den är negativ.

Detta motiverar ett mildare symmetriantagande - vikter för de anisotropa jämvikterna med motsatta hastigheter sammanfaller! Vi inför notationen i^* som index för hastigheten motsatt den hastighet med index i . Symmetrikravet kan då skrivas som

$$\chi_i = \chi_{i^*}, \quad i = 1, 2, \dots, Y. \quad (148)$$

2.8.2 Härledning - anisotropi

Vi är nu redo att härleda den anisotropa diffusionsekvationen via diffusiv skalning. Vi börjar precis som i det isotropiska fallet, men räkningarna blir lite annorlunda mot slutet. Betrakta således lattice Boltzmanns ekvation efter införandet om den diffusiva skalningen

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \epsilon, t + \epsilon^2) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} (f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)), \quad (149)$$

där vi vill visa att

$$u = \sum f_i \quad (150)$$

kan satisfiera den anisotropiska diffusionsekvationen (141). Vi Taylorutvecklar f_i i punkten (\mathbf{x}, t) och tar med termer upp till och med ordning 2. Detta ger

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \epsilon, t + \epsilon^2) = f_i(\mathbf{x}, t) + \sum_{\alpha} \partial_{\alpha} \epsilon c_{i\alpha} f_i(\mathbf{x}, t) + \epsilon^2 \partial_t f_i(\mathbf{x}, t) \quad (151)$$

$$+ \frac{\epsilon^2}{2} \sum_{\alpha, \beta} \partial_{\alpha} \partial_{\beta} c_{i\alpha} c_{i\beta} \epsilon^2 f_i(\mathbf{x}, t) + O(\epsilon^3). \quad (152)$$

Sätter vi in Taylorutvecklingen i (149) får vi

$$\epsilon \sum_{\alpha} c_{i\alpha} \partial_{\alpha} f_i(\mathbf{x}, t) + \epsilon^2 \partial_t f_i(\mathbf{x}, t) + \frac{\epsilon^2}{2} \sum_{\alpha, \beta} c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_{\alpha} \partial_{\beta} f_i(\mathbf{x}, t) + O(\epsilon^3) = -\frac{1}{\tau} (f_i(\mathbf{x}, t) - f_i(\mathbf{x}, t)^{eq}). \quad (153)$$

Vi utvecklar nu i vanlig ordning f_i som en potensserie i en liten parameter ϵ . Tar vi med termer upp till och med ordning 2 får vi

$$f_i = f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)} + \epsilon^2 f_i^{(2)} + O(\epsilon^3). \quad (154)$$

Vi sätter in (154) i (153) och sorterar efter ordning på ϵ . Detta ger
Ordning 0:

$$f_i^{(0)} = f_i^{eq}. \quad (155)$$

Ordning 1:

$$\sum_{\alpha} c_{i\alpha} \partial_{\alpha} f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(1)}. \quad (156)$$

Ordning 2:

$$\sum_{\alpha} c_{i\alpha} \partial_{\alpha} f_i^{(1)} + \partial_t f_i^{(0)} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_{\alpha} \partial_{\beta} f_i^{(0)} = \frac{1}{\tau} f_i^{(2)}. \quad (157)$$

Vi utnyttjar nu (155) och (156) i (157) och summerar över alla populationer f_i . Detta ger

$$\sum_i \left(-\tau \sum_{\alpha, \beta} c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_{\alpha} \partial_{\beta} f_i^{eq} + \partial_t f_i^{eq} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_{\alpha} \partial_{\beta} f_i^{eq} \right) = 0. \quad (158)$$

Med hjälp av (144) kan detta skrivas som

$$\left(\tau - \frac{1}{2} \right) \sum_{\alpha, \beta} \partial_{\alpha} \partial_{\beta} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{anis} = \partial_t \sum_i f_i^{anis}. \quad (159)$$

Konserveringslagar ger nu

$$\left(\tau - \frac{1}{2} \right) \sum_{\alpha, \beta} \partial_{\alpha} \partial_{\beta} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{anis} = \partial_t u. \quad (160)$$

Om vi utnyttjar att vi vet formen på f_i^{anis} kan detta formuleras

$$\left(\tau - \frac{1}{2} \right) \sum_{\alpha, \beta} \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} \chi_i \partial_{\alpha} \partial_{\beta} u = \partial_t u. \quad (161)$$

Diffusionsmatrisen kan således skrivas

$$d_{\alpha, \beta} = \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} \chi_i. \quad (162)$$

Vi går nu vidare till att betrakta två konkreta gitter, $D2Q5$ och $D2Q9$.

2.8.3 D2Q5

I $D2Q5$ har vi gitter med hastigheter

$$\begin{aligned} c_0 &= (0, 0) \\ c_1 &= (1, 0) \\ c_2 &= (0, 1) \\ c_3 &= (-1, 0) \\ c_4 &= (0, -1). \end{aligned}$$

De anisotropa symmetrikraven ger oss de två likheterna

$$\chi_1 = \chi_3 \tag{163}$$

$$\chi_2 = \chi_4. \tag{164}$$

Vi har alltså tre parametrar ($+\tau$) att bestämma. Betrakta nu elementen i diffusionsmatrisen i tur och ordning

$$d_{11} = \left(\tau - \frac{1}{2}\right) \sum_{i=0}^4 c_{i1}^2 \chi_i = 2\left(\tau - \frac{1}{2}\right) \chi_1 \tag{165}$$

$$d_{22} = \left(\tau - \frac{1}{2}\right) \sum_{i=0}^4 c_{i2}^2 \chi_i = 2\left(\tau - \frac{1}{2}\right) \chi_2 \tag{166}$$

$$d_{12} = d_{21} = \left(\tau - \frac{1}{2}\right) \sum_{i=0}^4 c_{i1} c_{i2} \chi_i = 0. \tag{167}$$

Vidare har vi bivillkor från masskonservering samt det logiska

$$\sum_{i=0}^4 \chi_i = \chi_0 + 2\chi_1 + 2\chi_2 = 1 \tag{168}$$

$$\chi_i \geq 0, \quad i = 0, 1, \dots, 4. \tag{169}$$

Antag nu att τ är fixerat och inför en ny diffusionsmatris \mathfrak{D} , med elementen \mathfrak{d}_{ij} , som $\mathfrak{D} := \frac{1}{(\tau-1/2)}D$. Givet denna diffusionsmatris \mathfrak{D} skall vi alltså välja χ_i sådana att villkoren (165) - (169) håller. En enkel omskrivning ger oss

$$\chi_0 = 1 - (\mathfrak{d}_{11} + \mathfrak{d}_{22}) \tag{170}$$

$$\chi_1 = \chi_3 = \frac{1}{2}\mathfrak{d}_{11} \tag{171}$$

$$\chi_2 = \chi_4 = \frac{1}{2}\mathfrak{d}_{22}. \tag{172}$$

Vi noterar att enbart diagonala diffusionsmatriser kan representeras, ty $\mathfrak{d}_{12} = \mathfrak{d}_{21} = 0$. Detta beror på att gittret har för få hastigheter, speciellt saknas diagonella hastigheter. För att kunna representera en mer allmän diffusionsmatris måste vi således utvidga gittret genom att tillåta fler hastigheter. Detta leder oss till att betrakta $D2Q9$ gittret.

2.8.4 D2Q9

Vi erinrar att hastigheterna i ett $D2Q9$ gitter ges utav

$$\begin{aligned}
c_0 &= (0, 0) \\
c_1 &= (1, 0) \\
c_2 &= (0, 1) \\
c_3 &= (-1, 0) \\
c_4 &= (0, -1) \\
c_5 &= (1, 1) \\
c_6 &= (-1, -1) \\
c_7 &= (1, -1) \\
c_8 &= (-1, 1).
\end{aligned}$$

Det anisotropa symmetrikravet gör att vi kan identifiera

$$\chi_1 = \chi_3 \quad (173)$$

$$\chi_2 = \chi_4 \quad (174)$$

$$\chi_5 = \chi_6 \quad (175)$$

$$\chi_7 = \chi_8. \quad (176)$$

Om vi även denna gång betraktar elementen i diffusionsmatrisen ges dessa av

$$d_{11} = (\tau - \frac{1}{2}) \sum_{i=0}^8 c_{i1}^2 \chi_i = 2(\tau - \frac{1}{2})(\chi_1 + \chi_5 + \chi_7) \quad (177)$$

$$d_{22} = (\tau - \frac{1}{2}) \sum_{i=0}^8 c_{i2}^2 \chi_i = 2(\tau - \frac{1}{2})(\chi_2 + \chi_5 + \chi_7) \quad (178)$$

$$d_{12} = d_{21} = (\tau - \frac{1}{2}) \sum_{i=0}^8 c_{i1} c_{i2} \chi_i = 2(\tau - \frac{1}{2})(\chi_5 - \chi_7). \quad (179)$$

Vidare har vi också bivillkoren

$$\sum_{i=0}^8 \chi_i = \chi_0 + 2\chi_1 + 2\chi_2 + 2\chi_5 + 2\chi_7 = 1 \quad (180)$$

$$\chi_i \geq 0, \quad i = 0, 1, \dots, 8. \quad (181)$$

Fixera τ och inför en ny diffusionsmatris \mathfrak{D} med element \mathfrak{d}_{ij} på samma sätt som för $D2Q5$ gittret. Om vi nu löser ut χ_i får vi

$$\chi_0 = 2(\mathfrak{d}_{12} - \mathfrak{d}_{11} - \mathfrak{d}_{22}) + 4\mathfrak{b} + 1 \quad (182)$$

$$\chi_1 = \chi_3 = \frac{1}{2}(\mathfrak{d}_{11} - \mathfrak{d}_{12}) - 2\mathfrak{b} \quad (183)$$

$$\chi_2 = \chi_4 = \frac{1}{2}(\mathfrak{d}_{22} - \mathfrak{d}_{12}) - 2\mathfrak{b} \quad (184)$$

$$\chi_5 = \chi_6 = \frac{1}{2}\mathfrak{d}_{12} + \mathfrak{b} \quad (185)$$

$$\chi_7 = \chi_8 = \mathfrak{b}, \quad (186)$$

där \mathfrak{b} väljs på något sätt som försäkrar $\chi_i \geq 0, \forall i$. Vi har alltså en frihetsgrad att arbeta med för detta gitter. Så länge \mathfrak{b} väljs så att kraven uppfylls, kommer Chapman-Enskog expansionen ge oss diffusionsekvationen med diffusionstensor \mathfrak{D} . Att χ_i inte är entydigt bestämda är en följd av att vi har mer än tillräckligt många hastigheter i gittret. Därav räcker det med att

vikterna uppvisar en viss struktur, bestämd av \mathbf{b} för att ge det önskade anisotropa beteendet. Däremot påverkar valet av \mathbf{b} stabiliteten av metoden. I [19] visas att för diffusionsekvationen är det tillräckligt att χ_i väljs som i exemplen ovan, speciellt kravet $\chi_i \geq 0$, för att metoden skall vara stabil. Detta gäller förutsatt att relaxionsparameter uppfyller stabilitetskravet $\tau \geq 1/2$.

2.9 Numeriskt fel

När man pratar om numeriska lösningar av PDE är man ofta intresserad att metoden man använder är så kallat konsekvent (eng. consistent). Att en metod är konsekvent innebär att den numeriska lösningen går mot den verkliga lösningen när steglängden går mot noll.

För vårt fall motsvarar detta att vi låter ϵ gå mot noll och om vi gör detta för expansionen

$$u(x, t) = f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + O(\epsilon^3), \quad (187)$$

ser vi lätt att metoden är konsekvent. Då $f_i^{(0)}$ löser vårt önskade problem, enligt avsnitt 3.1.

Man brukar även tala om till vilken ordning metoden är konsekvent och vi illustrerar begreppet med följande exempel.

Vi säger att följande exempel

$$g = g^{(0)} + \epsilon g^{(1)} + O(\epsilon^2) = g^{(0)} + O(\epsilon). \quad (188)$$

är första ordningens konsekvent om $g^{(1)}$ är skild från noll. Vi är alltså intresserade utav vilka termer som försvinner, för att kunna avgöra ordningen av felet.

I vårt fall innebär det alltså att vi är intresserade av vilka koefficienter i (187) som summerar till noll och utifrån detta kan vi avgöra ordning av det numeriska felet.

För att göra detta erinrar vi att ekvationerna för koefficienterna härledda i avsnitt i 2.6 ges utav

$$\begin{aligned} f_i^{(0)} &= f_i^{(eq)} = u(x, t)W_i \\ f_i^{(1)} &= -\tau \partial_x c_i f_i^{(0)} \\ f_i^{(2)} &= -\tau \partial_x c_i f_i^{(1)} + \partial_t f_i^{(0)} + \frac{1}{2} \partial_x^2 c_i^2 f_i^{(0)} \end{aligned}$$

Tanken är att explicit beräkna de olika expansionskoefficienterna och se vilka som försvinner. Om vi nu inleder med den första expansionskoefficienten för ordning 0. Vi summerar över alla i och påminner oss om symmetrikravet för vikterna kräver att summan av W_i är 1.

$$\sum_i f_i^{(0)} = \sum_i u(x, t)W_i \quad (189)$$

$$f^{(0)} = u(x, t) \quad (190)$$

Vi fortsätter med ekvationen för första ordningen där vi åter summerar över i och påminner oss om symmetrikravet för c_i att summan av c_i är lika med noll.

Alltså summeras

$$f_i^{(1)} = -\tau \partial_x c_i f_i^{(0)} \quad (191)$$

till

$$f^{(1)} = 0. \quad (192)$$

Med dessa resultat kan vi skriva om (187) till

$$u(x, t) = \sum_i f_i^{(0)} + \epsilon^2 f_i^{(2)} + O(\epsilon^3). \quad (193)$$

Vi subtraherar $u(x, t)$ från ekvation (193), och påminner oss om att $f^{(0)} = u(x, t)$, detta ger

$$\epsilon^2 \sum_i f_i^2 = 0. \quad (194)$$

Om vi summerar våra resultat ser vi att vi får följande

$$u(x, t) = \sum_i f_i^{(0)} + O(\epsilon^3). \quad (195)$$

Utifrån detta kan vi säga att diskretiseringen av diffusionsekvationen kommer ge oss ett fel som är $O(\epsilon^3)$. Eftersom vi har skalat våra variabler med ϵ respektive ϵ^2 kommer metoden alltså vara andra ordningens konsekvent med avseende på rumsvariabeln och första ordningens konsekvent med avseende på tidsvariabeln.

Ett av de centrala teoremen inom numeriska metoder är det så kallade Lax teorem. Lax teorem säger att om vi har en finit differensmetod är metoden konvergent om den både är stabil och konsekvent. Dessa två egenskaper för sig antyder inte konvergens utan båda måste vara uppfyllda.

2.10 Stabilitet av LBM-metoder för isotropisk diffusion

I [20] visas på ett rigoröst sätt att modeller av LBM-typen är stabila om de uppfyller en viss stabilitetsstruktur. Detta görs för en linjäriserad kollisionoperator men detta har ingen betydelse när man betraktar diffusionsfallet eftersom kollisionoperatorn redan är linjär på grund av definitionen av jämviktsfunktioner. Detta avsnitt skall ägnas åt att visa att modellerna som behandlas i detta arbete uppfyller strukturen.

2.10.1 Stabilitetsstruktur

I [20] visas att advektionssteget i LBM är stabilt så eftersom advektionssteget antas vara samma för alla LBM-metoder är det således enbart kollisionoperatorn Q det behöver ställas vissa krav på. Dessa krav är närmast kopplade till jacobianen J till Q . En LBM-metod anses uppfylla stabilitetsstrukturen om det finns en inverterbar matris $P \in \mathbb{R}^{N \times N}$ så att $P^T P = \text{diag}(a_1, a_2, \dots, a_N)$ och $PJ = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N)P$, där $\lambda_i \in [-2, 0]$ för alla i . Radvektorerna i P är alltså dels ortogonala och dels är de egenvektorer till J^T eller s.k. vänster-egenvektorer till J .

Här visas först en allmän egenskap hos dessa modeller. För ett godtyckligt antal hastigheter får Q formen

$$Q = -\frac{1}{\tau} \begin{pmatrix} f_0 - W_0 \sum_{j=0}^{n-1} f_j \\ f_1 - W_1 \sum_{j=0}^{n-1} f_j \\ \vdots \\ f_{n-1} - W_{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} f_j \end{pmatrix}$$

med

$$f_i^{\text{eq}} = W_i \sum_{j=0}^{n-1} f_j$$

Jacobianen J blir då

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial Q_0}{\partial f_0} & \frac{\partial Q_0}{\partial f_1} & \dots & \frac{\partial Q_0}{\partial f_{n-1}} \\ \frac{\partial Q_1}{\partial f_0} & \frac{\partial Q_1}{\partial f_1} & \dots & \frac{\partial Q_1}{\partial f_{n-1}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial Q_{n-1}}{\partial f_0} & \frac{\partial Q_{n-1}}{\partial f_1} & \dots & \frac{\partial Q_{n-1}}{\partial f_{n-1}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\tau} \begin{pmatrix} W_0 - 1 & W_0 & \dots & W_0 \\ W_1 & W_1 - 1 & \dots & W_1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ W_{n-1} & W_{n-1} & \dots & W_{n-1} - 1 \end{pmatrix}$$

Den karakteristiska ekvationen till J och därmed också till J^T är

$$(-1)^n \lambda \left(\frac{1}{\tau} + \lambda \right)^{n-1} = 0$$

Detta kan visas genom att definiera funktionen $g(n) = \det(J(n) - \lambda I)$ där $J(n)$ är jacobianen av Q då en modell med n hastigheter betraktas. Låt nu $\lambda_1 = \lambda\tau$. Genom ett par enkla matrisoperationer blir uttrycket för determinanten

$$\frac{1}{\tau^n} \det \begin{pmatrix} W_0 - 1 - \lambda_1 & W_0 & \cdots & W_0 & W_0 & 0 \\ W_1 & W_1 - 1 - \lambda_1 & \cdots & W_1 & W_1 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ W_{n-3} & W_{n-3} & \cdots & W_{n-3} - 1 - \lambda_1 & W_{n-3} & 0 \\ W_{n-2} & W_{n-2} & \cdots & W_{n-2} & W_{n-2} - 1 - \lambda_1 & 1 + \lambda_1 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{W_{n-1}}{W_{n-2}}(1 + \lambda_1) & -(1 + \lambda_1) \left(1 + \frac{W_4}{W_3} \right) \end{pmatrix}$$

Här kan determinanten utvecklas efter sista raden och man får då

$$g(n) = \frac{1}{\tau^n} [(-1)^{2n-1} \frac{W_{n-1}}{W_{n-2}} (1 + \lambda_1) \det \begin{pmatrix} W_0 - 1 - \lambda_1 & W_0 & \cdots & W_0 & 0 \\ W_1 & W_1 - 1 - \lambda_1 & \cdots & W_1 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ W_{n-3} & W_{n-3} & \cdots & W_{n-3} - 1 - \lambda_1 & 0 \\ W_{n-2} & W_{n-2} & \cdots & W_{n-2} & 1 + \lambda_1 \end{pmatrix} - (-1)^{2n} (1 + \lambda_1) \left(1 + \frac{W_4}{W_3} \right) g(n-1)] =$$

$$\frac{(1 + \lambda_1)}{\tau^n} \left[(-1) \frac{W_{n-1}}{W_{n-2}} (1 + \lambda_1) g(n-2) - \left(1 + \frac{W_{n-1}}{W_{n-2}} \right) g(n-1) \right]$$

efter utveckling av det återstående determinantuttrycket. Det kan sedan visas genom induktion att $g(n) = \frac{(-1)^n}{\tau^n} \lambda_1 (1 + \lambda_1)^{n-1} = (-1)^n \lambda \left(\frac{1}{\tau} + \lambda \right)^{n-1}$ gäller för alla n. Egenvärdena till J är alltså 0 och $-\frac{1}{\tau}$ där det senare är av multiplicitet n-1. Dessa modeller uppfyller därmed kraven på egenvärdena till J då $\tau > \frac{1}{2}$. Alltså uppfyller alla BGK-kollisionsoperatorer för diffusion villkoren på λ .

2.10.2 D1Q3

För att visa att D1Q3-modellen uppfyller stabilitetsstrukturen i [20] utgår vi från kollisionsoperatorn

$$Q = -\frac{1}{\tau} \begin{pmatrix} f_0 - f_0^{\text{eq}} \\ f_1 - f_1^{\text{eq}} \\ f_2 - f_2^{\text{eq}} \end{pmatrix} = -\frac{1}{\tau} \begin{pmatrix} f_0 - W_0 \sum_i f_i(x, t) \\ f_1 - W_1 \sum_i f_i(x, t) \\ f_2 - W_2 \sum_i f_i(x, t) \end{pmatrix}$$

med vikterna

$$(W_0 \quad W_1 \quad W_2) = \left(\frac{2}{3} \quad \frac{1}{6} \quad \frac{1}{6} \right)$$

Jacobianen till Q är

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial Q_0}{\partial f_0} & \frac{\partial Q_0}{\partial f_1} & \frac{\partial Q_0}{\partial f_2} \\ \frac{\partial Q_1}{\partial f_0} & \frac{\partial Q_1}{\partial f_1} & \frac{\partial Q_1}{\partial f_2} \\ \frac{\partial Q_2}{\partial f_0} & \frac{\partial Q_2}{\partial f_1} & \frac{\partial Q_2}{\partial f_2} \end{pmatrix} = -\frac{1}{\tau} \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} \\ -\frac{1}{6} & \frac{5}{6} & -\frac{1}{6} \\ -\frac{1}{6} & -\frac{1}{6} & \frac{5}{6} \end{pmatrix}$$

Genom att ta fram egenvektorer på vanligt sätt, t.ex.

$$v_1 = (1 \ 1 \ 1), \quad v_2 = \left(-\frac{1}{4} \ 0 \ 1\right), \quad v_3 = \left(-\frac{1}{4} \ 1 \ 0\right)$$

kan man eftersom v_2 och v_3 har samma egenvärde, byta ut dem mot linjärkombinationer av dessa, som är ortogonala mot v_1 och gentemot varandra. P får då formen

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -\frac{x_1+x_2}{4} & x_2 & x_1 \\ -\frac{u_1+u_2}{4} & u_2 & u_1 \end{pmatrix}$$

Genom att lösa det icke linjära systemet $P^T P = \text{diag}(a_1, a_2, \dots, a_N)$ kan man hitta t.ex. dessa värden på koordinaterna

$$x_1 \rightarrow -2\sqrt{\frac{6}{5}}, \quad x_2 \rightarrow 0, \quad u_2 \rightarrow -\sqrt{5}, \quad u_1 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{5}}$$

Detta ger

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \sqrt{\frac{3}{10}} & 0 & -2\sqrt{\frac{6}{5}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} & -\sqrt{5} & \frac{1}{\sqrt{5}} \end{pmatrix}$$

Inverterbarheten av P följer av att kolonnvektorerna är ortogonala och stabiliteten för D1Q3 är därmed visad. \square

2.10.3 D2Q9

På samma sätt som för D1Q3 visas stabilitet för D2Q9.

$$Q = -\frac{1}{\tau} \begin{pmatrix} f_0 - f_0^{\text{eq}} \\ f_1 - f_1^{\text{eq}} \\ f_2 - f_2^{\text{eq}} \\ f_3 - f_3^{\text{eq}} \\ f_4 - f_4^{\text{eq}} \\ f_5 - f_5^{\text{eq}} \\ f_6 - f_6^{\text{eq}} \\ f_7 - f_7^{\text{eq}} \\ f_8 - f_8^{\text{eq}} \end{pmatrix} = -\frac{1}{\tau} \begin{pmatrix} f_0 - W_0 \sum_i f_i(x, t) \\ f_1 - W_1 \sum_i f_i(x, t) \\ f_2 - W_2 \sum_i f_i(x, t) \\ f_3 - W_3 \sum_i f_i(x, t) \\ f_4 - W_4 \sum_i f_i(x, t) \\ f_5 - W_5 \sum_i f_i(x, t) \\ f_6 - W_6 \sum_i f_i(x, t) \\ f_7 - W_7 \sum_i f_i(x, t) \\ f_8 - W_8 \sum_i f_i(x, t) \end{pmatrix}$$

med vikterna

$$W_i = \begin{cases} \frac{4}{9} & \text{om } i = 0 \\ \frac{1}{9} & \text{om } i = 1, 2, 3, 4 \\ \frac{1}{36} & \text{om } i = 5, 6, 7, 8 \end{cases}$$

Jacobianen till Q blir

$$J = -\frac{1}{\tau} \begin{pmatrix} \frac{5}{9} & -\frac{4}{9} & -\frac{4}{9} & -\frac{4}{9} & -\frac{4}{9} & -\frac{4}{9} & -\frac{4}{9} & -\frac{4}{9} & -\frac{4}{9} \\ -\frac{1}{9} & \frac{8}{9} & -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} \\ -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} & \frac{8}{9} & -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} \\ -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} & \frac{8}{9} & -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} \\ -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} & \frac{8}{9} & -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} & -\frac{1}{9} \\ -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} & \frac{35}{36} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} \\ -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} & \frac{35}{36} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} \\ -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} & \frac{35}{36} & -\frac{1}{36} \\ -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{36} & \frac{35}{36} \end{pmatrix}$$

Här är det svårare att hitta ortogonala egenvektorer. I [20] föreslås egenvektorer till J, baserat på en ortogonalisering av vektorerna man får då man betraktar elementen i

$$(1 \quad v_1 \quad v_2 \quad v_1 v_2 \quad v_1^2 \quad v_2^2 \quad v_1 v_2^2 \quad v_2 v_1^2 \quad v_1^2 v_2^2)$$

som funktioner $f : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}^n$ applicerade på hastigheterna

$$c = \{\{0, 0\}, \{1, 0\}, \{0, 1\}, \{-1, 0\}, \{0, -1\}, \{1, 1\}, \{-1, 1\}, \{-1, -1\}, \{1, -1\}\}$$

v_1 står här för den första koordinaten i v och v_2 för den andra. Detta leder till vektorer associerade till funktionerna

$$(1 \quad v_1 \quad v_2 \quad v_1^2 - \frac{1}{3} \quad v_1 v_2 \quad v_2^2 - \frac{1}{3} \quad (3\langle v, v \rangle - 4)v_1 \quad (3\langle v, v \rangle - 4)v_2 \quad 9\langle v, v \rangle^2 - 15\langle v, v \rangle + 2)$$

P blir med dessa som radvektorer

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & \sqrt{3} & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \sqrt{3} & -\sqrt{3} & -\sqrt{3} & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & -\sqrt{3} & \sqrt{3} & \sqrt{3} & -\sqrt{3} & -\sqrt{3} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \sqrt{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \sqrt{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \sqrt{2} & \sqrt{2} & \sqrt{2} & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & -3 & 3 & -3 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \sqrt{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \sqrt{2} & \sqrt{2} & \sqrt{2} & \sqrt{2} & \sqrt{2} \\ 0 & -\sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & \sqrt{6} & -\sqrt{6} & -\sqrt{6} & \sqrt{6} \\ 0 & 0 & -\sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & \sqrt{6} & \sqrt{6} & -\sqrt{6} & -\sqrt{6} \\ \frac{1}{2} & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \end{pmatrix}$$

Återigen är P inverterbar på grund av att kolonnvektorerna är ortogonala. Detta P uppfyller därmed alla ställda villkor och därmed är stabiliteten visad för D2Q9-modellen. \square

3 Resultat

I den här delen presenterar vi resultaten av våra simuleringar. Vi har verifierat vår kod för diffusionsekvationen i en och två rumsvariabler samt provat vår teori för det anisotropa fallet.

3.1 Implementering

Implementeringen av LBM är förhållandevis enkel vilket är en av de stora fördelarna med metoden. En förutsättning man måste ta hänsyn till när man modellerar enbart diffusion är att τ beror av diffusionskoefficienten genom

$$\tau = \frac{D}{c_s^2} + 1/2$$

Detta innebär att en snabbare diffusion kräver fler itereringar. Förhållandet mellan D och τ innebär att antalet itereringar som krävs vid en fördubbling av D också dubblas för att behålla samma värde på τ .

Det enklaste sättet att implementera själva iterationsprocessen där man beräknar evolutionen av partikelfördelningarna $f_i(x + c_i\delta_t, t + \delta_t) = f_i(x, t) - \frac{1}{\tau}[f_i(x, t_n) - f_i^{\text{eq}}(x, t_n)]$ är att dela upp algoritmen i kollisionsteg och advektionssteg genom

$$(kollision) \quad \tilde{f}_i(x, t_{n+1}) = f_i(x, t_n) - \frac{1}{\tau}[f_i(x, t_n) - f_i^{\text{eq}}(x, t_n)]$$

$$(advektion) \quad f_i(x + c_i\delta_t, t_{n+1}) = \tilde{f}_i(x, t_{n+1})$$

där \tilde{f}_i är partikelfördelning f_i efter kollision. För D2Q9-modellen kan man använda en array f med dimensioner $x \times y \times 9$ där $x \times y$ är storleken på området. För enkelhets skull används här index 1...9 för f_i med f_9 för hastigheten (0,0). Övriga fördelningar är desamma som tidigare. Ett exempel på Matlab-kod för kollisionen är

```
function [f] = collide(f,Q,phi,tau)
    u=sum(f,3);
    feq=u.*phi;
    f=f-1/tau*(f-feq(:, :, ones(Q,1)));
end
```

ϕ är här de normerade jämviktsfunktionerna i en matris av samma dimensioner som gittret, och initieras innan iterationsprocessen. Eftersom jämviktsfunktionerna beror på $\sum_i f_i$ behöver de uppdateras i varje steg av itereringen.

Advektionssteget kan implementeras för ett område med enbart omgivande rand på ett mycket enkelt sätt genom matlab-funktionen `circshift`

```
function [f] = advect(f)
    c=[0, 1, 0, -1, 1, 1, -1, -1;
       1, 0, -1, 0, 1, -1, 9-1, 0]';
    for i=1:8
        f(:, :, i)=circshift(f(:, :, i), c(i, :))
    end
end
```

Raderna i c svarar alltså mot hastigheterna c_i . Fördelningarna cirkuleras här över gittret vilket innebär peridiska randvillkor. Andra randvillkor kan implementeras med varierande komplexitet och resultat.

3.1.1 Implementering av randvillkor

En fråga som behöver besvaras då man betraktar differentialekvationer är vad för slags randvillkor man är intresserad av och hur man bäst implementerar dessa i algoritmen. Det vanligaste och kanske enklaste randvillkor som används med LBM-metoder är det s.k 'bounceback'-villkoret som innebär att fördelningar som träffar en randnod helt enkelt studsar och får motsatt riktning. För diffusion behöver man dock bevara den tangentiella rörelsemängden. Detta svarar mot att låta fördelningar studsas i 'spegel'-riktningen och ger det vanliga Neumann-randvillkoret: $\partial x_{normal} = 0$. Bara de populationer med riktning ut från randen behöver bestämmas. Detta implementeras för t.ex den vänstra randen

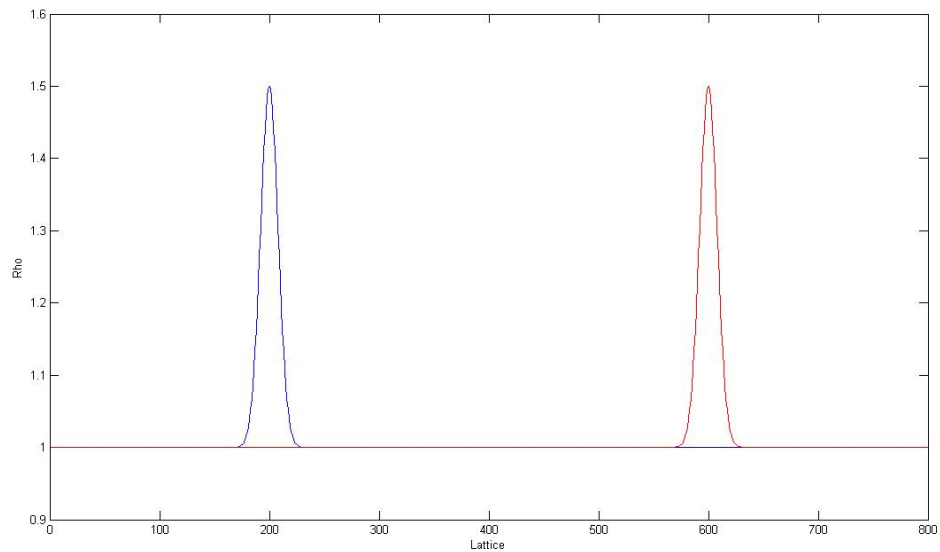
```
function [left_boundary] = bounceback(left_boundary)
    % left_boundary har dimensioner (y,1,Q)
    boundary(:,1,[1, 5, 8])=f(:,1,[3, 6, 7]);
end
```

Hörn-noderna kräver viss specialbehandling i D2Q9-fallet. Tre fördelningar anländer vid varje tidssteg till noden. Dessa studsas med *motsatt* riktning som i vanlig bounceback. De två återstående fördelningarna bevara vid varje tidssteg då de byter hastighet med varandra och följaktligen inte rör sig någonstans.

3.2 Verifiering av LBM

Vi inledde med att skriva kod för att lösa advektionsekvationen i en dimension och jämförde resultat med exempel från [22]. Figuren nedan visar advektion av en initialfördelning längs x .

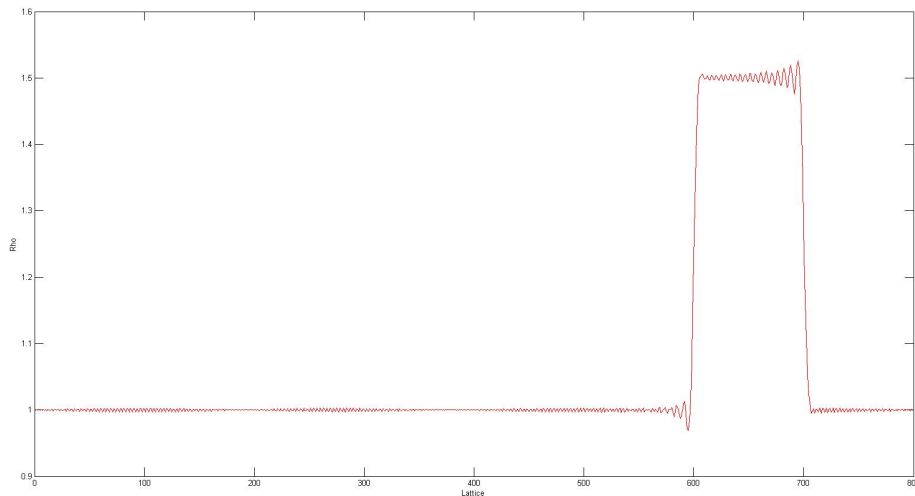
Figur 1: LBM för advektionsekvationen



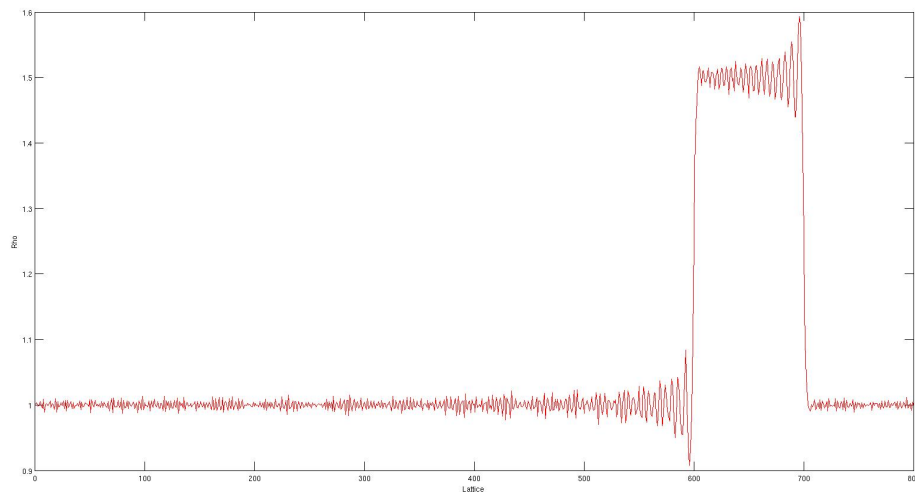
Resultaten stämde väl överens med [22]. Vi ser att initialfördelningen har translaterats och samtidigt behållit sin ursprungliga form. Detta påvisar att vi har advektion, men mycket lite diffusion, vilken var önskvärt eftersom vi enbart betraktade advektionsekvationen.

Vidare skrev vi ett program för entropisk lattice Boltzmann för att se hur denna variant skilde sig från den vanliga metoden. I teorin skall införandet av vår H-funktion bidra till stabilitet som minskar felaktiga oscillationer som kan uppkomma.

Figur 2: Entropisk LBM



Figur 3: LBM



Vi har i figurerna ovan valt en advektionsekvation med tillhörande initialfördelning som ger upphov till oscillationer för den vanliga LBM. Som man ser från figuren så minskar ELBM oscillationer.

3.2.1 Diffusionsekvationen i en dimension

För test av D1Q3-programmet användes en cosinus-funktion som initialfördelning eftersom det då existerar analytiska lösningar för diffusionsekvationen. Funktionen som användes de tjugo första termerna i cosinusserien till $f(x) = x$ då vi tidigare har testat och sett att detta

ger en god noggrannhet.

$$f(x) = \sum_{n=0}^{19} a_n \cos(nx)$$

med

$$a_0 = \frac{\pi}{2}$$

$$a_n = \frac{2}{n^2 * \pi i} * ((-1)^n - 1)$$

Den analytiska lösningen med $u(x,0)=f(x)$ som användes som initialfunktion, med randvillkoren

$$\partial_x u(0, T) = \partial_x u(l, T) = 0$$

är då

$$u(x, T) = \sum_{n=0}^{19} a_n e^{-\frac{\pi^2 n^2 D T}{l^2}} \cos\left(\frac{n\pi x}{l}\right)$$

Parametrar som användes var

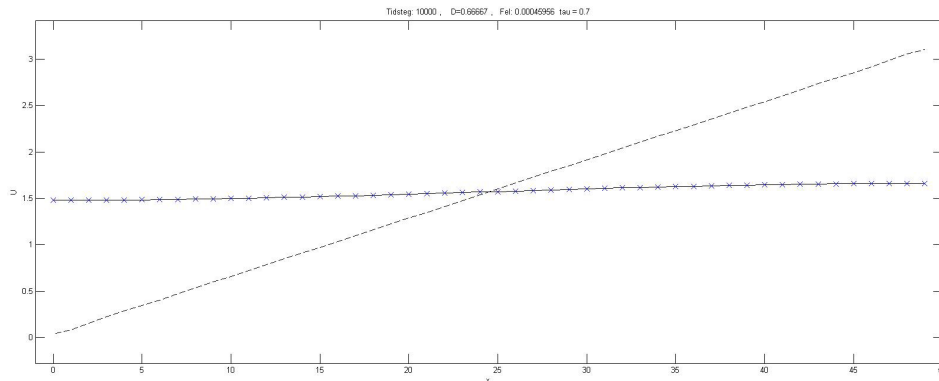
$$D = \frac{2}{3}, \quad T = 10000, \quad \delta t = 0.1, \quad \delta_x = 1, \quad l = 100$$

och antalet noder var 100. L_2 -normen användes för att uppskatta felet mellan numerisk lösning och analytisk lösning.

$$L_2 = \sqrt{\sum_{x_i} [U(x_i) - u(x_i, T\delta t)]^2} \quad (196)$$

Initialfördelningen, $T=0$ för den analytiska lösningen är även den lösningen som ges till numeriska LBM koden som initialfördelning.

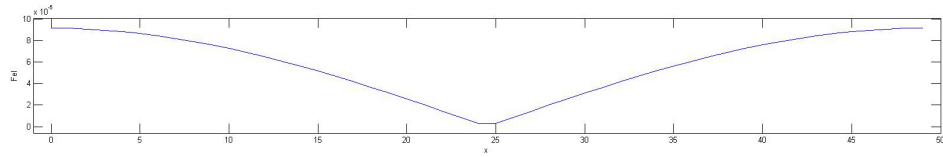
I figur 4 visas resultatet av programmet. Streckad linje är initialfördelningen, kryssen är den numeriska lösningen och den heldragna är den analytiska lösningen.



Figur 4: LBM för den endimensionella diffusionsekvationen

Av figur 4 kan vi tydligt utläsa hur både den numeriska och den analytiska lösningen stämmer väl överens med varandra. Båda lägger sig på ett jämviktsläge runt 1,5. Figuren visar tydligt hur vi har initialfördelningen stabiliserats.

För att läsa av hur stort felet är har vi plottat felnormen enligt L_2 -normen i figur 5.



Figur 5: Felet av LBM för den endimensionella diffusionsekvationen

Det visas tydligt i figur 2 hur felet är som störst i randerna och noll i mitten. Detta är förväntat då initialfördelningen någonstans skall skära linjen som beskriver fördelningen efter $T = 10000$. Ur figuren kan vi även se att felet stabiliseras desto närmare vi kommer randen.

3.2.2 Diffusionsekvationen i två dimensioner

För det tvådimensionella fallet har program skrivits för både D2Q5 och D2Q9. Dessa har verifierats genom att på samma sätt som i endimensionella fallet, genom att jämföra med en Fourierserie i 2D och beräkna en felnorm enligt L_2 -normen.

Som analytisk metod har vi en lösning som er ut enligt

$$u(x, y, T) = \cos(x) \cos(y) e^{-2DT}$$

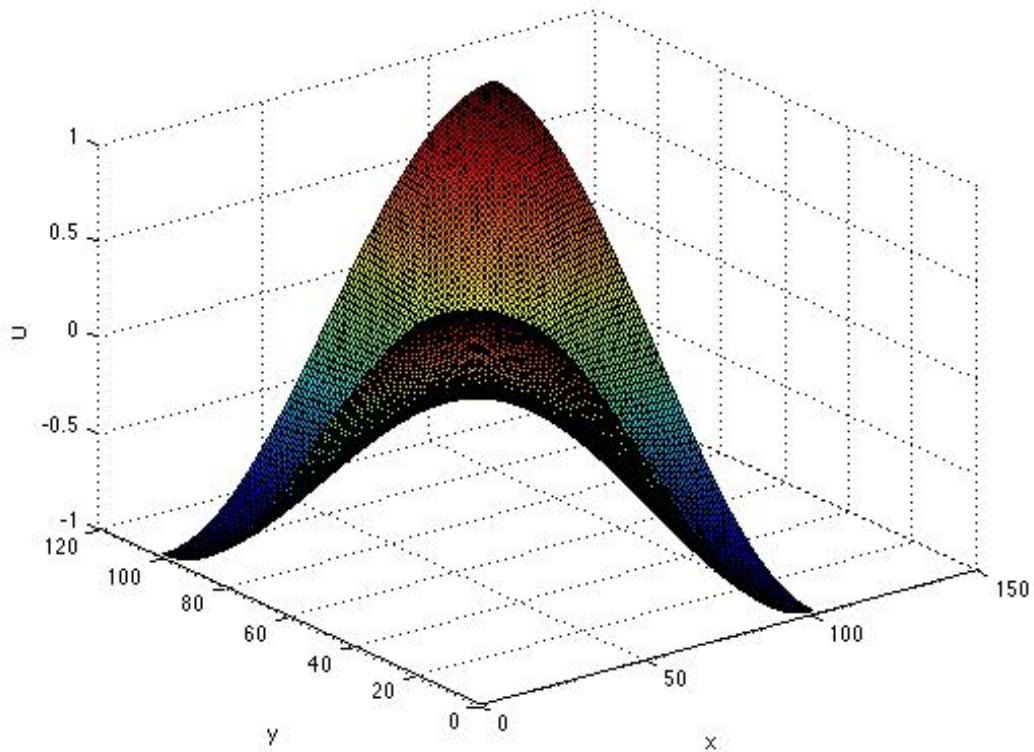
där vi har randvillkor

$$\partial_x u(0, T) = \partial_x u(l, T) = \partial_y u(0, T) = \partial_y u(l, T) = 0 \quad (197)$$

Initialfördelningen ges vid $T = 0$ som ger oss funktionen för initialfördelningen

$$f(x, y) = \cos(x) \cos(y) \quad (198)$$

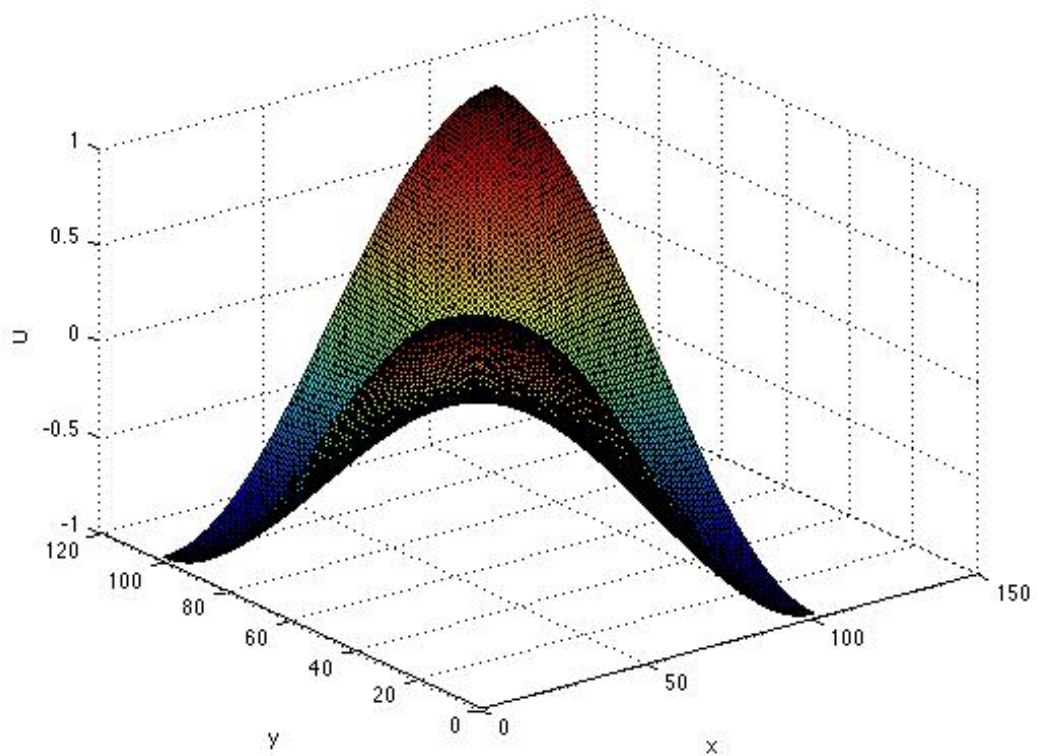
I följande figurer visar vi först den analytiska lösningen som blir referens för den numeriska. Den numeriska LBM lösningen börjar med D2Q9-gitter och dess fel relativt den analytiska lösningen, därefter görs det samma för D2Q5-gitter. Figur 6 visar den analytiska lösningen för diffusionsekvationen i två dimensioner med initialfördelningsfunktionen (198).



Figur 6: Analytisk lösning för diffusionsekvationen i 2d

Figur 6 visar den analytiska lösningen för diffusionsekvationen i två dimensioner med initialfördelningen given från funktionen (198). Notera att det är Neumann randvillkor enligt (197).

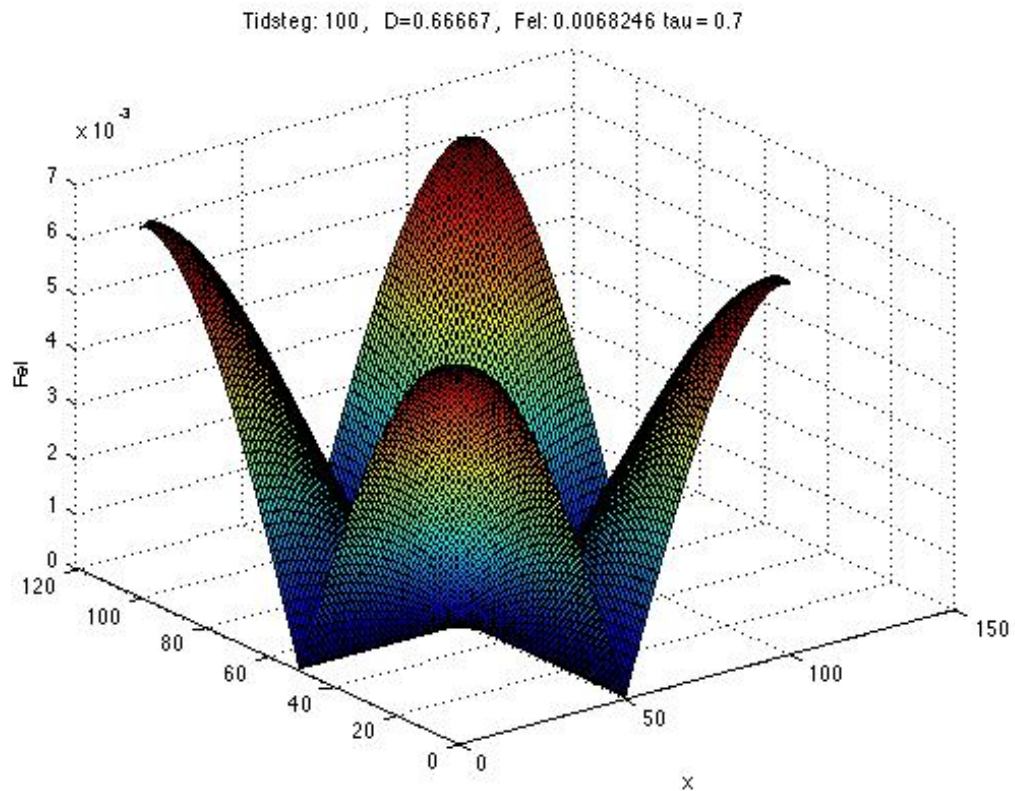
Till de numeriska lösningarna börjar vi med att presentera den numeriska lösningen för diffusionsekvationen i två dimensioner med hjälp av LBM och ett D2Q9-gitter.



Figur 7: LBM för diffusionsekvationen i 2d, D2Q9

För att få in initialfördelningen till LBM som vi har plottat här i figur (7) används den initialfördelning som redan räknats ut vid den analytiska lösningen för (198). Genom att göra en snabb bedömning genom att titta på figur (6) och (7) ser vi att de är mycket lika och en detaljerad numerisk bedömning ger sannolikt inga större skillnader.

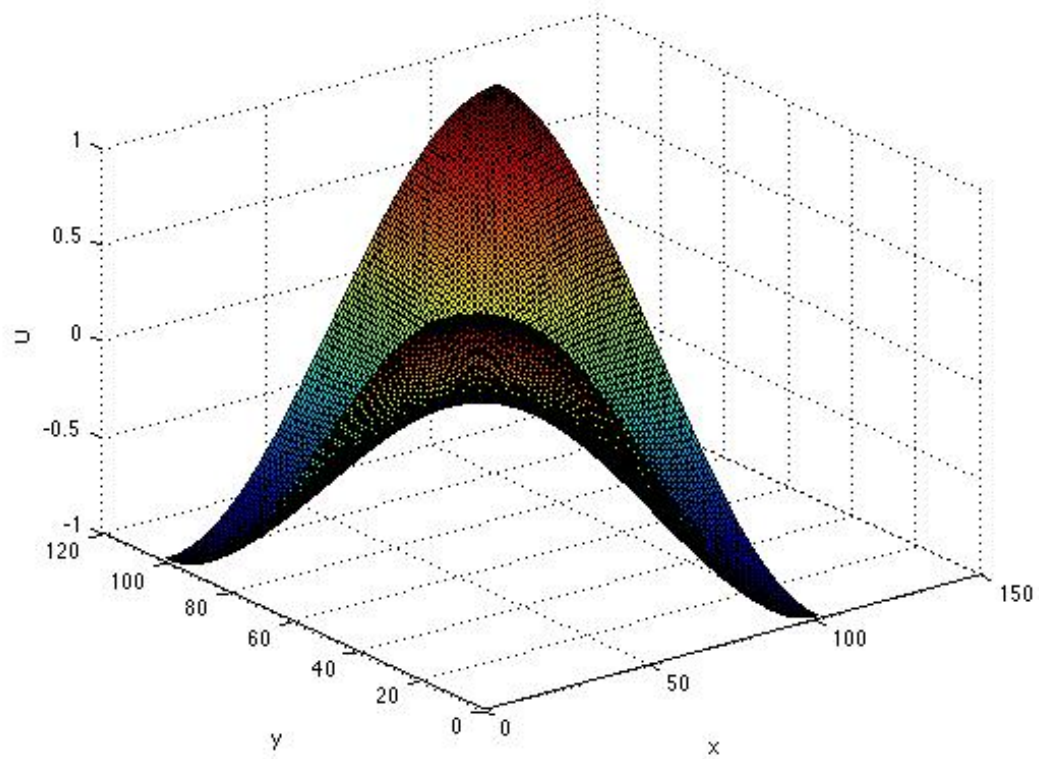
För att jämföra den analytiska och den numeriska lösningen använder vi oss av felnormen enligt L_2 -normen (196). Figuren visar felet vi får av att använda ett D2Q9-gitter för att lösa diffusinsekvationen.



Figur 8: Felnorm för LBM, D2Q9

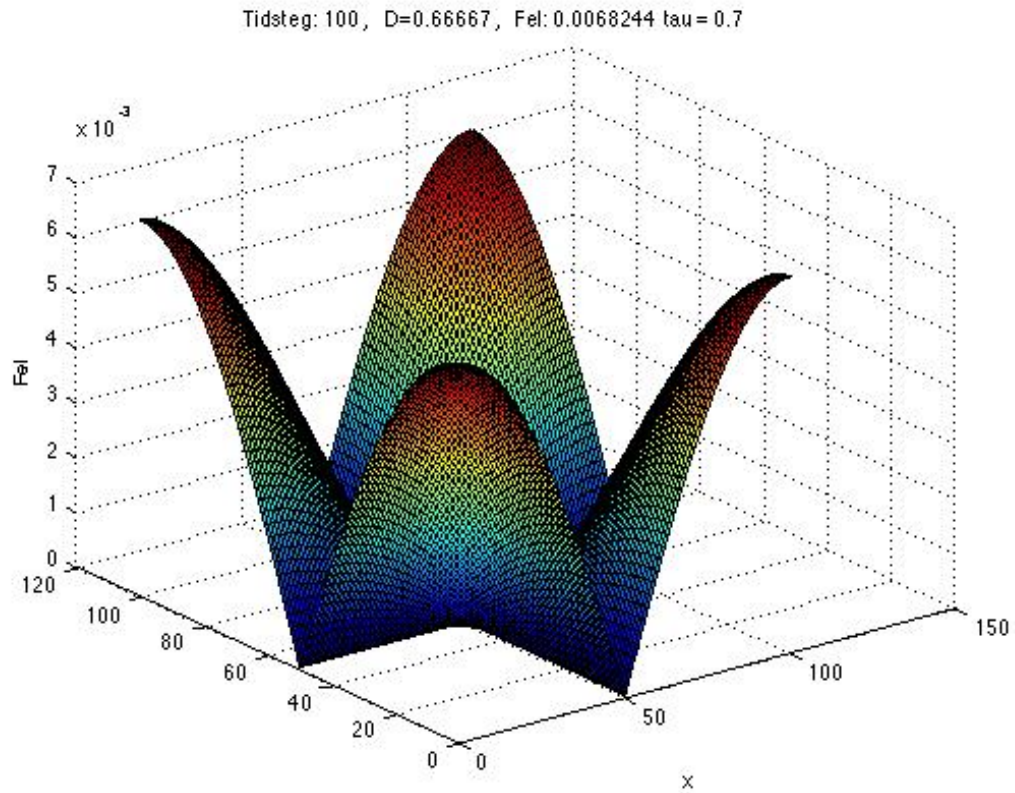
Som vi kan se i figur 8 är felet mycket litet och det största felet är ränderna, dessa kan dock ses som godtagbara då det största felet ligger inom en potens av 10^{-3} .

Nu gör vi samma sak för D2Q5-gitter och vi förväntar oss inte någon större förändring relativt D2Q9-gitter då denna simulering sker för isotrop diffusion. Figuren nedan visar den numeriska lösningen för diffusionsekvationen i två dimensioner med ett D2Q5-gitter.



Figur 9: LBM för diffusionsekvationen 2d, D2Q5

Figuren nedan visar felet vi får när vi använder oss av ett D2Q5-gitter.



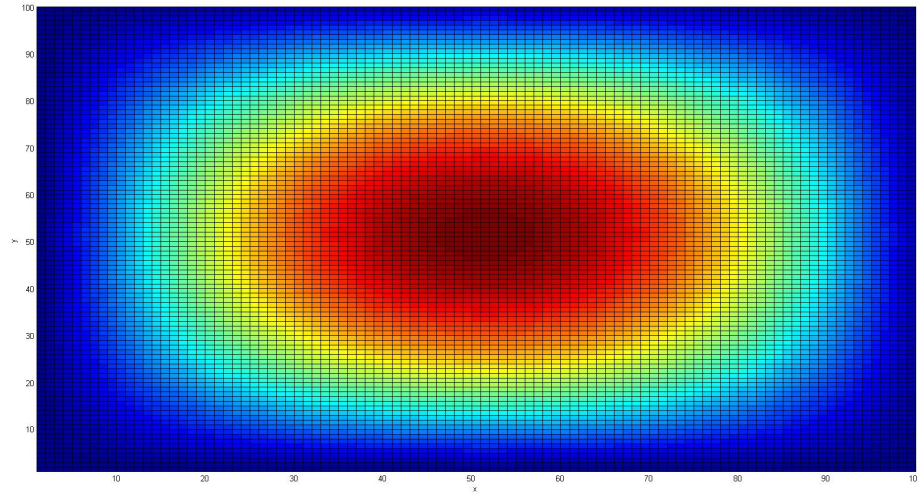
Figur 10: Felnorm för LBM, D2Q5

Som vi kan se i figur 10 är även felet för D2Q5-gittret mycket felet mycket litet. Även denna gång största felen störst i ränderna. Precis som vid D2Q5-gittret anses felet som godtagbart då det ligger inom en potens av 10^{-3} .

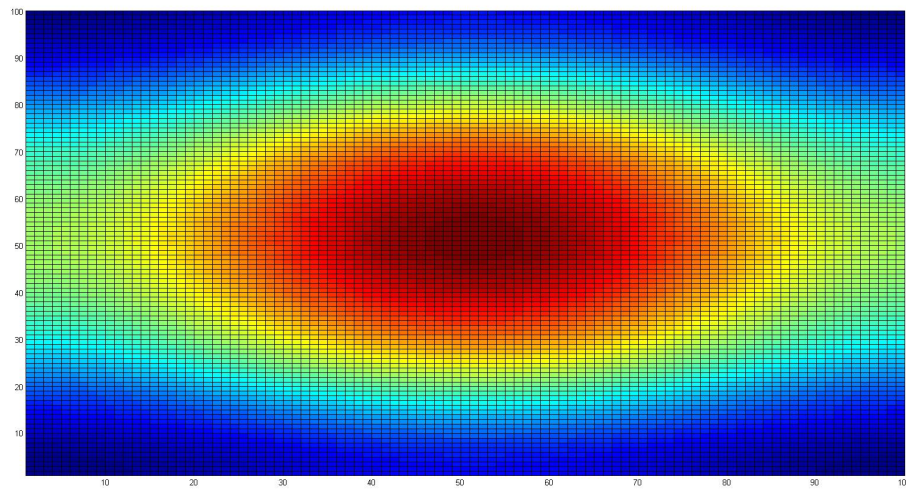
Vi jämför felnormerna för D2Q9 och D2Q5 i figurerna (8), (10). Det relativa felet mellan gittrena D2Q9 och D2Q5 ges av $0.0068246 - 0.0068244$ vilket är 2×10^{-7} . Precis som vi antog är felet nära noll.

3.2.3 Anisotrop diffusion i två dimensioner

För att testa LBM för anistorop diffusion har vi även gjort två plottar där vi har initialfördelningen och därefter även plottat hur denna diffunderar anisotropt. Figur 11 visar vår initialfördelning som vi därefter i figur 12 visar vi hur denna fördelning har diffunderat anisotropt.



Figur 11: Initialt för den anisotropa diffusionsekvationen



Figur 12: LBM för den anisotropa diffusionsekvationen

I figur 12 kan vi tydligt se hur det har diffunderat snabbare i horisontellt led än i vertikalt led.

4 Diskussion och slutsats

I arbetet har vi visat hur LBM kan användas för att lösa diffusionsproblem och våra simuleringar har visat att LBM ger ett litet fel jämfört med den analytiska lösningen.

För att diskutera hur väl LBM skulle kunna användas som en generell lösningsmetod för diffusionsproblem bör vi nämna några av för- och nackdelarna med metoden samt hur LBM står sig mot andra metoder.

Fördelarna med att använda LBM som lösningsmetod är att koden enkelt kan implementeras och är stabil för många fall. Stabilitet är en viktig egenskap för en numerisk metod men den viktigaste är givetvis att den är konvergent. Om metoden inte konvergerar är den naturligtvis praktiskt obrukbar. Vi har inte explicit visat konvergens av LBM men vi kan använda oss av etablerad teori för numeriska metoder för att diskutera detta.

Ett av de centrala teoremen inom numeriska metoder är det så kallade Lax teorem. Lax teorem säger att om vi har en finit differensmetod är metoden konvergent om den både är stabil och konsekvent. Dessa två egenskaper för sig antyder inte konvergens utan båda måste vara uppfyllda. Eftersom vi i avsnitt 2.10 respektive 2.9 visat att metoden både är stabil och konsekvent medför detta att metoden är konvergent.

Något som vi inte undersökt, men som är högintressant, är kodens förmåga att parallelliseras. Denna egenskap är inte unik för LBM men görs enklare för LBM än för andra metoder. Att kunna parallellisera en kod innebär att vi kan köra koden på flera processorer samtidigt och kan på så sätt utföra flera beräkningar samtidigt. Detta kommer leda till att beräkningstiden kommer minska, vilket är av stor praktisk nytta då man kan få exaktare lösningar på rimligare tid.

Parallelliseringen av koden kan användas för att komma runt den största nackdelen vi stött på hos LBM nämligen problemet med stora diffusionskoefficienter. Som vi såg i avsnittet om implementering kommer LBM endast kunna användas i fall där vi har små diffusionskoefficienter, D . Eftersom vi har begränsningar på hur stort τ vi kan använda har vi också begränsningar på vilka D vi kan välja och på grund av detta kan endast välja små D .

Om vi nu vill använda LBM för att lösa diffusionsproblem med ett stort D kommer vi behöva skala om problemet till tillåtna D . Praktiskt innebär detta att simuleringstiden kommer att öka kraftigt vilket inte är önskvärt. För att då komma runt detta problem kan man parallellisera koden för att minska tiden till en rimligare siffra. Detta skulle kunna vara en intressant fråga för framtida arbete.

En annan intressant egenskap hos LBM är att metoden kan användas för problem med komplicerade ränder. Detta är en stor fördel då fysikaliska problem ofta sker i komplicerade geometrier. Med denna egenskap kan LBM användas för att modellera ett större omfång av problem vilket självklart gör den mer attraktiv.

Så för att sammanfatta, i val av lösningsmetod för diffusionsekvationen bör man först undersöka hur problemet ser ut. Har man ett diffusionsproblem med stora diffusionskoefficienter i en enkel geometri kan det vara lämpligt att använda en mer konventionell metod som till exempel FEM. Har man däremot ett diffusionsproblem i en komplicerad geometri kan LBM vara ett bra alternativ, då implementeringen blir enklare.

Till sist, man bör även notera hur diffusionskoefficienten ser ut och välja lösningsmetod utifrån detta. Alternativt välja metod utifrån tillgång av beräkningskraft.

Vi konstaterar alltså att för rätt sorts problem är LBM ett bra lösningsmetod för diffusionsproblem.

Referenser

- [1] Succi S. *The Lattice Boltzmann equation for Fluid Dynamics and Beyond* Oxford: Clarendon press; 2001.
- [2] Geller S, Krafczyk M, Tölke J, Turek S, Hron J. *Benchmark computations based on lattice-Boltzmann, finite element and finite volume methods for laminar flows*. Comp and Flu 2006 Sep-Nov; 35 (8-9): 888-897
- [3] Narasimhan T N *Fouriers heat conduction equation: history, influence, and connections*. Geophysics. 1999 1 Feb; 37: 151-172
- [4] Chen Y, Yan Z, Shi J. *Application of Lattice Boltzmann Method to image segmentation*. Eng in Med and Bio Soc 2007. 29th Annual International Conference of the IEEE. 22-26 Aug; 2007. p. 6561 - 6564
- [5] Chen Y, Yan Z, Qian Y *An Anisotropic Diffusion Model for Medical Image Smoothing by Using the Lattice Boltzmann Method*. 7th Asian-Pacific Conference on Medical and Biological Engineering; 2008. IFMBE Proceedings 2008; 19 (7): 255-259
- [6] International Energy Agency *Electricity/Heat in World in 2009*. Key World Energy Statistics from the IEA 2011. Available from: http://www.iea.org/publications/free_new_desc.asp?pubs_ID=1199
- [7] Gombosi T. *Gaskinetic theory*. Cambridge: Cambridge University Press; 1994.
- [8] Cercignani C. *Theory and application of the Boltzmann equation* Edinburgh och London: Scottish academy press; 1975.
- [9] Villani C. *A review of mathematical topics in collisional kinetic theory* In: Friedlander S. and Serre D, editors. Handbook of Mathematical Fluid Dynamics. Vol 1. Amsterdam: Elsevier; Preprint. 2001. p .77-139
- [10] Boltzmann L. *Lectures on gas theory*. Berkeley: University of California Press, Berkeley; 1964. Översättare Brush SG. Nytryck av upplaga från 1896-1898. New York: Nytryck av Dover Publications; 1995.
- [11] Wolf-Gladrow D. *Lattice gas cellular automata and lattice Boltzmann models: an introduction* Springer; 2000.
- [12] Junk M, Klar A, Luo LS. *Asymptotic analysis of the lattice Boltzmann equation* Jour of Comp Phy. 2005; 210 (2): 676-704.
- [13] Mohamad AA *Lattice Boltzmann method*. London: Springer-Verlag; 2011.
- [14] Karlin IV, Chikatamarla SS, Ansumali S. *Elements of the Lattice Boltzmann Metod II: Kinetics and Hydrodynamics in One Dimension*. Com in Comp Phy. 2007 Apr; 2 (2): 196-238.
- [15] Boghosian BM, Yopez J, Conveney PV, Wagner A. *Entropic Lattice Boltzmann methods*. Proce: Math, Phy and Eng Sci. 2001 Mar 8; 457: 717-766
- [16] Gorban AN, Packwood D. *Possibility and Impossibility of the Entropy Balance in Lattice Boltzmann Collisions*. arxiv.org. 2011 Nov; Available from: <http://arxiv.org/abs/1111.5994>
- [17] Brownlee NA, Gorban AN, Levesley J. *Nonequilibrium entropy limiters in lattice Boltzmann methods*. Physica A 2008; 387 (2-3): 385-406
- [18] Yoshida H, Nagaoka M. *Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann model for the convection and anisotropic diffusion equation* Jour of comp phy 2010 Okt 1; 229 (20): 7774-7795

- [19] Ginzburg I. *Optimal Stability of Advection-Diffusion Lattice Boltzmann Models with Two Relaxation Times for Positive/Negative Equilibrium*. J Stat Phys 139: 1090-1143, (2010).
- [20] Junk M, Yong W. *Weighted L_2 -Stability of the Lattice Boltzmann Method*. SIAM J Numer Anal 2009; 47 (3): 1651-1665
- [21] Zou Q, He X, *On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model*. Phys Flu 1997 June; 9 (6): 1591-1598
- [22] Karlin IV, Chikatamarla SS, Ansumali S, Frouzakis CE *Elements of the Lattice Boltzmann Method I: Linear advection equation*. Com in Com Phys 2006; 1 (4): 616-655

Appendix A, MatLab-program för D1Q3, D2Q5, D2Q9 och anisotrop D2Q5

Ett LBM-program togs under detta arbete fram för diffusion i 1 och 2 dimensioner. Villkor som ställdes på programmet var att det skulle fungera med D1Q3-, D2Q5- och D2Q9-modellerna som betraktats i arbetet. Kravet har lett till att vissa specialkonstruktioner har gjorts för att tillåta ett generellare program. Den största skillnaden blir advektionssteget som löstes med indexering av arrayen f. Randvillkor är ett modifierat bounceback för diffusion med 'spegel'-reflekteringar.

```

1 function [U,Uv] = lb(Uin, D, T, Q, dt, dx)
2   % U in is initial distribution
3   % D is the diffusioncoefficient
4   % T is the number of iterations
5   % Q is the model which will be used; Q=3: D1Q3; Q=5: D2Q5; Q=9: D2Q9; Q
   % =1: anisotropic 5 velocities
6   % dt and dx are used to scale the problem in order to keep tau
   % reasonable
7
8   % speed of sound
9   cs=1/sqrt(3);
10
11  if Q==3 || Q==5 ||Q==9
12      tau=D*dt/(dx^2*cs^2)+1/2;
13  end
14  %##### initialise C, w, och bounce
15
16  if Q==3
17      C=[0 0
18         0 1
19         0 -1]'; % Velocities
20      w=1/6*[4 1 1]; % weights
21  elseif size(Uin,1)>1 && Q==5
22      C=[0 0
23         0 1
24         1 0
25         0 -1
26         -1 0]';
27      w=[1/3 1/6 1/6 1/6 1/6];
28  elseif Q==9
29      C=[0 0
30         0 1
31         1 0
32         0 -1
33         -1 0
34         1 1
35         1 -1
36         -1 -1
37         -1 1]';
38      w=1/36*[16 4 4 4 4 1 1 1 1];
39  elseif Q==1 % Anisotropic diffusion
40      tau=1;
41      C=[0 0
42         0 1
43         1 0
44         0 -1
45         -1 0]';
46      w=[1-1*(D(1,1)+D(2,2)), 1/2*D(1,1), 1/2*D(2,2), 1/2*D(1,1), 1/2*D(2,2)
47         ];
48      Q=5; % From here the operations are the same as for the D2Q5.
49  end
50  %#####
51
52
53
54  % initialize feq; size= [Y,X,Q]
55  phi=zeros(1,1,Q);
56  phi(1,1,:)=w;

```

```

57 phimat= repmat(phi,[Y X 1]);
58 Umat= repmat(Uin,[1,1,Q]);
59 feq= Umat.* phimat;
60
61 % The array Cm is used later in the computation of indices
62 ind=diag(1:Q)*ones(Q,Y*X); ind=ind'; ind=ind(:);
63 Cm=C(:,ind);
64
65
66
67 % ##### Propagation
68 % ###
69 % Compute indices for propagation
70
71 % xdist and qdist is used to compensate for the mod-operations in the
72 % computations
73 xdist=zeros(1,X,Q);
74 xdist(:)=0:Y:Y*(X*Q-1);
75 xdist= xdist(ones(Y,1),:,:);
76 xdist= xdist(:)';
77 qdist=zeros(1,1,Q);
78 qdist(:)=0:Q-1; qdist= qdist(ones(Y,1),ones(1,X),:);
79 qdist= Y*X*qdist(:)';
80
81 % linear indices
82 indices=(0:Y*X*Q-1);
83
84
85 % advect is a vector with the indices for propagation
86 advect=mod(mod(indices-Cm(1,:),Y)+xdist-Cm(2,:)*Y,Y*X)+qdist+1;
87
88 % #####
89
90
91 % #####
92 % Populations arriving at boundary nodes are bounced like in a mirror
93 if Q==9
94     xbound=(Y:Y:(X-2)*Y)'+1;
95
96     Sbound(:,1)=xbound+2*Y*X;
97     Sbound(:,2)=xbound+5*Y*X;
98     Sbound(:,3)=xbound+6*Y*X;
99     Sbound2(:,1)=xbound+4*Y*X;
100    Sbound2(:,2)=xbound+8*Y*X;
101    Sbound2(:,3)=xbound+7*Y*X;
102
103    xbound=xbound-1+Y;
104
105    Nbound(:,1)=xbound+4*Y*X;
106    Nbound(:,2)=xbound+7*Y*X;
107    Nbound(:,3)=xbound+8*Y*X;
108    Nbound2(:,1)=xbound+2*Y*X;
109    Nbound2(:,2)=xbound+6*Y*X;
110    Nbound2(:,3)=xbound+5*Y*X;
111
112
113    ybound=(2:Y-1)';
114    Wbound(:,1)=ybound+1*Y*X;
115    Wbound(:,2)=ybound+5*Y*X;
116    Wbound(:,3)=ybound+8*Y*X;
117    Wbound2(:,1)=ybound+3*Y*X;
118    Wbound2(:,2)=ybound+6*Y*X;
119    Wbound2(:,3)=ybound+7*Y*X;
120    ybound=ybound+(X-1)*Y;
121    Ebound(:,1)=ybound+3*Y*X;
122    Ebound(:,2)=ybound+6*Y*X;
123    Ebound(:,3)=ybound+7*Y*X;
124    Ebound2(:,1)=ybound+1*Y*X;
125    Ebound2(:,2)=ybound+5*Y*X;
126    Ebound2(:,3)=ybound+8*Y*X;

```

```

127
128
129
130
131 % Cornernodes indices for bounceback
132 corner1=[1+X*Y, 1+2*X*Y, 1+5*X*Y];
133 c1=[1+3*X*Y, 1+4*X*Y, 1+7*X*Y];
134 corner2=[Y+X*Y, Y+4*X*Y, Y+8*X*Y];
135 c2=[Y+3*X*Y, Y+2*X*Y, Y+6*X*Y];
136 corner3=[X*Y+3*X*Y, X*Y+4*X*Y, X*Y+7*X*Y];
137 c3=[X*Y+X*Y, X*Y+2*X*Y, X*Y+5*X*Y];
138 corner4=[(X-1)*Y+1+2*X*Y, (X-1)*Y+1+3*X*Y, (X-1)*Y+1+6*X*Y];
139 c4=[(X-1)*Y+1+4*X*Y, (X-1)*Y+1+X*Y, (X-1)*Y+1+8*X*Y];
140
141 % We need to save some of the populations in corners
142 corners=[1+6*X*Y, 1+8*X*Y, Y+5*X*Y, Y+7*X*Y, X*Y+6*X*Y, X*Y+8*X*Y, (X
-1)*Y+1+5*X*Y, (X-1)*Y+1+7*X*Y];
143 end
144
145 % Omit boundary-nodes for collision
146 xcoll=2:X-1;
147 ycoll=2:Y-1;
148
149 if Q==5
150 Sbound=(0:Y:(X-1)*Y)'+1+2*X*Y;
151 Sbound2=Sbound+2*X*Y;
152 Nbound=(Y:Y:X*Y)'+4*X*Y;
153 Nbound2=Nbound-2*X*Y;
154 Wbound=(1:Y)'+X*Y;
155 Wbound2=Wbound+2*X*Y;
156 Ebound=((X-1)*Y+1:X*Y)'+3*Y*X;
157 Ebound2=Ebound-2*X*Y;
158 corner1 = []; corner2 = []; corner3 = []; corner4 = []; c1 = []; c2 = []; c3 = [];
159 c4 = []; corners = [];
160
161 xcoll=2:X-1;
162 ycoll=2:Y-1;
163 end
164
165 if Q==3
166 Sbound = [];
167 Nbound = [];
168 Wbound=[2 1]; Wbound=[3 1];
169 Ebound=[3 X]; Ebound=[2 X];
170
171 corner1 = []; corner2 = []; corner3 = []; corner4 = []; c1 = []; c2 = []; c3 = [];
172 c4 = []; corners = [];
173 xcoll=2:X-1;
174 ycoll=1;
175 end
176
177 % #####
178
179 % The initial distribution set to equilibrium
180 f=feq;
181
182
183 % Run iterations
184 for i=1:T
185
186 u=sum(f,3); % Sum
187
188 f(xcoll,ycoll,:)=collide(f(xcoll,ycoll,:),Q,u,phimat,tau_inv); %
Collision
189
190 saved=f(corners); % Save some populations
191
192 f(:)=f(advect); % Propagation
193
194 f(corners)=saved; % Put back
195 % Boundary

```

```

196         f(Nbound(:))=f(Nbound2(:));
197         f(Wbound(:))=f(Wbound2(:));
198         f(Sbound(:))=f(Sbound2(:));
199         f(Ebound(:))=f(Ebound2(:));
200         f(corner1)=f(c1); f(corner2)=f(c2); f(corner3)=f(c3); f(corner4)=f
           (c4);
201     end
202
203
204     % Output
205     if Y==1 % D1Q3
206         % Solution
207         U=sum(f(1, :, :), 3);
208         % Create the Momentumfield
209         Uv=sum(C(2, 2)*f(1, :, 2)+C(2, 3)*f(1, :, 3), 3);
210
211     else
212
213         % The solution
214         U=sum(f, 3);
215
216         % Create the momentumfield
217         Uv=zeros(Y, X, 2);
218
219         Cm=Cm';
220
221         C2=zeros(Y, X, Q, 2);
222         C2(:)=Cm(:);
223
224         Uv(:, :, 1)=sum(f.*C2(:, :, :, 1), 3);
225         Uv(:, :, 2)=sum(f.*C2(:, :, :, 2), 3);
226
227     end % Output
228 end
229
230
231
232 function [f] = collide(f, Q, u, phimat, tau_inv)
233 feq=u(:, :, ones(Q, 1)).*phimat; % Update feq
234 f=f-tau_inv*(f-feq); % Collision
235
236 end

```