

Univerza
v Ljubljani
Fakulteta
za gradbeništvo
in geodezijo



Jamova cesta 2
1000 Ljubljana, Slovenija
<http://www3.fgg.uni-lj.si/>

DRUGG – Digitalni repozitorij UL FGG
<http://drugg.fgg.uni-lj.si/>

V zbirki je izvirna različica doktorske disertacije.

Prosimo, da se pri navajanju sklicujete na bibliografske podatke, kot je navedeno:

University
of Ljubljana
Faculty of
Civil and Geodetic
Engineering



Jamova cesta 2
SI – 1000 Ljubljana, Slovenia
<http://www3.fgg.uni-lj.si/en/>

DRUGG – The Digital Repository
<http://drugg.fgg.uni-lj.si/>

This is an original PDF file of doctoral thesis.

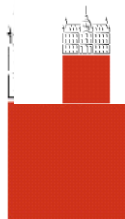
When citing, please refer as follows:

Maslo, A. 2015. Numerično modeliranje razlitja nafte v reko z uporabo mrežne Boltzmannove metode. = Numerical modelling of oil spills in rivers using lattice Boltzmann method. Doctoral dissertation. Ljubljana, Univerza v Ljubljani, Fakulteta za gradbeništvo in geodezijo. (Mentor Žagar, D., somentor Panjan, J.)

<http://drugg.fgg.uni-lj.si>

Univerza
v Ljubljani

Fakulteta za
*gradbeništvo in
geodezijo*



**DOKTORSKI ŠTUDIJSKI
PROGRAM III. STOPNJE
GRAJENO OKOLJE**

Kandidat:
ALJAŽ MASLO

**NUMERIČNO MODELIRANJE RAZLITJA NAFTE V REKO Z
UPORABO MREŽNE BOLTZMANNOVE METODE**

Doktorska disertacija številka: 16/GO

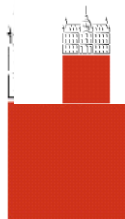
**NUMERICAL MODELLING OF OIL SPILLS IN RIVERS
USING LATTICE BOLTZMANN METHOD**

Doctoral thesis No.: 16/GO

Soglasje k temi doktorske disertacije je dala Komisija za doktorski študij Univerze v Ljubljani
na 30. seji 4. julija 2012.

Za mentorja je bil imenovan doc. dr. Dušan Žagar.
Za somentorja je bil imenovan izr. prof. dr. Jože Panjan.

Ljubljana, 26. januar 2015



Komisijo za oceno ustreznosti teme doktorske disertacije v sestavi:

- doc. dr. Dušan Žagar,
- prof. dr. Matjaž Četina,
- prof. dr. Matjaž Hriberšek, UM FS,
- izr. prof. dr. Jože Panjan

je imenoval Senat Fakultete za gradbeništvo in geodezijo na 30. seji 25. aprila 2012.

Poročevalce za oceno doktorske disertacije v sestavi:

- prof. dr. Matjaž Četina,
- prof. dr. Matjaž Hriberšek, UM FS,
- izr. prof. dr. Gašper Jaklič,

je imenoval Senat Fakultete za gradbeništvo in geodezijo na 15. seji 10. decembra 2014.

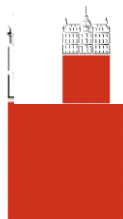
Komisijo za zagovor doktorske disertacije v sestavi:

- prof. dr. Matjaž Mikoš, dekan UL FGG, predsednik,
- izr. prof. dr. Dušan Žagar, mentor,
- izr. prof. dr. Jože Panjan, somentor,
- prof. dr. Matjaž Četina,
- prof. dr. Matjaž Hriberšek, UM FS,
- izr. prof. dr. Gašper Jaklič

je imenoval Senat Fakultete za gradbeništvo in geodezijo na 7. dopisni seji, ki je potekala od 12.1. 2015 do 15. 1. 2015.

Univerza
v Ljubljani

Fakulteta za
*gradbeništvo in
geodezijo*



IZJAVA O AVTORSTVU

Podpisani **Aljaž Maslo** izjavljam, da sem avtor doktorske disertacije z naslovom **Numerično modeliranje razlitja nafte v reko z uporabo mrežne Boltzmannove metode.**

Izjavljam, da je elektronska različica v vsem enaka tiskani različici.

Izjavljam, da dovoljujem objavo elektronske različice v digitalnih repozitorijih.

Ljubljana, 26. januar 2015

.....
(podpis)

STRAN ZA POPRAVKE

Stran z napako	Vrstica z napako	Namesto	Naj bo

BIBLIOGRAFSKO-DOKUMENTACIJSKA STRAN IN IZVLEČEK**UDK: 532:519.61/.64:551.464.3:665.61: 504.1:(043.3)****Avtor: Aljaž Maslo****Mentor:izr. prof. dr. Dušan Žagar****Somentor:izr. prof. dr. Jože Panjan****Naslov: Numerično modeliranje razlitja nafte v reko z uporabo mrežne Boltzmannove metode****Tip dokumenta: Doktorska disertacija****Obseg in oprema: 136 str., 9 pregl., 56 sl., 317 en.****Ključne besede: mrežna Boltzmannova metoda, učinkovitost, modeliranje razlitja nafte, Hermitovi polinomi, kinetična teorija, Nafta3D, TOP12****Izvleček**

Doktorska naloga obravnava uporabo mrežne Boltzmannove metode (MBM) kot alternativo Lagrangeevim in Eulerjevimi metodami za modeliranje razlitij nafte v rekah. Ker MBM uporablja preprostejše diferencialne enačbe lahko z njeno uporabo učinkoviteje modeliramo prenos razlite nafte kakor z obstoječimi modeli. Novo razviti model MBM je splošen in uporaben za simulacije razlitij nafte na rekah in morju, kar smo potrdili z njegovo validacijo na obeh primerih. Dosegli smo zelo dobro ujemanje rezultatov pri simulaciji razlitja pred libanonsko obalo leta 2006 in ob primerjavi modelnih rezultatov MBM z modelom Nafta3D na hipotetičnem razlitju na reki Savi. Po dokazu zanesljivosti modela MBM smo preverili še učinkovitost njegovega delovanja. Testiranje je potekalo dveh korakov, v prvem smo z več kot 1400 različnimi simulacijami preverili učinkovitost metod brez vpliva oblike računskega območja na računski čas, pri čemer je bil model MBM v povprečju osemkrat hitrejši od obstoječih modelov ob doseganju enake natančnosti. V drugem koraku smo pokazali, da oblika računskega območja nima večjega vpliva na povečanje njegovega računskega časa. S tem smo potrdili, da je novi model MBM vsaj enakovreden obstoječim modelom za simulacije prenosa nafte v naravnem okolju. V realnem primeru razlitja nafte lahko z uporabo MBM znatno prihranimo na računskem času. Novi model se lahko zato izkaže kot dragoceno orodje pri preprečevanju ali omilitvi posledic razlitij nafte in ga zato lahko priporočimo tudi ustreznim službam za uporabo v praksi.

BIBLIOGRAPHIC-DOCUMENTALISTIC INFORMATION AND ABSTRACT

UDC: 532:519.61/.64:551.464.3:665.61: 504.1:(043.3)

Author: Aljaž Maslo

Supervisor: Assoc. prof. Dušan Žagar, Ph.D.

Co-advisor: Assoc. prof. Jože Panjan, Ph.D.

Title: Numerical modelling of oil spills in rivers using lattice Boltzmann method

Document type: Doctoral Dissertation

Notes: 136 p., 9 tab., 56 fig., 317 eq.

Keywords: lattice Boltzmann method, efficiency, oil spill modelling, Hermite polynomials, kinetic theory, Nafta3D, TOP12

Abstract

We tested the adequacy of using the lattice Boltzmann method (LBM) as an alternative to Eulerian or Lagrangian methods in river oil spill modelling. By using simpler sets of partial differential equations, derived with the discretisation of the Boltzmann Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) equation, the LBM model is able to achieve higher computational efficiency than the established models. The newly developed LBM model is a general model that can be used to simulate the transport of oil in rivers and seas. It was validated on the 2006 Lebanon oil spill case using a two-dimensional two-relaxation-time D2Q9 model; and by comparing three-dimensional D3Q7 Zhou model results to the results of the Nafta3D model for a river oil spill. After the reliability of the results of the LBM model was confirmed, the next step was to determine whether the LBM model is equivalent to or possibly, as hypothesised, better than existing models. The efficiency of the model was tested in two phases. In the first phase, more than 1400 different simulations were carried out to assess the efficiency of the methods without taking into account the effect of the calculation domain on the calculation time. The D2Q9 LBM model was on average eight times faster than existing models while maintaining the same level of accuracy. In the second phase, we discovered that the shape of the calculation domain does not have any significant impact on the calculation time, thus fully confirming our initial hypothesis. In an actual oil spill event, the use of the LBM can result in significantly shorter calculation times, which can contribute significantly to reducing the consequences of pollution. The new model has proved to be a valuable tool in this area and can therefore be recommended for use in real oil spill events.

ZAHVALA



»Operacijo delno financira Evropska unija, in sicer iz Evropskega socialnega sklada. Operacija se izvaja v okviru Operativnega programa razvoja človeških virov za obdobje 2007 – 2013, 1. razvojne prioritete: Spodbujanje podjetništva in prilagodljivosti, prednostne usmeritve 1.1.: Strokovnjaki in raziskovalci za konkurenčnost podjetij.«

Zahvaljujem se mentorju izr. prof. dr. Dušanu Žagarju ter somentorju izr. prof. dr. Jožetu Panjanu za izjemen trud, čas in nasvete, ki sta mi jih namenila med pisanjem doktorske naloge. Zahvaljujem se tudi Italijanski vesoljski agenciji za posredovanje satelitskih posnetkov MODIS, dobljenih v okviru projekta PRIMI.

Iskrena hvala direktorju Borutu Roškarju in raziskovalni mentorici Mirjani Fesel z vodno gospodarskega podjetja Drava Ptuj d.d., za vso podporo in usmeritve pri nastajanju disertacije in omogočanju izvedbe doktorskega projekta.

Še posebej se zahvaljujem tudi mojima staršema, ki sta me v času študija in ob nastajanju doktorske naloge podpirala in mi ves čas stala ob strani.

KAZALO VSEBINE

1 UVOD	1
1.1 Hipoteza in cilji	3
1.2 Vsebina naloge	4
2 TEORETIČEN OPIS MREŽNE BOLTZMANNOVE METODE	5
2.1 Zgodovinski izvor MBM.....	5
2.2 Kinetična teorija plinov	8
2.2.1 Idealni plini	8
2.2.2 Porazdelitvena funkcija	10
2.2.3 Boltzmannova enačba	14
2.2.4 Poenostavljena Boltzmannova enačba	18
2.2.5 Brezdimenzijska oblika poenostavljene Boltzmannove enačbe.....	19
2.3 IZPELJAVA NAVIER-STOKESOVIH ENAČB IZ BOLTZMANNOVE ENAČBE.....	21
2.3.1 Posplošena Fourierjeva vrsta in Hermitovi polinomi	22
2.3.2 Navier-Stokesove enačbe	25
2.3.3 Brezdimenzijska oblika Navier-Stokesovih enačb.....	25
2.3.4 Izpeljava kontinuitetne enačbe	26
2.3.5 Izpeljava dinamične enačbe.....	27
2.3.6 Chapman-Enskogova razširitev Boltzmannove BGK enačbe	30
2.3.7 Razvoj Boltzmannove BGK enačbe v posplošeno Fourierjevo vrsto s Hermitovimi polinomi in uporabo Chapman-Enskogove razširitve	31
2.3.7.1 Razvoj prvega člena BBGK	34
2.3.7.2 Razvoj drugega člena BBGK	34
2.3.7.3 Razvoj tretjega člena BBGK	35
2.3.7.4 Razvoj četrtega člena BBGK	37
2.3.8 Približek ničtega reda in Eulerjeve enačbe.....	38
2.3.9 Približek prvega reda in Navier-Stokesove enačbe	38
2.4 Izpeljava advekcijsko-difuzijske enačbe iz Boltzmannove enačbe.....	50
2.4.1 Brezdimenzijska oblika advekcijsko-difuzijske enačbe.....	51
2.4.2 Izpeljava advekcijsko-difuzijske enačbe s projekcijo BBGK na Hermitove polinome	52
2.4.3 Chapman-Enskogova razširitev BBGK enačbe.....	52
2.4.4 Približek ničtega reda	53
2.4.5 Približek prvega reda in AD enačba.....	53
2.4.5.1 Razvoj prvega člena BBGK	53
2.4.5.2 Razvoj drugega člena BBGK	55

2.4.5.3 Razvoj tretjega člena BBGK	55
2.4.5.4 Razvoj četrtega člena BBGK.....	56
2.5 Diskretizacija.....	58
2.5.1 Diskretizacija po času in prostoru	58
2.5.2 Diskretizacija hitrosti.....	60
2.5.3 Pretvorba iz fizičnih spremenljivk v brezdimenzijske spremenljivke	64
2.5.4 Implementacija numerične sheme v računalniški algoritem.....	65
2.6 Robni pogoji.....	66
2.6.1 Odboj nazaj.....	67
2.6.2 Odboj nazaj na ukrivljeni površini	68
2.6.3 Gladek rob	69
2.6.4 Delno prepusten rob.....	70
2.6.5 Omejitev največje količine naložene nafte na brežine.....	70
2.7 Drugi modeli MBM.....	70
2.7.1 BGK Zhou D3Q7.....	71
2.7.2 Več-relaksacijski model MRT.....	72
2.7.3 Dva relaksacijska časa – model TRT.....	73
2.8 Povečanje stabilnosti MBM z metodo FIX-UP	75
2.9 Postopek raztezanja mreže ob uporabi interpolacij z omejevalci pretoka	76
3 OPIS PROCESOV PRI RAZLITJU NAFTE IN VGRADITEV GLAVNIH PROCESOV V RAČUNALNIŠKI MODEL MREŽNE BOLTZMANNOVE METODE.....	79
3.1 Izhlapovanje.....	80
3.2 Odlaganje na obalo	81
3.3 Največja možna količina odložene nafte na obali	81
3.4 Vzgon	81
3.5 Mehansko širjenje.....	85
3.6 Emulzifikacija.....	85
3.7 Disperzija.....	86
3.8 Sedimentacija	87
3.9 Biološka razgradnja	87
3.10 Raztapljanje	87
3.11 Oksidacija.....	87
4 VALIDACIJA TRANSPORTNEGA MODELA ŠIRJENJA NAFTE PO MREŽNI BOLTZMANNOVI METODI	88
4.1 Primerjava rezultatov modela MBM s resničnim razlitjem nafte ob libanonski obali	88
4.1.1 Izbira optimalnega modela MBM.....	89

4.1.2 Primerjava rezultatov simulacij s satelitskimi posnetki	94
4.1.3 Diskusija.....	98
4.2 Primerjava rezultatov modela MBM z rezultati modela Nafta3D na Savi.....	99
4.2.1 Primerjava simulacij modela MBM s simulacijami modela Nafta3D.....	101
4.2.2 Prikaz rezultatov modela MBM ob upoštevanju nalaganja nafte na brežine	107
5 PRIMERJAVA UČINKOVITOSTI MREŽNE BOLTZMANNOVE METODE S PRIMERLJIVIMI MODELI	110
5.1 Osnovne enačbe	110
5.1.1 Osnovne enačbe MSD.....	111
5.1.2 Osnovne enačbe TOP12 sheme.....	112
5.2 Opis numeričnega eksperimenta	113
5.2.1 Primerjava natančnosti MBM, Euler TOP12 in MSD po času	116
5.2.2 Analiza učinkovitosti.....	117
5.2.3 Primerjava računskega časa z ali brez ovire.....	120
6 ZAKLJUČKI IN NAPOTKI ZA NADALJNJE DELO.....	122
7 POVZETEK	124
8 SUMMARY	126
VIRI.....	128

KAZALO SLIK

Slika 2.1: Prikaz HPP mreže in razporeditve delcev v HPP modelu po trku	6
Slika 2.2: Prikaz šesterokotne FHP mreže in enako verjetnih porazdelitev delcev po čelnem trku.....	7
Slika 2.3: Primerjava povprečnih pretokov ravninskega laminarnega toka med dvema ploščama - Poiseuillovega toka z FHP (a) in MBM (b) v različnem številu iteracij. Črtkana črta predstavlja analitično rešitev (Bernsdorf, 2008)	7
Slika 2.4: Enodimenzionalni statistični opis sistema delcev s porazdelitveno funkcijo.....	11
Slika 2.5: Prikaz dvodimenzionalne ravnotežne-Maxwellove porazdelitve.....	12
Slika 2.6: Prikaz izseka tridimenzionalne ravnotežne-Maxwellove porazdelitve	12
Slika 2.7: Prikaz šestdimenzionalnega KV.....	15
Slika 2.8: Pretok delcev skozi stene KV v dveh časovnih intervalih	15
Slika 2.9: Pretok delcev skozi stene KV hitrosti delcev v dveh časovnih intervalih.....	16
Slika 2.10: Numerične sheme za enodimenzionalen primer, D1Q2 (levo) in D1Q3 (desno)	61
Slika 2.11: Numerične sheme za dvodimenzionalen primer, D2Q5 (levo) in D2Q9 (desno)	62
Slika 2.12: Numerične sheme za tridimenzionalen primer, D3Q7 (levo) in D3Q27 (desno).....	62
Slika 2.13: Prikaz razmerji med normiranimi x , ξ_i in nenormiranimi x , ξ_i brezdimenzijskimi količinami	63
Slika 2.14: Prikaz gladke površine kamna pod elektronskim mikroskopom.....	67
Slika 2.15: Prikaz RP odboja nazaj s postavitvijo roba območja na razdalji Δx od računske celice.....	67
Slika 2.16: Prikaz RP odboja nazaj s postavitvijo roba območja na razdalji $\Delta x/2$ od računske točke ..	68
Slika 2.17: Prikaz ukrivljene meje računskega območja.....	68
Slika 2.18: Skica postopka interpolacije.....	69
Slika 2.19: RP proste gladine	70
Slika 2.20: Skica raztegnjene in neraztegnjene mreže Figure 2.20: Schematic presentation of stretched and non-stretched mesh segment.....	76
Slika 2.21: Prikaz oscilacij, ki nastanejo ob interpoliranju z: (a) Lax-Wendroff shemo drugega reda, (b) QUICKEST shemo tretjega reda in (c) oscilacije se ne pojavijo ob interpolaciji z Lax-Wendroff shemo drugega reda in uporabi Van Leer omejevalca pretoka.....	77
Slika 3.1: Shematski prikaz procesov pri razlitju nafte	79
Slika 3.2: Časovni potek procesov pri razlitju nafte (ITOPF, 2002)	80
Slika 3.3: Prikaz razporeditve koncentracije po globini pri: (a) modelu MBM , (b) MSD_RPO1b in (c) Nafta3D	84
Slika 3.4: Primerjava razporeditve povprečnih koncentracij po globini med modeli: MBM, MSD_RPO1b in Nafta3D.....	84
Slika 3.5: Fotografija vode in dizelskega goriva: (a) pred premešanjem in (b) po 5-minutnem mešanju	85
Slika 4.1: Prikaz analitične rešitve - Gaussov zvon.....	89
Slika 4.2: Primerjava natančnosti TRT in BGK modela na D2Q5 mreži v spremenljivem časovnem koraku in različnih vrednostih magičnega parametra Λ TRT modela.	90
Slika 4.3: Primerjava natančnosti TRT in BGK modela na D2Q9 mreži v spremenljivem časovnem koraku in različnih vrednostih magičnega parametra Λ TRT modela.	90
Slika 4.4: Primerjava izolinij koncentracij numerične in analitične rešitve (a) D2Q5 in (b) D2Q9 modela.	91
Slika 4.5: Primerjava TRT D2Q9 in D2Q5 L2 napake z enakim končnim časom in časom izračuna simulacije.....	91
Slika 4.6: Primerjava natančnosti različnih omejevalcev pretoka in različnih velikosti raztezanja mreže z diagonalno hitrostjo (a) $u_{diag} = 0.6 m/s$ in (b) $u = 0 m/s$	92

Slika 4.7: Natančnost interpolacij TRT D2Q5 modela z uporabo različnih omejevalcev pretoka.....	92
Slika 4.8: Natančnost interpolacij TRT D2Q9 modela z uporabo različnih omejevalcev pretoka.....	93
Slika 4.9: Primerjava izolinij koncentracij numerične in analitične rešitve (a) TRT D2Q5 in (b) TRT D2Q9 modela z uporabo van Leerovega omejevalca pretoka.....	93
Slika 4.10: Položaj naftnega madeža dne 21. julija 2006, 7:35 GMT: (a) satelitski posnetek naftnega madeža, položaj naftnega madeža simuliran z MBM (b) brez uporabe interpolacij z omejevalci pretoka na 500 krat 250 celični mreži in (c) ob uporabi interpolacij z omejevalci pretoka na 250 krat 125 celični mreži.....	95
Slika 4.11: Položaj naftnega madeža dne 23. julija 2006, 8:35 GMT: (a) MODIS AQUA satelitski posnetek naftnega madeža, položaj naftnega madeža simuliran z MBM (b) brez uporabe interpolacij z omejevalci pretoka na 500 krat 250 celični mreži in (c) ob uporabi interpolacij z omejevalci pretoka na 250 krat 125 celični mreži.....	96
Slika 4.12: Položaj naftnega madeža dne 2. avgusta 2006, 10:50 GMT: (a) MODIS AQUA satelitski posnetek naftnega madeža, položaj naftnega madeža, simuliran z MBM (b) brez uporabe interpolacij z omejevalci pretoka na 500 krat 250 celični mreži in (c) ob uporabi interpolacij z omejevalci pretoka na 250 krat 125 celični mreži.....	97
Slika 4.13: Na terenu zbrani podatki o najbolj onesnaženih delih obale (GLA, 2007).....	97
Slika 4.14: Prikaz stopnje izhlapevanja in nalaganja nafte na obalo skozi čas.....	97
Slika 4.15: Prikaz računskega območja na reki Savi med HE Boštanj in HE Blanca.....	99
Slika 4.16: Prikaz tridimenzionalnega odseka struge Save med: HE Boštanj in HE Blanca (levo) in povečan del krajšega odseka pred HE Blanca (desno).....	100
Slika 4.17: Prikaz tokov v površinskem sloju.....	100
Slika 4.18: Rezultati modeliranja razlitja nafte na Savi v času 36 minut po razlitju z modelom: (a) Nafta3D s 4.800 delci, (b) Nafta3D z 48.000 delci, (c) Nafta3D s 480.000 delci in (d) MBM.....	102
Slika 4.19: Rezultati modeliranja razlitja nafte na Savi v času 1 ure in 18 minut po razlitju (1,3 ure) s modelom: (a) Nafta3D s 4.800 delci, (b) Nafta3D z 48.000 delci, (c) Nafta3D s 480.000 delci in (d) MBM.....	104
Slika 4.20: Razporeditev mase nafte (levo) in povprečnih vodoravnih hitrosti (desno) po globini prereza Save.....	105
Slika 4.21: Rezultati modeliranja razlitja nafte na Savi v času 3 ur in 6 minut po razlitju (3,1 ure) s modelom: (a) Nafta3D s 4.800 delci, (b) Nafta3D z 48.000 delci, (c) Nafta3D s 480.000 delci in (d) MBM.....	106
Slika 4.22: Rezultati modeliranja razlitja nafte na Savi z modelom MBM ob upoštevanju interakcije z brežinami v času: (a) 36 minut, (b) 1 ure in 18 minut (1,3 ure) in (c) 3 ur in 6 minut (3,1 ure) po razlitju.....	108
Slika 4.23: Prikaz rezultatov modela MBM v tridimenzionalnem GIS-u, (Harpha Sea, 2011).....	109
Slika 5.1: Komponente hitrosti delca.....	111
Slika 5.2: Prikaz širjenja Gaussovega zvona v tlorisu (a) in v 3D (b).....	114
Slika 5.3: Primerjava izolinij koncentracij, napake L_2 in računskih časov (RČ) različnih metod z enakim časovnim korakom 0,4 sekunde in mrežo z 250 x 250 celicami: (a) MSD, (b) MBM D2Q9 in (c) TOP12.....	115
Slika 5.4: Vpliv ovire na računski čas.....	115
Slika 5.5: Primerjava L_2 napake modelov (a) MBM, (b) Euler TOP12 in (c) MSD v dveh časovnih intervalih, na mreži s 50 x 50 celicami in diagonalno hitrostjo toka $u = 0,5$ m/s.....	117
Slika 5.6: Primerjava učinkovitosti modelov MBM, MSD in Euler TOP12 z mrežo s 50 x 50 celicami, 5 minutnim končnim časom simulacije in z diagonalno hitrostjo toka (a) $u = 0,5$ m/s in (b) $u = 1,5$ m/s.....	118

Slika 5.7: Prikaz testiranja vpliva ovire na povečanje računskega časa: (a) model MSD z 10^5 delci, (b) model MBM D2Q9 in (c) model TOP12..... 120

LIST OF FIGURES

Figure 2.1: The HPP lattice and distribution of particles after collision	6
Figure 2.2: The FHP hexagonal lattice and collision of particles with two equivalent outcomes	7
Figure 2.3: Mean flow rate of plane Poiseuille flow vs. iteration number for FHP (a) and MBM (b). The dashed lines indicate the theoretical value (Bernsdorf, 2008)	7
Figure 2.4: One-dimensional (1-D) statistical description of a system of particles with the distribution function	11
Figure 2.5: Two-dimensional (2-D) equilibrium-Maxwell distribution function	12
Figure 2.6: Section of three-dimensional (3-D) equilibrium-Maxwell distribution function.....	12
Figure 2.7: Six-dimensional (6-D) control volume	15
Figure 2.8: The flow of particles through the walls of the control volume in two time steps.....	15
Figure 2.9: The flow of particles through the walls of the particle velocity control volume in two time steps.....	16
Figure 2.10: Lattice arrangements for 1-D problems, D1Q2 (left) and D1Q3 (right).....	61
Figure 2.11: Lattice arrangements for 2-D problems, D2Q5 (left) and D2Q9 (right).....	62
Figure 2.12: Lattice arrangements for 3-D problems, D3Q7 (left) and D3Q27 (right).....	62
Figure 2.13: Ratios between normalized x , ξ_i and non-normalized x , ξ_i dimensionless quantities.....	63
Figure 2.14: Smooth stone surface under electron microscope.....	67
Figure 2.15: Bounce back boundary condition, with distance Δx between the fluid node and the wall	67
Figure 2.16: Bounce back boundary condition, with distance $\Delta x/2$ between the fluid node and the wall	68
Figure 2.17: Schematic presentation of curved boundary condition.....	68
Figure 2.18: Schematic presentation of the interpolation process.....	69
Figure 2.19: Free surface boundary condition.....	70
Slika 2.20: Skica raztegnjene in neraztegnjene mreže Figure 2.20: Schematic presentation of stretched and non-stretched mesh segment.....	76
Figure 2.21: Oscillations by interpolating with the (a) Lax-Wendroff second-order scheme, (b) QUICKEST third-order scheme and (c) oscillations do not occur when interpolating with the Lax- Wendroff second-order scheme using Van Leer flux limiter	77
Figure 3.1: Fate of oil spills	79
Figure 3.2: Fate of a crude oil spill showing changes in the relative importance of weathering processes with time (ITOPF, 2002).....	80
Figure 3.3: Distribution of concentration with depth for: (a) MBM model, (b) MSD_RPO1b and (c) Nafta3D	84
Figure 3.4: Comparison of the distribution of average concentrations with depth for MBM, MSD_RPO1b and Nafta3D.....	84
Figure 3.5: Images of water and diesel fuel: (a) before mixing and (b) after 5 minutes of mixing	85
Figure 4.1: Display of the analytical solution of the evolution of a Gaussian hill.	89
Figure 4.2: Comparing the accuracy of TRT and BGK models running on D2Q5 lattice and variable time step, while tuning the magic parameter Λ of the TRT model.....	90
Figure 4.3: Comparing the accuracy of TRT and BGK models running on D2Q9 lattice and variable time step, while tuning the magic parameter Λ of the TRT model.....	90
Figure 4.4: Comparing the contour plots of the numerical and analytical solutions of the (a) D2Q5 and (b) D2Q9 model results.	91
Figure 4.5: Comparison of TRT D2Q9 and D2Q5 L_2 error with the same simulation and computation time.....	91

Figure 4.6: Comparing the accuracy of different flux limiters and different amount of grid stretching, with diagonal velocity (a) $u_{diag} = 0.6 \text{ m/s}$ and (b) $u = 0 \text{ m/s}$.	92
Figure 4.7: Accuracy of the TRT D2Q5 model using different flux limiting interpolations technique	92
Figure 4.8: Accuracy of the TRT D2Q9 model using different flux limiting interpolations.	93
Figure 4.9: Comparing the contour plots of the numerical and analytical solution of the (a) TRT D2Q5 and (b) TRT D2Q9 model using the van Leer flux limiter interpolation.	93
Figure 4.10: Oil slick size and location on 21 July 2006, 7:35 GMT: (a) satellite image of the oil slick, LBM simulation results of oil slick and oil concentrations, (b) without the use of flux limiting interpolation technique on a 500 per 250 cell grid and (c) with the use of flux limiting interpolation technique on a 250 per 125 cell grid.	95
Figure 4.11: Oil slick size and location on 23 July 2006, 8:35 GMT: (a) MODIS AQUA satellite image of the oil slick, LBM simulation results of oil slick and oil concentrations, (b) without the use of flux limiting interpolation technique on a 500 per 250 cell grid and, (c) with the use of flux limiting interpolation technique on a 250 per 125 cell grid.	96
Figure 4.12: Oil slick size and location on 2 August 2006 at 10:50 GMT: (a) MODIS AQUA satellite image of the oil slick, LBM simulation results of oil slick and oil concentrations, (b) without the use of flux limiting interpolation technique on a 500 per 250 cell grid and (c) with the use of flux limiting interpolation technique on a 250 per 125 cell grid.	97
Figure 4.13: Oil-polluted area, field data (GLA, 2007).	97
Figure 4.14: Evaporation and oil onshore deposition rates.	97
Figure 4.15: Computation area on the Sava River between the hydro power plant (HPP) Boštanj and HPP Blanca.	99
Figure 4.16: A three-dimensional section of the Sava riverbed between HPP Boštanj and HPP Blanca (left) and magnification of a shorter part of the segment before HPP Blanca (right).	100
Figure 4.17: Surface current field.	100
Figure 4.18: The oil spill modelling results on the Sava River at the time 36 minutes after the spill with: (a) Nafta3D and 4,800 particles, (b) Nafta3D and 48,000 particles, (c) Nafta3D and 480,000 particles and (d) LBM	102
Figure 4.19: The oil spill modelling results on the Sava River at the time 1 hour and 18 minutes (1.3 hours) after the spill with: (a) Nafta3D and 4,800 particles, (b) Nafta3D and 48,000 particles, (c) Nafta3D and 480,000 particles and (d) LBM	104
Figure 4.20: Distribution of the weight of oil (left) and the average horizontal velocity (right) through the depth of the Sava cross-section.	105
Figure 4.21: The oil spill modelling results on the Sava River at the time 3 hours and 6 minutes (3.1 hours) after the spill with: (a) Nafta3D and 4,800 particles, (b) Nafta3D and 48,000 particles, (c) Nafta3D and 480,000 particles and (d) LBM	106
Figure 4.22: The LBM oil spill modelling results on the Sava River, taking into account the interaction of oil with the shores at the time: (a) 36 minutes, (b) 1 hour and 18 minutes (1.3 hours) and (c) 3 hours and 6 minutes (3.1 hours) after the spill	108
Figure 4.23: Results of LBM model in three-dimensional GIS (Harpha Sea, 2011)	109
Figure 5.1: Components of particle velocity	111
Figure 5.2: The propagation of the Gaussian bell in plain view (a) and 3D (b)	114
Figure 5.3: Comparison of the contour plots, L_2 errors and simulation running times of the: (a) PTM, (b) LBM D2Q9 and (c) TOP12 model results	115
Figure 5.4: The influence of obstacle on the computational time	115
Figure 5.5: Comparison of L_2 error using different models (a) LBM, (b) Euler TOP12 and (c) PTM in two time frames on a 50 x 50 computational grid and a diagonal velocity $u = 0.5 \text{ m/s}$	117

Figure 5.6: Efficiency comparison between LBM, PTM and TOP12 on a 50 x 50 computational grid, 5 minutes simulation time and diagonal velocity (a) $u = 0.5$ m/s in 118

Figure 5.7: Testing the increase of computational time due to an obstacle with: (a) PTM model with 10^5 particles, (b) LBM D2Q9 model and (c) TOP12 model 120

KAZALO PREGLEDNIC

Preglednica 2.1: Splošni algoritem MBM	66
Preglednica 3.1: Vhodni podatki za numerični preizkus	83
Preglednica 4.1: Vhodni podatki modela.	94
Preglednica 4.2: Vhodni podatki za model.....	101
Preglednica 4.3: Primerjava računski časov (RČ)	107
Preglednica 5.1: Vhodni podatki za numerični eksperiment	114
Preglednica 5.2: Rezultati primerjave učinkovitosti med: MBM, MSD in TOP12.....	119
Preglednica 5.3: Končni rezultati primerjave učinkovitosti med: MBM, MSD in TOP12	120
Preglednica 5.4: Povečanje računskega časa zaradi ovire v računskem območju.....	121

LIST OF TABLES

Table 2.1: General algorithm for lattice Boltzmann method (LBM)	66
Table 3.1: Input data for the numerical experiment	83
Table 4.1: Model input parameters.	94
Table 4.2: Model input parameters.	101
Table 4.3: Computation times (CT) comparison.....	107
Table 5.1: Input data for the numerical experiment	114
Table 5.2: Comparison of efficiency between LBM, PTM and TOP12	119
Table 5.3: Final results of the efficiency comparison between: LBM, PTM and TOP12.....	120
Table 5.4: The increase of computational time due to obstacle in computation area.....	121

OKRAJŠAVE

1-D	One-Dimensional
2-D	Two-Dimensional
3-D	Three-Dimensional
6-D	Six-Dimensional
AD	Advekcija difuzija
BBGK	Boltzmann, Bhatnagar, Gross, Krook
BGK	Bhatnagar, Gross, Krook
CA	Celični avtomat
CT	Computation Time
FHP	Frisch, Hasslacher, Pomeau
GIS	Geografsko informacijski sistem
HE	Hidroelektrarna
HPP	Hardy, Pomeau, Pazzis
HPP	Hydro Power Plant
IFO	Intermediate Fuel Oil
ITOPF	International Tanker Owners Pollution Federation
KV	Kontrolni volumen
LBM	Lattice Boltzmann Method
MBM	Mrežna Boltzmannova metoda
MKE	Metoda končnih elementov
MKD	Metoda končnih diferenc oz. razlik
MKV	Metoda končnih volumnov
MO	Mikroorganizmi
MPCA	Mrežni plinski celični avtomat
MRT	Multi-Relaxation Time
MSD	Metoda sledenja delcev
NS	Navier, Stokes
PDE	Parcialne diferencialne enačbe
PTM	Particle Tracking Method
RČ	Računski čas
$\widehat{RČ}$	Normiran računski čas
RDT	Računalniška dinamika tekočin
RMS	Root Mean Square
RPO	Robni pogoj
SAW	Spill Analysis Workstation
STD	Standardna deviacija
TOP12	Third-Order Polynomial
TRT	Two Relaxation Time

SIMBOLI

Simbol	Opis	Enota
$a_{0\alpha}^{(0)}$	Hermitov koeficient ravnotežne porazdelitvene funkcije	/
$a_{\alpha}^{(n)}, a_{F\alpha}^{(n)}$	Hermitova koeficienta	/
$\hat{t}, \hat{u}, \hat{x}, \hat{f}, \hat{f}^M, \hat{g}, \hat{m}_D, \hat{S}RC, \hat{c}_s, \hat{D}$	brezdimenzijske količine	/
c_e	prosti parameter modela TRT	/
C'_E, C_E	difuzijski in advekcijski pretok na vzhodni stranici računske celice	kg/m ³
C_{Fn}, C_n	koeficienta v Fourierjevi vrsti	/
c_l	mrežna hitrost zvoka	/
C^n	koncentracija nafte v časovnem koraku n	kg/m ³
c_s	hitrost zvoka	m/s ali /
D	koeficient difuzije	m ² /s ali /
D_{hor}	horizontalni koeficient difuzije	m ² /s
Dim	dimenzija prostora	/
dN^+, dN^-	število delcev, ki vstopa ali izstopa iz kontrolnega volumna	/
$D_{preč}$	prečni koeficient difuzije	m ² /s
D_v, D_{vert}	vertikalni koeficient difuzije	m ² /s
$D_{vzdolž}$	vzdolžni koeficient difuzije	m ² /s
D_x, D_y, D_z	komponente neizotropnega koeficienta difuzije	m ² /s
E	gostota notranje energije	J/m ³ ali /
E_0	nepremična utež	/
E_i^s, E_i^a	simetrične in asimetrične uteži	/
e_i^s, e_i^a	simetrični in asimetrični del ravnotežne porazdelitvene funkcije	/
Ev	delež izhlapele nafte	%
f	porazdelitvena funkcija	$\frac{s^{Dim}}{m^{3+Dim}}$ ali /
\vec{F}	zunanja sila	N
F	člen vpliva sil na porazdelitveno funkcijo	/
\tilde{f}	pomožna porazdelitvena funkcija	/
$f^{(0)}$	ravnotežna porazdelitvena funkcija	$\frac{s^{Dim}}{m^{3+Dim}}$ ali /
f_1, f_2	porazdelitveni funkciji delca ena in dve pred trkom	$\frac{s^{Dim}}{m^{3+Dim}}$
f'_1, f'_2	porazdelitveni funkciji delca ena in dve po trku	$\frac{s^{Dim}}{m^{3+Dim}}$
$f^{(1)}$	neravnotežni del porazdelitvene funkcije	$\frac{s^{Dim}}{m^{3+Dim}}$ ali /
F_{em}	volumski delež vode	/
F_{em}^f	končni volumski delež vode	/
\vec{f}_i	porazdelitvena funkcija, ki kaže v nasprotni smeri od i -tega smernega vektorja	/
f_i	diskretizirana porazdelitvena funkcija	kg/m ³ ali /

$f_i^{(in)}, f_i^{(out)}$	vrednost porazdelitvene funkcije pred in po vplivu trkov na njeno vrednost	kg/m ³	ali	/
f_i^s, f_i^a	simetrični in asimetrični del porazdelitvene funkcije		/	
f^M	Maxwellova porazdelitvena funkcija	$\frac{s^{Dim}}{m^{3+Dim}}$	ali	/
$f^{N(0)}, f^{N(1)}$	porazdelitvena funkcija razvita do N -tega reda		/	
\vec{g}	pospešek	m/s ²	ali	/
\vec{G}	gibalna količina	1/sm ²	ali	/
$g^{(u)}$	faktor korekcije numerične difuzije		/	
h	globina	m		
$H_\alpha^{(n)}$	Hermitov polinom stopnje n		/	
I	enotska matrika		/	
I_0	vzdolžni naklon kanala		/	
\vec{j}	gibalna količina pri izpeljavi adveksijsko-difuzijske enačbe		/	
k	konstanta upadanja nafte na obali		1/h	
k_B	Boltzmannova konstanta		J/K	
kd	konstanta		/	
K_{em}	emulzifikacijska konstanta		s/m ²	
Kn	Knudsenovo število		/	
L	karakteristična dolžina		m	
L^2	relativna napaka		/	
m	masa		kg	
Ma	Machovo število		/	
m_d	masa delca	kg	ali	/
md	razpršena masa nafte		kg	
$moil$	preostala masa nafte		kg	
M_{rvzgon}	srednja vrednost Gaussove porazdelitve		/	
n_i	logična spremenljivka		/	
N	število molekul, delcev		/	
$\bar{u}, \bar{D}, \overline{SRC}, \bar{x}, \bar{t}, \bar{f}_i$	normirane brezdimenzijske spremenljivke		/	
p	tlak	N/m ²	ali	/
P	tenzor napetosti	N/m ²	ali	/
$P_{\alpha\beta}$	element tenzorja napetosti	N/m ²	ali	/
p_n	polinom stopnje n		/	
q	brezdimenzijska koordinata		/	
r	polinom		/	
r	naključna spremenljivka		/	
$R_{analitična}$	vrednost analitične rešitve		kg/m ³	
$R_{numerična}$	vrednost numerične rešitve		kg/m ³	
r_{SNP}	naključna spremenljivka standardne normalne porazdelitve		/	
r_{vzgon}	naključna spremenljivka v vertikalni smeri ob upoštevanju vzgona		/	
\bar{S}	povprečna vrednost izvorno-ponornega člana porazdelitvene funkcije		$\frac{s^{Dim-1}}{m^{3+Dim}}$	
S	izvorno-ponorni člen porazdelitvene funkcije		$\frac{s^{Dim-1}}{m^{3+Dim}}$	

SRC	izvorni člen		$\text{kg/m}^3\text{s}$	
T	absolutna temperatura		$^{\circ}\text{K}$	
t	čas	s	ali	/
T_0, m_{D0}	referenčna temperatura in referenčna masa delca		$^{\circ}\text{K}, \text{kg}$	
t_i	'hidrodinamične' uteži		/	
\bar{u}	povprečni tok		m/s	
$\vec{u} = (u, v, w)$	vektor makroskopske hitrosti toka	m/s	ali	/
$\vec{u}^* = (u^*, v^*, w^*)$	deterministična komponenta hitrosti		m/s	
$\vec{u}^{**} = (u^{**}, v^{**}, w^{**})$	stohastična komponenta hitrosti		m/s	
\vec{u}_{AD}	hitrost transportirane snovi		/	
\vec{u}_{diag}	hitrost toka diagonalna na računsko mrežo		m/s	
u_L^{**}	stohastična hitrost v smeri vektorja \vec{u}^*		m/s	
U_{strig}	strižna hitrost		m/s	
u_T^{**}	stohastična hitrost pravokotna na smer vektorja \vec{u}^*		m/s	
u_w	hitrost vetra		m/s	
V	volumen		m^3	
\bar{v}	povprečna hitrost molekul idealnega plina		m/s	
V_{nazaj}	volumen nafte, ki z obale ponovno vstopa v vodni tok		m^3	
V_{obala}	volumen nafte, naložene na obali		m^3	
\vec{v}_r	relativna hitrost med delci		m/s	
W_n	notranja energija	J	ali	/
w_{SNP}^{**}	stohastična komponenta hitrosti brez upoštevanja vzgona		m/s	
w_{vzgon}	vzgonska hitrost delcev		m/s	
\vec{x}	prostorska koordinata	m	ali	/
χ	stisljivost snovi		m^2/N	
x, y, z	vrednosti koordinat v treh koordinatnih oseh	m	ali	/
α	kot trka med delcema		rad	
α, β	Courantova števila v različnih smereh koordinatnih osi		/	
α, β, γ	koordinatni indeksi		/	
$\hat{t}, \hat{\xi}, \hat{\eta}, \hat{\theta}, \hat{\rho}, \vec{\hat{v}}_{\hat{\xi}}$	brezdimenzijske količine		/	
$\delta_{\alpha, \beta}$	Kroneckerjev delta		/	
Δt	časovni korak	s	ali	/
Δx	prostorski korak numerične mreže	m	ali	/
$\Delta x_{enakomeren}$	prostorski korak numerične mreže		m	
$\Delta x_{raztegnjen}$	prostorski korak raztegnjene numerične mreže		m	
ϵ	specifična notranja energija	J/ m^3kg	ali	/
ε	majhen parameter		/	
η	gostota delcev	$1/\text{m}^3$	ali	/
η_0, ρ_0	referenčna gostota delcev in referenčna gostota		$1/\text{m}^3, \text{kg}/\text{m}^3$	
θ	$k_B T/m_d$	m^2/s^2	ali	/
θ	funkcija senzor		/	
θ_0	$k_B T_0/m_d$		m^2/s^2	
λ	povprečna prosta pot		m	

Λ	'magični' parameter TRT modela	/
λ	razpolovni čas	h
λ, μ	difuzijska števila v različnih smereh koordinatnih osi	/
Λ^s, Λ^a	lastni vrednosti simetričnega in asimetričnega dela trknega operatorja	/
λ^s, λ^a	relaksacijska parametra TRT modela	/
μ	dinamična viskoznost	kg/ms ali /
μ_n	moment n-tega reda	enota odvisna od stopnje momenta
ν	kinematična viskoznost	m ² /s ali /
$\bar{\rho}, \bar{V}, \bar{\xi}, \bar{\theta}, \bar{\tau}$	normirane brezdimenzijske spremenljivke	/
$\vec{\xi}$	vektor hitrosti mikroskopskega delca	m/s ali /
$\vec{\xi}_1, \vec{\xi}_2$	hitrosti delca ena in delca dve	m/s
$\vec{\xi}_i$	diskretizirana hitrost delca	m/s ali /
ρ	gostota oz. koncentracija	kg/m ³ ali /
ρ_{nafte}	gostota nafte	kg/m ³
ρ_{vode}	gostota vode	kg/m ³
σ	omejevalec pretoka	/
σ	površinska napetost nafta-voda	N/m ²
τ	čas relaksacije	s ali /
$\tilde{\tau}$	čas relaksacije	/
τ'	povečan čas relaksacije pri metodi FIX-UP	/
ω	utežna funkcija	/
$\Omega_{BGK}, \Omega_{TRT}, \Omega_{MRT}$	trkni operator BGK, TRT in MRT	kg/m ³ ali /
ω_i, W_i	uteži Gauss-Hermitovega kvadraturenega pavila	/
Ω_i	diskretiziran trkni operator	kg/m ³ ali /
$\vec{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$	operator nabra	1/m ali /
\otimes	Kroneckerjev produkt	/
Δ	Laplaceov operator	1/m ²
∞	neskončnost	/

1 UVOD

V praksi sta se za modeliranje razlitja nafte uveljavila dva numerična pristopa: Lagrangeev pristop metode sledenja delcev (MSD) in Eulerjev. Po Eulerjevem pristopu obravnavamo nafto kot zvezno snov in njeno gibanje opišemo s parcialnimi diferencialnimi enačbami (PDE), ki v splošnem nimajo analitične rešitve, zato njihovo aproksimativno rešitev iščemo s tremi klasičnimi numeričnimi metodami (Peiró in Sherwin, 2005): metodo končnih diferenc (MKD), metodo končnih volumnov (MKV) in metodo končnih elementov (MKE). Pri MSD onesnažilo ponazorimo s končnim številom delcev, katerih vsak vsebuje določeno maso in lastnosti onesnažila (Josza, 1989). Odločitev, kateri pristop uporabiti, je pogosto odvisna od raziskovalnih ciljev in raziskovalčevih preferenc.

V zadnjem desetletju prejšnjega stoletja se je izkazalo, da Eulerjevemu pristopu običajno povzroča težave numerična difuzija, ki lahko rezultate včasih naredi povsem neuporabne (Dippner, 2004), zato se je večina avtorjev pri simulacijah širjenja nafte preusmerila na uporabo Lagrangeevega pristopa sledenja delcev (Širca, 1992; Žagar, 1994; Rajar in Četina, 1997, Perkovič in sod., 2008; Coppini in sod., 2011; De Dominicis in sod., 2013; Ramšak in sod., 2013). Nekaj takih modelov je na primer: RiverSpill (Samuels in sod., 2006), GNOME (Beegle-Krause, 2001), SMIS (Camp in sod., 2010). Med njimi lahko izpostavimo model SMIS, ker v računu širjenja nafte omogoča upoštevanje največ vplivov: vpliva vetra na hidrodinamiko, izhlapevanje in biodegradacijo, hkrati pa omogoča tudi upoštevanje vpliva plavajočih pregrad na širjenje madeža. Poleg omenjenih dveh pristopov je bila uporabljena tudi metoda hidrodinamike zglajenih delcev (Violeau in sod., 2007). Po MSD se pri simulaciji advekcije in turbulentne difuzije delcev numerična difuzija v klasičnem smislu ne pojavlja.

Zelo dobro je raziskano področje razlitij nafte v morskem okolju. Vzrok temu je, da so se tam dogajale najbolj medijsko odmevne nezgode tankerjev, kot je npr. Exxon Valdez (Maki, 1991) ali naftne ploščadi Deepwater Horizon (Camilli in sod., 2010). Manj je raziskano področje odpravljanja posledic v primeru nezgode na celinskih vodah. Zanimiv je podatek, da je na območju ZDA na celinskih vodah večje število nezgod z naftnimi derivati kakor na morskih obalah (Yoshioka in Carpenter, 2002). Določene majhne razlike v obnašanju nafte glede na to, ali gre za celinsko ali morsko vodo, obstajajo (Fingas, 2004). Pojavljajo se predvsem pri emulzifikaciji, vendar podrobnosti teh procesov v okviru doktorske naloge ne bomo raziskovali.

V zadnjih letih so bile z naraščanjem hitrosti računalnikov in implementacijo MKD računskih shem tretjega reda odpravljene težave z numerično nestabilnostjo pri Eulerjevem pristopu (Tkalič, 2006a in 2006b), zato se bodo v prihodnosti tudi za simulacijo prenosa nafte zelo verjetno vse bolj uporabljali tudi modeli na podlagi Eulerjevega pristopa (Tkalič, 2006a, Heydariha in Ghiassi, 2010).

Na Fakulteti za gradbeništvo in geodezijo v Ljubljani (FGG) je bilo narejenih več modelov za simulacijo razlitja nafte v morju. Prvi uporabni MSD model pri nas je izdelal Širca (Širca, 1992). Nato je bil leta 1994 izdelan model SIMON (Žagar, 1994), ki mu je leta 1996 sledila nadgradnja z imenom Nafta. Trenutno se na FGG uporablja model NAFTA3D, ki je bil razvit v sodelovanju z Nacionalnim inštitutom za biologijo (Žagar in Četina, 2011). NAFTA3D poleg transportnih procesov, ki so posledica gibanja vode, upošteva še mehansko širjenje, izhlapevanje, vlečenje naftnega madeža zaradi vpliva vetra na gladini, na kvalitativnem nivoju pa tudi emulzifikacijo in disperzijo nafte v vodnem stolpcu.

Kakor je bilo že omenjeno, smo doslej modelirali tok tekočine po dveh osnovnih načinih: prvi je temeljil na konceptu zvezne snovi, drugi pa na konceptu diskretne snovi. Koncept zvezne snovi (lahko

ga poimenujemo »makro svet«) predpostavlja, da snov opazovanega predmeta v celoti zapolnjuje prostor, ki ga zaseda. Koncept diskretne snovi pa predpostavlja, da je snov zgrajena iz določenega števila delcev, med katerimi je prazen prostor. Na osnovi koncepta zvezne snovi so izpeljane klasične enačbe računalniške dinamike tekočin (RDT), Navier-Stokesove (NS) enačbe in advekcijsko-difuzijska enačba (AD). Diskretni prostor predstavlja svet molekul in atomov (imenovan tudi »mikro svet«), čigar lastnosti opisuje kinetična teorija plinov.

V zadnjem desetletju se je pojavila še tretja metoda, ki jo lahko smatramo za vez med mikro in makro pristopom, imenovana mrežna Boltzmannova metoda (MBM, Succi, 2001). Ta metoda je predstavnica t.i. »mezo sveta«. Osnovna ideja MBM je, da za modeliranje makro sveta ne potrebujemo podatkov položaja vsake molekule ali atoma, ampak lahko makro svet enako dobro opišemo tudi, če poznamo zgolj povprečne lastnosti določene skupine teh delcev. Lastnosti skupine delcev opišemo z metodami statistične mehanike in funkcijo gostote porazdelitve (Mohamad, 2011). Na ta način zamenjamo kompleksne nelinearne PDE drugega reda z računsko manj zahtevnimi PDE prvega reda.

Namesto sledenja vsakemu posameznemu delcu in izračuna koncentracije v računski celici iz števila in mase delcev v njej, MBM operira neposredno s porazdelitveno funkcijo teh delcev. Temeljna ideja pri tem postopku je, da je bolj učinkovito povprečiti mikro dinamiko pred simulacijo kakor po njej.

Porazdelitvena funkcija v metodi MBM predstavlja število delcev, ki se z določeno diskretno hitrostjo gibljejo po prostoru. Porazdelitvena funkcija se spremeni, ko v vozlišču delci trčijo z drugimi delci. Spreminjanje porazdelitvene funkcije lahko opišemo z dvema značilnima korakoma: propagacijo in trki. Trke modeliramo z relaksacijo proti ravnotežni porazdelitvi, kakor je običajno v kinetični teoriji.

V primerjavi z ustaljenimi Navier-Stokesovimi modeli ima MBM številne prednosti (Mohamad, 2011; Succi, 2001, Kandhai in sod., 1999):

- glavna prednost MBM je v reševanju enostavnejšega sistema enačb, ki jih lahko običajno rešujemo na časovno učinkovitejši način;
- jasnejši fizikalni pomen zaradi naravnega gibanja in trkanja diskretnih delcev;
- enostavnejše obravnavanje robnih pogojev, predvsem pri kompleksni geometriji;
- enostavnejše obravnavanje večfaznih in večkomponentnih tokov;
- enostavnejše vgrajevanje biokemijskih procesov v dinamiko tekočin;
- učinkovitejša paralelizacija za hkratni račun na več procesorjih.

Zaradi zgoraj naštetih prednosti postaja MBM v svetu vedno bolj uporabljena in priljubljena. Sukop in Thorne (2010) navajata, da število strokovnih člankov, povezanih z MBM, v literaturi narašča eksponentno. Opažata tudi, da so teme večinoma teoretične narave in se komaj v zadnjih nekaj letih selijo tudi na področje uporabe MBM na konkretnih primerih.

Čeprav je bila v začetku MBM mišljena za reševanje hidrodinamičnih problemov (Chen and Doolen, 1998), so jo kasneje prevzeli tudi za reševanje različnih transportnih problemov, kot je reakcijsko-difuzijska enačba (Dawson in sod. 1993), prenos onesnaževala (Deng in sod. 2001), prenos mase v kompleksnih geometrijah, kot so različni filtri (Sullivan in sod., 2005), prenos mase/temperature zaradi razlike v gostoti (Yoshino in Inamuro, 2003) in prenos snovi z neizotropično enačbo advekcije in difuzije (Ginzburg, 2005). MBM je bila uporabljena za simulacijo nezgode onesnaženja pri Gibraltarski ožini (Banda in sod., 2009) in simulacijo prenosa onesnaževal v plitkih vodah (Li in Huang, 2009).

Vendar pa nobeno teh del ali raziskav ni bilo posvečeno konkretnemu onesnažilu in zato nimajo povezave z nafto in njenimi lastnostmi. Edini članek, dostopen na spletu, ki je povezoval MBM in razlitje nafte, je delo Ha in sod. (2012), ki obravnava dvodimenzionalno širjenje nafte v primeru njenega odtekanja iz tankerja sredi oceana. Obravnava zgolj advekcijo in difuzijo ter pri tem ne upošteva nobenih fizikalno-kemijskih procesov ali interakcije z obalo. Prav interakcija z obalo se kasneje izkaže kot najzahtevnejši del modeliranja, saj povzroča velike razlike v koncentracijah in s tem težave s stabilnostjo modela.

Računalniško modeliranje razlitja nafte se je razvijalo v dveh smereh. Simulacije lahko izvedemo po taktičnem ali prognostičnem načinu (Žagar, 1994). Taktični način pomeni izvedbo simulacij v realnem času, ko se je razlitje že zgodilo, pri čemer uporabimo vse razpoložljive podatke dejanskega razlitja. Ker morajo biti računi čim hitrejši, je dovoljena nekoliko manjša točnost. Še posebej pri taktičnem načinu je pomembno imeti tak računalniški model, ki bo sposoben v čim krajšem času posredovati rezultate zadovoljive točnosti, da bodo lahko intervencijske ekipe s postavitvijo vodnih pregrad in vpojnih sredstev (Maslo in Fesl, 2014) omilile škodo na okolju. Pri prognostičnem načinu vnaprej izdelamo račune za najrazličnejše scenarije, ki se nam zdijo verjetni. V tem primeru lahko pripravimo bolj točne vhodne podatke, računi smejo trajati dlje, praviloma pa so tudi rezultati bolj natančni. Mnogi dolgoročni procesi so pri taktičnem načinu simulacij izpuščeni zaradi omejenega računskega časa, ki je na razpolago.

V preteklosti so številni modeli, da bi skrajšali računski čas in omogočili hitrejši odziv ekip za posredovanje, vključevali le advekcijo, disperzijo in mehansko širjenje. Taki modeli so primerni za nekajurne, kratkoročne simulacije, medtem ko bi za dolgoročne simulacije morali vsebovati še vsaj izhlapevanje in interakcijo z obalo. Upoštevanje dodatnih procesov poveča zanesljivost simulacij, vendar poveča računski čas tako metod, ki temeljijo na Eulerjevem, kakor tistih, ki delujejo na Lagrangeevem principu

Pri reševanju znanstvenih in strokovnih problemov se pogosto zgodi, da večji napredek dosežemo s korakom nazaj in rešitvijo problema s popolnoma drugačnega zornega kota in ne z nenehnim izboljševanjem iste ideje. Zato pričakujemo, da bo MBM omogočila razvoj računsko učinkovitejših modelov simuliranja razlitij nafte, primernih za taktično modeliranje brez opuščanja računsko potratnejših fizikalno-kemijskih procesov.

1.1 Hipoteza in cilji

Temeljna hipoteza, na kateri je zasnovana raziskava, je, da lahko z uporabo mrežne Boltzmannove metode učinkoviteje modeliramo prenos razlite nafte v reki kakor s sedanjimi modeli na osnovi Navier-Stokesovih enačb, bodisi po Eulerjevem ali Lagrangeovem principu, saj po metodi MBM potekajo simulacije v realnih računskih območjih nepravilnih oblik znatno hitreje.

Hipoteza temelji na dejstvu, da MBM za razliko od metod, ki temeljijo na Eulerjevih enačbah in uporabljajo kompleksne nelinearne PDE drugega reda, uporablja računsko manj zahtevne PDE prvega reda. Prednost MBM pred Lagrangeevimi metodami pa je, da ne sledi vsakemu delcu posebej, ampak uporablja porazdelitveno funkcijo za opis lastnosti večje skupine delcev.

Z namenom potrditve postavljene hipoteze sta bila v okviru raziskave zastavljena dva cilja:

1. Razviti in validirati alternativni model za simuliranje širjenja razlite nafte v reki, temelječ na mrežni Boltzmannovi metodi.
2. Primerjati učinkovitost in natančnost numeričnega mrežnega Boltzmannovega modela s preizkušeni primerljivimi modeli in dejanskimi rezultati.

1.2 Vsebina naloge

Disertacija vsebuje šest poglavij. Kratak opis posameznih poglavij navajamo za lažji pregled nad vsebino in obdelano tematiko:

V prvem poglavju opisujemo osnovne metode modeliranja razlitij nafte, zastavimo raziskovalno vprašanje, postavimo hipotezo ter opišemo namen in cilje naloge. Drugo poglavje vsebuje natančen opis teorije MBM. V tretjem poglavju so podrobno opisani procesi pri razlitju nafte in njihova vgradnja v numerični model. Četrto poglavje opisuje validacijo novega računalniškega modela MBM, ki smo ga izdelali v okviru raziskave na resničnem primeru razlitja nafte ob libanonski obali. in primerjavo rezultatov novega modela z rezultati modela Nafta3d na primeru hipotetičnega razlitja nafte na reki Savi. V petem poglavju proučujemo učinkovitost MBM s primerljivimi modeli. V šestem poglavju naredimo zaključke in podamo smernice nadaljnega razvoja.

2 TEORETIČEN OPIS MREŽNE BOLTZMANNOVE METODE

2.1 Zgodovinski izvor MBM

Matematično formalno bomo MBM izpeljali iz Boltzmannove enačbe v naslednjih poglavjih, vendar zamisel izhaja od drugod. MBM ima korenine v diskretnih računskih modelih, imenovanih celični avtomati (CA) (Wolfram, 1983). V tem poglavju se ne želimo podrobno posvečati teoriji CA, ampak le podati morda bolj intuitivno razlago modeliranja tekočin na podlagi diskretnih delcev in enakomerne mreže.

Za pionirja CA velja matematik von Neumann (1966). Avtomat je definiral kot kakršno koli napravo, katere obnašanje napreduje logično korak za korakom s kombiniranjem informacij iz okolja in lastnega programa. Govoril je o samo-razmnožujočih napravah, ki bi lahko s sledenjem ukazov, ki so del same naprave, ustvarile identično napravo. Poleg tega pa naj bi naravni organizmi sledili podobnim, enostavnim pravilom.

Osnovna ideja CA ni opisovati kompleksen sistem s kompleksnimi enačbami, temveč prepustiti, da se kompleksnost razvije kot posledica interakcije enostavnih posameznikov, ki sledijo enostavnim pravilom.

CA sestavlja urejena prostorska mreža diskretnega števila celic, pri čemer je vsaka od celic lahko v enem od končnih števil stanj. Tudi čas je diskreten in stanje celice v naslednjem časovnem koraku je funkcija stanja sosednjih celic v predhodnem časovnem koraku. Vsaka celica sledi enakemu enostavnemu pravilu za posodobitev svojega stanja. Ko se posodobijo vse celice v mreži, nastane nova generacija celic.

Ena od vrst celičnih avtomatov so tudi mrežni plinski celični avtomati (MPCA) (Wolf-Gladrow, 2005), s katerimi so želeli simulirati obnašanje dinamike velikega števila delcev v plinu na čim enostavnejši način. Plin se tako modelira z večjim številom delcev, ki se gibljejo po enakomerni mreži z diskretnim številom možnih hitrosti za vsak delec. Trki med delci so obravnavani z elastičnimi trknimi pravili, ki morajo zagotoviti ohranjanje mase in gibalne količine. MPCA lahko primerjamo z biljardno mizo, na kateri so vse krogle enake, gibljejo pa se lahko le po vezeh enakomerne mreže in sledijo trknim pravilom.

Stanje v celici (\vec{x}, t) MPCA določa logična spremenljivka $n_i(\vec{x}, t)$, ki ima vrednost 1, če se delec s hitrostjo $\vec{\xi}_i$ nahaja na koordinati \vec{x} , in vrednost 0, če delca tam ni. V primeru, da ne upoštevamo trkov med delci, se bo v vsakem časovnem koraku delec s hitrostjo $\vec{\xi}_i$ premaknil na naslednje vozlišče, ki je natanko za $\vec{\xi}_i \Delta t$ oddaljeno od prejšnjega vozlišča (2.1) in pri tem ohranil svojo hitrost $\vec{\xi}_i$. Pomembna podrobnost MPCA je, da v izogib dodatnim numeričnim napakam uporabljajo brezdimenzijske enote, definirane tako, da sta enotski časovni korak $\Delta t = 1$ in enotska velikost stranice računske mreže $\Delta x = 1$ (Wolf-Gladrow, 2005).

$$n_i(\vec{x} + \vec{\xi}_i, t + 1) = n_i(\vec{x}, t) \quad (2.1)$$

Upoštevanje trkov nam omogoča uvedba trknega operatorja $\Omega_i(\vec{x}, t)$, ki ima lahko tri vrednosti: 1, 0 in -1. Vrednost 0 ima v primeru, da do trka ni prišlo, vrednosti +1 in -1 pa pomenita, da je do trka prišlo, pri čemer predznak določa, v katero smer je odbilo delec.

$$n_i(\vec{x} + \vec{\xi}_i, t + 1) - n_i(\vec{x}, t) = \Omega_i(\vec{x}, t) \quad (2.2)$$

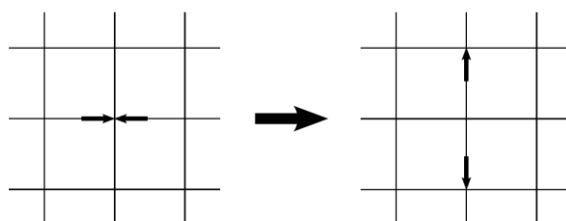
Gostota ρ v vozlišču s koordinato \vec{x} se izračuna z vsoto vseh delcev v tem vozlišču.

$$\rho(\vec{x}, t) = \sum_i n_i(\vec{x}, t) \quad (2.3)$$

Na podoben način lahko enostavno izračunamo tudi hitrost \vec{u} v posameznemu vozlišču:

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \frac{\sum_i n_i(\vec{x}, t) \vec{\xi}_i}{\rho(\vec{x}, t)} \quad (2.4)$$

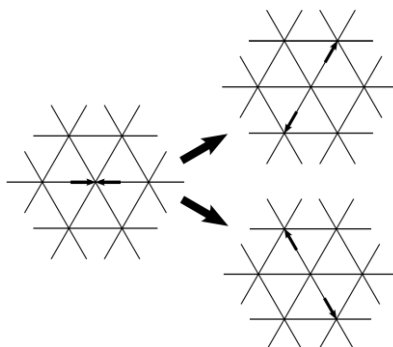
Prvi MPCA, ki je lahko dokaj uspešno simuliral obnašanje plinov, je bil HPP model, imenovan po Hardy, Pomeau in de Pazzis (Hardy in sod., 1973). HPP ima zelo enostavno kvadratno mrežo (slika 2.1), po kateri se delci lahko gibljejo le v pravokotnih smereh. Ena izmed glavnih slabosti HPP modela je odvisnost rezultatov od rotacije izbrane mreže. Na območju enakomerno porazdeljenih delcev po prostoru in večje koncentracije delcev v sredini se bodo npr. delci začeli širiti v obliki diamanta in ne v obliki kroga (Chopard in Droz, 1998). Druga pomembna slabost je tudi, da sistem zaradi svojega mikroskopskega obnašanja nikoli ne doseže ravnotežnega stanja. Tej pomanjkljivosti pravimo tudi statistični šum.



Slika 2.1: Prikaz HPP mreže in razporeditve delcev v HPP modelu po trku

Figure 2.1: The HPP lattice and distribution of particles after collision

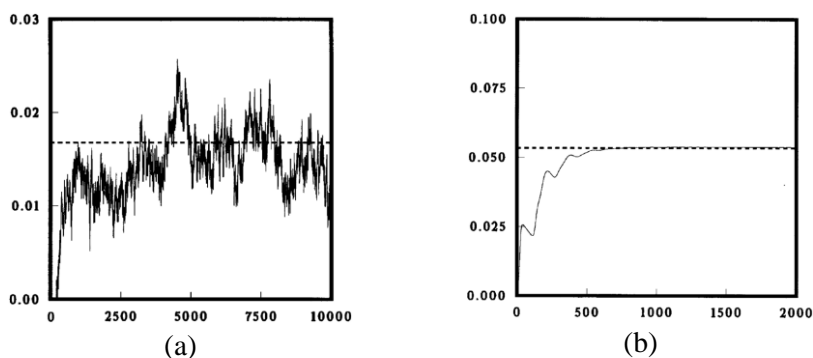
MPCA model, ki je želel odpraviti rotacijsko odvisnost rezultatov HPP modela, je bil FHP model, imenovan po Frisch, Hasslacher in Pomeau (Frisch in sod., 1986). FHP model je v bistvu HPP model s šestkotno mrežo (slika 2.2).



Slika 2.2: Prikaz šesterokotne FHP mreže in enako verjetnih porazdelitev delcev po čelnem trku

Figure 2.2: The FHP hexagonal lattice and collision of particles with two equivalent outcomes

Tudi FHP model ima svoje pomanjkljivosti; zaradi šestkotne mreže je njegova razširitev v tri dimenzije zelo zahtevna in se izvede z uvedbo četrte, navidezne dimenzije, kar pa naredi izračun zelo kompleksen. Wolfram (1986) je FHP model obsežno analiziral in dokazal, da je s povprečenjem logičnih spremenljivk po času in prostoru iz tega modela mogoče izpeljati NS enačbe. Tudi v FHP modelu ostane problem s statističnim šumom (slika 2.3a). S povprečenjem rezultatov po času in prostoru je mogoče posledice zglj omiliti, nikoli pa jih ne moremo povsem odpraviti.



Slika 2.3: Primerjava povprečnih pretokov ravninskega laminarnega toka med dvema ploščama - Poiseuillovega toka z FHP (a) in MBM (b) v različnem številu iteracij. Črtna črta predstavlja analitično rešitev (Bernsdorf, 2008)

Figure 2.3: Mean flow rate of plane Poiseuille flow vs. iteration number for FHP (a) and MBM (b). The dashed lines indicate the theoretical value (Bernsdorf, 2008)

Za zmanjševanje statističnega šuma je bilo potrebno rezultate MPCA pogosto povprečiti po času in prostoru, kar pa je pomenilo naraščanje računskega časa. Prvi MBM model je nastal, ko so McNamara in Zanetti (1988) ter približno ob istem času še Higuera in Jimenez (1989) prišli do ideje, da lahko v enačbi (2.2) namesto z logičnimi spremenljivkami n_i operiramo direktno z njihovimi povprečnimi vrednostnimi f_i in se tako izognemo potrebi po povprečenju rezultatov. Kasneje sta He in Luo (1997) dokazala, da za izpeljavo MBM ne potrebujemo več MPCA, ampak jo lahko izpeljemo neposredno z diskretizacijo Boltzmannove enačbe.

2.2 Kinetična teorija plinov

Za razumevanje MBM potrebujemo znanje iz statistične matematike, statistične mehanike, kemije in hidrodinamike, zato tukaj razložimo tudi nekaj osnov z omenjenih področij. Z vprašanjem povezave obnašanja trdnih snovi, tekočin in plinov z gibanjem delcev, iz katerih so te snovi zgrajene, se ukvarja kinetična teorija plinov (Liboff, 2003).

2.2.1 Idealni plini

Idealni plin je hipotetičen plin, ki se obnaša na "idealno" način in se natanko ravna po plinski enačbi (2.5). Njegove molekule nimajo prostornine, se ne privlačijo, se hitro gibajo v ravnih črtah in ne izgubljajo energije pri medsebojnih trkih. Realni plini se pri normalnem tlaku in temperaturi obnašajo približno enako kot idealni plini, tako da lahko z lastnostmi idealnih plinov opišemo tudi realne pline (Liboff, 2003). Razlika med realnimi in idealnimi plini je tem manjša, čim višja je temperatura in čim nižji je tlak ter čim manjše in čim bolj oddaljene so molekule.

Splošna plinska enačba idealnega plina (Kladnik, 1985):

$$p = \frac{Nk_B T}{V} = \frac{k_B T N \cdot m_d}{\underbrace{m_d}_{\theta} \underbrace{V}_{\rho}} \Rightarrow \quad (2.5)$$

$$p = \theta \rho$$

Pomen oznak:

N	število delcev [/]
k_B	Boltzmannova konstanta [$1,38 \cdot 10^{-23} \text{J/K}$]
T	absolutna temperatura [$^{\circ}\text{K}$]
V	volumen [m^3]
m_d	masa delca [kg]
ρ	gostota [kg/m^3]
θ	$\frac{k_B T}{m_d}$ [J/kg]
p	tlak [N/m^2]

V izpeljavah bomo pogosto uporabljali izraz $p = \theta \rho$ iz enačbe (2.5), ki predstavlja most med fiziko makroskopskega in mikroskopskega sveta.

Hitrost zvoka v idealnem plinu

Hitrost širjenja zvoka c_s v notranjosti snovi je definirana z izrazom $c_s^2 = \frac{1}{\rho \chi}$, kjer sorazmernostno konstanto χ imenujemo stisljivost snovi (Kladnik, 1996). Opazimo, da v gre limitnem primeru, ko gre stisljivost snovi proti nič $\chi \rightarrow 0$, hitrost zvoka proti neskončnosti $c_s \rightarrow \infty$. Za stisljivost idealnega plina pri konstantni temperaturi velja $\chi = \frac{1}{p}$ (Kladnik, 1985).

Potemtakem dobimo, da se zvok pri idealnem plinu pri konstantni temperaturi širi s hitrostjo:

$$c_s^2 = \frac{p}{\rho} \quad (2.6)$$

Ob upoštevanju enačbe (2.5) dobimo spodnji izraz, ki ga bomo še uporabljali v nadaljnjih izpeljavah:

$$c_s^2 = \theta \quad (2.7)$$

Viskoznost idealnega plina

Strižna viskoznost tekočin je definirana kot fizikalna količina, ki podaja odziv tekočine na strižno deformacijo. Določena je kot razmerje med strižno napetostjo in strižno hitrostjo in podaja notranje trenje tekočin (Rajar, 1997).

V NS enačbah se pojavlja tudi pojem sekundarne oziroma prostorninske viskoznosti, ta pa podaja razmerje med nehidrostatičnimi-deviatoričnimi tlačnimi napetostmi in tlačnimi deformacijami. Običajno se upošteva približek, da je prostorninska viskoznost 2/3 vrednosti strižne viskoznosti (Batchelor, 2000).

Morda si je težko predstavljati, da imajo idealni plini viskoznost, ker smo viskoznost definirali kot notranje trenje tekočine, za idealne pline pa velja, da so trki elastični brez izgube energije. Zato si je pri idealnih plinih potrebno viskoznost μ (2.8) predstavljati kot molekularno mešanje – difuzijo gibalne količine. Ko opazujemo dva sloja tekočine z različnimi hitrostmi, ugotovimo, da zaradi notranjega trenja po določenem času izenačita hitrost. Če isti pojav opazujemo na molekularnem nivoju, vidimo, da je se je preko trkov in z gibanjem molekul gibalna količina sistema porazdelila med oba sloja (Liboff, 2003).

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{1}{3} \rho \bar{v} \lambda \Rightarrow \\ \lambda &= 3 \frac{\mu}{\rho \bar{v}} \end{aligned} \quad (2.8)$$

S simbolom \bar{v} v enačbi (2.8) označujemo povprečno hitrost molekul idealnega plina (Kladnik, 1985), predstavlja koren povprečne vrednosti kvadratov RMS (angl. Root Mean Square) vseh hitrosti molekul v plinu. Z grško črko λ označujemo povprečno prosto pot, to je aritmetično povprečje vseh prostih poti. Prosta pot je definirana kot razdalja, ki jo molekula preteče med sosednjima trkoma (Kladnik, 1985). Povprečna prosta pot je odvisna od velikosti molekul in njihove gostote. Čim večje so molekule in čim več jih je v nekem prostoru, več bo trkov in manjša bo povprečna prosta pot.

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m_d}} \quad (2.9)$$

V povezavi s povprečno prosto potjo λ želimo omeniti še Knudsenovo število $Kn = \frac{\lambda}{L}$, kjer L predstavlja karakteristično dolžino sistema. V primeru majhnega Knudsenovega števila ($Kn < 0,001$) (Rathakrishnan, 2004) lahko plin obravnavamo kot zvezno snov in njegovo gibanje modeliramo s klasičnimi enačbami dinamike tekočin, kot so NS enačbe. Pri večjih Knudsenovih številih so razdalje

med posameznimi trki molekul že tako velike, da za opis obnašanja takega plina potrebujemo mikroskopski pristop, pri katerem upoštevamo vpliv skupine ali posamezne molekule. Povprečna razdalja med trki molekul npr. v vodiku, ki se nahaja med plinasto in kapljevino fazo snovi, znaša le $\lambda = 10^{-7}$ cm, medtem ko v vesolju naraste na $\lambda = 10^{15}$ cm (Huang, 1987).

Povprečno trajanje proste poti imenujemo trkni čas τ , ki je podan z naslednjim izrazom (Carey, 1999):

$$\tau = \frac{\lambda}{\bar{v}} \quad (2.10)$$

Povprečen čas med molekulskimi trki imenujemo tudi čas relaksacije. To izhaja iz dejstva, da trki med delci "relaksirajo" porazdelitveno funkcijo proti ravnotežni porazdelitvi (Bhatnagar, 1954). To poimenovanje formalno ni pravilno, ker je čas relaksacije skupni čas, ki ga sistem potrebuje, da doseže ravnotežje. Povprečen trkni čas in čas relaksacije sta okvirno istega velikostnega reda, ker je potrebnih le nekaj trkov, da plin preide iz neravnotežnega v ravnotežno stanje. Zato pri takem poimenovanju ne delamo večje napake. Na primer čas relaksacije molekul v vodiku, ki se nahaja med plinasto in kapljevino fazo snovi, znaša le $\tau = 10^{-11}$ s, (Huang, 1987).

Čas relaksacije, zapisan v makroskopskih količinah:

$$\tau = \frac{\lambda}{\bar{v}} = 3 \frac{\mu}{\rho \bar{v}^2} = 3 \frac{\mu m_d}{\rho 3 k_B T} = \frac{\mu m_d}{\rho \underbrace{k_B T}_{\theta^{-1}}} = \frac{\mu}{\rho \theta} = \frac{\mu}{p} \quad (2.11)$$

Pri idealnih plinih je pomembno definirati tudi pojem notranje energije W_n . Plini so sestavljeni iz molekul, ki se termično gibljejo ter delujejo druga na drugo s silo kratkega dosega. Notranja energija snovi je tako sestavljena iz kinetične energije termično gibajočih se molekul, potencialne energije zaradi sil med molekulami in notranje energije posameznih molekul. Ker sta zadnja dva člena majhna, pogosto ne naredimo prevelike napake, če za izračun notranje energije uporabimo le kinetično energijo molekul. Pri idealnem plinu imajo vse molekule N enako povprečno kinetično energijo $Dim/2 k_B T$. Pri tem smo z Dim označili dimenzijo prostora. Celotna notranja energija molekul je torej enaka (Liboff, 2003):

$$W_n = N \frac{Dim}{2} k_B T \quad (2.12)$$

Enačbo (2.12) pomnožimo z $\frac{m_d}{m_d V}$ in dobimo izraz za gostoto notranje energije (2.13), kjer z ϵ označimo specifično notranjo energijo.

$$\rho \epsilon = \frac{W_n}{V} = \frac{Dim}{2} \rho \frac{k_B T}{\underbrace{m_d}_{\theta}} = \frac{Dim}{2} \rho \theta \quad (2.13)$$

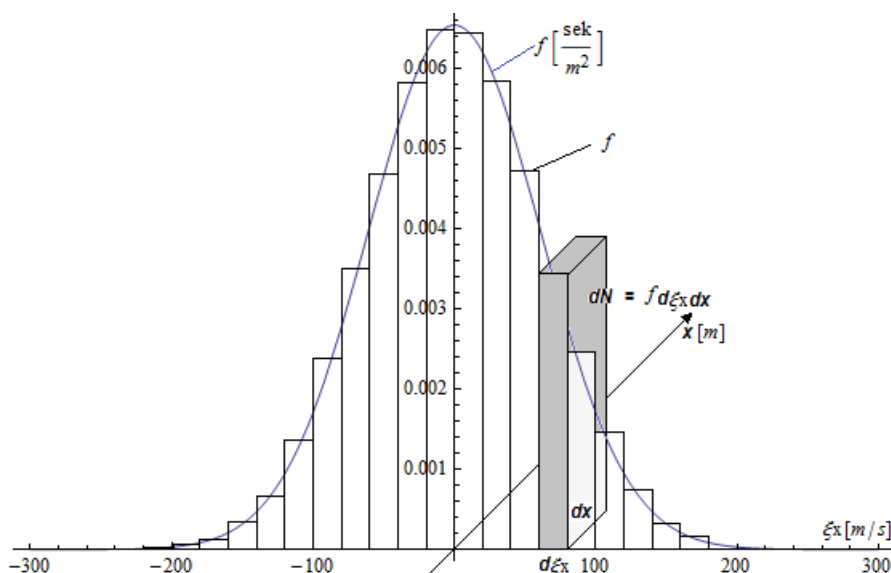
2.2.2 Porazdelitvena funkcija

Vsa teorija Boltzmannove enačbe temelji na porazdelitveni funkciji, zato je pomembno, da jo natančno razumemo in definiramo. Zanima nas, kako so molekule porazdeljene po prostoru in po

hitrostih, torej koliko molekul se giblje z eno hitrostjo, koliko z drugo, katere molekule v plinu so najmočnejše zastopane in podobno. Napraviti moramo statistiko množice molekul (Kladnik, 1985).

Statistični opis sistema delcev lahko pojasnimo s porazdelitveno funkcijo $f = f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$, kjer $dN = f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) dx dy dz d\xi_x d\xi_y d\xi_z$ pove število molekul ali delcev znotraj kvadra s koordinatnimi mejami: od x do $x + dx$, od y do $y + dy$ in od z do $z + dz$ ter s hitrostmi delcev: od ξ_x do $\xi_x + d\xi_x$, od ξ_y do $\xi_y + d\xi_y$ in od ξ_z do $\xi_z + d\xi_z$ (Succi, 2001).

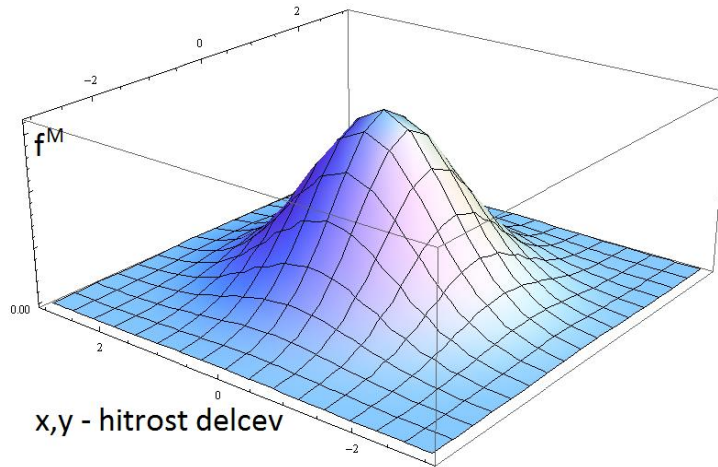
Za enodimenzionalni primer, ko so hitrosti delcev $\xi_y = \xi_z \approx 0$, porazdelitveno funkcijo izračunamo tako, da celoten razpon možnih hitrost molekul (od nič do neskončnosti) razdelimo na enake intervale $d\xi_x$. Število molekul, katerih hitrost je med ξ_x in $\xi_x + d\xi_x$ in se nahajajo med x in $x+dx$, označimo z $dN = f(x, \xi, t) d\xi_x dx$. To število vnesemo v histogram kot volumen stolpca nad izbranim intervalom $d\xi_x$. Višino stolpca označimo z $f(x, \xi, t) = \frac{dN}{d\xi_x dx}$ (slika 2.4).



Slika 2.4: Enodimenzionalni statistični opis sistema delcev s porazdelitveno funkcijo

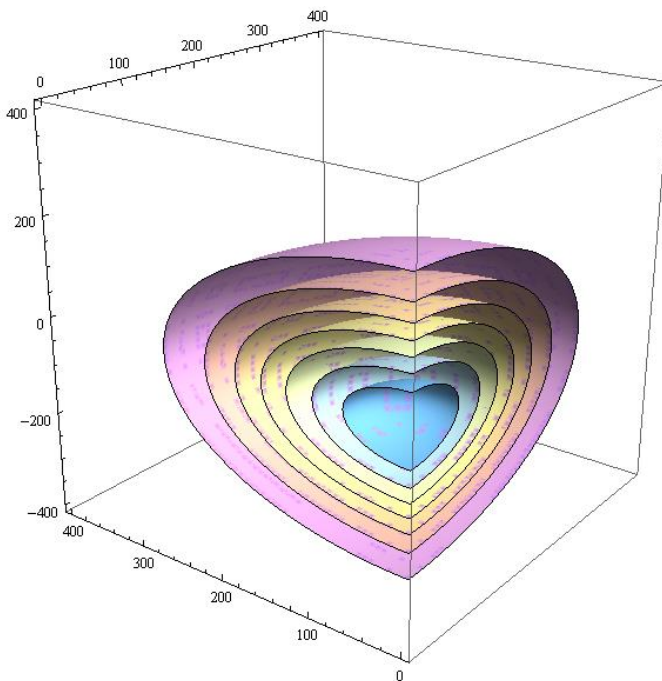
Figure 2.4: One-dimensional (1-D) statistical description of a system of particles with the distribution function

Podobno za dvodimenzionalni primer dobimo: $dN = f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \underbrace{d\xi_x d\xi_y}_{d\vec{\xi}} \underbrace{dx dy}_{dS} = f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi} dS$.



Slika 2.5: Prikaz dvodimenzionalne ravnotežne-Maxwellove porazdelitve
Figure 2.5: Two-dimensional (2-D) equilibrium-Maxwell distribution function

Po enakem principu dobimo za tridimenzionalni primer: $dN = f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \underbrace{d\xi_x d\xi_y d\xi_z}_{d\vec{\xi}} \underbrace{dxdydz}_{dV} = f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi} dV.$



Slika 2.6: Prikaz izseka tridimenzionalne ravnotežne-Maxwellove porazdelitve
Figure 2.6: Section of three-dimensional (3-D) equilibrium-Maxwell distribution function

Z integriranjem porazdelitvene funkcije po vseh možnih hitrostih delcev, pridemo do makroskopskih količin: gostote (2.14), kinetične energije (2.15) in gostote notranje energije (2.16). Pri tem smo z η označili gostoto delcev.

$$\rho(\vec{x}, t) = m_d \iiint_{-\infty}^{\infty} \frac{f(\vec{x}, \vec{v}, t) dx_x dy_y dz_z d\xi_x d\xi_y d\xi_z}{dx_x dy_y dz_z} \rightarrow$$

$$\rho = m_d \int_{-\infty}^{\infty} f d\xi \text{ ali } \eta = \int_{-\infty}^{\infty} f d\xi \quad (2.14)$$

$$\rho \vec{u} = m_d \int_{-\infty}^{\infty} \vec{\xi} f d\xi \text{ ali } \eta \vec{u} = \int_{-\infty}^{\infty} \vec{\xi} f d\xi$$

$$\rightarrow \vec{u} = \frac{m_d \int_{-\infty}^{\infty} \vec{\xi} f d\xi}{\rho} \quad (2.15)$$

$$\rho \epsilon = m_d \int_{-\infty}^{\infty} (\vec{\xi} - \vec{u})^2 f d\xi \text{ ali } \eta \epsilon = \int_{-\infty}^{\infty} (\vec{\xi} - \vec{u})^2 f d\xi \quad (2.16)$$

Zelo pomembno je definirati tudi Maxwellovo porazdelitev (2.17), to je porazdelitev, proti kateri s časom limitirajo vsi idealni plini. Maxwellovo porazdelitev (slika 2.5 in 2.6) bomo imenovali tudi ravnotežna porazdelitev (Sukop, 2005 in Stensholt, 2010).

$$f^M = \eta \left(\frac{m_d}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{Dim}{2}} e^{-\frac{m_d(\vec{\xi} - \vec{u})^2}{2k_B T}} \quad (2.17)$$

Pomen oznak:

f^M	Maxwellova porazdelitvena funkcija $\left[\frac{\text{št. delcev}}{m^3 \left(\frac{m}{s}\right)^{Dim}} \right]$
η	gostota delcev [št delcev/m ³]
m_d	masa delca [kg]
k_B	Boltzmannova konstanta [1,38·10 ⁻²³ J/K]
T	absolutna temperatura [K]
Dim	dimenzija prostora
$\vec{\xi}$	hitrost delcev, molekul [m/s]
\vec{u}	poprečna hitrost delcev-makroskopska hitrost [m/s]

V literaturi se pogosto pojavlja pojem moment reda n porazdelitvene funkcije (2.18). To poimenovanje izhaja iz statistične analogije z momenti slučajne spremenljivke (Bronštejn in sod., 1997).

Moment n . reda:

$$\mu_n = \int_{-\infty}^{\infty} \vec{\xi}^n f d\xi \quad (2.18)$$

Moment 0. reda predstavlja gostoto delcev:

$$\mu_0 = \int_{-\infty}^{\infty} 1 f d\xi = \eta \quad (2.19)$$

Moment 1. reda predstavlja gibalno količino

$$\mu_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \vec{\xi} f d\xi = \eta \vec{u} \quad (2.20)$$

Moment 2. reda predstavlja zvezo z gostoto notranje energije

$$\frac{\mu_2}{2} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (\vec{\xi} - \vec{u})^2 f d\xi = \eta \epsilon \quad (2.21)$$

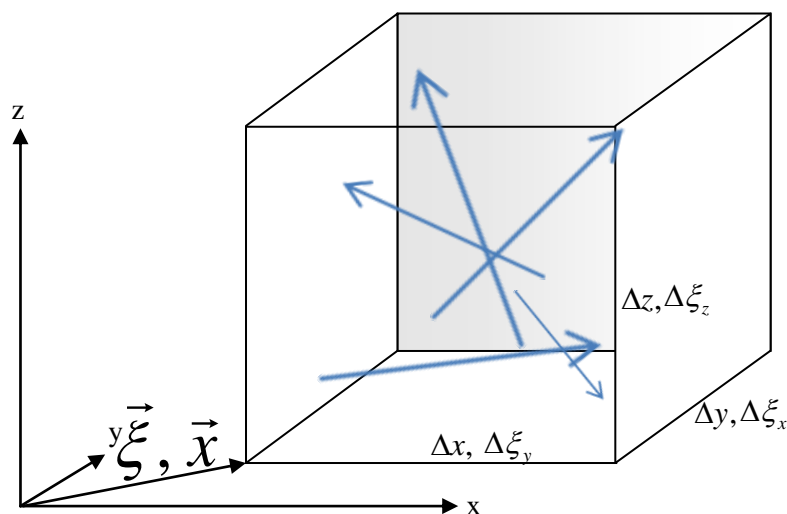
2.2.3 Boltzmannova enačba

Boltzmannova enačba se uporablja za opis spreminjanja porazdelitvene funkcije molekul močno razredčenega plina. Ker je plin močno razredčen, molekule prepotujejo daljše razdalje, preden trčijo v drugo molekulo (Liboff, 2003).

Trenutno stanje dinamičnega sistema opišemo z vrednostmi fizikalnih spremenljivk. V primeru gibanja delca so te spremenljivke koordinate in hitrosti delca. Prostor, v katerem vsaka točka natanko določa stanje sistema, imenujemo fazni prostor. Tako za stanje molekule v plinu potrebujemo šestdimenzionalen fazni prostor, ker imamo tri prostorske koordinate in tri koordinate hitrosti.

Boltzmannova enačba je v knjigah kinetične teorije (Liboff, 2003 in Huang 1987) izpeljana na zapleten način, zato je bila naša želja izpeljati Boltzmannovo enačbo na čim bolj predstavljiv, fizikalen način, po zgledu izpeljave kontinuitetne enačbe v NS enačbah. Kontinuiteta enačba je izpeljana s pomočjo kontrolnega volumna (KV), v katerem se sprememba mase znotraj KV določi kot neto pretok mase skozi njegovo površino. Edina težava pri uporabi enakega postopka tudi pri izpeljavi Boltzmannove enačbe je, da je porazdelitvena funkcija del šestdimenzijskega faznega prostora.

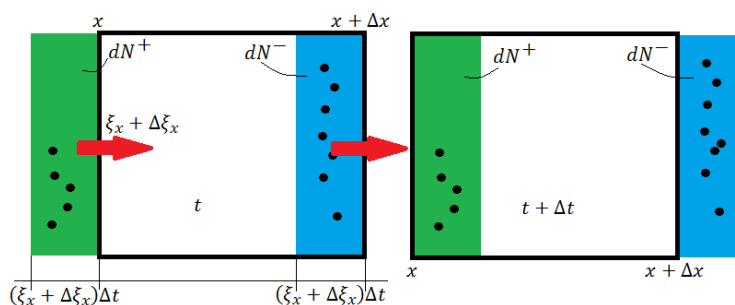
V literaturi nismo našli nobenega primera grafične upodobitve šestdimenzijskega faznega prostora, zato smo si ga zamislili sami. Šestdimenzijski fazni prostor lahko prikažemo s prekrivajočima koordinatnima sistemoma prostora in hitrosti, v katerem delce ponazorimo z vektorji. Vsak vektor v KV predstavlja en delec, začetna točka vektorja predstavlja krajevne prostorske koordinate \vec{x} , končna točka pa njegove koordinate v hitrostnem prostoru $\vec{\xi}$. Merili koordinatnih sistemov se v splošnem razlikujeta in si jih izberemo tako, da se KV prostora in KV hitrosti prekrivata (slika 2.7).



Slika 2.7: Prikaz šestdimenzionalnega KV
 Figure 2.7: Six-dimensional (6-D) control volume

Na povečanje in zmanjšanje števila delcev znotraj KV lahko vpliva več dejavnikov:

- pretok delcev skozi stene KV (slika 2.8);
- vpliv sil na hitrost delcev, kar jim spremeni hitrost ter lahko tako padejo izven KV hitrosti (slika 2.9);
- trkanje delcev med seboj, kar jim spremeni hitrost ter lahko tako skočijo iz KV hitrosti in prostora;
- izvori in ponori delcev.



Slika 2.8: Pretok delcev skozi stene KV v dveh časovnih intervalih
 Figure 2.8: The flow of particles through the walls of the control volume in two time steps

Iz slike (2.8) in definicije porazdelitvene funkcije (poglavje 2.2.2) lahko dobimo izraz, da je število delcev dN^+ , ki vstopi v KV na mestu x v časovnem koraku Δt , za enodimenzionalni primer enako:

$$dN^+ = f(x - (\xi_x + \Delta\xi_x)\Delta t, \xi_x, t)\Delta\xi_x(\xi_x + \Delta\xi_x)\Delta t \quad (2.22)$$

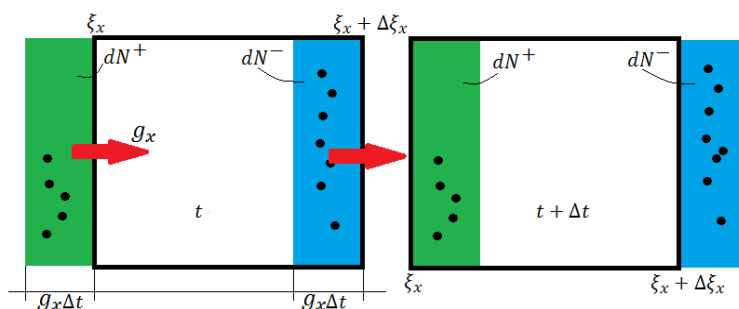
In število delcev, ki na mestu $x + \Delta x$, ki zapusti KV enako dN^- :

$$dN^- = f(x + \Delta x - (\xi_x + \Delta\xi_x)\Delta t, \xi_x, t)\Delta\xi_x(\xi_x + \Delta\xi_x)\Delta t \quad (2.23)$$

Sile \vec{F} povzročijo, da se delcu spremeni hitrost s pospeškom \vec{a} :

$$\vec{\xi}(t + dt) = \vec{\xi}(t) + \vec{g}dt = \vec{\xi}(t) + \frac{\vec{F}}{m_d} dt \quad (2.24)$$

Ta pospešek lahko toliko spremeni hitrost delcev na robu KV hitrosti (slika 2.9), da ti začnejo vstopati/izstopati iz samega volumna.



Slika 2.9: Pretok delcev skozi stene KV hitrosti delcev v dveh časovnih intervalih

Figure 2.9: The flow of particles through the walls of the particle velocity control volume in two time steps

Število delcev dN^+ , ki se jim bo zaradi pospeška g_x toliko povečala hitrost, da bodo vstopili v KV hitrosti, je za enodimenzionalni primer enako:

$$dN^+ = f(x, \xi_x - g_x \Delta t, t) g_x \Delta t \Delta x \quad (2.25)$$

S podobnim sklepanjem bi prišli tudi do števila delcev dN^- , ki zapusti KV hitrosti:

$$dN^- = f(x, \xi_x + \Delta \xi_x - g_x \Delta t, t) g_x \Delta t \Delta x \quad (2.26)$$

Delci pritekajo/odtekajo v KV tudi z izvornim/ponornim členom $S(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \Delta x \Delta \xi_x$ [št. delcev/sek]. Sprememba števila delcev dN v časovnem koraku Δt zaradi izvora ali ponora je:

$$\int_t^{t+\Delta t} S(\vec{x}, \vec{\xi}, t) dt \Delta x \Delta \xi_x = \bar{S}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \Delta t \Delta x \Delta \xi_x \quad (2.27)$$

Skupni neto pretok delcev skozi stene KV prostora in hitrosti za enodimenzionalni primer povzamemo v enačbi (2.28). Prehod na več dimenzij je z upoštevanjem definicije porazdelitvene funkcije (poglavje 2.2.2) trivialen.

$[f(x, \xi_x, t + \Delta t) - f(x, \xi_x, t)]\Delta x \Delta \xi_x =$	Sprememba števila delcev v KV (2.28)
$= [f(x - (\xi_x + \Delta \xi_x)\Delta t, \xi_x, t) - f(x + \Delta x - (\xi_x + \Delta \xi_x)\Delta t, \xi_x, t)]\Delta \xi_x (\xi_x + \Delta \xi_x)\Delta t$	neto sprememba števila delcev znotraj KV, zaradi prehajanja delcev skozi stene KV
$+ [f(x, \xi_x - g_x \Delta t, t) - f(x, \xi_x + \Delta \xi_x - g_x \Delta t, t)]g_x \Delta t \Delta x$	neto pretok delcev skozi stene KV hitrosti delcev zaradi vpliva sil
$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{trkov}$	sprememba števila molekul znotraj KV zaradi vpliva medsebojnih trkov
$+ \bar{S}(x, \xi_x, t)\Delta x \Delta \xi_x \Delta t$	sprememba števila delcev znotraj KV zaradi izvira/ponora delcev

Če enačbo (2.28) delimo z $\Delta \xi_x \Delta x \Delta t$ oziroma $\Delta \xi_x \Delta \xi_y \Delta \xi_z \Delta t \Delta x \Delta y \Delta z$ za tridimenzionalen primer in upoštevamo mejni primer, ko gredo dimenzije elementarnega volumna $\Delta \xi_x, \Delta \xi_y, \Delta \xi_z, \Delta x, \Delta y, \Delta z$ in sprememba časa Δt proti nič, dobimo Boltzmannovo enačbo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)}{\partial t} &= -\xi_x \frac{\partial f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)}{\partial x} - \xi_y \frac{\partial f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)}{\partial y} - \xi_z \frac{\partial f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)}{\partial z} - g_x \frac{\partial f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)}{\partial \xi_x} \\ &\quad - g_y \frac{\partial f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)}{\partial \xi_y} - g_z \frac{\partial f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)}{\partial \xi_z} + S(\vec{x}, \vec{\xi}, t) + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{trkov} \end{aligned} \quad (2.29)$$

$$\frac{\partial f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)}{\partial t} = -\vec{\xi} \nabla f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) - \vec{g} \nabla_{\xi} f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) + S(\vec{x}, \vec{\xi}, t) + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{trkov}$$

Člena $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{trkov}$, ki ponazarja vpliv trkov na porazdelitveno funkcijo, tukaj namenoma nismo izpeljevali zaradi dolgotrajnosti postopka in ker Boltzmannove enačbe ne bomo uporabili v osnovni, temveč v poenostavljeni obliki. V kolikor bi bralca izpeljava zanimala, priporočamo delo Liboffa (2003) ali delo Saint-Raymonda (2009).

Člen $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{trkov}$, ki ponazarja vpliv trkov, je bil izpeljan (Liboff, 2003) ob naslednjih predpostavkah:

- zaradi velike razredčenosti plina je zelo majhna verjetnost, da bo prišlo do hkratnega trka treh ali več delcev, zato se upoštevajo le trki dveh delcev naenkrat;
- vpliv sten je zanemaren;
- vpliv zunanjih sil na trke je zanemaren;
- predpostavka molekularnega kaosa, hitrosti in lokacije delcev so neodvisne med seboj.

Ob upoštevanju pravkar navedenih predpostavk pridemo do osnovnega zapisa Boltzmannove enačbe (Liboff, 2003):

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla} + \vec{g} \cdot \vec{\nabla}_{\xi}\right) f = \int (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) |\vec{v}_r| b(\vec{v}_r, \alpha) d\alpha d\xi_2 \quad (2.30)$$

Pomen oznak:

f_1, f_2	porazdelitveni funkciji delca 1 in 2 pred trkom
f'_1, f'_2	porazdelitveni funkciji delca 1 in 2 po trku
$\vec{\xi}_1, \vec{\xi}_2$	hitrosti delca 1 in 2
$\vec{v}_r = \vec{\xi}_1 - \vec{\xi}_2$	relativna hitrost med delci
α	kot trka med delcema
$b(\vec{v}_r, \alpha)$	parameter vpliva relativne hitrosti in kota na trk delcev (Stensholt, 2010)

2.2.4 Poenostavljena Boltzmannova enačba

Osnovna Boltzmannova enačba je za računalniško uporabo neprimerna, ker ima zelo kompleksen trkni operator. Bhatnagar, Gross in Krook (BGK) (1954) so s poenostavitvijo – linearizacijo trknega operatorja naredili Boltzmannovo enačbo primerno tudi za uporabo v modeliranju toka tekočin.

Porazdelitveno funkcijo lahko zapišemo kot vsoto ravnotežne – Maxwelllove porazdelitve $f^{(0)}$ in njenega odstopanja od ravnotežja $f^{(1)}$:

$$f = f^{(0)} + f^{(1)} \quad (2.31)$$

Bhatnagar, Gross in Krook so predpostavili, da je porazdelitvena funkcija f zelo blizu Maxwelllove ravnotežne porazdelitve $f^{(0)}$ (Stensholt, 2010 in Liboff, 2003), tako da velja:

$$f^{(1)} \ll f^{(0)} \quad (2.32)$$

Ob zgornji predpostavki so uvedli tako imenovano Boltzmannovo BGK (BBGK) enačbo, ki jo zapišemo kot:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla} + \vec{g} \cdot \vec{\nabla}_{\xi}\right) f = \underbrace{-\frac{1}{\tau}(f - f^{(0)})}_{\text{Trkni operator}} \quad (2.33)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla} f + \underbrace{\vec{g} \cdot \vec{\nabla}_{\xi} f}_F &= -\frac{1}{\tau}(f - f^{(0)}) \\ \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla} f + F &= -\frac{1}{\tau}(f - f^{(0)}) \\ F &= \vec{g} \cdot \vec{\nabla}_{\xi} f \end{aligned} \quad (2.34)$$

Pomen oznak:

τ	relaksacijski čas – predstavlja povprečen čas, ki ga potrebuje sistem, da preko trkov preide v ravnotežno stanje
$\vec{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$	operator nabra
\vec{g}	vektorsko polje sil, ki delujejo na delce
f	porazdelitvena funkcija
$f^{(0)}$	ravnotežna porazdelitvena funkcija
F	člen vpliva sil na porazdelitveno funkcijo

- **Značilnosti trknega operatorja**

Značilnosti trknega operatorja zajemajo izrazi (2.35) do (2.38). Ne bomo jih posebej izpeljevali, ker je njihov pomen precej jasen, celotno izpeljavo pa podaja Huang (1987) v svoji knjigi.

$$0 = \int_{-\infty}^{\infty} (f - f^{(0)}) d\xi \quad (2.35)$$

$$0 = \int_{-\infty}^{\infty} \vec{\xi} (f - f^{(0)}) d\xi \quad (2.36)$$

$$0 = \int_{-\infty}^{\infty} (\vec{\xi} - \vec{u})^2 (f - f^{(0)}) d\xi \quad (2.37)$$

Ob upoštevanju enačb (2.35) in (2.36) lahko enačbo (2.37) še preoblikujemo:

$$0 = \int_{-\infty}^{\infty} \vec{\xi}^2 (f - f^{(0)}) d\xi \quad (2.38)$$

Trkni operator podaja vpliv trkov molekul na porazdelitveno funkcijo. Pred trkom imamo na omejenem prostoru določeno število molekul z določenimi hitrostmi, po trku nekatere molekule uidejo iz obravnavanega območja, drugim pa se spremenijo hitrosti. S tem se spremeni vrednost porazdelitvene funkcije. Pomembno je poudariti, da se pri trkanju molekul le-te ne uničijo in ne nastajajo nove, njihovo število se ohranja. Ko integriramo porazdelitveno funkcijo po vseh možnih hitrostih pred in po trku, torej ostane število molekul nespremenjeno in je zato integral v enačbi (2.35) enak nič. Tudi druga dva integrala (2.36) in (2.37) imata vrednost nič, saj se po podobnem principu ohranjata tudi gibalna količina in gostota notranje energije molekul pred in po trku. Gostoti delcev η , gibalni količine $\vec{G} = \vec{u}\eta$ in gostoti notranje energije $E = \rho\epsilon$ pravimo tudi konservativne spremenljivke, ker se njihove vrednosti po molekularnem trku ne spremenijo (Malaspinas, 2009).

2.2.5 Brezdimenzijska oblika poenostavljene Boltzmannove enačbe

Pretvorbo BBGK enačbe (2.33) v njeno brezdimenzijsko obliko opravimo iz dveh pomembnih razlogov. Prvi razlog je ta, da nam bo v poglavju 2.3.5 ob uporabi perturbacijske teorije podala območje veljave naših enačb. Drugi razlog pa je, da nam bo v poglavju 2.3.8 pri iskanju rešitve prvega reda v primeru uporabe konstantne temperature $T(\vec{x}, t) = T_0$ omogočala bistveno poenostavitev enačb.

Za pretvorbo BBGK (2.33) v njeno brezdimenzijsko obliko je potrebno vpeljati brezdimenzijske spremenljivke, ki jih s simbolom $[\hat{\quad}]$ ločimo od njihovih dimenzijskih različic. Tako na primer označba \hat{t} predstavlja brezdimenzijski čas in $\hat{\tau}$ brezdimenzijski čas relaksacije. Faktorji pretvorbe med dimenzijskimi in brezdimenzijskimi spremenljivkami so: referenčna temperatura T_0 , karakteristična dolžina L in referenčna hitrost $\sqrt{\theta_0} = \sqrt{\frac{k_B T_0}{m_d}}$. Spodnji izrazi podajajo zveze med dimenzijskimi in brezdimenzijskimi spremenljivkami:

$$\begin{aligned} \theta_0 &= \frac{k_B T_0}{m_d} = c_s^2, \quad t = \hat{t} \frac{L}{\sqrt{\theta_0}}, \quad \tau = \hat{\tau} \frac{L}{\sqrt{\theta_0}}, \quad u = \hat{u} \sqrt{\theta_0}, \quad \xi = \hat{\xi} \sqrt{\theta_0}, \quad x = \hat{x} L, \quad f = \hat{f} \frac{\eta_0}{\sqrt{\theta_0}^{Dim}}, \\ g &= \hat{g} \frac{\theta_0}{L}, \quad \eta = \hat{\eta} \eta_0, \quad \theta = \hat{\theta} \theta_0, \quad \rho = \eta m_D = \hat{\eta} \hat{m}_D \eta_0 m_{D0} = \hat{\rho} \rho_0 \text{ in } SRC = \frac{SRC \rho_0 \sqrt{\theta_0}}{L}, \end{aligned} \quad (2.39)$$

S SRC smo označili izvorni člen, ki nam podaja količino razlite nafte v makroskopskih količinah $[\text{kg}/\text{m}^3\text{s}]$. Enačba (2.7) iz poglavja 2.2.1 pove, da je v primeru uporabe konstantne temperature referenčna hitrost enaka hitrosti zvoka $\sqrt{\theta_0} = c_s$. Ker nam Machovo število podaja razmerje med hitrostjo tekočine in hitrostjo zvoka c_s v tej tekočini (Rathakrishnan, 2004), smo z našo izbiro referenčne hitrosti in konstantne temperature dobili, da so naše brezdimenzijske hitrosti zapisane v Machovih enotah:

$$\hat{u} = \frac{u}{c_s} = [Ma] \quad (2.40)$$

V primeru uporabe konstantne temperature dobimo, da je brezdimenzijska hitrost zvoka enaka ena (2.41); to enakost bomo uporabili v poglavju 2.3.8 za poenostavitev enačb.

$$\sqrt{\hat{\theta}} = \hat{c}_s = 1 \quad (2.41)$$

Tukaj izpeljimo še pomembno podrobnost, ki jo dobimo z upoštevanjem enačb (2.9) in (2.10) v izrazu $\tau = \hat{\tau} \frac{L}{\sqrt{\theta_0}}$, ki povezuje brezdimenzijski in dimenzijski čas relaksacije:

$$\hat{\tau} = \frac{\tau c_s}{L} = \frac{\tau \bar{v}}{L\sqrt{3}} = \frac{\lambda}{L\sqrt{3}} = \frac{Kn}{\sqrt{3}} \Rightarrow \hat{\tau} \sim Kn \quad (2.42)$$

Dobili smo zvezo, ki nam pove, da je brezdimenzijski čas relaksacije $\hat{\tau}$ sorazmeren s Knudsenovim številom Kn in v njegovem velikostnem razredu (Kuzmin, 2009). To zvezo bomo uporabili v poglavju 2.3.5 za določitev veljavnosti naših enačb v okviru perturbacijske teorije.

Izpeljava brezdimenzijske BBGK enačbe poteka tako, da vstavimo izraze (2.39) v BBGK enačbo (2.33) in dobimo:

$$\begin{aligned} &\left(\frac{\partial \sqrt{\theta_0}}{\partial (\hat{t}L)} + \hat{\xi} \sqrt{\theta_0} \cdot \frac{\vec{\nabla}}{L} + \hat{g} \frac{\theta_0}{L} \cdot \frac{\vec{\nabla}_{\hat{\xi}}}{\sqrt{\theta_0}} \right) \hat{f} \frac{\eta_0}{\sqrt{\theta_0}^{Dim}} \\ &= -\frac{\sqrt{\theta_0}}{\hat{t}L} (\hat{f} - \hat{f}^{(0)}) \frac{\eta_0}{\sqrt{\theta_0}^{Dim}} + \frac{SRC \sqrt{\theta_0} \hat{f}^{(0)} \eta_0}{L \hat{\rho} \sqrt{\theta_0}^{Dim}} \end{aligned} \quad (2.43)$$

Enačbo (2.43) pomnožimo z $\frac{L}{\sqrt{\theta_0}} \frac{\sqrt{\theta_0}^{Dim}}{\eta_0}$ in dobimo BBGK enačbo, zapisano z brezdimenzijskimi spremenljivkami (2.44). S primerjavo enačbe (2.33) in (2.44) opazimo, da se brezdimenzijska BBGK enačba ne razlikuje od njene dimenzijske oblike.

$$\left(\frac{\partial}{\partial \hat{t}} + \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla} + \vec{g} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{\xi}} \right) \hat{f} = -\frac{1}{\hat{t}} (\hat{f} - \hat{f}^{(0)}) + \frac{SRC \hat{f}^{(0)}}{\hat{\rho}} \quad (2.44)$$

Po enakem postopku pretvorimo v njihovo brezdimenzijsko obliko še vse ostale do sedaj izpeljane izraze. Ob pretvorbi ugotovimo, da se tudi zapisi teh izrazov, kot je na primer brezdimenzijska Maxwellova porazdelitev (2.45), pri prehodu na brezdimenzijske spremenljivke ne razlikujejo od njihovih prvotnih dimenzijskih zapisov.

$$\hat{f}^M = \hat{\eta} \left(\frac{1}{2\pi\hat{\theta}} \right)^{\frac{Dim}{2}} e^{-\frac{(\vec{\xi} - \vec{u})^2}{2\hat{\theta}}} \quad (2.45)$$

Zaradi omenjenih prednosti uporabe brezdimenzijske BBGK enačbe (2.44) pri izpeljavi NS enačb bomo od sedaj naprej brez izgube na splošnosti operirali le z brezdimenzijskimi spremenljivkami in zaradi nepreglednosti opustili simbol $[\hat{\quad}]$ v njihovem zapisu. Pomembno, je da se bralec zaveda, da od tega poglavja dalje v naših enačbah nastopajo le brezdimenzijske spremenljivke, čeprav za njihovo označbo ne uporabljamo simbola $[\hat{\quad}]$.

2.3 IZPELJAVA NAVIER-STOKESOVIH ENAČB IZ BOLTZMANNOVE ENAČBE

Ker Boltzmannova enačba deluje na molekularnem nivoju, bomo za boljše razumevanje in kasnejšo uporabo MBM v tem poglavju izpeljali NS enačbe in v naslednjem poglavju še AD enačbo. Pri izpeljavi NS enačb iz BBGK se bomo opirali na izpeljavo, ki jo je opravil Malaspinas (2009). Njegova izpeljave je zelo groba in v njej manjka večina ključnih korakov. Nekaj manjkajočih korakov smo našli v Huangovi knjigi (1987), veliko pa smo jih odkrili sami. Literatura je na tem področju zelo razpršena, zato smo se odločili nameniti izpeljavi NS enačb iz BBGK pomemben del disertacije.

V BBGK enačbi nastopajo hitrosti molekul, ki niso direktno povezane z makroskopskimi količinami, kot so tlak, viskoznost in povprečna hitrost. Zato gre pri iskanju NS enačb za spremembo mikro spremenljivk BBGK enačbe v makroskopske spremenljivke.

Poglavje začnemo z nekaj teorije o Fourierjevih vrstah in Hermitovih polinomih, ki imajo ključno vlogo pri iskanju aproksimativnih rešitev porazdelitvene. Videli bomo, da za izpeljavo klasičnih, makroskopskih enačb ne potrebujemo številnih členov Fourierjeve vrste. Za izpeljavo kontinuitetne in dinamične NS enačbe zadostuje že razvoj do drugega reda.

Poglavje nadaljujemo s prvim poskusom izpeljave NS, ki se zaustavi pri neizpeljanemu tenzorju napetosti. Za iskanje rešitve so potrebne dodatne poenostavitve BBGK, ki jih uvedemo s Chapman-Enskogovo razširitvijo porazdelitvene funkcije. Nato poiščemo ničto aproksimacijo BBGK, ki daje Eulerjeve enačbe za modeliranje toka nevskočne tekočine in nekatere dodatne pogoje, ki jih kasneje "vsilimo" v prvo aproksimacijo. V prvi aproksimaciji uporabimo pogoje izpeljane v ničti aproksimaciji ter izpeljemo tenzor napetosti. Ta tenzor nato vstavimo nazaj v dinamično enačbo, ki smo jo v prvem poizkusu izpeljave pustili nedokončano, in tako dobimo iskano kontinuitetno in dinamično enačbo.

2.3.1 Posplošena Fouriereva vrsta in Hermitovi polinomi

Celoten postopek izpeljave NS enačb temelji na Hermitovih polinomih (Dunham, 2004), zato je smiselno napisati nekaj teorije tudi o teh. Hermitovi polinomi spadajo v skupino ortogonalnih polinomov. Za dva polinoma $p(x)$ in $q(x)$ pravimo, da sta ortogonalna na intervalu $[a,b]$, če zanju velja pogoj (Bronštejn in sod., 1997):

$$\int_a^b \omega(x)p(x)q(x)dx = 0, \quad (2.46)$$

kjer je $\omega(x)$ nenegativna utežna funkcija. Zgornji pogoj je ortogonalni skalarni produkt v prostoru polinomov.

Za Hermitove polinome velja, da so ortogonalni na intervalu $(-\infty, \infty)$ z utežno funkcijo (Peng, 2011):

$$\omega(\vec{\xi}) = \frac{1}{(2\pi)^{Dim/2}} e^{-\frac{(\vec{\xi})^2}{2}} \quad (2.47)$$

Formula za izračun Hermitovega polinoma stopnje n in indeksom α je sledeča (Peng, 2011):

$$H_\alpha^{(n)}(\vec{\xi}) = \frac{(-1)^n}{\omega(\vec{\xi})} \frac{\partial^n}{\partial \xi_\alpha^n} \omega(\vec{\xi}) \quad (2.48)$$

Vsak od indeksov α, β, γ lahko zavzame vrednost katere koli od koordinatnih smeri x, y, z in pri Hermitovih polinomih pomeni, po kateri smeri hitrosti delcev ξ_x, ξ_y, ξ_z je bila odvajana utežna funkcija ω . Zapišimo nekaj členov $H_\alpha^{(n)}$:

$$\begin{aligned} H_\alpha^{(0)} &= 1 \\ H_\alpha^{(1)} &= \xi_\alpha \\ H_{\alpha\beta}^{(2)} &= \xi_\alpha \xi_\beta - \delta_{\alpha\beta} \\ H_{\alpha\beta\gamma}^{(3)} &= \xi_\alpha \xi_\beta \xi_\gamma - (\delta_{\alpha\beta} \xi_\gamma + \delta_{\alpha\gamma} \xi_\beta + \delta_{\beta\gamma} \xi_\alpha) \end{aligned} \quad (2.49)$$

V zgornjih enačbah simbol $\delta_{\alpha\beta}$ predstavlja Kroneckerjev delta. Zanj velja, da zavzame vrednost ena v kolikor sta njegova dva indeksa enakih vrednosti ($\alpha = \beta$) in vrednost nič v kolikor se indeksa razlikujeta ($\alpha \neq \beta$).

- **Posplošena Fouriereva vrsta**

Pomeni razvoj funkcije v vrsto na podlagi ortogonalnih polinomov p_n . Z uporabo lastnosti ortogonalnih polinomov lahko odsekoma gladko funkcijo $f(\xi)$ zapišemo v obliki posplošene Fouriereve vrste:

$$f(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n p_n(\xi) \quad (2.50)$$

- **Izpeljava koeficientov Hermitovih polinomov**

Izraz za koeficiente a_n (2.54) bomo izpeljali nekoliko drugače kot v literaturi (Dunham, 2004). Vzrok temu je, da se želimo "znebiti" utežne funkcije v vseh kasnejših izračunih. Zapišimo enačbo (2.50) na nekoliko drugačen način:

$$\frac{f(\xi)}{\omega(\xi)} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n H_{\alpha}^{(n)}(\xi) \quad (2.51)$$

Integriramo s Hermitovim polinomom $H_{\alpha}^{(m)}$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) H_{\alpha}^{(m)} d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\omega(\xi) H_{\alpha}^{(m)} \sum_{n=0}^{\infty} c_n H_{\alpha}^{(n)} \right) d\xi \quad (2.52)$$

Zaradi ortogonalnosti so vsi členi razen tistih z enako stopnjo in indeksi enaki 0 in dobimo:

$$\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) H_{\alpha}^{(n)} d\xi}_{a_{\alpha}^{(n)}} = c_n \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \omega(\xi) H_{\alpha}^{(n)2} d\xi}_{n!} \quad (2.53)$$

$$a_{\alpha}^{(n)} = c_n n!$$

V kasnejših izpeljavah bomo pogosto uporabljali izraz za $a_{\alpha}^{(n)}$, zato ga zapišimo še enkrat v splošni obliki s porazdelitveno funkcijo:

$$a_{\alpha}^{(n)}(\vec{x}, t) = \int f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) H_{\alpha}^{(n)}(\vec{\xi}) d\xi \quad (2.54)$$

Z uporabo enačb (2.14) in (2.15) lahko zapišemo nekaj členov $a_{\alpha}^{(n)}$:

$$\begin{aligned} a_{\alpha}^{(0)} &= \eta \\ a_{\alpha}^{(1)} &= \eta u_{\alpha} \\ a_{\alpha\beta}^{(2)} &= \frac{1}{m_d} P_{\alpha\beta} + \eta(u_{\alpha} u_{\beta} - \delta_{\alpha\beta}) \end{aligned} \quad (2.55)$$

Spremenljivka $P_{\alpha\beta}$ predstavlja element tenzorja napetosti, ki ga bomo definirali v enačbi (2.67).

Razvoj porazdelitvene funkcije v posplošeno Fourierovo vrsto s Hermitovimi polinomi

$$f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = \omega(\vec{\xi}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_{\alpha}^{(n)}(\vec{\xi}) a_{\alpha}^{(n)}(\vec{x}, t) \quad (2.56)$$

Vsota členov $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_{\alpha}^{(n)}(\vec{\xi}) a_{\alpha}^{(n)}$ pomeni vsoto vseh možnih permutacij indeksov α . Naj bo npr. $n = 3$; vse možne permutacije indeksa α za dvodimenzionalen primer so:

$$\alpha = \{\{x, x, x\}, \{x, x, y\}, \{x, y, x\}, \{x, y, y\}, \{y, x, x\}, \{y, x, y\}, \{y, y, x\}, \{y, y, y\}\} \quad (2.57)$$

Vseh možnih permutacij je 2^n za dvodimenzionalen in 3^n za tridimenzionalen primer.

Na enak način razvijmo v Fourierjevo vrsto s Hermitovimi polinomi tudi člen, ki podaja vpliv sil na porazdelitveno funkcijo:

$$F = \vec{g} \cdot \vec{\nabla}_\xi f$$

$$\frac{F(\xi)}{\omega(\xi)} = \sum_{n=0}^{\infty} c_{Fn} H_\alpha^{(n)}(\xi) \quad (2.58)$$

Integriramo s Hermitovim polinomom $H_\alpha^{(m)}$

$$\int_{-\infty}^{\infty} F(\xi) H_\alpha^{(m)} d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\omega(\xi) H_\alpha^{(m)} \sum_{n=0}^{\infty} c_{Fn} H_\alpha^{(n)} \right) d\xi \quad (2.59)$$

Zaradi ortogonalnosti so vsi členi razen tistih z enako stopnjo in enakimi indeksi enaki 0. Dobimo:

$$\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} F(\xi) H_\alpha^{(n)} d\xi}_{a_{F\alpha}^{(n)}} = c_{Fn} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \omega(\xi) H_\alpha^{(n)2} d\xi}_{n!} \quad (2.60)$$

$$a_{F\alpha}^{(n)} = c_{Fn} n!$$

V kasnejših izpeljavah bomo pogosto uporabljali tudi izraz za $a_{F\alpha}^{(n)}$, zato ga zapišimo še enkrat v splošni obliki s porazdelitveno funkcijo:

$$a_{F\alpha}^{(n)}(\vec{x}, t) = \int F(\vec{x}, \vec{\xi}, t) H_\alpha^{(n)}(\vec{\xi}) d\xi \quad (2.61)$$

$$a_{F\alpha}^{(n)}(\vec{x}, t) = \vec{g} \int \vec{\nabla}_\xi f H_\alpha^{(n)}(\vec{\xi}) d\xi$$

Z uporabo enačb (2.14) in (2.15) lahko zapišemo nekaj členov $a_{F\alpha}^{(n)}$:

$$a_{F\alpha}^{(0)} = 0$$

$$a_{F\alpha}^{(1)} = -\eta g_\alpha \quad (2.62)$$

$$a_{F\alpha\beta}^{(2)} = -\eta (g_\alpha u_\alpha + g_\beta u_\beta)$$

Sledi razvoj člena vpliva sil v posplošeno Fourierjevo vrsto s Hermitovimi polinomi:

$$F(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = \omega(\vec{\xi}) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} H_\alpha^{(n)}(\vec{\xi}) a_{F\alpha}^{(n)}(\vec{x}, t) \quad (2.63)$$

V poglavju 2.3.9 bomo dokazali, da za izpeljavo kontinuitetne in dinamične Navier-Stokesove enačbe zadostuje že razvoj do drugega reda ($N = 2$) Fouriereve vrste.

$$\begin{aligned} f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) &\cong f^N(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = \omega(\vec{\xi}) \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!} H_{\alpha}^{(n)}(\vec{\xi}) a_{\alpha}^{(n)}(\vec{x}, t) \\ F(\vec{x}, \vec{\xi}, t) &\cong F^N(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = \omega(\vec{\xi}) \sum_{n=1}^N \frac{1}{n!} H_{\alpha}^{(n)}(\vec{\xi}) a_{F\alpha}^{(n)}(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (2.64)$$

2.3.2 Navier-Stokesove enačbe

NS enačbe predstavljajo osnovne izraze, s katerimi operiramo pri računanju toka tekočin. Sestavljajo jih tri enačbe: kontinuitetna (2.65), dinamična (2.66) in energijska. Operirali bomo s predpostavko konstantne temperature, zato energijske enačbe ne bomo izpeljali. NS enačbe za stisljivo tekočino zapišemo na sledeči način (Rajar, 1997):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \rho \vec{u} = 0 \quad (2.65)$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{d\vec{u}}{dt} + \vec{\nabla} \cdot [P] &= \vec{g} \rho \\ \rho \frac{d\vec{u}}{dt} + \vec{\nabla} \cdot \left(\underbrace{p[I] - \mu[\Lambda]}_{\text{tenzor naprtosti}} \right) &= \vec{g} \rho \end{aligned}$$

$p[I]$ normalne oziroma tlačne napetosti

$\mu[\Lambda]$ strižne ali tangencialne ali viskozne napetosti

$$\rho \frac{d\vec{u}}{dt} = \vec{g} \rho - \vec{\nabla} p + \vec{\nabla} \cdot \mu[\Lambda] \quad (2.66)$$

$$\Lambda_{\alpha\beta} = \left(\frac{\partial u_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} + \frac{\partial u_{\beta}}{\partial x_{\alpha}} \right) - \frac{2}{Dim = 3} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \delta_{\alpha\beta}$$

$$\rho \frac{d\vec{u}}{dt} = \vec{g} \rho - \vec{\nabla} p + \mu \Delta \vec{u} + \frac{1}{3} \mu \vec{\nabla} \cdot \underbrace{(\vec{\nabla} \vec{u})}_{\substack{0, \text{ če} \\ \rho = \text{konst.}}}$$

$$\Delta = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \text{ Laplaceov operator}$$

2.3.3 Brezdimenzijska oblika Navier-Stokesovih enačb

Izpeljava NS enačb iz BBGK enačbe od poglavja 2.2.5 dalje poteka z uporabo brezdimenzijskih spremenljivk, zato je potrebno za dosledno primerjavo tudi NS enačbe pretvoriti v brezdimenzijsko obliko.

Poleg brezdimenzijskih spremenljivk (2.39), ki smo jih vpeljali v poglavju 2.2.5, je potrebno za razvoj NS enačb v brezdimenzijsko obliko uvesti še dve novi brezdimenzijski spremenljivki, ki v BBGK enačbi ne nastopata. To sta brezdimenzijski tlak \hat{p} in brezdimenzijska dinamična viskoznost $\hat{\mu}$. Njune zveze z dimenzijskimi spremenljivkami podajta sledeča izraza:

$$p = \hat{p} \rho_0 \theta_0 \text{ in } \mu = \hat{\mu} L \rho_0 \sqrt{\theta_0} \quad (2.67)$$

Izpeljava brezdimenzijske kontinuitetne enačbe poteka tako, da vstavimo izraze (2.39) in (2.67) v kontinuiteto enačbo (2.65) in dobimo:

$$\frac{\sqrt{\theta_0}\rho_0\partial\hat{\rho}}{L\partial\hat{t}} + \frac{\sqrt{\theta_0}\rho_0\vec{\nabla}}{L}\hat{\rho}\vec{u} = 0 \quad (2.68)$$

Enačbo (2.68) pomnožimo z $\frac{L}{\sqrt{\theta_0}\rho_0}$ in dobimo kontinuiteto enačbo, zapisano z brezdimenzijskimi spremenljivkami:

$$\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial\hat{t}} + \vec{\nabla}\hat{\rho}\vec{u} = 0 \quad (2.69)$$

Opazimo lahko, da se kontinuitetna enačba, zapisana z brezdimenzijskimi spremenljivkami, ne razlikuje od svoje prvotne oblike (2.65).

Na enak način, kakor smo izpeljali brezdimenzijsko kontinuitetno enačbo (2.69), izpeljemo še brezdimenzijsko dinamično enačbo.

Vstavimo izraze (2.39) in (2.67) v dinamično enačbo (2.66) in dobimo:

$$\frac{\rho_0\theta_0\hat{\rho}d\vec{u}}{Ld\hat{t}} = \frac{\rho_0\theta_0}{L}\vec{g}\hat{\rho} - \frac{\rho_0\theta_0}{L}\vec{\nabla}\hat{\rho} + \frac{\rho_0\theta_0}{L}\vec{\nabla}\cdot\hat{\mu}[\hat{\Lambda}] \quad (2.70)$$

Zgornjo enačbo pomnožimo z $\frac{L}{\rho_0\theta_0}$ in dobimo dinamično enačbo, zapisano z brezdimenzijskimi spremenljivkami:

$$\hat{\rho}\frac{d\vec{u}}{d\hat{t}} = \vec{g}\hat{\rho} - \vec{\nabla}\hat{\rho} + \vec{\nabla}\hat{\mu}[\hat{\Lambda}] \quad (2.71)$$

Pri primerjavi enačb (2.66) in (2.71) opazimo, da se tudi brezdimenzijska dinamična enačba ne razlikuje od njene osnovne oblike. V naslednjih poglavjih bomo enačbe (2.71), brezdimenzijske Navier-Stokesove enačbe (2.69) in (2.71) razvili iz brezdimenzijske BBGK.

2.3.4 Izpeljava kontinuitetne enačbe

Zaradi jasnosti bomo prikazali izpeljavo za dvodimenzionalni primer, izpeljava tridimenzionalnega primera poteka po enakem principu. BBGK (2.44) integriramo po vseh možnih hitrostih in pomnožimo z maso delca ter dobimo:

$$\frac{\partial}{\partial t} \underbrace{m_d \int f d\xi}_{\rho} + \underbrace{\vec{\nabla} m_d \int \xi f d\xi}_{\rho\vec{u}} + \underbrace{m_d \vec{g} \int \vec{\nabla}_\xi f d\xi}_{3.\text{člen}} = \underbrace{-\frac{1}{\tau} m_d \int (f - f^{(0)}) d\xi}_{=0, \text{enačba (2.35)}} \quad (2.72)$$

Nadalje z metodo integriranja po delih – *per partes* (Bronštejn in sod., 1997) razvijamo 3. člen:

$$\begin{aligned}
 m_d \vec{g} \int \vec{\nabla}_\xi f d\xi &= m_d \vec{g} \iint_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial f}{\partial \xi_x}, \frac{\partial f}{\partial \xi_y} \right) d\xi_x d\xi_y \\
 m_d \vec{g} \int \vec{\nabla}_\xi f d\xi &= m_d \vec{g} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\underbrace{f \Big|_{-\infty}^{+\infty}}_0 d\xi_y, \underbrace{f \Big|_{-\infty}^{+\infty}}_0 d\xi_x \right) \Rightarrow \\
 m_d \vec{g} \int \vec{\nabla}_\xi f d\xi &= 0
 \end{aligned} \tag{2.73}$$

Dobimo enačbo o ohranitvi mase, ki je enaka Navier-Stokesovi enačbi (2.69).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \rho \vec{u} = 0 \tag{2.74}$$

Tako smo uspeli dokazati, da kontinuitetno enačbo (2.69) lahko izpeljemo iz BBGK enačbe (2.44). Preostane nam le še izpeljava dinamične enačbe (2.71), za kar je potreben veliko dolgotrajnejši postopek.

2.3.5 Izpeljava dinamične enačbe

Po izpeljavi kontinuitetne enačbe (2.69) nadaljujemo z izpeljavo dinamične enačbe (2.71). BBGK enačbo (2.44) integriramo po vseh možnih hitrostih in pomnožimo z maso delca ter z eno od komponent vektorja molekularnih hitrosti ξ_x , ξ_y ali ξ_z . Izpeljali bomo le izraze za ξ_x , ker je postopek za ostale smeri enak. Zaradi preglednosti bomo razvijali vsak člen enačbe (2.75) posebej.

$$\frac{\partial}{\partial t} \underbrace{m_d \int \xi_x f d\xi}_{\rho u_x} + \underbrace{\vec{\nabla} m_d \int \xi_x \vec{\xi} f d\xi}_{2.\text{člen}} + \underbrace{m_d \vec{g} \int \xi_x \vec{\nabla}_\xi f d\xi}_{3.\text{člen}} = \underbrace{-\frac{1}{\tau} m_d \int \xi_x (f - f^{(0)}) d\xi}_{=0, \text{enačba (2.36)}} \tag{2.75}$$

- **Razvoj 2. člena:**

$$\vec{\nabla} m_d \int \xi_x \vec{\xi} f d\xi = \vec{\nabla} m_d \int (\xi_x \xi_x, \xi_x \xi_y) f d\xi \tag{2.76}$$

Uporabimo "trik" oziroma nastavek (Huang, 1987):

$$m_d \int \xi_i \xi_j f d\xi = \underbrace{m_d \int (\xi_i - u_i)(\xi_j - u_j) f d\xi}_{P_{ij}} + \eta m_d u_i u_j \tag{2.77}$$

ter ga vstavimo v enačbo (2.76) in dobimo:

$$\begin{aligned}
 \vec{\nabla} m_d \int \xi_x \vec{\xi} f d\xi &= \\
 &= \vec{\nabla} \left(\underbrace{m_d \int (\xi_x - u_x)(\xi_x - u_x) f d\xi}_{P_{xx}}, \underbrace{m_d \int (\xi_x - u_x)(\xi_y - u_y) f d\xi}_{P_{xy}} \right) \\
 &\quad + \vec{\nabla} \left(\underbrace{\frac{m_d \eta}{\rho} u_x u_x}_{\rho}, \underbrace{\frac{m_d \eta}{\rho} u_x u_y}_{\rho} \right)
 \end{aligned} \tag{2.78}$$

Na koncu izpeljave se izkaže, da tenzor $P_{\alpha\beta}$ iz enačbe (2.77) in (2.78) predstavlja komponente tenzorja napetosti tekočine (2.79).

$$P_{\alpha\beta} = m_d \int (\xi_\alpha - u_\alpha)(\xi_\beta - u_\beta) f d\xi \quad (2.79)$$

Drugi člen, izražen z tenzorjem napetosti (2.79):

$$\vec{\nabla} m_d \int \xi_x \vec{\xi} f d\xi = \vec{\nabla}(Pxx, Pxy) + \vec{\nabla}(\rho u_x u_x, \rho u_x u_y) \quad (2.80)$$

• **Razvoj 3. člena:**

$$m_d \vec{g} \int \xi_x \vec{\nabla}_\xi f d\xi = m_d \vec{g} \iint_{-\infty}^{\infty} \left(\xi_x \frac{\partial f}{\partial \xi_x}, \xi_x \frac{\partial f}{\partial \xi_y} \right) d\xi_x d\xi_y \quad (2.81)$$

3. člen iz enačbe (2.75) integriramo po delih – *per partes* (Bronštejn in sod., 1997):

$$\begin{aligned} m_d \vec{g} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{f \xi_x}_{0} \Big|_{-\infty}^{+\infty} d\xi_y - \iint_{-\infty}^{\infty} f \underbrace{\frac{\partial \xi_x}{\partial \xi_x}}_1 d\xi_x d\xi_y, \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{f \xi_x}_{0} \Big|_{-\infty}^{+\infty} d\xi_x \right. \\ \left. - \iint_{-\infty}^{\infty} f \underbrace{\frac{\partial \xi_x}{\partial \xi_y}}_0 d\xi_x d\xi_y \right) d\xi_x d\xi_y \Rightarrow \\ m_d \vec{g} \int \xi_x \vec{\nabla}_\xi f d\xi = m_d \vec{g} \left(- \iint_{-\infty}^{\infty} f d\xi_x d\xi_y, 0 \right) = -g_x \rho \end{aligned} \quad (2.82)$$

Sedaj lahko enačbo (2.75) zapišemo kot:

$$\frac{\partial(\rho u_x)}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho u_x u_x, \rho u_x u_y) + \vec{\nabla}(Pxx, Pxy) = g_x \rho \quad (2.83)$$

Prvi in drugi člen na levi strani enačbe (2.83) lahko razvijamo še naprej:

$$\begin{aligned} \overbrace{\frac{\partial \rho}{\partial t} u_x + u_x \frac{\partial(\rho u_x)}{\partial x} + u_x \frac{\partial(\rho u_y)}{\partial y}}^{u_x \cdot \text{kontinuitetna enačba}=0} + \rho \frac{\partial u_x}{\partial t} + \rho u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + \rho u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + \vec{\nabla}(Pxx, Pxy) \\ = g_x \rho \\ = \rho \left(\underbrace{\frac{\partial u_x}{\partial t} + (\vec{u} \vec{\nabla}) u_x}_{\frac{du_x}{dt}} \right) + \vec{\nabla}(Pxx, Pxy) = g_x \rho \end{aligned} \quad (2.84)$$

Dobimo komponento dinamične enačbe v smeri x:

$$\rho \frac{du_x}{dt} + \vec{\nabla}(P_{xx}, P_{xy}) = g_x \rho \quad (2.85)$$

Zapis dinamične enačbe v splošni obliki:

$$\rho \frac{d\vec{u}}{dt} + \vec{\nabla} \cdot [P] = \vec{g} \rho \quad (2.86)$$

Tako smo dobili enačbo, ki je na pogled enaka dinamični NS enačbi (2.71). Vendar s tem še nismo končali izpeljave, saj tenzor napetosti (2.79) še vedno vsebuje molekularne hitrosti, ki jih ne poznamo. Namen naslednjih poglavij je poiskati makroskopske količine, s katerimi bomo opisali tenzor napetosti (2.79).

2.3.6 Chapman-Enskogova razširitev Boltzmannove BGK enačbe

V tem poglavju bomo BBGK enačbo (2.44) še nekoliko poenostavili po principu Chapman-Enskogove razširitve porazdelitvene funkcije (Chapman, 1916, 1918; Enskog, 1917). Chapman in Enskog sta približno ob istem času vsak zase prva dokazala povezavo med Boltzmannovo in Navier-Stokesovimi enačbami. Njuna metoda temelji na iskanju rešitve Boltzmannove enačbe na podlagi perturbacijske metode (Fulling, 2009).

Perturbacijska metoda podaja možno rešitev, ko matematičnega problema ne moremo rešiti analitično ali pa je njegova rešitev zelo odvisna od določenega parametra v njem. Lahko imamo primer, v katerem je razmeroma preprosto poiskati rešitev, v katerem ima parameter ε vrednost 0. Nato se lahko vprašamo, kako se rešitev obnaša za neničelne, vendar majhne vrednosti parametra ε .

Bistvo perturbacijske metode je, da iščemo rešitev neke enačbe tako, da iskano spremenljivko razširimo v okolici nekega zelo majhnega parametra ε , ki nastopa v sami enačbi (2.87). V primeru Boltzmannove enačbe se izkaže, da je ta parameter enak brezdimenzijskemu času relaksacije τ , za katerega smo v enačbi (2.42) dokazali, da je sorazmeren Knudsenovemu številu Kn in je njegovega velikostnega reda.

Reševanje enačb s perturbacijsko metodo poteka v dveh korakih. V prvem koraku zapišemo rešitev kot konvergenčno vrsto v odvisnosti od majhnega parametra ε , kakor prikazuje enačba (2.87). Število členov, ki jih zapišemo, je odvisno od želene natančnosti rešitve. Natančnost rešitve poimenujemo skladno s Taylorjem z redom parametra ε .

$$\begin{aligned} f &= f_0 + \varepsilon f_1 + \varepsilon^2 f_2 + \text{ostanek}(\varepsilon^3) \\ f &= f_0 + \tau f_1 + \tau^2 f_2 + \text{ostanek}(\tau^3) \end{aligned} \quad (2.87)$$

Na ta način predpostavimo, da je rešitev mogoče razviti v Taylorjevo vrsto. Kot vemo, je pogoj za razvoj funkcije v Taylorjevo vrsto, da je ta odvedljiva. BBGK enačba (2.44) temelji na predpostavki (2.32), da porazdelitvena funkcija ne odstopa veliko od Maxwelllove porazdelitve, ki je odvedljiva funkcija, zato je naša predpostavka smotna. V kolikor bi se izkazalo, da je bila naša predpostavka napačna, bi morali uporabiti kakšno drugo metodo.

Izkaže se, da je za izpeljavo NS enačb dovolj približek prvega reda.

$$f = f_0 + \tau f_1 + \text{ostanek}(\tau^2) \quad (2.88)$$

V enačbi (2.88) vidimo, da napaka, ki jo naredimo s tem približkom, narašča s kvadratom časa relaksacije oziroma Knudsenovega števila $\tau \sim Kn$ (enačba (2.42)). Iz tega sledi, da je izbrani perturbacijski pristop veljaven le za majhne čase relaksacije τ oziroma majhna Knudsenova števila Kn . Iz poglavja 2.2.1 vemo, da za hidrodinamičen režim veljajo majhna Knudsenova števila - $Kn < 0,001$ (Rathakrishnan, 2004), zato smo v območju veljave Navier-Stokesovih enačb. V drugem koraku predpostavljeno rešitev (2.88) vstavimo v BBGK enačbo (2.44):

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla} + \vec{g} \cdot \vec{\nabla}_{\xi} \right) (f_0 + \tau f_1) = -\frac{1}{\tau} \left((f_0 + \tau f_1) - f^M \right) \quad (2.89)$$

Zapišemo enačbo (2.89) kot polinom spremenljivke τ in poiščemo njegove ničle (2.90). Zaporedno iskanje ničel polinoma nam daje končno rešitev iskanega problema.

$$\underbrace{\tau^2 \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla} + \vec{g} \cdot \vec{\nabla}_{\xi} \right) f_1}_{\text{zanemarimo}} + \tau \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla} + \vec{g} \cdot \vec{\nabla}_{\xi} \right) f_0 + f_1}_0 + \underbrace{(f_0 - f^M)}_0 = 0 \quad (2.90)$$

Perturbacijska metoda nas pripelje do sledečih rezultatov:

$$\begin{aligned} f_0 = f^M \quad & \text{rešitev ničtega reda porazdelitvene funkcije je enaka Maxwelllovi} \\ & \text{porazdelitvi} \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla} + \vec{g} \cdot \vec{\nabla}_{\xi} \right) f_0 = -f_1 \quad & \text{pomembna enačba, s katero bomo iskali rešitev prvega} \\ \text{reda} \end{aligned} \quad (2.91)$$

Neravnotežni del porazdelitvene funkcije τf_1 bomo raje označili v skladu z enačbo (2.31) z $f^{(1)}$.

$$\begin{aligned} f &= f_0 + \underbrace{\tau f_1}_{f^{(1)}} \Rightarrow \\ f &= f^{(0)} + f^{(1)} \end{aligned} \quad (2.92)$$

Z uporabo enačbe (2.92) v enačbi (2.91) pridemo do končnih rezultatov Chapman-Enskogove razširitve s perturbacijsko metodo:

$$\begin{aligned} f^{(0)} = f^M \quad & \text{rešitev ničtega reda} \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla} + \vec{g} \cdot \vec{\nabla}_{\xi} \right) f^{(0)} = -\frac{f^{(1)}}{\tau} \quad & \text{dodatno poenostavljena BBGK enačba} \end{aligned} \quad (2.93)$$

S perturbacijsko teorijo smo tako poiskali rešitev ničtega reda in poenostavili BBGK enačbo za nadaljnje iskanje rešitve prvega reda s pomočjo Hermitovih polinomov.

2.3.7 Razvoj Boltzmannove BGK enačbe v posplošeno Fourierovo vrsto s Hermitovimi polinomi in uporabo Chapman-Enskogove razširitve

V prejšnjem poglavju smo s pomočjo Chapman-Enskogove razširitve dodatno poenostavili BBGK enačbo (2.44) ter tako izpeljali pomembno enačbo (2.93), s katero bomo lahko v končni fazi BBGK enačbo zapisali z makroskopskimi količinami, kar je bistvo iskanja NS enačb.

Iskanju rešitve poenostavljene BBGK enačbe (2.93) z razvojem porazdelitvene funkcije v Fourierovo vrsto s pomočjo ortogonalnih Hermitovih polinomov lahko po analogiji z bazami vektorskih prostorov rečemo tudi projekcija BBGK na Hermitovo bazo (Herman, 2012). Nekomu inženirske izobrazbe pa tudi avtorju samemu si je lažje predstavljati postopek projekcije na Hermitovo bazo, in sicer z uporabo nekoliko bolj 'domačega' vektorskega zapisa. Namesto kompleksnega zapisa porazdelitvene funkcije s Fourierovo vrsto in Hermitovimi polinomi (2.56), kot smo to storili v poglavju 2.3.1, lahko uporabimo preprostejši "vektorski" zapis (2.94).

$$\begin{aligned}
f^N(\vec{x}, \vec{\xi}, t) &= \omega(\vec{\xi}) \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!} H_{\alpha}^{(n)}(\vec{\xi}) a_{\alpha}^{(n)}(\vec{x}, t) = \\
&= \omega(\vec{\xi}) \left(a^{(0)}, \dots, \frac{a_{\alpha}^{(n)}}{n!}, \dots, \frac{a_{\alpha}^{(N)}}{N!} \right) \left(H^{(0)}, H_{\alpha}^{(1)}, \dots, H_{\alpha}^{(N)} \right)^T
\end{aligned} \tag{2.94}$$

Enako lahko zapišemo še ravnotežno porazdelitev $f^{N(0)}$ in neznanu neravnotežno porazdelitev $f^{N(1)}$

$$\begin{aligned}
f^{N(0)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) &= \omega(\vec{\xi}) \left(a_0^{(0)}, \dots, \frac{a_{0\alpha}^{(n)}}{n!}, \dots, \frac{a_{0\alpha}^{(N)}}{N!} \right) \left(H^{(0)}, H_{\alpha}^{(1)}, \dots, H_{\alpha}^{(N)} \right)^T \\
f^{N(1)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) &= \omega(\vec{\xi}) \left(a_1^{(0)}, \dots, \frac{a_{1\alpha}^{(n)}}{n!}, \dots, \frac{a_{1\alpha}^{(N)}}{N!} \right) \left(H^{(0)}, H_{\alpha}^{(1)}, \dots, H_{\alpha}^{(N)} \right)^T
\end{aligned} \tag{2.95}$$

Iskanje neznanih koeficientov $a_{1\alpha}^{(n)}$ neravnotežne porazdelitve $f^{N(1)}$ bo potekalo s projekcijo poenostavljene BBGK enačbe (2.93) na bazne vektorje $H_{\alpha}^{(n)}$ Hermitovih polinomov. Ob projekciji zgornje enačbe na bazni vektor $H_{\alpha}^{(n)}$, ki poteka z integriranjem po vseh možnih hitrostih, so zaradi ortogonalnosti Hermitovih polinomov vsi členi, ki ne pripadajo baznemu vektorju $H_{\alpha}^{(n)}$, enaki nič in ostane le iskani koeficient $a_{1\alpha}^{(n)}$. To je zelo podobno kakor pri vektorjih in zaradi tega lažje predstavljivo.

$$\begin{aligned}
&\int \left(\frac{\partial f^{N(0)}}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla} f^{N(0)} + \vec{g} \cdot \vec{\nabla}_{\xi} f^{N(0)} \right) H_{\alpha}^{(n)} d\xi = -\frac{1}{\tau} \int f^{N(1)} H_{\alpha}^{(n)} d\xi \\
&= \int \omega(\vec{\xi}) \left(a_1^{(0)}, \dots, \frac{a_{1\alpha}^{(n)}}{n!}, \dots, \frac{a_{1\alpha}^{(N)}}{N!} \right) \left(H^{(0)}, H_{\alpha}^{(1)}, \dots, H_{\alpha}^{(N)} \right)^T H_{\alpha}^{(n)} d\xi = a_{1\alpha}^{(n)}(\vec{x}, t)
\end{aligned} \tag{2.96}$$

Projekcija levega dela zgornje enačbe na bazo Hermitovih polinomov zahteva nekaj matematičnega dela. Zaradi preglednosti postopka bomo v podpoglavjih od 2.3.7.1 do 2.3.7.4 prikazali projekcijo vsakega člana posebej, kakor so označeni v enačbi (2.97). Od tega poglavja dalje bomo v naših izpeljavah namesto eksaktne ravnotežne $f^{(0)}$ in neravnotežne porazdelitve $f^{(1)}$ uporabljali njuna približka $f^{N(0)}$ in $f^{N(1)}$. Eksaktno porazdelitveno funkcijo bi dobili s projiciranjem BBGK enačbe do neskončne stopnje Hermitovih polinomov, vendar bomo v nadaljevanju dokazali, da je za izpeljavo NS enačb za malo stisljivo tekočino (2.66) dovolj že razvoj do druge stopnje Hermitovih polinomov.

Kakor smo pri uvedbi brezdimenzijskih spremenljivk zaradi nepreglednosti opustili simbol $[\hat{\quad}]$ nad spremenljivkami, bomo sedaj opustili zapis reda N , do katerega smo razvili porazdelitveno funkcijo. Pomembno, je da se bralec zaveda, da od tega poglavja dalje v naših enačbah nastopa do N -ega reda razvita porazdelitvena funkcija f^N , čeprav jo še vedno zapisujemo kot f .

$$\frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\int f^{(0)} H_{\alpha}^{(n)} d\xi}_{1.\text{člen}} + \underbrace{\vec{\nabla} \int \vec{\xi} f^{(0)} H_{\alpha}^{(n)} d\xi}_{2.\text{člen}} + \underbrace{\vec{g} \cdot \int \vec{\nabla}_{\xi} f^{(0)} H_{\alpha}^{(n)} d\xi}_{3.\text{člen}} = \underbrace{-\frac{1}{\tau} \int f^{(1)} H_{\alpha}^{(n)} d\xi}_{4.\text{člen}} \tag{2.97}$$

Pred nadaljevanjem razvoja zgornje enačbe je potrebno še izračunati koeficiente $a_{0\alpha}^{(n)}$ ravnotežne porazdelitvene funkcije.

Ker je ravnotežna porazdelitvena funkcija znana in enaka Maxwellovi porazdelitvi (2.99), lahko njene koeficiente $a_{0\alpha}^{(n)}$ konkretno izračunamo skladno z izrazom (2.47):

$$a_{0\alpha}^{(n)}(\vec{x}, t) = \int f^{(0)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) H_{\alpha}^{(n)}(\vec{\xi}) d\xi \quad (2.98)$$

Ker bomo nekatere integrale direktno izračunali, je dobro, da se spomnimo Maxwellove porazdelitvene funkcije:

$$f^{(0)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = f^M = n(\vec{x}, t) \left(\frac{m_d}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{D}{2}} e^{-\frac{m_d(\vec{\xi}-\vec{u})^2}{2k_B T}} \quad (2.99)$$

Zapišimo nekaj členov $a_{0\alpha}^{(n)}$:

$$\begin{aligned} a_{0\alpha}^{(0)} &= \eta \\ a_{0\alpha}^{(1)} &= \eta u_{\alpha} \\ a_{0\alpha\beta}^{(2)} &= \frac{1}{m_d} P_{\alpha\beta}^{(0)} + \eta(u_{\alpha}u_{\beta} - \delta_{\alpha\beta}) \end{aligned} \quad (2.100)$$

Z enačbo (2.79) izračunajmo še tenzor napetosti $P_{\alpha\beta}^{(0)}$:

$$\begin{aligned} P_{\alpha\beta}^{(0)} &= m_d \int (\xi_{\alpha} - u_{\alpha})(\xi_{\beta} - u_{\beta}) f^{(0)} d\xi \\ P_{\alpha\beta}^{(0)} &= m_d n(\vec{x}, t) \left(\frac{1}{2\pi} \frac{m_d}{k_B T} \right)^{\frac{Dim=2}{2}} \int \left(\frac{\xi_{\alpha} - u_{\alpha}}{U_{\alpha}} \right) \left(\frac{\xi_{\beta} - u_{\beta}}{U_{\beta}} \right) e^{-\frac{m_d \left(\frac{U}{\xi - \vec{u}} \right)^2}{2k_B T}} d\xi \\ P_{\alpha\beta}^{(0)} &= \frac{m_d n(\vec{x}, t)}{2\pi\theta} \int U_{\alpha} U_{\beta} e^{-\frac{(U_{\alpha}^2 + U_{\beta}^2)}{2\theta}} dU_{\beta} dU_{\alpha} \Rightarrow \\ &\quad \underbrace{\text{Lastnost Hermitovih polinomov}}_{\begin{cases} =2\pi\theta^2 & \alpha=\beta \\ 0, & \alpha \neq \beta \end{cases}} \\ P_{\alpha\beta}^{(0)} &= \delta_{\alpha\beta} \rho(\vec{x}, t) \theta \end{aligned} \quad (2.101)$$

V matrični obliki:

$$P^{(0)} = \begin{bmatrix} \rho\theta & 0 \\ 0 & \rho\theta \end{bmatrix} \quad (2.102)$$

Z upoštevanjem enačbe stanja idealnega plina (2.5) $p = \frac{Nk_B T}{V} = n\theta m_d$ dobimo tenzor hidrostatičnega tlaka:

$$P^{(0)} = \begin{bmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{bmatrix} \quad (2.103)$$

Sedaj lahko še nekoliko poenostavimo koeficient $a_{0\alpha\beta}^{(2)}$ iz enačbe (2.100)

$$a_{0\alpha\beta}^{(2)} = \delta_{\alpha\beta} n(\vec{x}, t) \theta + \eta (u_\alpha u_\beta - \delta_{\alpha\beta}) \quad (2.104)$$

Koeficiente $a_{0\alpha}^{(n)}$ višjih stopenj bi dobili na enak način. Izpeljavo nadaljujemo z ločenim razvojem členov v enačbi (2.97).

2.3.7.1 Razvoj prvega člena BBGK

V prvem členu prepoznamo parcialni odvod koeficienta $a_\alpha^{(n)}$ po času (2.98).

$$\frac{\partial}{\partial t} \int f^{(0)} H_\alpha^{(n)} d\xi = \frac{\partial}{\partial t} a_{0\alpha}^{(n)} \quad (2.105)$$

2.3.7.2 Razvoj drugega člena BBGK

Drugi člen razvijamo dalje ob upoštevanju rekurzijske enakosti (Malaspinas, 2009) Hermitovih polinomov.

$$\xi_{i_0} H_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)} = H_{i_0 i_1 i_2 \dots i_n}^{(n+1)} + \sum_{k=1}^n \delta_{i_0 i_k} H_{i_1 i_2 \dots i_{k-1} i_{k+1} \dots i_n}^{(n-1)}, \quad n \geq 1 \quad (2.106)$$

Razvijemo za konkretni 2D primer za $n = 0, 1$ in 2:

$n = 0$

$$\vec{\nabla} \int \xi f^{(0)} \underbrace{H_\alpha^{(0)}}_1 d\xi = \vec{\nabla} \int (\xi_x f^{(0)}, \xi_y f^{(0)}) d\xi = \vec{\nabla} (u_x \eta, u_y \eta) = \vec{\nabla} (\vec{u} \eta) \quad (2.107)$$

$n = 1$ Razvijemo za $H_\alpha^{(1)} = \xi_x$, za ξ_y velja enak postopek.

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \int \xi f^{(0)} \underbrace{H_\alpha^{(1)}}_{\xi_x} d\xi &= \vec{\nabla} \int (\xi_x \xi_x f^{(0)}, \xi_y \xi_x f^{(0)}) d\xi \\ &= \vec{\nabla} \int \left(\left(H_{xx}^{(1+1)} + \sum_{k=1}^1 \delta_{xx} H^{(1-1)} \right) f^{(0)}, \left(H_{xy}^{(1+1)} + \sum_{k=1}^1 \delta_{xy} H^{(1-1)} \right) f^{(0)} \right) d\xi \\ &= \vec{\nabla} \int (H_{xx}^{(2)} f^{(0)}, H_{xy}^{(2)} f^{(0)}) d\xi + \vec{\nabla} \int (\delta_{xx} H^{(0)} f^{(0)}, \delta_{xy} H^{(0)} f^{(0)}) d\xi \\ &= \vec{\nabla} (a_{0xx}^{(2)}, a_{0xy}^{(2)}) + \vec{\nabla} \left(\frac{\delta_{xx} a^{(0)}}{\eta}, \frac{\delta_{xy} a^{(0)}}{0} \right) \end{aligned} \quad (2.108)$$

Za $H_\alpha^{(1)} = \xi_y$ dobimo:

$$\vec{\nabla} \int \xi f^{(0)} \underbrace{H_\alpha^{(1)}}_{\xi_y} d\xi = \vec{\nabla} \int (\xi_x \xi_y f^{(0)}, \xi_y \xi_y f^{(0)}) d\xi = \vec{\nabla} (a_{0xy}^{(2)}, a_{0yy}^{(2)}) + \vec{\nabla} (0, \eta) \quad (2.109)$$

$n = 2$ Razvijemo za $H_\alpha^{(2)} = \xi_x \xi_y$, za $\xi_y \xi_x$ velja enak postopek

$$\begin{aligned}
 \vec{\nabla} \int \xi f^{(0)} \underbrace{H_\alpha^{(2)}}_{\xi_x \xi_y} d\xi &= \vec{\nabla} \int (\xi_x \xi_x \xi_y f^{(0)}, \xi_y \xi_x \xi_y f^{(0)}) d\xi \\
 &= \vec{\nabla} \int \left(\left(H_{xxy}^{(2+1)} + \sum_{k=1}^2 \delta_{xi} H_x^{(2-1)} \right) f^{(0)}, \left(H_{yxy}^{(2+1)} \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \sum_{k=1}^2 \delta_{yi i_1 i_2 \dots i_{k-1} i_{k+1} \dots i_n} H_x^{(2-1)} \right) f^{(0)} \right) d\xi \tag{2.110} \\
 &= \vec{\nabla} \int \left(\left(H_{xxy}^{(3)} + \delta_{xx} H_y^{(1)} + \delta_{xy} H_x^{(1)} \right) f^{(0)}, \left(H_{yxy}^{(3)} + \delta_{yx} H_y^{(1)} + \delta_{yy} H_x^{(1)} \right) f^{(0)} \right) d\xi \\
 &= \vec{\nabla} (a_{0xxy}^{(3)}, a_{0yxy}^{(3)}) + \vec{\nabla} (\delta_{xx} a_{0y}^{(1)} + \delta_{xy} a_{0x}^{(1)}, \delta_{yx} a_{0y}^{(1)} + \delta_{yy} a_{0x}^{(1)}) \\
 &= \vec{\nabla} (a_{0xxy}^{(3)}, a_{0yxy}^{(3)}) + \vec{\nabla} (\eta u_y, \eta u_x)
 \end{aligned}$$

Za $H_\alpha^{(2)} = \xi_y \xi_x$ dobimo:

$$\begin{aligned}
 \vec{\nabla} \int \xi f^{(0)} \underbrace{H_\alpha^{(2)}}_{\xi_y \xi_x} d\xi &= \vec{\nabla} \int (\xi_x \xi_y \xi_x f^{(0)}, \xi_y \xi_y \xi_x f^{(0)}) d\xi \\
 &= \vec{\nabla} (a_{0xyx}^{(3)}, a_{0yyx}^{(3)}) + \vec{\nabla} (\eta u_y + \eta u_x) \tag{2.111}
 \end{aligned}$$

Za $H_\alpha^{(2)} = \xi_x \xi_x - 1$ dobimo:

$$\begin{aligned}
 \vec{\nabla} \int \xi f^{(0)} \underbrace{H_\alpha^{(2)}}_{\xi_x \xi_x - 1} d\xi &= \vec{\nabla} \int (\xi_x (\xi_x \xi_x - 1) f^{(0)}, \xi_y (\xi_x \xi_x - 1) f^{(0)}) d\xi \\
 &= \vec{\nabla} (a_{0xxx}^{(3)}, a_{0yxx}^{(3)}) + \vec{\nabla} (2\eta u_x) \tag{2.112}
 \end{aligned}$$

Za $H_\alpha^{(2)} = \xi_y \xi_y - 1$ dobimo:

$$\begin{aligned}
 \vec{\nabla} \int \xi f^{(0)} \underbrace{H_\alpha^{(2)}}_{\xi_y \xi_y - 1} d\xi &= \vec{\nabla} \int (\xi_x (\xi_y \xi_y - 1) f^{(0)}, \xi_y (\xi_y \xi_y - 1) f^{(0)}) d\xi \\
 &= \vec{\nabla} (a_{0xyy}^{(3)}, a_{0yyy}^{(3)}) + \vec{\nabla} (2\eta u_y) \tag{2.113}
 \end{aligned}$$

2.3.7.3 Razvoj tretjega člena BBGK

Tretji člen razvijamo ob upoštevanju formule za odvod Hermitovih polinomov, dobljene z odvajanjem enačbe (2.48).

$$\frac{\partial H_\alpha^{(n)}}{\partial \xi_{i_0}} = \sum_{k=1}^n \delta_{i_0 i_k} H_{i_1 i_2 \dots i_{k-1} i_{k+1} \dots i_n}^{(n-1)} \tag{2.114}$$

Tretji člen označimo z $F(\vec{\xi})$

$$F(\vec{\xi}) = \vec{g} \cdot \int (\vec{\nabla}_{\xi} f^{(0)}) H_{\alpha}^{(n)} d\xi = \vec{g} \cdot \left(\int \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \xi_x} H_{\alpha}^{(n)} d\xi, \int \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \xi_y} H_{\alpha}^{(n)} d\xi \right) \quad (2.115)$$

Integriramo po delih – *per partes*

$$\begin{aligned} \vec{g} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{f^{(0)} H_{\alpha}^{(n)}}_0 \Big|_{-\infty}^{+\infty} d\xi_y - \iint_{-\infty}^{\infty} f^{(0)} \underbrace{\frac{\partial H_{\alpha}^{(n)}}{\partial \xi_x}}_{\delta_i H^{(n-1)}} d\xi_x d\xi_y, \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{f^{(0)} H_{\alpha}^{(n)}}_0 \Big|_{-\infty}^{+\infty} d\xi_x \right. \\ \left. - \iint_{-\infty}^{\infty} f^{(0)} \underbrace{\frac{\partial H_{\alpha}^{(n)}}{\partial \xi_y}}_{\delta_i H^{(n-1)}} d\xi_x d\xi_y \right) d\xi_x d\xi_y \Rightarrow \\ \vec{g} \cdot \int (\vec{\nabla}_{\xi} f^{(0)}) H_{\alpha}^{(n)} d\xi = \vec{g} \left(- \iint_{-\infty}^{\infty} f^{(0)} \frac{\partial H_{\alpha}^{(n)}}{\partial \xi_x} d\xi_x d\xi_y, - \iint_{-\infty}^{\infty} f^{(0)} \frac{\partial H_{\alpha}^{(n)}}{\partial \xi_y} d\xi_x d\xi_y \right) \end{aligned} \quad (2.116)$$

Zapišimo člene za $n = 0, 1$ in 2

$n = 0$

$$\vec{g} \left(- \iint_{-\infty}^{\infty} f^{(0)} \underbrace{\frac{\partial 1}{\partial \xi_x}}_0 d\xi_x d\xi_y, - \iint_{-\infty}^{\infty} f^{(0)} \underbrace{\frac{\partial 1}{\partial \xi_y}}_0 d\xi_x d\xi_y \right) = 0 \quad (2.117)$$

$n = 1$ in $H_{\alpha}^{(1)} = \xi_x$

$$\vec{g} \left(- \iint_{-\infty}^{\infty} f^{(0)} \underbrace{\frac{\partial \xi_x}{\partial \xi_x}}_1 d\xi_x d\xi_y, - \iint_{-\infty}^{\infty} f^{(0)} \underbrace{\frac{\partial \xi_x}{\partial \xi_y}}_0 d\xi_x d\xi_y \right) = -\vec{g}(\eta, 0) = -g_x \eta \quad (2.118)$$

$n = 1$ in $H_{\alpha}^{(1)} = \xi_y$

$$\vec{g} \left(- \iint_{-\infty}^{\infty} f^{(0)} \underbrace{\frac{\partial \xi_y}{\partial \xi_x}}_0 d\xi_x d\xi_y, - \iint_{-\infty}^{\infty} f^{(0)} \underbrace{\frac{\partial \xi_y}{\partial \xi_y}}_1 d\xi_x d\xi_y \right) = -\vec{g}(0, \eta) = -g_y \eta \quad (2.119)$$

$n = 2$ in $\xi_x \xi_y$

$$\vec{g} \left(- \iint_{-\infty}^{\infty} f^{(0)} \underbrace{\frac{\partial (\xi_x \xi_y)}{\partial \xi_x}}_{\xi_y} d\xi_x d\xi_y, - \iint_{-\infty}^{\infty} f^{(0)} \underbrace{\frac{\partial (\xi_x \xi_y)}{\partial \xi_y}}_{\xi_x} d\xi_x d\xi_y \right) = -\vec{g}(\eta u_y, \eta u_x) \quad (2.120)$$

$$n = 2 \text{ in } \xi_y \xi_x$$

$$\vec{g} \left(- \iint_{-\infty}^{\infty} f^{(0)} \frac{\partial(\xi_y \xi_x)}{\partial \xi_x} d\xi_x d\xi_y, - \iint_{-\infty}^{\infty} f^{(0)} \frac{\partial(\xi_y \xi_x)}{\partial \xi_y} d\xi_x d\xi_y \right) = -\vec{g}(\eta u_y, \eta u_x) \quad (2.121)$$

$$n = 2 \text{ in } \xi_x \xi_x - 1$$

$$\vec{g} \left(- \iint_{-\infty}^{\infty} f^{(0)} \frac{\partial(\xi_x \xi_x - 1)}{\partial \xi_x} d\xi_x d\xi_y, - \iint_{-\infty}^{\infty} f^{(0)} \frac{\partial(\xi_x \xi_x - 1)}{\partial \xi_y} d\xi_x d\xi_y \right) = -\vec{g}(2\eta u_x, 0) \quad (2.122)$$

$$n = 2 \text{ in } \xi_y \xi_y - 1$$

$$\vec{g} \left(- \iint_{-\infty}^{\infty} f^{(0)} \frac{\partial(\xi_y \xi_y - 1)}{\partial \xi_x} d\xi_x d\xi_y, - \iint_{-\infty}^{\infty} f^{(0)} \frac{\partial(\xi_y \xi_y - 1)}{\partial \xi_y} d\xi_x d\xi_y \right) = -\vec{g}(0, 2\eta u_y) \quad (2.123)$$

2.3.7.4 Razvoj četrtega člena BBGK

$$-\frac{1}{\tau} \int f^{(1)} H_\alpha^{(n)} d\xi = -\frac{1}{\tau} a_{1\alpha}^{(n)} \quad (2.124)$$

Tako smo končali s projekcijo poenostavljene BBGK enačbe (2.93) na bazo Hermitovih polinomov. Zaradi jasnosti smo projicirali na bazo vsak člen enačbe (2.93) posebej. Sedaj imamo na voljo vse elemente, da lahko v sledečem poglavju nadaljujemo z iskanjem ničtega približka.

2.3.8 Približek ničtega reda in Eulerjeve enačbe

V prejšnjem poglavju smo projicirali dodatno poenostavljeno BBGK enačbo (2.93) na bazo Hermitovih polinomov. Na ta način smo dobili vse potrebne izraze, s katerimi lahko nadaljujemo z iskanjem približne rešitve ničtega reda.

Ko iščemo rešitev ničtega reda, predpostavimo, da je porazdelitvena funkcija $f = f^{(0)}$. Na ta način dobimo, da je četrti člen v enačbi (2.97) enak 0. Tako se enačba (2.93) bistveno poenostavi in lahko s členi, dobljenimi v poglavju 2.3.7, pridemo do naslednjih rešitev, ki smo jih razvrstili po stopnjah Hermitovih polinomov.

V primeru $n = 0$ dobimo kontinuiteto enačbo:

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \vec{\nabla} \eta \vec{u} = 0 \quad (2.125)$$

V primeru $n = 1$ dobimo dinamično Eulerjevo enačbo:

$$\frac{\partial(\eta \vec{u})}{\partial t} + \vec{\nabla} \left(\underset{\text{kroneckerjev produkt}}{In\theta + \eta (\vec{u} \otimes \vec{u})} \right) = \vec{g} \eta \quad (2.126)$$

Tako smo pri aproksimaciji ničtega reda BBGK enačbe (2.44) dobili Eulerjevo kontinuitetno in dinamično enačbo. Kot vemo, so Eulerjeve enačbe izpeljane ob predpostavki idealiziranih, neviskoznih tekočin. Ker ne upoštevajo strižnih napetosti, so za modeliranje realnih tekočin premalo natančne.

2.3.9 Približek prvega reda in Navier-Stokesove enačbe

V prejšnjem poglavju smo predpostavili, da je porazdelitvena funkcija enaka ravnotežni porazdelitvi $f = f^{(0)}$ in smo z enostavno vsoto projekcij členov poenostavljene BBGK enačbe, izpeljanih v poglavju 2.3.7, prišli do Eulerjevih enačb, ki predstavljajo rešitev ničtega reda po perturbacijski metodi (2.99). Pri iskanju rešitve prvega reda $f = f^{(0)} + f^{(1)}$ se enostavno seštevanje projekcij členov poenostavljene BBGK enačbe ne izide. Zaplete se že pri prvem členu poenostavljene BBGK enačbe (2.93) $\frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial t}$, ker je ta zapisan kot časovni odvod, tenzor napetosti P (2.66), ki nas loči do izpeljave dinamične enačbe, pa ne vsebuje časovnih, temveč prostorske odvode.

Časovne odvode v prvem členu poenostavljene BBGK enačbe (2.93) bomo pretvorili v prostorske s pomočjo konservativnih spremenljivk: gostote delcev η , gibalne količine $\vec{G} = \vec{u}\eta$ in gostote notranje energije $E = \rho\epsilon$ (Malaspinas, 2009). Konservativne spremenljivke imajo dobro lastnost, da se njihova vrednost po molekularnem trku ne spremeni, kar smo upoštevali z enačbami od (2.35) do (2.38), ki opisujejo značilnosti trknega operatorja. Npr. število molekul in posledično njihova gostota η se po molekularnem trku ne bo spremenilo, spremenila pa se bo njihova razporeditev po prostoru. Z drugimi besedami: spremenili se bodo prostorski, ne pa časovni odvodi. Enako velja tudi za gibalno količino in gostoto notranje energije.

Zapišimo konservativne spremenljivke:

$$\begin{aligned} G_x &= u_x \eta \\ G_y &= u_y \eta \\ E &= \rho \epsilon \end{aligned} \quad (2.127)$$

Koeficient $a_{0\alpha}^{(n)}$ iz prvega člena enačbe (2.97) bomo zapisali kot funkcijo konservativnih spremenljivk (2.127):

$$a_{0\alpha}^{(n)} = a_{0\alpha}^{(n)}(\eta(\vec{x}, t), G_x(\vec{x}, t), G_y(\vec{x}, t), E(\vec{x}, t)) \quad (2.128)$$

Sedaj lahko poiščemo totalni diferencial $a_{0\alpha}^{(n)}$ posredno podane funkcije več spremenljivk (Bronštejn in sod., 1997):

$$da_{0\alpha}^{(n)} = \frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial \eta} d\eta + \frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial G_x} dG_x + \frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial G_y} dG_y + \frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial E} dE \quad (2.129)$$

Tako dobimo parcialni odvod po času prvega člena enačbe (2.97), zapisan s konservativnimi spremenljivkami:

$$\frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial t} = \frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial G_x} \frac{\partial G_x}{\partial t} + \frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial G_y} \frac{\partial G_y}{\partial t} + \frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial t} \quad (2.130)$$

V enačbi (2.130) imamo za dvodimenzionalni primer štiri neznane odvode koeficienta $a_{0\alpha}^{(n)}$ po konservativnih spremenljivkah ($\frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial \eta}$, $\frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial G_x}$, $\frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial G_y}$ in $\frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial E}$) ter štiri neznane odvode konservativnih spremenljivk po času: $\frac{\partial \eta}{\partial t}$, $\frac{\partial G_x}{\partial t}$, $\frac{\partial G_y}{\partial t}$ in $\frac{\partial E}{\partial t}$. V nadaljevanju bomo najprej izpeljali odvode konservativnih spremenljivk po času in kasneje še odvode koeficienta $a_{0\alpha}^{(n)}$ po konservativnih spremenljivkah.

Odvod gostote delcev po času $\frac{\partial \eta}{\partial t}$ dobimo s seštevanjem projekcij členov ničtega reda Hermitovih polinomov, izpeljanih v poglavju 2.3.7, in ob upoštevanju, da je integral trknega operatorja konservativne spremenljivke enak nič (2.36).

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = -\vec{\nabla} \eta \vec{u} \quad (2.131)$$

Podobno $\frac{\partial(\eta u_x)}{\partial t}$ dobimo odvod gibalne količine po času s seštevanjem projekcij členov prvega reda Hermitovih polinomov:

$$\frac{\partial(\eta u_x)}{\partial t} = -\vec{\nabla}(\eta u_x^2, \eta u_x u_y) - \vec{\nabla}(\eta \theta, 0) + g_x \eta \quad (2.132)$$

$$\frac{\partial(\eta u_y)}{\partial t} = -\vec{\nabla}(\eta u_y u_x, \eta u_y^2) - \vec{\nabla}(0, \eta \theta) + g_y \eta \quad (2.133)$$

Po zgledu v enačbi (2.84) lahko zadnji dve enačbi zapišemo tudi krajše:

$$\eta \frac{d\vec{u}}{dt} + \vec{\nabla}(\eta\theta) = \vec{g}\eta \quad (2.134)$$

Izračun odvoda notranje energije po času $\frac{\partial(\rho\epsilon)}{\partial t}$ pa zahteva nekoliko drugačen pristop in nekoliko več dela. Začnemo tako, da z uporabo nastavka (2.135) preoblikujemo enačbo (2.134)

$$\frac{d(\vec{u}^2)}{dt} = 2 \frac{d(\vec{u})}{dt} \vec{u} \quad (2.135)$$

Dobimo zvezo, ki jo bomo kasneje vstavili v enačbo (2.144)

$$\begin{aligned} \eta \frac{d\left(\frac{\vec{u}^2}{2}\right)}{dt} &= -\vec{\nabla}(\eta\theta)\vec{u} + (\vec{g}\eta)\vec{u} \\ \eta \left(\frac{\partial \frac{\vec{u}^2}{2}}{\partial t} + \vec{u}\vec{\nabla} \frac{\vec{u}^2}{2} \right) &= -\vec{\nabla}(\eta\theta)\vec{u} + (\vec{g}\eta)\vec{u} \\ \eta \frac{\partial \frac{\vec{u}^2}{2}}{\partial t} + \vec{u}\eta\vec{\nabla} \frac{\vec{u}^2}{2} + \underbrace{\frac{\vec{u}^2}{2} \frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\vec{u}^2}{2} \vec{\nabla}(\vec{u}\eta)}_{0=\text{kont. enačba}} &= -\vec{\nabla}(\eta\theta)\vec{u} + (\vec{g}\eta)\vec{u} \end{aligned} \quad (2.136)$$

Nadaljujemo tako, da projiciramo poenostavljeno BBGK enačbo (2.93) na bazo $H_{xx}^{(2)}$ in dobimo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int f^{(0)} H_{xx}^{(2)} d\xi + \vec{\nabla} \int \vec{\xi} f^{(0)} H_{xx}^{(2)} d\xi + \vec{g} \cdot \int \vec{\nabla}_{\xi} f^{(0)} H_{xx}^{(2)} d\xi \\ = -\frac{1}{\tau} \int (f - f^{(0)}) H_{xx}^{(2)} d\xi \end{aligned} \quad (2.137)$$

Desno stran enačbe lahko z upoštevanjem lastnosti trknega operatorja (2.35) še poenostavimo:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\tau} \int (f - f^{(0)}) H_{xx}^{(2)} d\xi &= -\frac{1}{\tau} \int (f - f^{(0)}) (\xi_x^2 - 1) d\xi \\ &= -\frac{1}{\tau} \int (f - f^{(0)}) \xi_x^2 d\xi + \underbrace{\frac{1}{\tau} \int (f - f^{(0)}) d\xi}_{=0, \text{ enačba (2.35)}} \end{aligned} \quad (2.138)$$

Enako storimo še za projekcijo poenostavljenega BBGK enačbe (2.93) na bazo Hermitovega polinoma $H_{yy}^{(2)}$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int f^{(0)} H_{yy}^{(2)} d\xi + \vec{\nabla} \int \vec{\xi} f^{(0)} H_{yy}^{(2)} d\xi + \vec{g} \cdot \int \vec{\nabla}_{\xi} f^{(0)} H_{yy}^{(2)} d\xi = -\frac{1}{\tau} \int (f - f^{(0)}) \xi_y^2 d\xi \quad (2.139)$$

Izračunajmo koeficienta a_{0xx} in a_{0yy} iz enačbe (2.104).

$$a_{0xx} = \eta(-1 + u_x^2 + \theta), \quad a_{0yy} = \eta(-1 + u_y^2 + \theta) \quad (2.140)$$

Vstavimo člena (2.140) in ostale člene, izračunane v poglavju 2.3.7 v enačbi (2.137) in (2.139), ter dobimo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_{0xx}}{\partial t} &= \frac{\partial(\eta(-1 + u_x^2 + \theta))}{\partial t} \\ &= -\vec{\nabla} \left(u_x \eta(-1 + u_x^2 + 3\theta), u_y \eta(-1 + u_x^2 + \theta) \right) + \vec{g}(2\eta u_x, 0) \\ &\quad - \frac{1}{\tau} \int (f - f^{(0)}) \xi_x^2 d\xi \end{aligned} \quad (2.141)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_{0yy}}{\partial t} &= \frac{\partial(\eta(-1 + u_y^2 + \theta))}{\partial t} \\ &= -\vec{\nabla} \left(u_x \eta(-1 + u_y^2 + \theta), u_y \eta(-1 + u_y^2 + 3\theta) \right) + \vec{g}(0, 2\eta u_y) \\ &\quad - \frac{1}{\tau} \int (f - f^{(0)}) \xi_y^2 d\xi \end{aligned} \quad (2.142)$$

Seštejemo zgornji dve enačbi, ju delimo z dve ter pri tem upoštevamo lastnost trknega operatorja (2.38):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\eta \left(-1 + \frac{u_x^2 + u_y^2}{2} + \theta \right) \right) \\ &= -\vec{\nabla} \left(\vec{u} \eta \left(-1 + \frac{u_x^2 + u_y^2}{2} + 2\theta \right) \right) + \vec{g}(\eta u_x, \eta u_y) \\ &\quad - \frac{1}{2\tau} \int \underbrace{\xi^2 (f - f^{(0)})}_{=0, \text{ enačba (2.38)}} d\xi \end{aligned} \quad (2.143)$$

Odvajamo člene zgornje enačbe:

$$\begin{aligned} \underbrace{-\frac{\partial \eta}{\partial t}}_0 + \frac{\partial \left(\eta \frac{\vec{u}^2}{2} \right)}{\partial t} + \frac{\partial \eta \theta}{\partial t} &= \underbrace{\vec{\nabla}(\vec{u} \eta)}_0 - \vec{\nabla} \left(\vec{u} \eta \frac{\vec{u}^2}{2} \right) - 2\vec{\nabla}(\vec{u} \eta \theta) + \vec{g}(\eta u_x, \eta u_y) = \\ \frac{\partial(\eta \theta)}{\partial t} + \eta \frac{\partial \left(\frac{\vec{u}^2}{2} \right)}{\partial t} + \vec{u} \eta \vec{\nabla} \frac{\vec{u}^2}{2} + \frac{\vec{u}^2}{2} \frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\vec{u}^2}{2} \vec{\nabla}(\vec{u} \eta) - \vec{g}(\eta u_x, \eta u_y) &= -2\vec{\nabla}(\vec{u} \eta \theta) \\ &= -\vec{u} \vec{\nabla}(\eta \theta), \text{ enačba (2.136)} \end{aligned} \quad (2.144)$$

Na koncu dobimo izraz za parcialni odvod gostote notranje energije po času:

$$\frac{\partial(\eta \theta)}{\partial t} = \vec{u} \vec{\nabla}(\eta \theta) - 2\vec{\nabla}(\vec{u} \eta \theta) \quad (2.145)$$

Tako smo končali z izpeljavo štirih neznanih odvodov konservativnih spremenljivk po času iz enačbe (2.130). Ponovno zapišimo te pogoje:

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = -\vec{\nabla} \eta \vec{u} \quad (2.146)$$

$$\frac{\partial (\eta u_x)}{\partial t} = -\vec{\nabla} (\eta u_x^2, \eta u_x u_y) - \vec{\nabla} (\eta \theta, 0) + g_x \eta \quad (2.147)$$

$$\frac{\partial (\eta u_y)}{\partial t} = -\vec{\nabla} (\eta u_y u_x, \eta u_y^2) - \vec{\nabla} (0, \eta \theta) + g_y \eta \quad (2.148)$$

$$\frac{\partial (\eta \theta)}{\partial t} = \vec{u} \vec{\nabla} (\eta \theta) - 2 \vec{\nabla} (\vec{u} \eta \theta) \quad (2.149)$$

Vstavimo pogoje (2.146) do (2.149) v enačbo (2.130):

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial t} &= \frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial \eta} (-\vec{\nabla} \eta \vec{u}) + \frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial G_x} (-\vec{\nabla} (\eta u_x^2, \eta u_x u_y) - \vec{\nabla} (\eta \theta, 0) + g_x \eta) \\ &\quad + \frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial G_y} (-\vec{\nabla} (\eta u_y u_x, \eta u_y^2) - \vec{\nabla} (0, \eta \theta) + g_y \eta) \\ &\quad + \frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial E} (\vec{u} \vec{\nabla} (\eta \theta) - 2 \vec{\nabla} (\vec{u} \eta \theta)) \end{aligned} \quad (2.150)$$

Po končani izpeljavi časovnih odvodov konservativnih spremenljivk nam preostane še izračun neznanih odvodov različnih stopenj koeficienta $a_{0\alpha}^{(n)}$ po konservativnih spremenljivkah: $\frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial \eta}$, $\frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial G_x}$, $\frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial G_y}$ in $\frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial E}$.

Začeli bomo z izračunom parcialnih odvodov koeficienta $a_{0\alpha}^{(n)}$ po gostoti delcev η . Koeficient $a_{0\alpha}^{(n)}$ izrazimo s konservativnimi spremenljivkami iz enačbe (2.127) ter odvajajmo po gostoti delcev η do drugega reda Hermitovih polinomov:

Pri $n = 0$ dobimo:

$$a_0^{(0)} = \eta \Rightarrow \frac{\partial a_0^{(0)}}{\partial \eta} = \frac{\partial \eta}{\partial \eta} = 1 \quad (2.151)$$

Pri $n = 1$ dobimo:

$$a_{0\alpha}^{(1)} = \eta u_\alpha = G_\alpha \Rightarrow \frac{\partial a_{0\alpha}^{(1)}}{\partial \eta} = \frac{\partial G_\alpha}{\partial \eta} = 0 \quad (2.152)$$

Pri $n = 2$ dobimo:

$$a_{0\alpha\beta}^{(2)} = \delta_{\alpha\beta} n(\vec{x}, t) \theta + \eta (u_\alpha u_\beta - \delta_{\alpha\beta}) = \delta_{\alpha\beta} E - \eta \delta_{\alpha\beta} + \frac{G_\alpha G_\beta}{\eta} \Rightarrow \quad (2.153)$$

$$\frac{\partial a_{0\alpha\beta}^{(2)}}{\partial \eta} = -\delta_{\alpha\beta} - \frac{G_\alpha G_\beta}{\eta^2} = -\delta_{\alpha\beta} - u_\alpha u_\beta$$

Podobno izračunamo parcialne odvode po G_α do drugega reda in dobimo:

Pri $n = 0$ dobimo:

$$\frac{\partial a_0^{(0)}}{\partial G_\alpha} = \frac{\partial \eta}{\partial G_\alpha} = 0 \quad (2.154)$$

Pri $n = 1$ dobimo:

$$\frac{\partial a_{0\alpha}^{(1)}}{\partial G_\beta} = \frac{\partial G_\alpha}{\partial G_\beta} = \delta_{\alpha\beta} \quad (2.155)$$

Pri $n = 2$ dobimo:

$$a_{0\alpha\beta}^{(2)} = \delta_{\alpha\beta} E - \eta + \frac{G_\alpha G_\beta}{\eta} \Rightarrow \frac{\partial a_{0\alpha\beta}^{(2)}}{\partial G_\gamma} = \delta_{\gamma\beta} u_\alpha + \delta_{\gamma\alpha} u_\beta \quad (2.156)$$

Podobno izračunamo parcialne odvode po E do drugega reda in dobimo:

Pri $n = 0$ dobimo:

$$\frac{\partial a_0^{(0)}}{\partial E} = \frac{\partial \eta}{\partial E} = 0 \quad (2.157)$$

Pri $n = 1$ dobimo:

$$\frac{\partial a_{0\alpha}^{(1)}}{\partial E} = \frac{\partial G_\alpha}{\partial E} = 0 \quad (2.158)$$

Pri $n = 2$ dobimo:

$$a_{0\alpha\beta}^{(2)} = \delta_{\alpha\beta} E - \eta + \frac{G_\alpha G_\beta}{\eta} \Rightarrow \frac{\partial a_{0\alpha\beta}^{(2)}}{\partial E} = \delta_{\alpha\beta} \quad (2.159)$$

Zapišimo prvih nekaj členov $\frac{\partial a_0^{(n)}}{\partial t}$ enačbe (2.150)

Pri $n = 0$ dobimo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_0^{(0)}}{\partial t} &= \overbrace{\frac{\partial a_0^{(0)}}{\partial \eta}}^1 (-\vec{\nabla} \eta \vec{u}) + \overbrace{\frac{\partial a_0^{(0)}}{\partial G_x}}^0 (-\vec{\nabla}(\eta u_x^2, \eta u_x u_y) - \vec{\nabla}(\eta \theta, 0) + g_x \eta) + \\ &+ \underbrace{\frac{\partial a_0^{(0)}}{\partial G_y}}_0 (-\vec{\nabla}(\eta u_y u_x, \eta u_y^2) - \vec{\nabla}(0, \eta \theta) + g_y \eta) + \underbrace{\frac{\partial a_0^{(0)}}{\partial E}}_0 (\vec{u} \vec{\nabla}(\eta \theta) - 2 \vec{\nabla}(\vec{u} \eta \theta)) \Rightarrow \\ \frac{\partial a_0^{(0)}}{\partial t} &= -1 \vec{\nabla} \eta \vec{u} \end{aligned} \quad (2.160)$$

Pri $n = 1$ dobimo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_{0x}^{(1)}}{\partial t} &= \overbrace{\frac{\partial a_{0x}^{(1)}}{\partial \eta}}^0 (-\vec{\nabla} \eta \vec{u}) + \overbrace{\frac{\partial a_{0x}^{(1)}}{\partial G_x}}^1 (-\vec{\nabla}(\eta u_x^2, \eta u_x u_y) - \vec{\nabla}(\eta \theta, 0) + g_x \eta) \\ &\quad + \overbrace{\frac{\partial a_{0x}^{(1)}}{\partial G_y}}^0 (-\vec{\nabla}(\eta u_y u_x, \eta u_y^2) - \vec{\nabla}(0, \eta \theta) + g_y \eta) \\ &\quad + \overbrace{\frac{\partial a_{0x}^{(1)}}{\partial E}}^0 (\vec{u} \vec{\nabla}(\eta \theta) - 2 \vec{\nabla}(\vec{u} \eta \theta)) \Rightarrow \end{aligned} \quad (2.161)$$

$$\frac{\partial a_{0x}^{(1)}}{\partial t} = -\vec{\nabla}(\eta u_x^2 + \eta \theta, \eta u_x u_y) + g_x \eta$$

$$\frac{\partial a_{0y}^{(1)}}{\partial t} = -\vec{\nabla}(\eta u_y u_x, \eta u_y^2 + \eta \theta,) + g_y \eta \quad (2.162)$$

Pri $n = 2$ dobimo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_{0xx}^{(2)}}{\partial t} &= \overbrace{\frac{\partial a_{0xx}^{(2)}}{\partial \eta}}^{(-1-u_x^2)} (-\vec{\nabla} \eta \vec{u}) + \overbrace{\frac{\partial a_{0xx}^{(2)}}{\partial G_x}}^{(2u_x)} (-\vec{\nabla}(\eta u_x^2, \eta u_x u_y) - \vec{\nabla}(\eta \theta, 0) + g_x \eta) \\ &\quad + \overbrace{\frac{\partial a_{0xx}^{(2)}}{\partial G_y}}^0 (-\vec{\nabla}(\eta u_y u_x, \eta u_y^2) - \vec{\nabla}(0, \eta \theta) + g_y \eta) \\ &\quad + \overbrace{\frac{\partial a_{0xx}^{(2)}}{\partial E}}^1 (\vec{u} \vec{\nabla}(\eta \theta) - 2 \vec{\nabla}(\vec{u} \eta \theta)) \end{aligned} \quad (2.163)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_{0xx}^{(2)}}{\partial t} &= (-1 - u_x^2)(-\vec{\nabla} \eta \vec{u}) - 2u_x \vec{\nabla}(\eta u_x^2 + \eta \theta, \eta u_x u_y) + 2u_x g_x \eta \\ &\quad + (\vec{u} \vec{\nabla}(\eta \theta) - 2 \vec{\nabla}(\vec{u} \eta \theta)) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_{0yy}^{(2)}}{\partial t} &= (-1 - u_y^2)(-\vec{\nabla} \eta \vec{u}) - 2u_y \vec{\nabla}(\eta u_x u_y, \eta u_y^2 + \eta \theta) + 2u_y g_y \eta \\ &\quad + (\vec{u} \vec{\nabla}(\eta \theta) - 2 \vec{\nabla}(\vec{u} \eta \theta)) \end{aligned} \quad (2.164)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_{0xy}^{(2)}}{\partial t} &= (-u_x u_y)(-\vec{\nabla} \eta \vec{u}) - u_y \vec{\nabla}(\eta u_x^2 + \eta \theta, \eta u_x u_y) - u_x \vec{\nabla}(\eta u_x u_y, \eta u_y^2 + \eta \theta) \\ &\quad + u_x g_x \eta + u_y g_y \eta \end{aligned} \quad (2.165)$$

Sedaj imamo znane vse komponente, da lahko izračunamo koeficiente $a_{1\alpha}^{(n)}$. Prikazali bomo le izračun za $a_1^{(0)}$, $a_{1x}^{(1)}$, $\{a_{1xx}^{(2)}\}^3$ in $\{a_{1xx}^{(2)}\}^2$. Označba $\{\}^n$ pomeni, do katere stopnje Hermitovih polinomov smo razvili ravnotežno funkcijo $f^{(0)}$ v enačbi (2.97). To je pomembno predvsem za izračun $\{a_{1xx}^{(2)}\}^2$, kjer bodo členi $a_0^{(3)}$ zaradi ortogonalnosti Hermitovih polinomov enaki nič (enačbe (2.111) do (2.113)).

Členi $a_1^{(0)}$, $a_1^{(1)}$ ne vsebujejo členov a_0 s stopnjo, večjo od dve, zato je njihova vrednost enaka za vsak razvoj, večji od druge stopnje.

$$-\frac{1}{\tau} a_1^{(n)} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \int f^{(0)} H_\alpha^{(n)} d\xi}_{1.\text{člen}} + \underbrace{\vec{\nabla} \int \xi f^{(0)} H_\alpha^{(n)} d\xi}_{2.\text{člen}} + \underbrace{\vec{g} \cdot \int \vec{\nabla}_\xi f^{(0)} H_\alpha^{(n)} d\xi}_{3.\text{člen}} \quad (2.166)$$

$$-\frac{1}{\tau} a_1^{(0)} = -\vec{\nabla}(\eta \vec{u}) + \vec{\nabla}(\vec{u} \eta) = 0 \quad (2.167)$$

$$-\frac{1}{\tau} a_{1x}^{(1)} = -\vec{\nabla}(\eta u_x^2 + \eta \theta, \eta u_x u_y) + \vec{\nabla}(n\theta - n + n u_x^2 + \eta, \eta u_x u_y) + g_x \eta - g_x \eta = 0 \quad (2.168)$$

Izračun člena $\{a_{1xx}^{(2)}\}^3$:

$$1.\text{člen} \frac{\partial \{a_{0xx}^{(2)}\}^3}{\partial t} = (1 + u_x^2)(\vec{\nabla} \eta \vec{u}) - 2u_x \vec{\nabla}(\eta u_x^2 + \eta \theta, \eta u_x u_y) + 2u_x g_x \eta + \vec{u} \vec{\nabla}(\eta \theta) - 2\vec{\nabla}(\vec{u} \eta \theta) \quad (2.169)$$

$$2.\text{člen} \vec{\nabla} \int \xi f^{(0)} \underbrace{H_\alpha^{(2)}}_{\xi_x \xi_x - 1} d\xi = \vec{\nabla}(a_{0xxx}^{(3)}, a_{0yxx}^{(3)}) + \vec{\nabla}(2\eta u_x, 0) = \vec{\nabla}(\eta u_x^3 + 3u_x \eta(\theta - 1) + 2\eta u_x, \eta u_x^2 u_y + \eta u_y(\theta - 1)) \quad (2.170)$$

$$3.\text{člen} \vec{g} \cdot \int \vec{\nabla}_\xi f^{(0)} H_\alpha^{(n)} d\xi = -\vec{g}(2\eta u_x, 0) \quad (2.171)$$

Odvajajmo 1. člen:

$$\begin{aligned} & (1 + u_x^2)(\vec{\nabla} \eta \vec{u}) - 2u_x \vec{\nabla}(\eta u_x^2 + \eta \theta, \eta u_x u_y) + 2u_x g_x \eta + (\vec{u} \vec{\nabla}(\eta \theta) - 2\vec{\nabla}(\vec{u} \eta \theta)) = \\ & = n \frac{\partial(ux)}{\partial x} + ux \frac{\partial(n)}{\partial x} + n \frac{\partial(uy)}{\partial y} + uy \frac{\partial(n)}{\partial y} + u_x^2 n \frac{\partial(ux)}{\partial x} + u_x^3 \frac{\partial(n)}{\partial x} + u_x^2 n \frac{\partial(uy)}{\partial y} \\ & \quad + u_x^2 uy \frac{\partial(n)}{\partial y} - 4u_x^2 \eta \frac{\partial(u_x)}{\partial x} - 2u_x^3 \frac{\partial(\eta)}{\partial x} - 2u_x \eta \frac{\partial(\theta)}{\partial x} - 2u_x \theta \frac{\partial(\eta)}{\partial x} \\ & \quad - 2\eta u_x^2 \frac{\partial(u_y)}{\partial y} - 2u_x \eta u_y \frac{\partial(u_x)}{\partial y} - 2u_x^2 u_y \frac{\partial(\eta)}{\partial y} - \vec{u} \eta \vec{\nabla}(\theta) - \theta \vec{u} \vec{\nabla}(\eta) \\ & \quad - 2\eta \theta \vec{\nabla}(\vec{u}) + 2u_x g_x \eta \end{aligned} \quad (2.172)$$

Odvajajmo 2. člen:

$$\begin{aligned}
& \vec{\nabla} \left(\eta u_x^3 + 3u_x \eta (\theta - 1) + 2\eta u_x, \eta u_x^2 u_y + \eta u_y (\theta - 1) \right) = \\
& = u_x^3 \frac{\partial(\eta)}{\partial x} + \eta 3u_x^2 \frac{\partial(u_x)}{\partial x} + 3u_x \eta \frac{\partial(\theta)}{\partial x} + 3u_x \theta \frac{\partial(\eta)}{\partial x} + 3\eta \theta \frac{\partial(u_x)}{\partial x} - 3u_x \frac{\partial(\eta)}{\partial x} \\
& \quad - 3\eta \frac{\partial(u_x)}{\partial x} + 2\eta \frac{\partial(u_x)}{\partial x} + 2u_x \frac{\partial(\eta)}{\partial x} + 2\eta u_x u_y \frac{\partial(u_x)}{\partial y} + u_x^2 u_y \frac{\partial(\eta)}{\partial y} \\
& \quad + \eta u_x^2 \frac{\partial(u_y)}{\partial y} + \theta \eta \frac{\partial(u_y)}{\partial y} + \theta u_y \frac{\partial(\eta)}{\partial y} + \eta u_y \frac{\partial(\theta)}{\partial y} - \eta \frac{\partial(u_y)}{\partial y} \\
& \quad - u_y \frac{\partial(\eta)}{\partial y}
\end{aligned} \tag{2.173}$$

Seštejmo člene od 1 do 3 (enačbe (2.172), (2.173) in (2.171)) in dobimo:

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{\tau} \{a_{1xx}^{(2)}\}^3 &= 3\eta \theta \frac{\partial(u_x)}{\partial x} + \theta \eta \frac{\partial(u_y)}{\partial y} + u_x \theta \frac{\partial(\eta)}{\partial x} + \theta u_y \frac{\partial(\eta)}{\partial y} + u_x \eta \frac{\partial(\theta)}{\partial x} \\
& \quad + \eta u_y \frac{\partial(\theta)}{\partial y} - \vec{u} \eta \vec{\nabla}(\theta) - \theta \vec{u} \vec{\nabla}(\eta) - 2\eta \theta \vec{\nabla}(\vec{u}) \Rightarrow \\
\{a_{1xx}^{(2)}\}^3 &= -\tau \theta \eta \left(2 \frac{\partial(u_x)}{\partial x} - \vec{\nabla} \vec{u} \right)
\end{aligned} \tag{2.174}$$

Izračun ostalih členov je potekal na enak način, zato podajamo le končne rezultate, pridobljene s programom Mathematica (Wolfram Research, 2010).

$$\begin{aligned}
a_{1y}^{(1)} &= 0 \\
\{a_{1xy}^{(2)}\}^3 &= \{a_{1yx}^{(2)}\}^3 = -\tau \eta \theta \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) \\
\{a_{1yy}^{(2)}\}^3 &= -\tau \eta \theta \left(2 \frac{\partial u_y}{\partial y} - \vec{\nabla} \vec{u} \right)
\end{aligned} \tag{2.175}$$

V izračunu člena $\{a_{1xx}^{(2)}\}^2$ bomo upoštevali poenostavitve konstantne temperature in majhnih vrednosti Machovih hitrosti (2.40). V primeru konstantne temperature lahko vzamemo, da je brezdimenzijska hitrost zvoka enaka ena $c_s = \sqrt{\theta} = 1$ (enačba (2.41)). Upoštevanje majhnih Machovih števil bo potekalo tako, da bomo v enačbah zanemarili člene, ki so približno enaki nič, $u^2 \approx u^3 \approx 0$.

Tukaj naj omenimo pomembno podrobnost, dobljeno s poenostavitvijo enačb z majhnim Machovim številom. Ker je hitrost zvoka v nestisljivih tekočinah neskončna (poglavje 2.2.1), bi v primeru računa s formalno nestisljivimi tekočinami morali zanemariti tudi člene s hitrostjo $u^1 \approx 0$, torej vse člene, v katerih nastopajo hitrosti, in bi tako dobili nesmiselne rezultate. Zato velja, da morajo biti tekočine, če jih želimo modelirati po MBM, malo stisljive in ne nestisljive tekočine.

Izračun člena $\{a_{1xx}^{(2)}\}^2$:

$$\begin{aligned} \text{1. člen } \frac{\partial \{a_{0xx}^{(2)}\}^2}{\partial t} &= (1 + u_x^2)(\vec{\nabla}\eta\vec{u}) - 2u_x\vec{\nabla}(\eta u_x^2 + \eta\theta, \eta u_x u_y) + 2u_x g_x \eta - \theta\vec{\nabla}(\vec{u}\eta) \end{aligned} \quad (2.176)$$

V prvem členu smo upoštevali, da lahko spremembo notranje energije po času v primeru konstantne temperature zapišemo s pomočjo kontinuitetne enačbe $\frac{\partial(\theta\eta)}{\partial t} = -\theta\vec{\nabla}(\vec{u}\eta)$

$$\text{2. člen } \vec{\nabla} \int \xi^{\vec{f}} f^{(0)} \underbrace{H_\alpha^{(2)}}_{\xi_x \xi_x^{-1}} d\xi = \vec{\nabla} \left(\underbrace{a_{0xxx}^{(3)}, a_{0yxx}^{(3)}}_{0,0 \text{ če } n=2} \right) + \vec{\nabla}(2\eta u_x, 0) = \vec{\nabla}(2\eta u_x, 0) \quad (2.177)$$

V drugem členu smo upoštevali, da smo ravnotežno funkcijo razvili le do druge stopnje in so zato koeficienti $a_0^{(3)} = 0$.

$$\text{3. člen } \underbrace{\vec{g} \cdot \int \vec{\nabla}_\xi f^{(0)} H_\alpha^{(n)} d\xi}_{\text{3. člen}} = -\vec{g}(2\eta u_x, 0) \quad (2.178)$$

Ko razširimo vse odvode in zanemarimo člene z majhnim Machovim številom, dobimo:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\tau} \{a_{1xx}^{(2)}\}^2 &= \vec{\nabla}\eta\vec{u} + \underbrace{u_x^2 n}_{\approx 0} \frac{\partial(ux)}{\partial x} + \underbrace{u_x^3}_{\approx 0} \frac{\partial(n)}{\partial x} + \underbrace{u_x^2 n}_{\approx 0} \frac{\partial(uy)}{\partial y} + \underbrace{u_x^2 u_y}_{\approx 0} \frac{\partial(n)}{\partial y} \\ &\quad - 4 \underbrace{u_x^2 \eta}_{\approx 0} \frac{\partial(u_x)}{\partial x} - \underbrace{2u_x^3}_{\approx 0} \frac{\partial(\eta)}{\partial x} - 2u_x \eta \frac{\partial(\theta)}{\partial x} - 2u_x \theta \frac{\partial(\eta)}{\partial x} \\ &\quad - 2 \underbrace{\eta u_x^2}_{\approx 0} \frac{\partial(u_y)}{\partial y} - 2 \underbrace{u_x \eta u_y}_{\approx 0} \frac{\partial(u_x)}{\partial y} - 2 \underbrace{u_x^2 u_y}_{\approx 0} \frac{\partial(\eta)}{\partial y} - \theta \vec{\nabla}(\vec{u}\eta) \\ &\quad + 2ux \frac{\partial(n)}{\partial x} + 2n \frac{\partial(ux)}{\partial x} \end{aligned} \quad (2.179)$$

Upoštevam še konstantno temperaturo $\theta = 1$ (enačba (2.41)) in dobimo končno obliko:

$$\{a_{1xx}^{(2)}\}^2 = -\tau 2\eta \frac{\partial(u_x)}{\partial x} \quad (2.180)$$

Na enak način izračunamo še ostale člene in dobimo:

$$\begin{aligned} \{a_{1yy}^{(2)}\}^2 &= -\tau 2\eta \frac{\partial(u_y)}{\partial y} \\ \{a_{1xy}^{(2)}\}^2 &= \{a_{1yx}^{(2)}\}^2 = -\tau n \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) \end{aligned} \quad (2.181)$$

Splošni zapis za tridimenzionalni primer: $\{a_{1\alpha\beta}^{(2)}\}^3 = -\tau\eta\theta\Lambda$

$$\Lambda_{\alpha\beta} = \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{Dim = 3} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \quad (2.182)$$

Splošni zapis za tridimenzionalni primer: $\{a_{1\alpha\beta}^{(2)}\}^2 = -\tau\eta\mathbf{S}$

$$\mathbf{S}_{\alpha\beta} = \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \quad (2.183)$$

Sedaj lahko sestavimo neravnotežno funkcijo $f^{(1)}$ z njenim zapisom v posplošeno Fourierovo vrsto s Hermitovimi polinomi do drugega reda:

$$\begin{aligned} f^{(1)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) &= \omega \sum_{n=0}^2 \frac{1}{n!} H_\alpha^{(n)}(\vec{\xi}) a_{1\alpha}^{(n)}(\vec{x}, t) \\ &= \frac{\omega}{2} \left(2H_{xy}^{(2)} a_{1xy}^{(2)} + H_{xx}^{(2)} a_{1xx}^{(2)} + H_{yy}^{(2)} a_{1yy}^{(2)} \right) \end{aligned} \quad (2.184)$$

Vstavimo vrednosti izračunanih koeficientov:

$$\begin{aligned} \{f^{(1)}\}^3 &= \omega \left(\frac{H^{(0)} \overbrace{a_1^{(0)}}^0}{0!} + \frac{H_x^{(1)} \overbrace{a_{1x}^{(1)}}^0}{1!} + \frac{H_y^{(1)} \overbrace{a_{1y}^{(1)}}^0}{1!} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2!} \left(H_{xx}^{(2)} \{a_{1xx}^{(2)}\}^3 + H_{xy}^{(2)} \{a_{1xy}^{(2)}\}^3 + H_{yx}^{(2)} \{a_{1yx}^{(2)}\}^3 + H_{yy}^{(2)} \{a_{1yy}^{(2)}\}^3 \right) \right) \quad (2.185) \\ &\Rightarrow \\ \{f^{(1)}\}^3 &= -\frac{\omega\tau\eta\theta}{2} \left(2\xi_x \xi_y \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) + (\xi_x^2 - 1) \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) \right. \\ &\quad \left. + (\xi_y^2 - 1) \left(\frac{\partial u_y}{\partial y} - \frac{\partial u_x}{\partial x} \right) \right) \end{aligned}$$

Podobno:

$$\{f^{(1)}\}^2 = -\frac{\omega\tau\eta}{2} \left(2\xi_x \xi_y \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) + (\xi_x^2 - 1) \left(2 \frac{\partial u_x}{\partial x} \right) + (\xi_y^2 - 1) \left(2 \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) \right) \quad (2.186)$$

Izračunajmo komponente tenzorja napetosti neravnotežne porazdelitvene funkcije $\{f^{(1)}\}^3$:

$$\begin{aligned} \{P_{\alpha\beta}^{(1)}\}^3 &= m_d \int \{f^{(1)}\}^3 (\xi_\alpha - u_\alpha)(\xi_\beta - u_\beta) d\xi \\ \{P_{xx}^{(1)}\}^3 &= -\tau\rho\theta \left(2 \frac{\partial u_x}{\partial x} - \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) \right) \\ \{P_{yy}^{(1)}\}^3 &= -\tau\rho\theta \left(2 \frac{\partial u_y}{\partial y} - \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) \right) \\ \{P_{xy}^{(1)}\}^3 &= \{P_{yx}^{(1)}\}^3 = -\tau\rho\theta \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) \end{aligned} \quad (2.187)$$

Splošen zapis enačb (2.187):

$$\{P_{\alpha\beta}^{(1)}\}^3 = - \underbrace{\tau\rho\theta}_{\substack{\mu=\text{din.} \\ \text{viskoznost}}} \underbrace{\left[\left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right) - \frac{2}{\text{Dim} = 3} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \right]}_{\Lambda} \quad (2.188)$$

Podobno bi dobili v primeru razvoja ravnotežne porazdelitvene funkcije do druge stopnje Hermitovih polinomov:

$$\{P_{\alpha\beta}^{(1)}\}^2 = - \underbrace{\tau\rho}_{\substack{\mu=\text{din.} \\ \text{viskoznost}}} \underbrace{\left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right)}_S \quad (2.189)$$

Tukaj smo z μ označili dinamično viskoznost tekočine. Tenzor $P^{(1)}$ je v matričnem zapisu enak:

$$\begin{aligned} \{P^{(1)}\}^3 &= -\tau\rho\theta[\Lambda] = -\mu[\Lambda] \\ \{P^{(1)}\}^2 &= -\tau\rho[S] = -\mu[S] \end{aligned} \quad (2.190)$$

Celoten tenzor napetosti dobimo z enačbo (2.191):

$$P_{\alpha\beta} = P_{\alpha\beta}^{(0)} + P_{\alpha\beta}^{(1)} \quad (2.191)$$

Spomnimo se enačbe za $P^{(0)}$ (2.103):

$$P^{(0)} = \begin{bmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{bmatrix} = p[I] \quad (2.192)$$

P je napetostni tenzor, ki ga sestavljajo normalne oziroma tlačne napetosti in strižne ali viskozne napetosti in je bil edina manjkajoča komponenta, ki smo jo potrebovali v poglavju 2.3.5, da bi izrazili dinamično enačbo (2.85) z makroskopskimi količinami.

$$\begin{aligned} \{P\}^3 &= p[I] - \mu[\Lambda] \\ \{P\}^2 &= p[I] - \mu[S] \end{aligned} \quad (2.193)$$

Ko napetostni tenzor (2.193) vstavimo v enačbo (2.85), dobimo celotno NS dinamično enačbo.

$$\rho \frac{d\vec{u}}{dt} + \vec{\nabla} \cdot P = \vec{g}\rho \quad (2.194)$$

V primeru razvoja ravnotežne porazdelitvene funkcije do tretjega reda Hermitovih polinomov dobimo:

$$\begin{aligned} \rho \frac{d\vec{u}}{dt} + \vec{\nabla} \cdot (p[I] - \mu[\Lambda]) &= \vec{g}\rho \\ \rho \frac{d\vec{u}}{dt} &= \vec{g}\rho - \vec{\nabla}p + \vec{\nabla} \cdot \mu[\Lambda] \end{aligned} \quad (2.195)$$

V primeru razvoja ravnotežne porazdelitvene funkcije do drugega reda Hermitovih polinomov ter ob upoštevanju poenostavitve z majhnimi Machovimi števili in konstantne temperature pa ima dinamična enačba obliko:

$$\rho \frac{d\vec{u}}{dt} = \vec{g}\rho - \vec{\nabla}p + \vec{\nabla} \cdot \mu[S] \quad (2.196)$$

Tako smo iz molekularnega nivoja prišli na makro nivo klasičnih enačb dinamike tekočin ter dobili kontinuitetno (2.74) in dinamično enačbo (2.195), ki se ujemata z NS enačbama, predstavljenima v uvodu (2.69) in (2.71). V primeru upoštevanja konstantne temperature in majhnih hitrosti tekočine v primerjavi s hitrostjo zvoka se dinamična enačba še poenostavi v dinamično enačbo pri malo stisljivi tekočini (2.196).

Ključno vlogo pri izpeljavi NS enačb imajo: perturbacijska metoda, Fourierove vrste in Hermitovi polinomi. Zanimivo je, da za pridobitev klasičnih, makroskopskih NS enačb zadostuje že razvoj porazdelitvene funkcije v Fourierovo vrsto drugega reda.

Izpeljava NS z uporabo splošene Fourierove vrste in Hermitovih polinomov je za razliko od izvirne Chapman-Enskogove izpeljave bolj splošna rešitev, ker dopušča izpeljavo enačb tudi izven okvira NS (Grad, 1949). Prava prednost te izpeljave pa dejansko nastopi pri prostorski diskretizaciji BBGK enačbe, kjer lahko uporabimo Gauss-Hermitovo kvadraturno pravilo.

2.4 Izpeljava advekcijsko-difuzijske enačbe iz Boltzmannove enačbe

V predhodnem poglavju smo dokazali, da lahko ob upoštevanju majhnih hitrosti toka v primerjavi s hitrostjo zvoka, konstantne temperature ter majhnega Knudsenovega števila iz BBGK enačbe izpeljemo NS enačbe. V tem poglavju bomo izpeljali še dvodimenzionalno AD enačbo (2.197) (Širca, 1992):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho \vec{u}) = D \left(\frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} \right) + SRC \quad (2.197)$$

V izpeljavah bomo podobno kakor Malaspinas (2009), za označevanje koncentracije nafte uporabljali simbol za gostoto ρ in ne kakor je običajno v literaturi C . Vzrok temu je, da je izpeljava AD enačbe iz BBGK nekakšna poenostavitev izpeljave NS enačb (poglavje 2.3) in bomo lahko uporabili večino že izpeljanih izrazov iz poglavja 3.4. Z drugačnim označevanjem bi bila uporaba že izpeljanih enačb

manj jasna. Pri izpeljavi v celoti sledimo postopku izpeljave NS enačb, zato smo lahko nekoliko manj podrobni.

2.4.1 Brezdimenzijska oblika adveksijsko-difuzijske enačbe

V poglavju 2.2.5 smo BBGK enačbo pretvorili v brezdimenzijsko obliko (2.44), zato je potrebno za dosledno primerjavo tudi AD enačbo (2.197) pretvoriti v enako obliko. Poleg brezdimenzijskih spremenljivk (2.39), ki smo jih vpeljali v poglavju 2.2.5, je potrebno za razvoj AD enačbe v brezdimenzijsko obliko uvesti še dodatno brezdimenzijsko spremenljivko, ki v BBGK enačbi ne nastopa. To je brezdimenzijski koeficient difuzije \widehat{D} , ki ga definiramo z izrazom:

$$D = \widehat{D}L\sqrt{\theta_0} \quad (2.198)$$

Izpeljava brezdimenzijske kontinuitetne enačbe poteka tako, da vstavimo enačbe (2.39) in izraz (2.198) v AD enačbo (2.197) in dobimo:

$$\frac{\sqrt{\theta_0}\rho_0\partial\hat{\rho}}{L\partial\hat{t}} + \frac{\sqrt{\theta_0}\rho_0}{L}\vec{\nabla}(\hat{\rho}\vec{u}) = \frac{\sqrt{\theta_0}\rho_0}{L}\widehat{D}\left(\frac{\partial^2\hat{\rho}}{\partial\hat{x}^2} + \frac{\partial^2\hat{\rho}}{\partial\hat{y}^2}\right) + \frac{\sqrt{\theta_0}\rho_0}{L}S\widehat{RC} \quad (2.199)$$

Zgornjo enačbo pomnožimo z $\frac{L}{\sqrt{\theta_0}\rho_0}$ in dobimo AD enačbo zapisano z brezdimenzijskimi spremenljivkami, katere smo definirali v izrazih (2.39) in (2.198).

$$\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial\hat{t}} + \vec{\nabla}(\hat{\rho}\vec{u}) = \widehat{D}\left(\frac{\partial^2\hat{\rho}}{\partial\hat{x}^2} + \frac{\partial^2\hat{\rho}}{\partial\hat{y}^2}\right) + S\widehat{RC} \quad (2.200)$$

Opazimo lahko, da se AD enačba zapisana z brezdimenzijskimi spremenljivkami ne razlikuje od prvotne oblike (2.197). Kakor pri izpeljavi NS enačb bomo tudi v primeru izpeljave AD enačbe brez izgube na splošnosti operirali le z brezdimenzijskimi spremenljivkami in zaradi nepreglednosti opustili simbol $[\widehat{\quad}]$ v njihovem zapisu.

Izpeljava AD enačbe se od izpeljave NS enačb loči v dvojem: prvič, da je dovolj razvoj porazdelitvene funkcije v Fourierovo vrsto prvega reda (in ne drugega kakor pri izpeljavi NS enačb); druga pomembna predpostavka pa je, da hitrost transportirane snovi \vec{u}_{AD} ni nujno enaka hitrosti toka \vec{u} po kateri se snov prenaša.

$$\vec{u}_{AD} \neq \vec{u} \quad (2.201)$$

To lahko pojasnimo z opazovanjem transporta snovi na molekularni ravni, kjer vidimo, da so delci, ki sestavljajo transportirano snov lahko različne mase in velikosti od delcev tekočine po kateri se prenašajo, zato se v splošnem ne bodo gibal enako kakor delci te tekočine.

$$\begin{aligned} \vec{j} &= \int \vec{\xi}f d\xi \neq \int \vec{\xi}f^{(0)}(\vec{u})d\xi \\ \vec{j} &= \vec{u}_{AD}\rho \neq \vec{u}\rho \end{aligned} \quad (2.202)$$

Tako gibalna količina porazdelitvene funkcije \vec{j} v splošnem ne bo enaka gibalni količini ravnotežne porazdelitvene funkcije (2.202), kakor je to veljalo za trkni operator pri izpeljavi NS enačb (2.36).

V izpeljavi ne bomo upoštevali vpliva sil na porazdelitveno funkcijo, saj tega v modelu nismo uporabljali in bi naredilo izpeljavo kvečjemu manj razumljivo. V kolikor bi bralca to zanimalo priporočamo delo Malaspinasa (2009). V izpeljavi bomo upoštevali izvorno-ponorni člen delcev:

$$\frac{SRC}{\rho} f^{(0)} \quad (2.203)$$

S SRC smo označili izvorni člen, ki nam podaja količino razlite nafte v makroskopskih količinah [$\text{kg}/\text{m}^3\text{s}$]. Prikazali bomo le izpeljavo za dvodimenzionalen primer, izpeljava tridimenzionalnega primera poteka po enakem principu.

2.4.2 Izpeljava adveksijsko-difuzijske enačbe s projekcijo BBGK na Hermitove polinome

Izpeljavo začnemo tako da BBGK (2.44) integriramo po vseh možnih hitrostih in pomnožimo z maso delca ter dobimo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{m_d \int f d\xi}_{\rho} + \underbrace{\vec{\nabla} m_d \int \vec{\xi} f d\xi}_{\vec{j}} + \underbrace{m_d \vec{g} \int \vec{\nabla}_{\xi} f d\xi}_{\text{zanemarim silo}} \\ = \underbrace{-\frac{1}{\tau} m_d \int (f - f^{(0)}) d\xi}_{=0, \text{ enačba (2.35)}} + \frac{SRC}{\rho} \underbrace{m_d \int f^{(0)} d\xi}_{\rho} \end{aligned} \quad (2.204)$$

Dobimo enačbo o ohranitvi mase transportirane snovi:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = SRC \quad (2.205)$$

Namen naslednjih podpoglavij je poiskati makroskopske količine, s katerimi bomo opisali neznano gibalno količino \vec{j} porazdelitvene funkcije.

2.4.3 Chapman-Enskogova razširitev BBGK enačbe

Nadaljujemo enako kakor v poglavju 2.3.6 pri izpeljavi NS enačb in porazdelitveno funkcijo razširimo v okolici ravnotežne porazdelitve v skladu s perturbacijsko metodo.

$$\begin{aligned} f^{(0)} = f^M \text{ rešitev ničtega reda} \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla} + \vec{g} \cdot \vec{\nabla}_{\xi} \right) f^{(0)} = -\frac{f^{(1)}}{\tau} \text{ dodatno poenostavljena BBGK enačba} \end{aligned} \quad (2.206)$$

S perturbacijsko teorijo smo tako poiskali rešitev ničtega reda in poenostavili BBGK enačbo za nadaljnje iskanje rešitve prvega reda s pomočjo Hermitovih polinomov.

2.4.4 Približek ničtega reda

Približek ničtega reda dobimo, če privzamemo da je porazdelitvena funkcija f enaka ravnotežni porazdelitvi $f^{(0)}$ in jo vstavimo v dodatno poenostavljeno BBGK enačbo (2.206):

$$\frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\int f^{(0)} H_{\alpha}^{(n)} d\xi}_{1.\text{člen}} + \underbrace{\vec{\nabla} \int \xi f^{(0)} H_{\alpha}^{(n)} d\xi}_{2.\text{člen}} = \frac{SRC}{\rho} \underbrace{\int f^{(0)} d\xi}_{\rho} \quad (2.207)$$

Po projekciji na Hermitov polinom ničtega reda dobimo AD enačbo pri kateri je difuzija nič:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \eta}_{1.\text{člen}} + \underbrace{\vec{\nabla} \eta \vec{u}}_{2.\text{člen}} = \frac{SRC}{m_d} \quad (2.208)$$

2.4.5 Približek prvega reda in AD enačba

Pri iskanju rešitve prvega reda smo v skladu s perturbacijsko teorijo (enačba (2.92)) predpostavili, da je porazdelitvena funkcija enaka vsoti njenega ravnotežnega in neravnotežnega dela $f = f^{(0)} + f^{(1)}$. Približno rešitev prvega reda iščemo s projekcijo poenostavljene BBGK (2.206) enačbe na različne stopnje Hermitovih polinomov.

$$\frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\int f^{(0)} H_{\alpha}^{(n)} d\xi}_{1.\text{člen}} + \underbrace{\vec{\nabla} \int \xi f^{(0)} H_{\alpha}^{(n)} d\xi}_{2.\text{člen}} = \underbrace{-\frac{1}{\tau} \int f^{(1)} H_{\alpha}^{(n)} d\xi}_{3.\text{člen} = -\frac{1}{\tau} a_{1x}^{(1)}} + \frac{SRC}{\rho} \underbrace{\int f^{(0)} H_{\alpha}^{(n)} d\xi}_{4.\text{člen}} \quad (2.209)$$

Kakor pri izpeljavi NS enačb bomo zaradi preglednosti postopka prikazali projekcijo vsakega člena poenostavljene BBGK enačbe posebej.

2.4.5.1 Razvoj prvega člena BBGK

Tudi tukaj se, kakor pri izpeljavi NS enačb (poglavje 2.3.9), želimo znebiti časovnih odvodov v prvem členu enačbe (2.209) in jih z uporabo konservativnih spremenljivk gostote delcev η in gibalne količine \vec{G} nadomestiti s prostorskimi. V primeru izpeljave AD enačbe koeficienti $a_{0\alpha}^{(n)} = a_{0\alpha}^{(n)}(\eta, G_x, G_y)$ niso funkcija gostote notranje energije, ker ta nastopi šele pri drugem redu Hermitovih polinomov, kakor smo že zapisali v enačbi (2.153).

$$\frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial t} = \frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial G_x} \frac{\partial G_x}{\partial t} + \frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial G_y} \frac{\partial G_y}{\partial t} \quad (2.210)$$

V enačbi (2.210) imamo za dvodimenzionalen primer tri neznane odvode koeficienta $a_{0\alpha}^{(n)}$ po konservativnih spremenljivkah $\frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial \eta}$, $\frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial G_x}$ in $\frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial G_y}$ ter tri neznane odvode konservativnih spremenljivk

po času $\frac{\partial \eta}{\partial t}$, $\frac{\partial G_x}{\partial t}$ in $\frac{\partial G_y}{\partial t}$. V nadaljevanju bomo najprej izpeljali odvode konservativnih spremenljiv po času in kasneje še odvode koeficienta $a_{0\alpha}^{(n)}$ po konservativnih spremenljivkah.

Člen $\frac{\partial \eta}{\partial t}$ dobimo tako, da enačbo (2.209) projiciramo na Hermitov polinomom stopnje nič $H^{(0)} = 1$, pri čemer je tretji člen z upoštevanjem lastnosti trknega operatorja (2.35) enak nič.

$$\frac{\partial}{\partial t} \eta = -\vec{\nabla} \eta \vec{u} + \frac{SRC}{m_d} \quad (2.211)$$

Člena $\frac{\partial G_x}{\partial t}$ ne moremo izračunati na podoben način kot smo $\frac{\partial \eta}{\partial t}$, ker se nam pri projekciji poenostavljene BBGK (2.209) enačbe na Hermitov polinom prve stopnje tretji člen ne bi izničil, saj integral trknega operatorja ne bi bil enak nič, kot sledi iz enačbe (2.202).

Zato člen $\frac{\partial G_x}{\partial t}$ izračunamo z upoštevanjem enačbe (2.211) pri njegovem odvajanju:

$$\frac{\partial G_x}{\partial t} = \frac{\partial(\eta u_x)}{\partial t} = \eta \frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial \eta}{\partial t} = \eta \frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \left(-\vec{\nabla} \eta \vec{u} + \frac{SRC}{m_d} \right) \quad (2.212)$$

Izračun člena $\frac{\partial G_y}{\partial t}$ bi potekal po enakem postopku. Po končani izpeljavi časovnih odvodov konservativnih spremenljivk, nam preostane še izračun neznanih odvodov različnih stopenj koeficienta $a_{0\alpha}^{(n)}$ po konservativnih spremenljivkah: $\frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial \eta}$, $\frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial G_x}$ in $\frac{\partial a_{0\alpha}^{(n)}}{\partial G_y}$. Ker je $f^{(0)}$ znana funkcija, ki je enaka Maxwelllovi porazdelitvi, lahko odvode $a_{0\alpha}^{(0)}$ eksaktno izračunamo enako kot v poglavju 2.3.9 v enačbah od (2.151) do (2.155) za različne stopnje n Hermitovih polinomov.

Pri $n = 0$ dobimo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_0^{(0)}}{\partial \eta} &= 1 \text{ enačba (2.151)} \\ \frac{\partial a_0^{(0)}}{\partial G_\alpha} &= 0 \text{ enačba (2.144)} \end{aligned} \quad (2.213)$$

Ob upoštevanju teh izrazov ter enačb (2.211) in (2.212) v enačbi (2.210) dobimo:

$$\frac{\partial a_0^{(0)}}{\partial t} = \frac{\partial \eta}{\partial t} = -\vec{\nabla} \eta \vec{u} + \frac{SRC}{m_d} \quad (2.214)$$

Pri $n = 1$ dobimo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_{0\alpha}^{(1)}}{\partial \eta} &= 0 \text{ enačba (2.152)} \\ \frac{\partial a_{0\alpha}^{(1)}}{\partial G_\beta} &= \delta_{\alpha\beta} \text{ enačba (2.155)} \end{aligned} \quad (2.215)$$

Ob upoštevanju teh izrazov ter enačb (2.211) in (2.212) v enačbi (2.210) dobimo:

$$\frac{\partial a_{0x}^{(1)}}{\partial t} = \frac{\partial G_x}{\partial t} = \frac{\partial(\eta u_x)}{\partial t} = \eta \frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \left(-\vec{\nabla} \eta \vec{u} + \frac{SRC}{m_d} \right) \quad (2.216)$$

Podobno velja za $n = 1$ in Hermitov polinom $H_\alpha^{(1)} = \xi_y$:

$$\frac{\partial a_{0y}^{(1)}}{\partial t} = \frac{\partial G_y}{\partial t} = \frac{\partial(\eta u_y)}{\partial t} = \eta \frac{\partial u_y}{\partial t} + u_y \left(-\vec{\nabla} \eta \vec{u} + \frac{SRC}{m_d} \right) \quad (2.217)$$

2.4.5.2 Razvoj drugega člena BBGK

Nadaljujemo z razvojem drugega člena v enačbi (2.209) za različne stopnje n Hermitovih polinomov, enako kakor smo to storili v poglavju 2.3.7.2.

Pri $n = 0$ velja že izpeljana enačba (2.107):

$$\vec{\nabla} \int \xi f^{(0)} \underbrace{H_\alpha^{(0)}}_1 d\xi = \vec{\nabla}(\vec{u}\eta) \quad (2.218)$$

Pri $n = 1$ razvijemo za $H_\alpha^{(1)} = \xi_x$, za ξ_y pa velja enak postopek. Izračun se razlikuje od tistega pri izpeljavi NS (enačba (2.108)), ker pri izpeljavi AD razvijamo ravnotežno porazdelitev le do prvega reda Fouriereve vrste.

$$\vec{\nabla} \int \xi f^{(0)} \underbrace{H_\alpha^{(1)}}_{\xi_x} d\xi = \vec{\nabla} \underbrace{\left(a_{0xx}^{(2)}, a_{0xy}^{(2)} \right)}_{=0, \text{ker razvijamo do } n=1} + \vec{\nabla} \left(\underbrace{\delta_{xx} a^{(0)}}_\eta, \underbrace{\delta_{xy} a^{(0)}}_0 \right) = \frac{\partial \eta}{\partial x} \quad (2.219)$$

Za $H_\alpha^{(1)} = \xi_y$ dobimo:

$$\vec{\nabla} \int \xi f^{(0)} \underbrace{H_\alpha^{(1)}}_{\xi_y} d\xi = \vec{\nabla} \underbrace{\left(a_{0xy}^{(2)}, a_{0yy}^{(2)} \right)}_{=0, \text{ker razvijamo do } n=1} + \vec{\nabla}(0, \eta) = \frac{\partial \eta}{\partial y} \quad (2.220)$$

2.4.5.3 Razvoj tretjega člena BBGK

Ker pri izpeljavi AD enačbe nismo upoštevali vpliva sil, je razvoj tretjega člena poenostavljene BBGK enačbe (2.209) enak razvoju četrtega člena v izpeljavi NS enačb iz poglavja 2.3.74:

$$-\frac{1}{\tau} \int f^{(1)} H_\alpha^{(n)} d\xi = -\frac{1}{\tau} a_{1\alpha}^{(n)} \quad (2.221)$$

2.4.5.4 Razvoj četrtega člena BBGK

Pri razvoju četrtega člena poenostavljene BBGK enačbe (2.209) upoštevamo, da velikost izvorno-ponornega člena SRC ni odvisna od hitrosti delcev in jo zato lahko izpostavimo iz integrala:

$$\frac{SRC}{\rho} \int f^{(0)} H_{\alpha}^{(n)} d\xi = \frac{SRC}{\rho} a_{0\alpha}^{(n)}(\vec{x}, t) \quad (2.222)$$

Koeficiente $a_{0\alpha}^{(n)}$ smo izračunali v enačbi (2.100) v poglavju 2.3.7; tako za različne stopnje n Hermitovih polinomov dobimo vrednosti:

$$n = 0$$

$$\frac{SRC}{\rho} \int f^{(0)} H_{\alpha}^{(n)} d\xi = \frac{SRC}{m_d} \quad (2.223)$$

$n = 1$ in $H_{\alpha}^{(1)} = \xi_x$ dobimo:

$$\frac{SRC}{\rho} \int f^{(0)} H_x^{(1)} d\xi = \frac{SRC}{m_d} u_x \quad (2.224)$$

$n = 1$ in $H_{\alpha}^{(1)} = \xi_y$ dobimo:

$$\frac{SRC}{\rho} \int f^{(0)} H_y^{(1)} d\xi = \frac{SRC}{m_d} u_y \quad (2.225)$$

Preostane nam le še končni izračun koeficientov $a_{1\alpha}^{(n)}$, katere dobimo s seštevanjem pravkar izpeljanih členov za različne stopnje n Hermitovih polinomov:

$$n = 0$$

$$\underbrace{-\vec{\nabla}\eta\vec{u}}_{1.\text{člen}} + \underbrace{\frac{SRC}{m_d}}_{2.\text{člen}} + \underbrace{\vec{\nabla}(\vec{u}\eta)}_{3.\text{člen}} = \underbrace{-\frac{1}{\tau}a_1^{(0)}}_{3.\text{člen}} + \underbrace{\frac{SRC}{m_d}}_{4.\text{člen}} \Rightarrow a_1^{(0)} = 0 \quad (2.226)$$

Koeficient $a_{1x}^{(0)} = 0$, bi lahko izračunali tudi neposredno z upoštevanjem lastnosti trknega operatorja.

Pri $n = 1$ in $H_x^{(1)} = \xi_x$ dobimo:

$$\underbrace{\eta \frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \left(-\vec{\nabla}\eta\vec{u} + \frac{SRC}{m_d} \right)}_{1.\text{člen}} + \underbrace{\frac{\partial \eta}{\partial x}}_{2.\text{člen}} = \underbrace{-\frac{1}{\tau}a_{1x}^{(1)}}_{3.\text{člen} = -\frac{1}{\tau}a_{1x}^{(1)}} + \underbrace{\frac{SRC}{m_d} u_x}_{4.\text{člen}} \Rightarrow \quad (2.227)$$

$$-\frac{1}{\tau}a_{1x}^{(1)} = \eta \frac{\partial u_x}{\partial t} - u_x \vec{\nabla}\eta\vec{u} + \frac{\partial \eta}{\partial x}$$

Podobno pri $n = 1$ in $H_y^{(1)} = \xi_y$:

$$-\frac{1}{\tau} a_{1y}^{(1)} = \eta \frac{\partial u_y}{\partial t} - u_y \vec{\nabla} \eta \vec{u} + \frac{\partial \eta}{\partial y} \quad (2.228)$$

Zdaj lahko sestavimo neravnotežno funkcijo $f^{(1)}$ z razvojem v posplošeno Fourierjevo vrsto s Hermitovimi polinomi do prvega reda:

$$f^{(1)} = \omega \left(\frac{H^{(0)} \overbrace{a_1^{(0)}}^0}{0!} + \frac{H_x^{(1)} a_{1x}^{(1)}}{1!} + \frac{H_y^{(1)} a_{1y}^{(1)}}{1!} \right) \Rightarrow \quad (2.229)$$

$$f^{(1)} = -\omega \tau \left(\xi_x \left(\eta \frac{\partial u_x}{\partial t} - u_x \vec{\nabla} \eta \vec{u} + \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) + \xi_y \left(\eta \frac{\partial u_y}{\partial t} - u_y \vec{\nabla} \eta \vec{u} + \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \right)$$

Na enak način razvijemo tudi ravnotežno porazdelitveno funkcijo v posplošeno Fourierjevo vrsto s Hermitovimi polinomi do prvega reda:

$$f^{(0)} = \omega \eta (1 + \xi \vec{u}) \quad (2.230)$$

Vstavimo perturbacijsko rešitev $f^{(0)} + f^{(1)}$ nazaj v enačbo o ohranitvi mase transportirane snovi (2.204) in prikažimo izpeljavo še neznanega člana gibalne količine \vec{j} porazdelitvene funkcije:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \vec{j} = SRC \rightarrow$$

$$\vec{j} = m_d \int \xi (f^{(0)} + f^{(1)}) d\xi = j^{(0)} + j^{(1)} \rightarrow \quad (2.231)$$

$$j^{(0)} = m_d \int \xi (f^{(0)}) d\xi = \rho \vec{u}$$

$$j^{(1)} = m_d \int \xi (f^{(1)}) d\xi = -\tau \left(\vec{\nabla} \rho + \rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} - \vec{u} \vec{\nabla} \rho \vec{u} \right)$$

Po ureditvi rezultatov dobimo AD enačbo (2.200) z dodanim členom numerične napake drugega reda (Camas, 2008):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho \vec{u}) = SRC + \underbrace{\tau \vec{\nabla}^2 \rho + \tau \vec{\nabla} \left(\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} - \vec{u} \vec{\nabla} \rho \vec{u} \right)}_{Napaka} \quad (2.232)$$

Primerjava z brezdimenzijsko AD enačbo (2.200) pokaže, da mora biti čas relaksacije τ enak koeficientu difuzije D , če želimo z MBM simulirati AD.

$$D = \tau \quad (2.233)$$

Člen, ki izraža napako, še dodatno razčlenimo:

$$\tau \vec{\nabla} \left(\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} - \vec{u} \vec{\nabla} \rho \vec{u} \right) = \tau \vec{\nabla} \left(\underbrace{\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t}}_{\approx 0} - \underbrace{\vec{u} \rho \vec{\nabla} \vec{u}}_{\approx 0} - \underbrace{\vec{u}^2 \vec{\nabla} \rho}_{\approx 0} \right) \quad (2.234)$$

V primeru, da predpostavimo majhne sprememb toka v času $\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} \approx 0$ (Flekkøy, 1993), majhne Machove hitrosti toka $\vec{u}^2 \approx 0$ in malo stisljive tekočine $\vec{\nabla} \vec{u} \approx 0$ lahko napako zanemarimo.

2.5 Diskretizacija

V splošnem BBGK enačba (2.44) nima analitične rešitve, zato smo jo primorani reševati numerično. Numerično reševanje temelji na postopku diskretizacije in iskanju rešitve problema v le določenem omejenem številu točk. Pri diskretizaciji BBGK ločimo diskretizacijo po času in prostoru ter diskretizacijo zveznih hitrosti delcev.

2.5.1 Diskretizacija po času in prostoru

Postopek časovne in prostorske diskretizacije poteka s postopno uvedbo treh novih spremenljivk, s katerimi diskretiziramo adveksijski del BBGK enačbe (2.44). Adveksijski del BBGK enačbe lahko zapišemo tudi z uporabo totalnega odvoda:

$$\underbrace{\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \vec{\nabla} f}_{\frac{df}{dt}} = -\frac{1}{\tau} (f - f^{(0)}) + SRC \frac{f^{(0)}}{\rho} \quad (2.235)$$

Zgornji izraz poenostavimo z uvedbo prve nove spremenljivke:

$$f^{\text{eq}} = f^{(0)} + \tau SRC \frac{f^{(0)}}{\rho} \quad (2.236)$$

Z uvedbo nove spremenljivke izvorno-ponorni člen ne nastopa več samostojno, ampak znotraj trknega operatorja, kar prikazuje enačba:

$$\frac{df}{dt} = -\frac{1}{\tau} (f - f^{\text{eq}}) \quad (2.237)$$

Postopek diskretizacije nadaljujemo z integriranjem enačbe (2.237) po času do velikosti časovnega koraka Δt , na ta način iz nje odstranimo totalni odvod.

$$\begin{aligned} f(\vec{x} + \vec{\xi} \Delta t, \vec{\xi}, t + \Delta t) - f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \\ = -\frac{1}{\tau} \int_0^{\Delta t} \left(f(\vec{x} + \vec{\xi} s, \vec{\xi}, t + s) - f^{\text{eq}}(\vec{x} + \vec{\xi} s, \vec{\xi}, t + s) \right) ds \end{aligned} \quad (2.238)$$

Integral na desni strani enačbe (2.238) izračunamo z numeričnim integriranjem z uporabo trapeznega pravila (Bronštejn in sod., 1997):

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a) \left(\frac{f(a) + f(b)}{2} \right) \quad (2.239)$$

Z uporabo trapeznega pravila dosežemo natančnost diskretizacije drugega reda v času in tudi v prostoru, ker je prostorski prirastek Δx sorazmeren časovnemu prirastku Δt , $\Delta x = \xi \Delta t$.

$$\begin{aligned} f(\vec{x} + \vec{\xi} \Delta t, \vec{\xi}, t + \Delta t) - f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \\ = -\frac{\Delta t}{2\tau} \left(f(\vec{x} + \vec{\xi} \Delta t, \vec{\xi}, t + \Delta t) - f^{\text{eq}}(\vec{x} + \vec{\xi} \Delta t, \vec{\xi}, t + \Delta t) + f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \right. \\ \left. - f^{\text{eq}}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \right) + O(\Delta t^2) \end{aligned} \quad (2.240)$$

Enačbo (2.240) uvrščamo med implicitne enačbe, ki so zahtevne za numerično reševanje. Zato jo z uvedbo dveh novih spremenljivk \tilde{f} (2.241) in $\tilde{\tau}$ (2.242), ki nimajo fizikalnega pomena, pretvorimo v eksplicitno enačbo.

$$\tilde{f}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) + \frac{\Delta t}{2\tau} \left(f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) - f^{\text{eq}}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \right) \quad (2.241)$$

$$\tilde{\tau} = \tau + \frac{1}{2} \quad (2.242)$$

Od tod dalje predpišemo, v skladu s 'filozofijo' MPCA (poglavje 2.1), da je brezdimenzijski časovni korak $\Delta t = 1$. S tem ne izgubimo na splošnosti. Po krajšem obračanju enačbe (2.240) dobimo enačbo BBGK diskretizirano po času in prostoru:

$$\tilde{f}(\vec{x} + \vec{\xi}, \vec{\xi}, t + 1) - \tilde{f}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) = -\frac{1}{\tilde{\tau}} \left(\tilde{f}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) - f^{\text{eq}}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \right) \quad (2.243)$$

Oziroma v drugi podobi, če spremenljivko f^{eq} povrnemo nazaj v prvotno obliko (2.241):

$$\begin{aligned} \tilde{f}(\vec{x} + \vec{\xi}, \vec{\xi}, t + 1) - \tilde{f}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \\ = -\frac{1}{\tilde{\tau}} \left(\tilde{f}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) - f^{(0)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t) \right) + \left(1 - \frac{1}{2\tilde{\tau}} \right) SRC \frac{f^{(0)}(\vec{x}, \vec{\xi}, t)}{\rho} \end{aligned} \quad (2.244)$$

Tako je časovna in prostorska diskretizacija končana. Uvedba treh dodatnih spremenljivk ima določen vpliv na izračun makroskopskih količin. Z upoštevanjem enačbe novega časa relaksacije $\tilde{\tau}$ (2.241) v izrazu, ki povezuje koeficient difuzije s časom relaksacije (2.233), dobimo naslednjo pomembno zvezo:

$$D = \tilde{\tau} - \frac{1}{2} \quad (2.245)$$

Uvedba nove porazdelitvene funkcije \tilde{f} (2.241) ima vpliv na izračun gostote transportirane tekočine (2.14), kot to prikazuje spodnja enačba:

$$\rho = \int f d\xi = \underbrace{\int \tilde{f}(\vec{x}, t) d\xi}_{\tilde{\rho}} - \frac{1}{2\tau} \left(\underbrace{\int f(\vec{x}, t) d\xi}_{\rho} - \underbrace{\int f^{\text{eq}}(\vec{x}, t) d\xi}_{\rho + \tau \text{SRC}} \right) \Rightarrow$$

$$\rho(\vec{x}, t) = \tilde{\rho}(\vec{x}, t) + \frac{\text{SRC}(\vec{x}, t)}{2} \quad (2.246)$$

2.5.2 Diskretizacija hitrosti

S prostorsko in časovno diskretizacijo diskretizacija BBGK še ni končana, ker se v izračunu ravnotežne porazdelitve $f^{(0)}$ (2.230) nahaja makroskopska količina, gostota delcev η ; to izračunamo z integracijo porazdelitvene funkcije po vseh možnih hitrostih delca (2.19 in 2.248). To pomeni, da bi morali poznati vrednosti porazdelitvene funkcije v celotnem zveznem prostoru hitrosti delcev, česar pri numeričnem reševanju nimamo na voljo.

Enačba (2.244), dobljena z diskretizacijo po času in prostoru, velja za vsako poljubno izbrano smer in velikost hitrosti delca. V skladu z 'lagrangeevsko filozofijo' lahko na porazdelitvene funkcije gledamo kot na delce, ki v vsakem časovnem koraku prepotujejo natanko razdaljo Δx , ki jih loči od naslednjega vozlišča. V tem poglavju bomo zato pogosto namesto izraza porazdelitvena funkcija uporabljali kar izraz delci, ker vemo, da je porazdelitvena funkcija v skladu z njeno definicijo v poglavju 2.2.2 mera za količino (število) delcev.

Pri izpeljavi NS enačb in AD enačbe smo porazdelitveno funkcijo zapisali s Fourierevo vrsto in Hermitovimi polinomi (2.56), v njej pa nastopa utežna funkcija ω (2.47). Ta funkcija ni le zelo uporabna pri računu ortogonalnosti dveh Hermitovih polinomov, ampak lahko z njo numerično izračunamo tudi integrale z uporabo Gauss-Hermitovega (GH) kvadraturenega pravila. Z GH kvadraturenim pravilom lahko eksaktno izračunamo integral (2.247) v primeru, da poznamo vrednosti polinoma $r(\xi)$ stopnje manjše ali enake $(2n - 1)$ v n -tih vrednostih ξ_i (Peng, 2011). V primeru izpeljave AD enačbe smo porazdelitveno funkcijo razvili do polinoma prve $r(\xi)$ stopnje (enačbi (2.229) in (2.230)), zato teoretično zadostuje že ena točka za posamezno dimenzijo.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \omega(\xi) r(\xi) dx = \sum_{i=1}^n \omega_i r(\xi_i) \quad (2.247)$$

$$\eta = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, \xi, t) d\xi = \sum_{i=1}^n f(x, \xi_i, t) = \sum_{i=1}^n f_i(x, t) \quad (2.248)$$

V enačbi (2.248) smo s $f_i(x, t) = f(x, \xi_i, t)$ vpeljali krajši način označevanja porazdelitvene funkcije v odvisnosti od diskretizirane hitrosti ξ_i . ω_i (2.249) so uteži, ξ_i pa so v matematičnem smislu ničle Hermitovih polinomov (Peng, 2011), ki pri MBM predstavljajo diskretizirane hitrosti delcev in povedo, kam se bo pomakni delec v naslednjem enotskem časovnem koraku.

Diskretizirane hitrosti delcev pogosto imenujemo kar smerni vektorji. Uteži ω_i in smerni vektorji ξ_i so neodvisni od polinoma $r(\xi)$, za $n = 2, 3$ smo jih izračunali in dobili:

$$\omega_i = \frac{n!}{(nH_{n-1}(\xi_i))^2} \quad (2.249)$$

$n = 2$

$$\begin{aligned} \xi_1 &= -1, \xi_2 = 1 \\ \omega_1 &= \frac{1}{2}, \omega_2 = \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (2.250)$$

$n = 3$

$$\begin{aligned} \xi_1 &= 0, \xi_2 = -\sqrt{3}, \xi_3 = \sqrt{3} \\ \omega_1 &= \frac{2}{3}, \omega_2 = \frac{1}{6}, \omega_3 = \frac{1}{6} \end{aligned} \quad (2.251)$$

Z uporabo GH kvadraturnega pravila in dvema točkama diskretizacije (2.250) pridemo do numerične sheme, imenovane D1Q2 (slika 2.10 levo). D1 pomeni, da gre za enodimenzionalen primer in Q2, da je to mreža z dvema smernima vektorjema oz. možnima smerema gibanja delca, kar je tipičen način poimenovanja pri MBM. Z uporabo GH kvadraturnega pravila s tremi smernimi vektorji (2.251) pa pridemo do sheme D1Q3 (slika 2.10 desno).



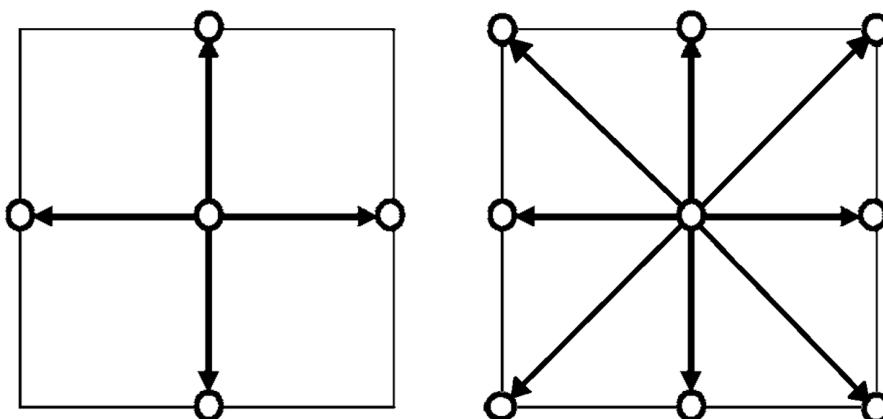
Slika 2.10: Numerične sheme za enodimenzionalen primer, D1Q2 (levo) in D1Q3 (desno)

Figure 2.10: Lattice arrangements for 1-D problems, D1Q2 (left) and D1Q3 (right)

Razširitev enačbe (2.247) v dve dimenziji poteka tako, da uporabimo GH kvadraturno pravilo najprej v eni nato v drugi koordinatni smeri hitrosti ter na koncu zmnožke uteži označimo z novo utežjo W_i , kot to prikazujemo v enačbi (2.252). Z razširitvijo kvadraturnega pravila, ki uporablja tri smerne vektorje v eni dimenziji, bi v dveh dimenzijah dobili devet smernih vektorjev in mrežo D2Q9 (slika 2.11 desno). Razširitev v tri dimenzije bi potekala s še tretjo uporabo GK kvadraturnega pravila in je tukaj ne bomo prikazali.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \omega(\vec{\xi}) r(\vec{\xi}) d\vec{\xi} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \underbrace{\omega_i \omega_j}_{W_i} r(\xi_i, \xi_j) = \sum_{i=1}^{n*n} W_i r(\vec{\xi}_i) \quad (2.252)$$

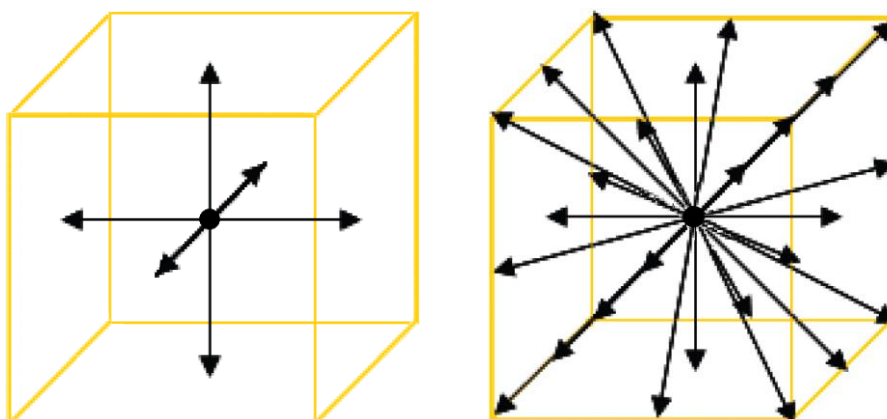
Numerična mreža D2Q4 se v izračunih ne uporablja, ker ima enako kakor MPCA HPP (poglavje 2.1) težave z rotacijsko simetričnostjo svojih rezultatov. Za namen simulacije AD se pogosto uporablja shema D2Q5 (slika 2.11 levo), ki je bila razvita s poenostavljanjem mreže D2Q9 z zanemarjanjem diagonalnih smernih vektorjev (Chen in sod., 2012).



Slika 2.11: Numerične sheme za dvodimenzionalen primer, D2Q5 (levo) in D2Q9 (desno)

Figure 2.11: Lattice arrangements for 2-D problems, D2Q5 (left) and D2Q9 (right)

Po enakem postopku, kot smo razširili kvadraturno pravilo iz ene v dve dimenziji, to storimo še za tri dimenzije, kar nas privede do mreže D3Q7 (slika 2.12 levo) in D3Q27 (slika 2.12 desno). Mreža D3Q7 je podobno kakor D2Q5 poenostavljena mreža D3Q27 in jo bomo v poglavju 4.2 uporabili za simulacijo hipotetičnega razlitja nafte na reki Savi.



Slika 2.12: Numerične sheme za tridimenzionalen primer, D3Q7 (levo) in D3Q27 (desno)

Figure 2.12: Lattice arrangements for 3-D problems, D3Q7 (left) and D3Q27 (right)

Pri MBM si želimo, enako kakor pri njenih predhodnikih MPCA, v izogib dodatnim numeričnim napakam uporabljati brezdimenzijske količine, definirane tako, da sta enotski časovni korak $\Delta t = 1$ in enotska velikost stranice računske mreže $\Delta x = 1$. V kolikor so ničle Hermitovih polinomov ± 1 , so smerni vektorji enotski, kar je v skladu s 'filozofijo' MPCA in je tako diskretizacija hitrosti skoraj zaključena.

Preden končamo diskretizacijo, lahko še dodatno poenostavimo enačbo (2.244), tako da iz nje pokrajšamo zvezno utežno funkcijo in jo nadomestimo z utežmi ω_i za vse smeri smernih vektorjev $\vec{\xi}_i$, ki sestavljajo numerično mrežo. To storimo tako, da enačbo pomnožimo z $\frac{\omega_i}{\omega(\vec{\xi}_i)}$ za vsak smerni vektor

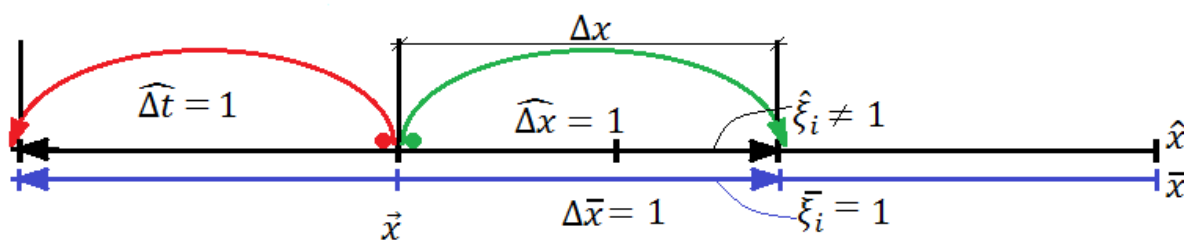
$\vec{\xi}_i$ posebej. Tako diskretiziramo BBGK enačbo v prostoru hitrosti in dobimo najpomembnejšo enačbo MBM:

$$f_i(\vec{x} + \vec{\xi}_i, t + 1) - f_i(\vec{x}, t) = -\frac{1}{\tilde{\tau}}(f_i(\vec{x}, t) - f_i^{(0)}(\vec{x}, t)) + \left(1 - \frac{1}{2\tilde{\tau}}\right) SRC \frac{f_i^{(0)}(\vec{x}, t)}{\rho} \quad (2.253)$$

Posledica numeričnega integriranja je, da momenti porazdelitvene funkcije (2.18) niso več izračunani kot integrali prek neskončnega intervala hitrosti, ampak kot utežna vsota prek končnega števila diskretnih hitrosti. Pri računu AD nas najbolj zanima spreminjanje gostote; to izračunamo z vsoto porazdelitvenih funkcij v določenem vozlišču.

$$\rho = m_D \sum_i f_i \quad (2.254)$$

V primeru uporabe večjega števila točk GH kvadraturnega pravila pa smerni vektorji oziroma ničle Hermitovih polinomov niso več enotske (2.251). V tem primeru se delci v naslednjem časovnem koraku ne bodo premaknili za enotsko dolžino $\Delta x = 1$, kakor bi želeli, ampak v primeru uporabe GH kvadraturnega pravila s tremi točkami za dolžino $\pm\sqrt{3}$ (2.251). Nastali položaj prikazuje slika 2.13.



Slika 2.13: Prikaz razmerji med normiranimi \bar{x} , $\bar{\xi}_i$ in nenormiranimi \hat{x} , $\hat{\xi}_i$ brezdimenzijskimi količinami

Figure 2.13: Ratios between normalized \bar{x} , $\bar{\xi}_i$ and non-normalized \hat{x} , $\hat{\xi}_i$ dimensionless quantities

Ker želimo tudi v primeru uporabe neenotskih ničel Hermitovih polinomov delovati v skladu s 'filozofijo' MPCA in se na ta način izogniti nepotrebnim numeričnim napakam, moramo normirati brezdimenzijsko prostorsko koordinato \hat{x} z velikostjo ničle Hermitovega polinoma $\bar{x} = \frac{\hat{x}}{\xi_i(\Delta t=1)} = \hat{x}c_l$. S c_l smo označili faktor merila, kakor je to pogosto v literaturi. Pri postopku normiranja bomo spremenili mero za dolžino, tako da bo nova brezdimenzijska koordinata \bar{x} enaka ena na mestu, kjer se nahaja sosednja računsko točka (slika 2.13). Na ta način se bodo spremenile tudi vse ostale brezdimenzijske količine, ki so definirane z dolžinskimi enotami (2.255). To lahko primerjamo s spremembo osnovnih dolžinskih enot nekega sistema, npr. iz [m] v [dm]; vemo, da se bodo na ta način spremenile vrednosti tudi hitrosti in ostalim količinam.

Normiranje spremenljivk ima vpliv na razmerje med koeficientom difuzije D in časom relaksacije τ (2.233) ter na izračun ravnotežne porazdelitve $f^{(0)}$ (2.230). To bomo dokazali z vstavljanjem normiranih brezdimenzijskih spremenljivk (2.255) v brezdimenzijsko AD enačbo (2.200) in brezdimenzijsko BBGK enačbo (2.232) ter z njihovo primerjavo ugotovili novo zvezo med D in τ .

$$\begin{aligned}\hat{u} &= \frac{\bar{u}}{c_l}, \quad \hat{D} = \frac{\bar{D}}{c_l^2}, \quad \widehat{SRC} = \overline{SRC} c_l^3, \quad \hat{\rho} = \bar{\rho} c_l^3, \quad \hat{x} = \frac{\bar{x}}{c_l}, \quad \hat{t} = \bar{t}, \quad \hat{\nabla} = \bar{\nabla} c_l, \quad \hat{\xi} = \frac{\bar{\xi}}{c_l}, \quad \hat{f}_i = \bar{f}_i c_l^3, \\ \hat{\theta} &= \frac{\bar{\theta}}{c_l^2}, \quad \hat{\tau} = \bar{\tau}\end{aligned}\quad (2.255)$$

Spremenljivke (2.255) vstavimo v brezdimenzijsko AD (2.200) enačbo in dobimo:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \bar{t}} + \bar{\nabla}(\bar{\rho} \bar{\vec{u}}) = \bar{D} \left(\frac{\partial^2 \bar{\rho}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{\rho}}{\partial \bar{y}^2} \right) + \overline{SRC} \quad (2.256)$$

Opazimo, da se oblika brezdimenzijske AD enačbe pri vstavljanju novih normiranih brezdimenzijskih spremenljivk ni spremenila.

Enako kakor pri izpeljavi normirane brezdimenzijske AD enačbe vstavimo nove brezdimenzijske spremenljivke (2.255) v brezdimenzijsko BBGK (2.232) in dobimo:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \bar{t}} + \bar{\nabla}(\bar{\rho} \bar{\vec{u}}) = \overline{SRC} + c_l^2 \bar{\tau} \bar{\nabla}^2 \bar{\rho} \quad (2.257)$$

S primerjavo enačb (2.256) in (2.257) ugotovimo, da je normalizacija spremenila zvezo $D = \tau$ (2.233) v $\bar{D} = c_l^2 \bar{\tau}$, kar z upoštevanjem tudi enačbe (2.242) privede do izraza:

$$\bar{D} = c_l^2 \left(\bar{\tau} - \frac{1}{2} \right) \quad (2.258)$$

Spremenil se je tudi izračun ravnotežne porazdelitvene funkcije $f^{(0)}$ (2.230) po uporabi GH kvadraturega pravila, kjer smo namenoma pustili spremenljivki $\hat{\eta}$ in \hat{f}_i v njuni nenormirani obliki, ker bi si z njihovim normiranjem povzročali le nepotrebno dodatno delo.

$$\hat{f}_i^{(0)} = \hat{\eta} \omega_i \left(1 + \frac{\bar{\xi}_i \bar{\vec{u}}}{c_l^2} \right) \quad (2.259)$$

V literaturi se raje kot izraz brezdimenzijska hitrost zvoka uporablja izraz mrežna hitrost zvoka. Za nenormirano brezdimenzijsko hitrost zvoka $\sqrt{\hat{\theta}}$ velja, da je enaka ena (2.41). Brezdimenzijska normirana hitrost zvoka $\sqrt{\bar{\theta}}$ pa je enaka faktorju merila $\sqrt{\bar{\theta}} = c_l$, zato se slednji izraz pogosto imenuje tudi mrežna hitrost zvoka. Faktor merila oz. mrežna hitrost zvoka ima za različne numerične mreže različne vrednosti. Najbolj pogoste mreže D1Q3, D2Q5, D2Q9, D3Q7 in D3Q27 imajo vse enako vrednost mrežne hitrosti $c_l = \frac{1}{\sqrt{3}}$, saj so bile izpeljane z uporabo istega postopka izračuna GH kvadraturega pravila s tremi točkami diskretizacije (2.251).

2.5.3 Pretvorba iz fizičnih spremenljivk v brezdimenzijske spremenljivke

Doslej smo opisali in uvedli že vrsto različnih spremenljivk, zato bomo prikazali tudi, kako potekajo spremembe iz fizičnih spremenljivk v brezdimenzijske, ki se uporabljajo pri numeričnem reševanju.

Z normalizacijo brezdimenzijskih spremenljivk ($\overline{\Delta x} = 1$) in uvedbo enotskega brezdimenzijskega časovnega koraka ($\overline{\Delta t} = 1$) smo posredno določili dve novi zvezi med fizičnimi in brezdimenzijskimi spremenljivkami:

$$x = \bar{x}\Delta x \text{ in } t = \bar{t}\Delta t \quad (2.260)$$

Ob upoštevanju enačb (2.260) v zvezah med fizičnimi in brezdimenzijskimi spremenljivkami (2.39) ter zvezah med brezdimenzijskimi in normiranimi spremenljivkami (2.255) lahko hitro pridemo do ugotovitve, da je realna hitrost zvoka c_s določena z razmerjem realnega časovnega koraka Δt , velikostjo stranice diskretizirane mreže Δx in mrežne hitrosti zvoka c_l :

$$c_s = \frac{c_l \Delta x}{\Delta t} \quad (2.261)$$

Z upoštevanjem hitrosti zvoka (2.261) v enačbah (2.39) in (2.255), pridemo do končnih zvez med brezdimenzijskimi in fizičnimi količinami, s katerimi operiramo v MBM:

$$\bar{u} = u \frac{\Delta t}{\Delta x} \text{ in } \bar{D} = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad (2.262)$$

Pri izračunu gostote transportirane snovi ρ je najpreprosteje predpostaviti referenčno gostoto, enako ena $\rho_0 = 1$, in referenčno maso delca, enako realni masi delca $\frac{m_D}{m_{D0}} = 1$. Tako z upoštevanjem izrazov v enačbi (2.39) dobimo, da je brezdimenzijska gostota delcev $\hat{\eta}$ enaka brezdimenzijski gostoti $\hat{\rho}$ in ta enaka realni gostoti ρ :

$$\hat{\eta} = \hat{\rho} = \rho \quad (2.263)$$

Tako smo v celoti končali postopek diskretizacije BBGK enačbe (2.44) in dobili vse pomembne zveze, s katerimi lahko pristopimo k njenemu numeričnemu reševanju.

2.5.4 Implementacija numerične sheme v računalniški algoritem

Z opazovanjem dokončno diskretizirane BBGK enačbe (2.253) vidimo, da jo lahko razdelimo na dva jasno ločena koraka, ki ju imenujemo trkni korak in propagacija. Trkni korak (2.264) podaja vpliv trkov na porazdelitveno funkcijo, medtem ko propagacija (2.265) pomakne delec v enotskem časovnem koraku natančno za razdaljo širine numerične mreže. Ta interpretacija je posledica 'lagrangeevskega' obnašanja enačbe, ki ima osnove že v MPCA. S $f_i^{(in)}$ smo označili vrednosti porazdelitvene funkcije pred trki, s $f_i^{(out)}$ pa po vplivu trkov.

Trkni korak:

$$f_i^{(out)}(\vec{x}, t) = f_i^{(in)}(\vec{x}, t) - \frac{1}{\bar{\tau}} \left(f_i^{in}(\vec{x}, t) - f_i^{(0)}(\vec{x}, t) \right) + \left(1 - \frac{1}{2\bar{\tau}} \right) \frac{SRC f_i^{(0)}(\vec{x}, t)}{\rho(\vec{x}, t)} \quad (2.264)$$

Propagacija:

$$f_i^{(in)}(\vec{x} + \vec{\xi}_i, t + 1) = f_i^{(out)}(\vec{x}, t) \quad (2.265)$$

Trkni korak je popolnoma lokalnega značaja, medtem ko za račun propagacije potrebujemo vrednosti le v sosednjih točkah. Zaradi tega je MBM odlična za račun na večjedrnih procesorjih, ker lahko razdelimo celotno računsko območje na več podobmočij in vsako od njih računamo na ločenem procesorju. Propagacijo vgradimo v numerični program z enostavno rotacijo matrike porazdelitvene funkcije v smeri smernih vektorjev. Na podlagi splošnega numeričnega algoritma katerega prikazuje preglednica 2.1, smo v programskem okolju Matlab (2012) razvili vse modele MBM za potrebe raziskave.

Preglednica 2.1: Splošni algoritem MBM

Table 2.1: General algorithm for lattice Boltzmann method (LBM)

Besedni opis algoritma	Grafična predstavitev algoritma
Sprememba iz fizičnih v brezdimenzijske spremenljivke, diskretizacija prostora, branje vhodnih podatkov tokov in podajanje začetnih vrednosti porazdelitvene funkcije	<pre> graph TD A[Začetek] --> B[Trki Propagacija] B --> C[Konec] </pre>
Ponavljjanje trknega koraka (2.264) in propagacije (2.265) je enako skupnemu številu časovnih korakov	
Sprememba iz brezdimenzijskih spremenljivk nazaj v fizične in prikaz rezultatov	

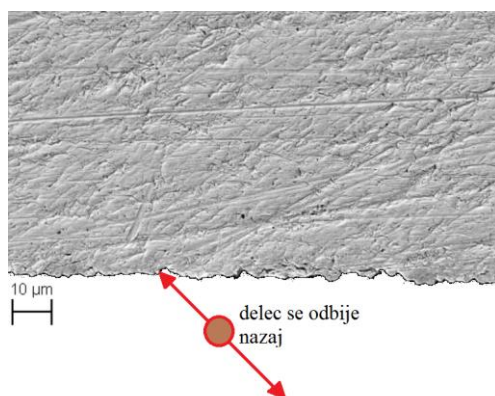
2.6 Robni pogoji

Robni pogoji (RP) so eno najkočljivejših vprašanj transportnih modelov in predstavljajo eno največjih prednosti MBM. Ta tematika je zelo pomembna za numerične simulacije, ker je stabilnost in natančnost simulacij običajno pogojena s kvalitetnimi RP. Namen tega poglavja ni v predstavitvi nabora vseh možnih RP, ampak v natančnejšem opisu tistih, ki smo jih uporabili v modelih. Za več teoretičnih podrobnosti o RP in njihovi praktični vgraditvi v modele priporočamo dela Sukop in Thorne (2010) ali Mohamad (2011).

Pri MBM lahko porazdelitveno funkcijo obravnavamo 'lagrangeevsko', kot delec, ki skače iz vozlišča v vozlišče, ali kot vrednost, ki jo zavzame zvezna funkcija v določenem vozlišču. Zato lahko robne pogoje obravnavamo bodisi kot odboje delcev od roba računskega območja bodisi z različnimi matematičnimi interpolacijami.

2.6.1 Odboj nazaj

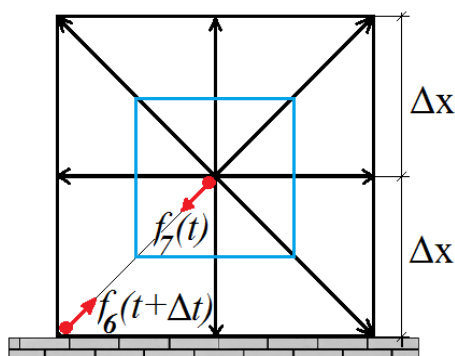
Odboj nazaj (angl. bounce back) izhaja iz MBM prednika MPCA in je zaradi svoje enostavnosti ter brezpogojne stabilnosti še vedno najbolj uporabljen RP v MBM. Pri odboju nazaj gre za neke vrste 'biljardni' odboj delca od stene na mikroskopski ravni. Ker iz slike 2.14 vidimo, da pod veliko povečavo nobena, še tako gladka stena, ni zares gladka, ampak nazobčana, se bodo mikroskopski delci od nje odbili nazaj, v smeri od koder so prišli, in ne, kot bi pričakovali pri klasični igri biljarda. Pri takem odboju bo povprečna hitrost delca enaka nič, kar odraža realno stanje 'prilepljanja' tekočine na stene prostora.



Slika 2.14: Prikaz gladke površine kamna pod elektronskim mikroskopom

Figure 2.14: Smooth stone surface under electron microscope

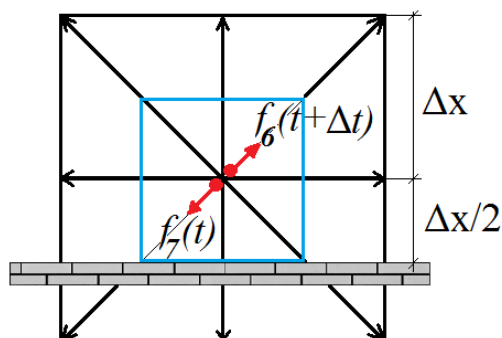
Glede na to, kam v računski mreži postavimo steno računskega območja, ločimo dve vrsti RP odboja nazaj. Prva možnost postavitve stene je na oddaljenost Δx od središča računske celice, kakor to prikazuje slika 2.15. Ta postavitev je najlažja za vgraditev v računalniški model, vendar omogoča le rezultate do prvega reda točnosti (Succi, 2001 in Zou in He, 1997).



Slika 2.15: Prikaz RP odboja nazaj s postavitvijo roba območja na razdalji Δx od računske celice

Figure 2.15: Bounce back boundary condition, with distance Δx between the fluid node and the wall

Drugo možnost prikazuje slika 2.16. V tem primeru steno postavimo na sredino razdalje med dvema računskima celicama, to je na oddaljenosti $\Delta x/2$ od središča tekočinske celice. Ta postavitev daje v primeru ravnih stranic, kjer računsko območje natančno sovпада z mejami celic, natančnost drugega reda (Ziegler, 1993 in Kandhai in sod., 1999), v primeru ukrivljenih območij pa vsaj natančnost prvega reda (Stenshold, 2010). Zaradi večje natančnosti smo to možnost vgradili v numerični model. Vgradnja v računalniški model bodisi prve bodisi druge različice RP odboja nazaj poteka z enostavno rotacijo indeksov porazdelitvenih funkcij, kakor je razvidno iz slike 2.15 in 2.16.

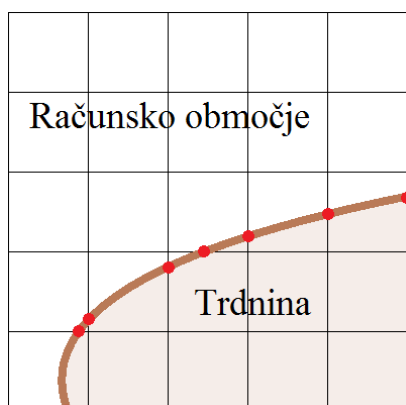


Slika 2.16: Prikaz RP odboja nazaj s postavitvijo roba območja na razdalji $\Delta x/2$ od računske točke

Figure 2.16: Bounce back boundary condition, with distance $\Delta x/2$ between the fluid node and the wall

2.6.2 Odboj nazaj na ukrivljeni površini

V primeru območij poljubnih, ukrivljenih oblik (slika 2.17), pri katerih se meje območja ne skladajo z mrežo računskih točk, je potrebno uporabiti interpolacije porazdelitvenih funkcij ali zgoščevanje mreže na robu takega območja (Peng, 2011). Eno od priljubljenih možnosti interpolacij, ki smo jo tudi sami vgradili v model, opisujejo Bouzidi in sod. (2001).



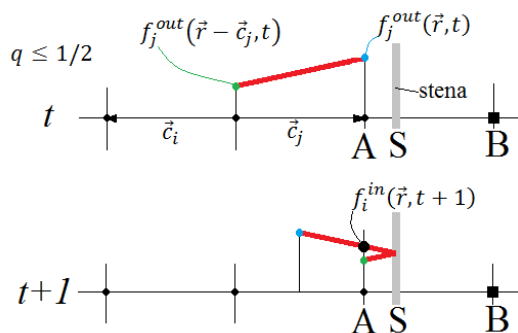
Slika 2.17: Prikaz ukrivljene meje računskega območja

Figure 2.17: Schematic presentation of curved boundary condition

Bouzidijev RP je posplošitev odboja nazaj. Položaj roba računskega območja določa brezdimenzijska koordinata q , ki je definirana z razdaljo od stene:

$$q = |AS|/|AB| \quad (2.266)$$

Z $|AS|$ smo označili razdaljo od računske točke do stene (roba območja), z $|AB|$ pa razdaljo med dvema računskima celicama (slika 2.18). V kolikor je brezdimenzijska koordinata $q = 1/2$, dobimo navaden primer odboja nazaj s položajem stene na sredini med dvema računskima celicama (slika 2.16). V primeru $q = 0$ ali 1 pa imamo primer, ko stena poteka skozi računsko celico (slika 2.15).



Slika 2.18: Skica postopka interpolacije
 Figure 2.18: Schematic presentation of the interpolation process

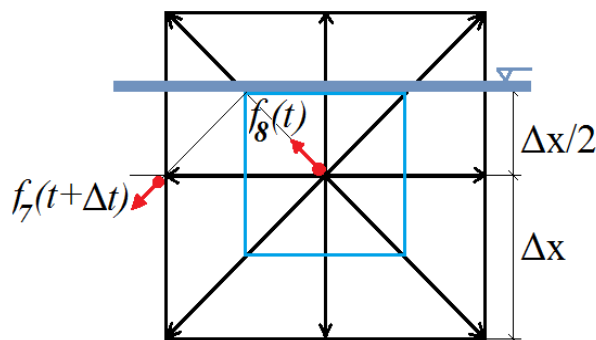
Uporaba linearne interpolacije daje izraza:

$$\begin{aligned} f_i^{in}(\vec{r}, t+1) &= 2qf_j^{out}(\vec{r}, t) + (1-2q)f_j^{out}(\vec{r}-\vec{c}_j, t) && \text{za } q \leq 1/2 \\ f_i^{in}(\vec{r}, t+1) &= \frac{1}{2q}f_j^{out}(\vec{r}, t) + \frac{(2q-1)}{2q}f_i^{out}(\vec{r}, t) && \text{za } q \geq 1/2 \end{aligned} \quad (2.267)$$

Z linearno interpolacijo dobimo točnost med prvim in drugim redom, v odvisnosti od položaja stene. Bouzidi in sod. (2001) opisujejo tudi možnost uporabe višjih stopenj interpolacij. Interpolacije (2.267) smo uporabili za pomik računske točke tik pod vodno gladino, saj je naftni madež lahko debel le nekaj centimetrov in ga običajno računanje njegove gostote na sredini računske celice ne bi nujno zaznalo.

2.6.3 Gladek rob

V primeru uporabe tridimenzionalnega modela je potrebno definirati tudi odboj delcev od proste gladine, kar storimo s tako imenovanim pogojem gladkega roba (angl. free slip)(Succi, 2001). V tem primeru lahko ponovno uporabimo sklepanje iz RP odboja nazaj, vendar gladino zamenjamo z neskončno gladko površino, pri kateri se bodo porazdelitvene funkcije odbijale enako kakor biljardne kroglice, kot prikazuje slika 2.19.



Slika 2.19: RP proste gladine

Figure 2.19: Free surface boundary condition

2.6.4 Delno prepusten rob

Ko razlito nafto prinese do obale, se začne nanjo odlagati. Kasneje se lahko del nafte zaradi tokov ponovno sprosti in se vrne nazaj v obtok. To je proces, ki ga je potrebno modelirati in ga bomo podrobneje razložili v poglavju 3.2.

Proces sproščanja in nalaganja nafte z obale je v model MBM dokaj preprosto vgraditi. Deluje podobno kakor RP odboja nazaj, vendar pa se delec nafte, ko prispe na območje obale, ne odbije takoj nazaj, ampak se najprej doda k masi predhodno naloženih delcev, nato pa se, zmanjššan za faktor, ki ga predpisuje Torgrimson (1984) in smo ga podali v enačbi (3.3), odbije nazaj.

2.6.5 Omejitev največje količine naložene nafte na brežine

Količina nafte, ki se lahko odloži na obali, je omejena. Ko se na obalo odloži največja možna količina nafte, le-ta ne sprejme nove nafte, ki zato potuje dalje s tokom. Tudi to je proces, ki ga je potrebno modelirati in ga bomo podrobneje razložili v poglavju 3.3. Tudi vgradnja tega RP v MBM model je preprosta. Ko količina nafte v obalni celici doseže največjo možno po Gundlachu (1987), se ta celica zapre in vključi navadni RP odboja nazaj.

2.7 Drugi modeli MBM

Doslej smo obravnavali le MBM z uporabo BGK trknega operatora (2.33). MBM z BGK trknim operatorjem je najenostavnejša MBM shema in je zelo primerna za predstavitev osnovnih fizikalnih načel in ideje delovanja MBM.

Algoritem MBM razdelimo na dva koraka (poglavje 2.5.4), propagacijo delcev in trke (2.268). Propagacijski korak je enak za vse modele MBM in predstavlja gibanje delcev od enega vozlišča do drugega, obstaja pa več različic modeliranja trknega koraka.

$$\begin{aligned} f_i^{(out)} &= f_i^{(in)}(\vec{x}, t) - \Omega_i(\vec{x}, t) && \text{trkni korak} \\ f_i^{(in)}(\vec{x} + \vec{\xi}_i, t + 1) &= f_i^{(out)}(\vec{x}, t) && \text{propagacija delcev} \end{aligned} \quad (2.268)$$

Funkcijo s katero modeliramo trke imenujemo trkni operator $\Omega(f_i)$ (2.269). Ta ima lahko različne oblike, odvisno od tega kolikšno število relaksacijskih časov uporablja: en relaksacijski čas, dva relaksacijska časa ali več relaksacijskih časov.

$$\Omega_i = \begin{cases} \Omega_{BGK} \\ \Omega_{TRT} \\ \Omega_{MRT} \end{cases} \quad (2.269)$$

2.7.1 BGK Zhou D3Q7

Ta model je zelo zanimiva in uporabna različica BGK modela, ki jo je razvil Zhou (2009). Gre za posplošitev osnovnega BGK modela, ki lahko deluje le na enakostranični numerični mreži ($\Delta x = \Delta y = \Delta z$) in z izotropnim koeficientom difuzije, na neenakostranično mrežo ($\Delta x \neq \Delta y \neq \Delta z$) in neizotropni koeficient difuzije ($D_x \neq D_y \neq D_z$). Ta model je zelo primeren za modeliranje razlitij nafte na območjih, kjer je ena prostorska dimenzija bistveno večja od ostalih, zato smo ga izbrali za modeliranje hipotetičnega razlitja nafte na reki Savi, ki sledi v poglavju 4.2. V nadaljevanju predstavljamo enačbe modela Zhou D3Q7.

Pomembno je poudariti da model Zhou deluje v fizičnih enotah in ne v brezdimenzijskih, kakor je običajno pri MBM. Enačba (2.270) prikazuje koordinate smernih vektorjev D3Q7 mreže, opazimo lahko, da ti niso več enotski.

$$\vec{\xi}_i = \begin{cases} (0,0,0), i = 1 \\ e_x(1,0,0), i = 2 \\ e_y(0,1,0), i = 3 \\ e_x(-1,0,0), i = 4 \\ e_y(0,-1,0), i = 5 \\ e_z(0,-1,1), i = 6 \\ e_z(0,-1,-1), i = 7 \end{cases} \quad (2.270)$$

Pri tem so spremenljivke, ki nastopajo v enačbi (2.270) definirane z izrazi:

$$e_x = \frac{\Delta x}{\Delta t}, e_y = \frac{\Delta y}{\Delta t}, e_z = \frac{\Delta z}{\Delta t}, e = \frac{\Delta x + \Delta y + \Delta z}{3\Delta t} \quad (2.271)$$

Diskretizirano ravnotežno porazdelitveno funkcijo f_i^{eq} v posameznih smereh smernih vektorjev izračunamo po enačbah:

$$f_i^{eq} = \begin{cases} \rho \left(1 - \frac{\lambda_z e_x^2 e_y^2 + \lambda_y e_x^2 e_z^2 + \lambda_x e_y^2 e_z^2}{e e_x e_y e_z} \right), i = 1 \\ \rho \left(\frac{1}{2} \frac{e_y e_z}{e_x e} \lambda_x + \frac{\vec{\xi}_i \cdot \vec{u}}{2e_x^2} \right), i = 2 \text{ in } 4 \\ \rho \left(\frac{1}{2} \frac{e_x e_z}{e_y e} \lambda_y + \frac{\vec{\xi}_i \cdot \vec{u}}{2e_y^2} \right), i = 3 \text{ in } 5 \\ \rho \left(\frac{1}{2} \frac{e_x e_y}{e_z e} \lambda_z + \frac{\vec{\xi}_i \cdot \vec{u}}{2e_z^2} \right), i = 6 \text{ in } 7 \end{cases} \quad (2.272)$$

Spremenljivke λ_x , λ_y in λ_z so definirane z enačbami:

$$\lambda_x = \frac{eD_x}{\Delta t \left(\tau - \frac{1}{2}\right) e_x e_y e_z}, \quad \lambda_y = \frac{eD_y}{\Delta t \left(\tau - \frac{1}{2}\right) e_x e_y e_z}, \quad \lambda_z = \frac{eD_{yz}}{\Delta t \left(\tau - \frac{1}{2}\right) e_x e_y e_z} \quad (2.273)$$

Pri enakostranični numerični mreži $\Delta x = \Delta y = \Delta z$ in izotropnem koeficientu difuzije $D_x = D_y = D_z$, se vse enačbe modela Zhou poenostavijo v osnovni BGK model z D3Q7 shemo (slika 2.12 desno).

Stabilnost modela Zhou

Ker porazdelitvene funkcije v realnosti ne morejo biti negativne, je eden od stabilnostnih pogojev pozitivnost ravnotežne porazdelitve:

$$f_i^{eq} > 0 \quad (2.274)$$

Iz pogoja pozitivnosti porazdelitvene funkcije v smeri smernega vektorja ena ($f_1^{eq} > 0$), dobimo sledeči stabilnostni pogoj:

$$\Delta t < \frac{\Delta x^2 \Delta y^2 \Delta z^2 \left(\tau - \frac{1}{2}\right)}{D_x \Delta y^2 \Delta z^2 + D_y \Delta x^2 \Delta z^2 + D_z \Delta x^2 \Delta y^2} \quad (2.275)$$

Ker so vrednosti: Δt , Δx , Δy , Δz , D_y , D_x , D_z in τ vedno pozitivne, bo zgornja enačba rešljiva le v primeru, da je čas relaksacije $\tau > 1/2$. To je tudi osnovno pravilo za izbiro τ v MBM in je v skladu z zahtevo po pozitivni vrednosti koeficienta difuzije v AD enači.

Zhou omenja, da pogoja $\tau > 1/2$ in enačba (2.275) sicer nista zadostna pogoja za stabilnost, vendar pa v praktičnih izračunih običajno zadoščata. Za zadovoljitev pogoja stabilnosti v celoti bi morali zagotoviti pozitivnost porazdelitvene funkcije še v vseh ostalih smereh ravnotežne porazdelitve (2.274).

2.7.2 Več-relaksacijski model MRT

Sočasno s predstavitvijo MBM z BGK trknim operatorjem je d'Humières (1992) spoznal, da lahko posploši BGK trkni operator z uporabo več relaksacijskih časov. Ta pristop je temeljil še na trkni matriki, ki sta jo Higuera in Jimenez (1989) razvila iz MPCA. Opisani pristop danes imenujemo več-relaksacijski model, zanj bomo uporabljali uveljavljeno kratico MRT (angl. Multi Relaxation Times). Lallemand in Luo (2000) sta proučevala stabilnost MRT in BGK in ugotovila, da je MRT veliko bolj stabilen kakor BGK, ker uporablja več relaksacijskih časov, katere lahko nastavljamo za doseganje optimalne stabilnosti.

Kljub večji stabilnosti MRT modela, o kateri poročajo našteti avtorji pa ima ta pristop več resnih slabosti. Ker relaksacijski čas nastopa v obliki matrike, je izračun počasnejši (Stensholt, 2010). Druga slabost je, da vsebuje kar tri proste parametre, za katere sicer obstajajo priporočene vrednosti (Rettinger, 2013), vendar pa nimajo jasnega fizikalnega pomena. Priporočena vrednost enega izmed parametrov je npr. 475/63. V tem poglavju želimo podati le osnovno idejo MRT, za bolj jasno, vendar še vedno jedrnato izpeljavo MRT priporočamo delo Rettingerja (2013).

Guo in Shu (2013) podajata sledečo obliko zapisa MBM z MRT trknim operatorjem:

$$[f](\vec{x} + \vec{\xi}, t + 1) - [f](\vec{x}, t) = [\Omega_{MRT}] \quad (2.276)$$

Trkni operator Ω_{MRT} nastopa v obliki stolpične matrike. $[S]$ je $n \times n$ razsežna matrika, ki 'relaksira' diskretizirane porazdelitvene funkcije proti ravnotežni porazdelitvi. V tem primeru n predstavlja število smernih vektorjev uporabljene sheme. V primeru uporabe D3Q27 sheme je $[S]$ 27×27 razsežna matrika.

$$\Omega_{MRT} = -[S]([f](\vec{x}, t) - [f^{eq}](\vec{x}, t)) \quad (2.277)$$

Tudi porazdelitvene funkcije so podane v obliki stolpične matrike

$$[f] = (f_1, f_2, \dots, f_n)^T \quad (2.278)$$

Iz zgornje enačbe lahko razberemo, da v primeru, če za trkno matriko izberemo $[S] = \frac{1}{\tau}[I]$, kjer je $[I]$ enotska matrika, spet dobimo osnovni BGK trkni operator.

2.7.3 Dva relaksacijska časa – model TRT

Kompromis med enostavnostjo BGK modela in stabilnostjo MRT je model, ki uporablja dva relaksacijska časa. Za ta model bomo uporabljali uveljavljeno kratico TRT (angl. Two Relaxation Times). TRT trkni operator je šele nedavno predstavila Ginzburg (2005). Običajno MBM, ki uporablja TRT, doseže boljšo stabilnost in natančnost kakor BGK ob porabi enakega računskega časa. Enačbe (2.279) do (2.282) veljajo ob uporabi tako imenovanih hidrodinamičnih uteži t_i , podanih v enačbi (2.283) (Kuzmin in sod., 2011) in so bile uporabljene v izdelanih D2Q5 in D2Q9 TRT modelih, ki so uporabljeni v poglavju 4.1.

V TRT modelih ima trkni operator $\Omega_{TRT}(f_i)$ dva relaksacijska parametra: simetričnega λ^s in asimetričnega λ^a :

$$\Omega_{TRT}(f_i) = \lambda^s(f_i^s(\vec{x}, t) - e_i^s(\vec{x}, t)) + \lambda^a(f_i^a(\vec{x}, t) - e_i^a(\vec{x}, t)) \quad (2.279)$$

Z \bar{f}_i označimo porazdelitvene funkcije, ki kažejo v nasprotni smeri od vektorja diskretne hitrosti $\vec{\xi}_i$. f_i^s in e_i^s sta simetrična, f_i^a sta e_i^a pa sta asimetrična dela porazdelitvene in ravnotežne porazdelitvene funkcije.

$$f_i^s = \frac{f_i + \bar{f}_i}{2}, \quad f_i^a = \frac{f_i - \bar{f}_i}{2} \quad (2.280)$$

$$e_i^s = \rho E_i^s, \quad e_i^a = \rho E_i^a$$

V skladu z delom Ginzburg in sod. (2010), bomo E_i^s, E_i^a imenovali simetrične in asimetrične uteži ter E_0 nepremično utež. Člen $g^{(u)}$ v enačbi (2.281) lahko zavzame le vrednosti 1 ali 0, odvisno od tega ali je uporabljena korekcija numerične difuzije ali ne.

$$\begin{aligned}
E_i^s &= E_i^{(m)} + g^{(u)} E_i^{(u)}(\vec{u}), \quad E_0^s = 1 - \sum E_i^s, \quad E_i^a = t_i(\vec{u}\vec{\xi}_i) \\
E_i^{(m)} &= t_i c_e + E_i^{(anis)}, \quad E_i^{(u)}(\vec{u})_{D2Q5} = \frac{(\vec{u}\vec{\xi}_i)^2}{2}, \quad E_i^{(u)}(\vec{u})_{D2Q9} = \frac{t_i}{2} (3(\vec{u}\vec{\xi}_i)^2 - u^2)
\end{aligned} \tag{2.281}$$

TRT model vsebuje dva prosto nastavljiva parametra c_e in Λ . Historično so Λ poimenovali »magični parameter« (Kuzmin in sod., 2011), ker je ta ob točno določenih vrednostih, kot naprimer $\Lambda = 1/4$ 'magično' povečal stabilnost MBM, niso pa znali pojasniti vzroka. Λ^s in Λ^a sta pozitivni lastni vrednosti simetričnega in asimetričnega dela trknega operatorja.

$$\begin{aligned}
\Lambda &= \Lambda^s \Lambda^a, \quad \Lambda^s = -\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\lambda^s}\right), \quad \Lambda^a = -\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\lambda^a}\right) \\
c_e &= \frac{D}{\Lambda^a}, \quad \lambda^a = \frac{1}{-\frac{D}{c_e} - \frac{1}{2}}, \quad \lambda^s = \frac{1}{-\frac{\Lambda c_e}{D} - \frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{2.282}$$

Enačbi (2.283) prikazujeta tako imenovane "hidrodinamične" uteži. Uteži $t_{i D2Q5}$ pripadajo mreži D2Q5, uteži $t_{i D2Q9}$ pa mreži D2Q9.

$$t_{i D2Q5} = \left[\frac{1}{3} \frac{1}{6} \frac{1}{6} \frac{1}{6} \frac{1}{6} \right], \quad t_{i D2Q9} = \left[0 \frac{1}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{12} \frac{1}{12} \frac{1}{12} \frac{1}{12} \right] \tag{2.283}$$

Stabilnost TRT

Natančni stabilnostni pogoji so bili izpeljani le za optimalni TRT D1Q3 model (Kuzmin in sod., 2011). Ti stabilnostni pogoji so zapleteni za uporabo, zato so bili poenostavljeni, vendar doslej le za D1Q3 model (Hammou in sod., 2011). V nadaljevanju predstavljamo zgolj osnovne stabilnostne pogoje TRT modela, s katerimi dobimo približno oceno potrebne časovne in prostorske diskretizacije.

- Stabilnost TRT pri dominantnem vplivu difuzije

Nenegativnost simetričnih uteži E_i^s , je zadosten pogoj za stabilnost TRT shem ob čisti difuziji ($\vec{u} = 0$), za katero koli vrednost lastnih vrednosti λ^s, λ^a (Ginzburg in sod., 2010). Iz tega sledi, da mora ob uporabi modela D2Q5 prosti parameter c_e ležati v intervalu:

$$c_e \in \left[0, \frac{1}{dim} \right] \tag{2.284}$$

Z dim smo označili število prostorskih dimenzij uporabljenih pri modeliranju. Potrebne pogoje za model D2Q9 lahko najdemo v Kuzmin in sod. (2011)

- Stabilnost TRT pri dominantnem vplivu advekcije

Potrebni stabilnostni pogoj za vse sheme TRT pri dominantnem vplivu advekcije in nekorrigirani numerični difuziji $g^{(u)} = 0$ je:

$$|\vec{u}|^2 \leq c_e, \quad c_e \in \left[0, \frac{1}{dim} \right] \tag{2.285}$$

Potrebni stabilnostni pogoj za TRT D2Q5 shemo pri dominantnem vplivu advekcije in deloma odpravljeni numerični difuziji $g^{(u)} = 1$ je:

$$u_{max}^2 = \min(2c_e, 1 - 2c_e) \quad (2.286)$$

- Optimalni TRT model

Potrebni pogoji postanejo zadostni za katero koli kombinacijo lastnih vrednosti λ^s, λ^a , ko je njihov magični parameter Λ enak $\frac{1}{4}$, v tem primeru se model imenuje optimalni TRT model (Ginzburg in sod., 2010).

2.8 Povečanje stabilnosti MBM z metodo FIX-UP

V izpeljavi NS enačb in izpeljavi AD enačbe smo predpostavili, da morajo biti brezdimenzijske hitrosti toka bistveno manjše od ena ($\hat{u} \ll 1$). V MBM delci potujejo z enotsko brezdimenzijsko hitrostjo, kar pomeni, da smo globoko znotraj Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) stabilnostnega pogoja (Dabbaghitehrani, 2013). Vendar izpolnitev CFL pogoja MBM še ne zagotavlja numerične stabilnosti.

V poglavju 2.5.2 smo koeficient difuzije \bar{D} povezali s časom relaksacije $\bar{\tau}$ z enačbo $\bar{D} = c_l^2 \left(\bar{\tau} - \frac{1}{2} \right)$ (2.258). Iz te enačbe lahko hitro izpeljemo osnovni stabilnostni pogoj BGK modela, da mora biti čas relaksacije večji od ene polovice, če želimo imeti pozitivne vrednosti koeficienta difuzije. Izraz (2.258) tudi sugerira, da lahko s preprosto izbiro časa relaksacije dovolj blizu ene polovice z MBM simuliramo advekcijsko dominantne pojave. Žal začne v primeru izbire nizkih časov relaksacije MBM trpeti za numeričnimi nestabilnostmi, te pa povzročijo nerealne negativne vrednosti porazdelitvenih funkcij (Ricot in sod., 2009). Predlaganih je bilo več rešitev za izboljšanje stabilnosti MBM, od katerih smo na podlagi dobrih referenc (Li in sod., 2004 in Tosi in sod., 2006) izbrali za vgradnjo v modele metodo imenovane FIX-UP.

Metoda FIX-UP

V primerih, ko imamo nizke vrednosti difuzije (relaksacijskega časa), zmerne hitrosti toka in velike gradientne koncentracij transportirane snovi, lahko porazdelitvene funkcije postanejo negativne, kar lahko privede do numerične nestabilnosti modela MBM. V modeliranju razlitja nafte so to pogoji tik ob mestu razlitja in ob interakciji nafte z obalo. V simulacijah smo uporabili preprosto metodo imenovano FIX-UP (Li in sod., 2004), da bi preprečili pojavljanje negativnih vrednosti porazdelitvenih funkcij.

Metoda na mestih, kjer se pojavijo negativne vrednosti porazdelitvenih funkcij, poviša čas relaksacije do te mere, da negativne porazdelitvene funkcije postanejo nenegativne.

$$\tau' = \max_{i=1,n} \left(\tau, 1 - \frac{f_i^{eq}}{f_i} \right) \quad (2.287)$$

V zgornji enačbi smo z n označili število smernih vektorjev uporabljene sheme. Čeprav je metoda FIX-UP zasnovana za delovanje na osnovnem BGK modelu, smo jo prilagodili tudi za delovanje na modelu TRT in uporabili na primeru razlitja nafte ob libanonski obali (poglavje 4.1). To smo storili

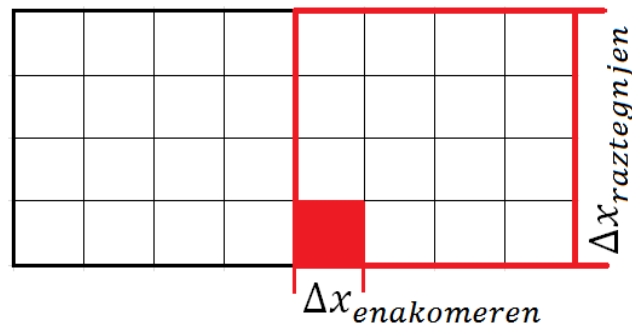
tako, da smo povišali vrednost časa relaksacije v obeh relaksacijskih parametrih, simetričnemu λ^s in asimetričnemu λ^a , na mestih pojavljanja negativnih porazdelitvenih funkcij.

$$\lambda^a = \lambda^s = -\frac{1}{\tau} \quad (2.288)$$

Metoda se je odlično izkazala v praktičnih simulacijah, ki jih prikazujemo v poglavjih 4.1 in 4.2., saj je omogočala uporabo bistveno daljšega časovnega koraka kakor sicer ob komaj zaznavnem povečanju računskega časa.

2.9 Postopek raztezanja mreže ob uporabi interpolacij z omejevalci pretoka

Običajno MBM uporablja enakomerno, kvadratno numerično mrežo s prostorskim korakom enakim $\Delta x = \Delta y = \Delta x_{\text{enakomeren}}$. Za krajši čas izračuna se lahko uporabijo prilagodljive računske mreže in neenakomerne mreže. Med neenakomerne mreže sodi tudi postopek raztezanja mreže (angl. grid stretching, Mussa in sod., 2009), ki je bil uporabljen tudi v tej disertaciji.



Slika 2.20: Skica raztegnjene in neraztegnjene mreže
Figure 2.20: Schematic presentation of stretched and non-stretched mesh segment

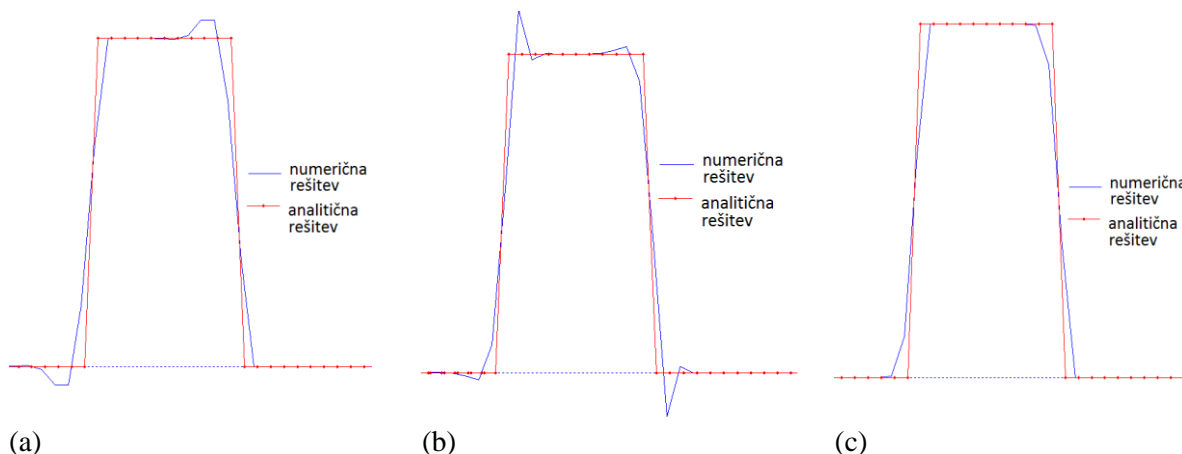
Prednost postopka raztezanja mreže je, da časovni korak ostane nespremenjen neodvisno od izbire prostorskega koraka Δx . S tem pristopom lahko uporabimo poljubno neenakomerno mrežo z najmanjšim razmakom v mreži $\Delta x = \Delta x_{\text{enakomeren}}$. Ker so porazdelitvene funkcije f_i zvezne funkcije tako v času kot prostoru, lahko vrednost funkcije v katerikoli točki v prostoru vedno približno izračunamo na podlagi vrednosti porazdelitvene funkcije v sosednjih točkah, s postopkom interpolacije. Za vsa vozlišča, katerih $\Delta x > \Delta x_{\text{enakomeren}}$, moramo za izračun vrednosti f_i po koraku propagacije delcev uporabiti interpolacije. Ker se vrednosti Δt in $\Delta x_{\text{enakomeren}}$ v postopku raztezanja mreže niso spremenile, se ni spremenila niti vrednost difuzije (2.262).

Algoritem MBM z metodo raztezanja mreže poteka v treh korakih; trki, propagacija in interpolacija propagacijskega koraka. Edina razlika v primerjavi z obstoječim algoritmom (preglednica 2.1) je dodatek tretjega koraka interpolacij.

Omejevalci pretoka

Interpolacija propagacijskega koraka s shemo drugega reda MKD Lax-Wendroff (Alhumaizi, 2007) (slika 2.21a) in shemo tretjega reda QUICKEST (Tkalič, 2006b) (slika 2.21b) nam je na območjih z velikimi gradienti koncentracije nafte povzročala težave zaradi pojavljanja negativnih vrednosti

porazdelitvene funkcije. Problematična so bila območja na robovih naftnega madeža in območja zgoščevanja nafte ob obali. Negativne vrednosti so zelo hitro prišle v resonanco same s seboj, kar je privedlo do neuporabnih rezultatov. Da bi odpravili težavo nezaželenih oscilacij shem višjega reda ter zagotovili realne, pozitivne vrednosti koncentracij, smo v Matlab (2012) vgradili še metodo Lax-Wendroff z vgrajenimi različnimi omejevalci pretoka (angl. flux-limiters). S to metodo so bile neželena oscilacije odpravljene (slika 2.21c).



Slika 2.21: Prikaz oscilacij, ki nastanejo ob interpoliranju z: (a) Lax-Wendroff shemo drugega reda, (b) QUICKEST shemo tretjega reda in (c) oscilacije se ne pojavijo ob interpolaciji z Lax-Wendroff shemo drugega reda in uporabi Van Leer omejevalca pretoka.

Figure 2.21: Oscillations by interpolating with the (a) Lax-Wendroff second-order scheme, (b) QUICKEST third-order scheme and (c) oscillations do not occur when interpolating with the Lax-Wendroff second-order scheme using Van Leer flux limiter

Z metodo omejevalcev pretoka se propagacijski korak ne izračuna več po enačbi (2.265), ampak se za izračun uporabijo enačbe Lax-Wendroff sheme z vgrajenimi omejevalci pretoka (Alhumaizi, 2007):

$$\begin{aligned}
 f(x_i, t + \Delta t) &= f(x_i, t) - \frac{\Delta t}{\Delta x} (J(x_i + \Delta x/2, t) - J(x_i - \Delta x/2, t)) \\
 J(x_i + \Delta x/2, t) &= u_x \left(f(x_i, t) + \frac{\sigma(\theta(x_i))}{2} (f(x_i + \Delta x, t) - f(x_i, t)) \right) \\
 J(x_i - \Delta x/2, t) &= u_x \left(f(x_i - \Delta x, t) + \frac{\sigma(\theta(x_i - \Delta x))}{2} (f(x_i, t) - f(x_i - \Delta x, t)) \right)
 \end{aligned} \tag{2.289}$$

kjer imenujemo $\sigma(\theta)$ omejevalec pretoka. Omejevalec pretoka se izračuna s pomočjo funkcije imenovane senzor θ , ki predstavlja razmerje gradientov koncentracij gorvodno in dolvodno od izbranega vozlišča.

Za enakomerno mrežo lahko senzor θ zapišemo z izrazom (Alhumaizi, 2007):

$$\theta(x_i) = \frac{f(x_i, t) - f(x_i - \Delta x, t)}{f(x_i + \Delta x, t) - f(x_i, t)} \tag{2.290}$$

V literaturi obstaja veliko različnih omejevalcev pretoka, za najboljše pa so se izkazali (Alhumaizi, 2007):

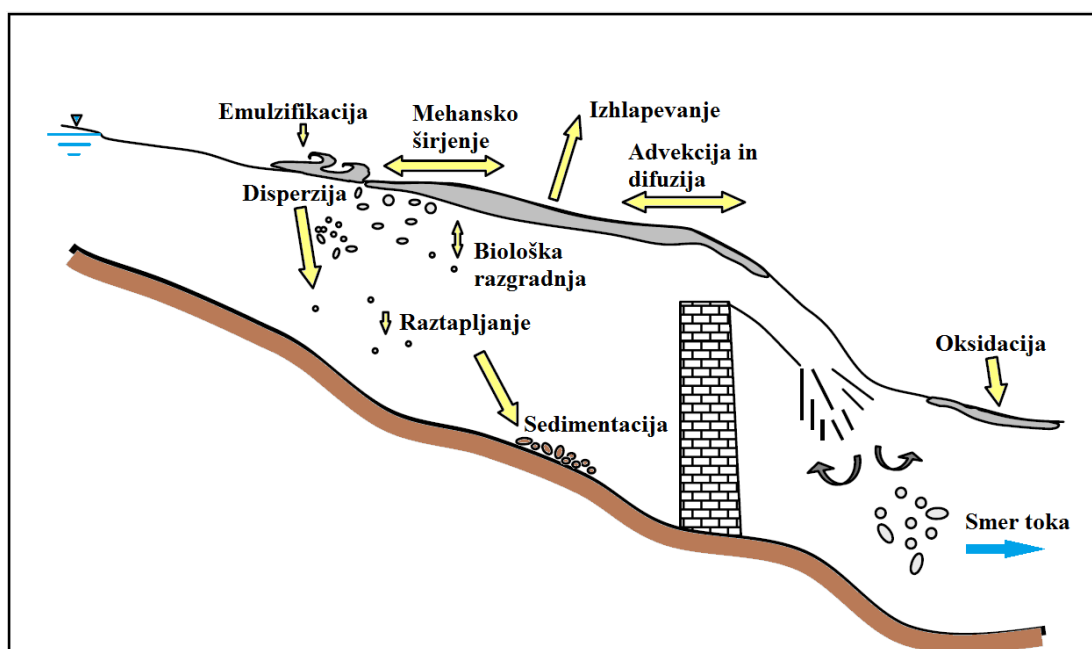
$$\begin{aligned} \sigma(\theta) &= \frac{\theta + |\theta|}{1 + |\theta|} && \text{van Leer} \\ \sigma(\theta) &= \max[0, \min(\theta, 1)] && \text{Minmod} \\ \sigma(\theta) &= \max[0, \min(2\theta, 1), \min(\theta, 2)] && \text{Superbee} \quad (2.291) \\ \sigma(\theta) &= \max\left[0, \min\left(2\theta, \frac{2\theta}{3} + \frac{1}{3}, 2\right)\right] && \text{Koren} \\ \sigma(\theta) &= \max\left[0, \min\left(2\theta, \frac{\theta}{2} + \frac{1}{2}, 2\right)\right] && \text{MUSCL (iz angl. Monotone Upstream} \\ &&& \text{Scheme for Conservation Laws)} \end{aligned}$$

Postopek raztezanja mreže ob uporabi interpolacij z omejevalci pretoka bomo uporabili v poglavju 4.1 pri validaciji modela na primeru simulacije razlitja ob libanonski obali.

3 OPIS PROCESOV PRI RAZLITJU NAFTE IN VGRADITEV GLAVNIH PROCESOV V RAČUNALNIŠKI MODEL MREŽNE BOLTZMANNOVE METODE

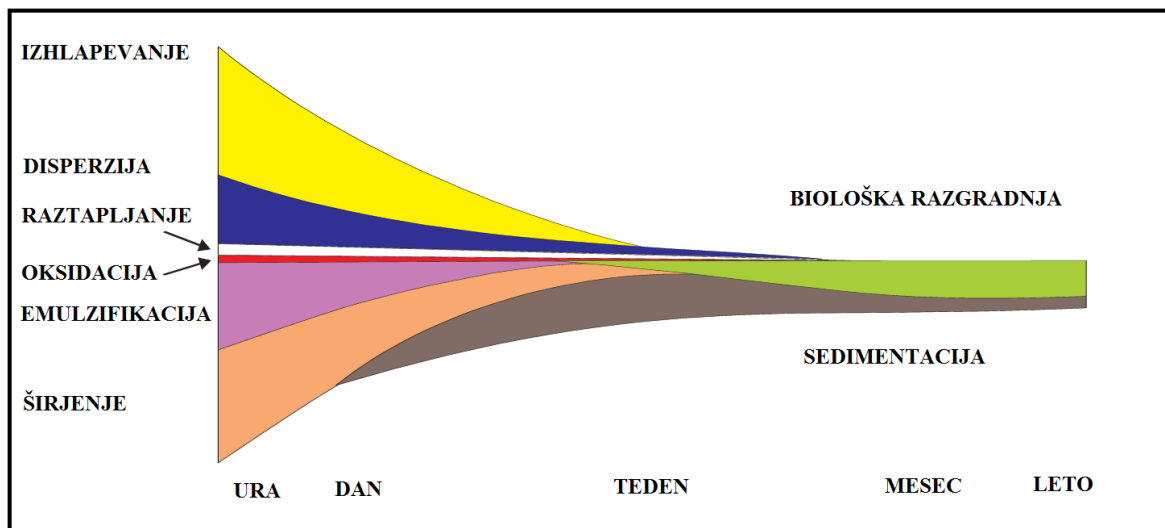
Ob razlitju nafte v vodno okolje se začne hkrati odvijati večje število fizikalno-kemijskih procesov. Vsak od teh procesov ima določen vpliv na širjenje in razgradnjo nafte. Upoštevanje vseh procesov bi znatno povečalo računski čas simulacij, zato smo se v doktorski nalogi omejili le na tiste, ki imajo bistven vpliv na transport in razgradnjo nafte. To so hidrodinamika toka, odlaganje nafte na obalo in sproščanje nazaj z obale ter izhlapevanje. Ostali procesi razgradnje so s stališča transporta in procesov pretvorb oz. spremembe mase kratkoročno manj pomembni (Žagar, 1994) in jih zato pri modeliranju nismo upoštevali. Shema pomembnejših procesov je prikazana na sliki 3.1.

V tem poglavju bomo predstavili vgrajene in nevgrajene procese v model MBM in pojasnili, zakaj slednjih pri računalniškem modeliranju nismo upoštevali. Za bolj poglobljen pregled vseh procesov priporočamo obsežno delo Fingasa (2010) na tem področju.



Slika 3.1: Shematski prikaz procesov pri razlitju nafte
Figure 3.1: Fate of oil spills

Veliko vlogo pri procesih pretvorb in razgradnje nafte ima čas; določeni procesi (npr. izhlapevanje) so najintenzivnejši tik po razlitju, drugi (npr. biološka razgradnja) pa lahko trajajo še desetletja (slika 3.2). V prvih nekaj dneh so poleg advekcije in difuzije najpomembnejši procesi mehansko širjenje, izhlapevanje, emulzifikacija in disperzija. Po nekaj tednih pride v ospredje sedimentacija, ki je sprva posledica usedanja težjih delcev nafte, kasneje pa produkt mikrobne razgradnje (ITOPF, 2002). Slednja začne prevladovati šele nekaj mesecev po razlitju nafte in je lahko prisotna več let. Pri razlitju nafte so v manjši meri prisotni tudi drugi procesi, kot sta oksidacija in raztapljanje v vodi.



Slika 3.2: Časovni potek procesov pri razlitju nafte (ITOPF, 2002)

Figure 3.2: Fate of a crude oil spill showing changes in the relative importance of weathering processes with time (ITOPF, 2002)

3.1 Izhlapevanje

Izhlapevanje je najpomembnejši izmed procesov, pri katerih se spreminja prostornina razlite nafte (Fingas, 2010; Žagar, 1994). Naftni derivati, kot sta npr. bencin in kerozin, lahko popolnoma izhlapijo že v nekaj urah, medtem ko pri rafinatih z večjo gostoto in surovih naftah poteka izhlapevanje bistveno počasneje (ITOPF, 2002).

Večina modelov še vedno uporablja osnovni način računa izhlapevanja, ki so ga predstavili Mackay in sod. (1980). Mackayev model predpostavlja, da je izhlapevanje nafte primerljivo z izhlapevanjem vode, ki je odvisno od temperature okolice, hitrosti vetra in površine gladine. Pri izhlapevanju vode se tik nad njeno površino v tako imenovani mejni plasti zadržuje določena količina izhlapelih molekul, ki otežujejo izhlapevanje preostalim molekulam. Veter odnaša te molekule iz mejne plasti in na ta način pospešuje izhlapevanje. Večja temperatura poveča kinetično energijo molekul, s katero lahko premagajo površinsko napetost, večja površina naftnega madeža pa izpostavi izhlapevanju večje število molekul (Silberberg, 2012).

Fingas (2010) je s poskusi ovrgel Mackayevo predpostavko, da izhlapevanje nafte regulira mejna plast, in dokazal, da izhlapevanje nafte ni odvisno od vetra in površine naftnega madeža, ampak le od temperature in časa po razlitju.

Za izračun izhlapevanja smo uporabili najnovejša dognanja Fingasa (2010) na tem področju. Fingas je določil delež izhlapele nafte Ev [%] za številne vrste nafte in njenih derivatov. Kot primer navedimo enačbo za delež izhlapele nafte vrste IFO 180, ki se je leta 2006 razlila na obalah Libanona in smo jo uporabili tudi za validacijo našega modela:

$$Ev(IFO180, t) = (-0.12 + 0.013T)\sqrt{t} \quad (3.1)$$

kjer je temperatura T podana v °C in čas t v minutah.

Delež neizhlapele nafte v morju in na obali v sledečih si časovnih korakih izračunamo na naslednji način:

$$\text{delež neizhlapele nafte} = \frac{100 - Ev(t + \Delta t)}{100 - Ev(t)} \quad (3.2)$$

3.2 Odlaganje na obalo

Ko razlito nafto prinese do obale, se začne nanjo odlagati. Kasneje se lahko del nafte zaradi tokov ponovno sprosti in se vrne nazaj v obtok. Torgrimson (1984) je predlagal uporabo vrednosti razpolovnega časa (angl. half life) za opis sposobnosti obale za zadrževanje nafte. Natančneje razpolovni čas pove, v kolikšnem času se v obtok vrne polovica prvotno odložene nafte. V skladu s teorijo razpolovnega časa se volumen odložene nafte, ki ponovno vstopa v vodni tok v naslednjem časovnem koraku, izračuna v spodnjem izrazom:

$$V_{nazaj} = (1 - e^{-k\Delta t})V_{obala} \quad (3.3)$$

V_{obala} je volumen nafte, naložene na obali, in V_{nazaj} je volumen nafte, ki z obale ponovno vstopa v vodni tok. Zvezo med konstanto upadanja k in konstanto razpolovnega časa λ nam podaja izraz:

$$k = \frac{(-\ln(1/2))}{\lambda} \quad (3.4)$$

Različni tipi obale imajo različne vrednosti razpolovnega časa, na primer, $\lambda = 24$ ur za peščene plaže in $\lambda = 1$ za izpostavljene klife (Torgrimson, 1984).

3.3 Največja možna količina odložene nafte na obali

Količina nafte, ki se lahko odloži na obali, je omejena. Ko se na obalo odloži največja možna količina nafte, le-ta ne sprejme nove nafte, ki zaradi tega potuje dalje s tokom. Ta proces ima lahko velik vpliv na položaj nafnega madeža in ga v priobalnih simulacijah nikakor ne bi smeli zanemariti. Gundlach (1987) je v svojem delu prikazal izraze za izračun največje količine odložene nafte za različne tipe obale, ki je odvisna od debeline madeža, globine infiltracije v obalo in naklona obale (Gundlach, 1987). Gundlach (1987) je predlagal tudi povprečne vrednosti za nekaj tipičnih tipov obale, ki smo jih uporabili tudi v tej raziskavi. Povprečna količina odložene nafte na skalnati obali je npr. $0.01 \text{ m}^3/\text{m}$, na peščeni pa kar $2,16 \text{ m}^3/\text{m}$ (kubičnih metrov na tekoči meter obale).

3.4 Vzgon

Z namenom kasnejše validacije rezultatov MBM modela s preizkušenim programom za simulacijo širjenja nafte Nafta3D (Žagar in Četina, 2011) smo vpliv vzgona na delce upoštevali na enak način kot v omenjenem modelu. Nafta3D temelji na MSD. Osnovne enačbe te metode podajamo v petem poglavju, tukaj pa se omejimo le na obravnavanje vertikalnih hitrosti v metodi. Nafta3D simulira vertikalno hitrost dviganja delcev w kot vsoto deterministične komponente w^* in stohastične komponente hitrosti w^{**} :

$$w = w^* + w^{**} \quad (3.5)$$

Deterministična komponenta hitrosti w^* je podatek hitrosti toka, dobljen s hidrodinamičnim modelom. Stohastična komponenta w^{**} pa podaja vpliv vertikalne turbulentne difuzije D_v na gibanje delcev in jo opisuje izraz (Žagar in sod., 2011):

$$w^{**} = r_{vzgon} \sqrt{\frac{2D_v}{\Delta t}} \quad (3.6)$$

Pri tem vrednosti r_{vzgon} dobimo z generatorjem naključnih števil v vertikalni smeri, ki generira naključne spremenljivke, porazdeljene po Gaussovi krivulji s srednjo vrednostjo, enako $M_{r_{vzgon}}$, in standardno deviacijo (STD) enako ena (Žagar in sod., 2011). Srednja vrednost $M_{r_{vzgon}}$ porazdelitve je odvisna od razmerja gostote vode ρ_{vode} in nafte ρ_{nafte} in podaja vpliv vzgona na vertikalno gibanje delcev:

$$M_{r_{vzgon}} = \frac{(\rho_{vode} - \rho_{nafte})}{\rho_{vode}} \quad (3.7)$$

Gaussovo porazdelitev s STD enako ena in srednjo vrednostjo $M_{r_{vzgon}}$ lahko zapišemo tudi z uporabo naključne spremenljivke r_{SNP} standardne normalne porazdelitve, to je normalne porazdelitve s srednjo vrednostjo nič in STD enako ena (Bronštejn in sod., 1997):

$$r_{vzgon} = (M_{r_{vzgon}} + r_{SNP}) \quad (3.8)$$

V nadaljevanju želimo vpliv vzgona na gibanje delcev ločiti od stohastične komponente hitrosti in ga priključiti deterministični komponenti hitrosti. To storimo z upoštevanjem enačbe (3.8) v enačbi (3.6) in dobimo:

$$w^{**} = (M_{r_{vzgon}} + r_{SNP}) \sqrt{\frac{2D_v}{\Delta t}} \rightarrow$$

$$w^{**} = \underbrace{M_{r_{vzgon}} \sqrt{\frac{2D_v}{\Delta t}}}_{w_{vzgon} \text{ hitrost vzgona delcev}} + \underbrace{r_{SNP} \sqrt{\frac{2D_v}{\Delta t}}}_{w_{SNP}^{**} \text{ stohastična komponenta}} = w_{vzgon} + w_{SNP}^{**} \quad (3.9)$$

Vidimo, da v zgornji enačbi vpliv vzgona na vertikalno hitrost delcev $M_{r_{vzgon}}$ nastopa ločeno od naključne spremenljivke r_{SNP} . Z w_{SNP}^{**} smo označili stohastično komponento hitrosti, ki jo dobimo, če ne upoštevamo vzgona na delce. Tako smo ločili vpliv vzgona delcev od stohastične komponente hitrosti in ga lahko upoštevamo kot dodatek deterministični komponenti hitrosti. Sedaj lahko vpliv vzgona na delce izračunamo tako, da prištejemo vzgonsko hitrost delcev w_{vzgon} k že podani vertikalni hitrosti w^* ; na tak način bomo upoštevali vpliv vzgona pri uporabi MBM.

$$w = w^* + w_{vzgon} + w_{SNP}^{**} \quad (3.10)$$

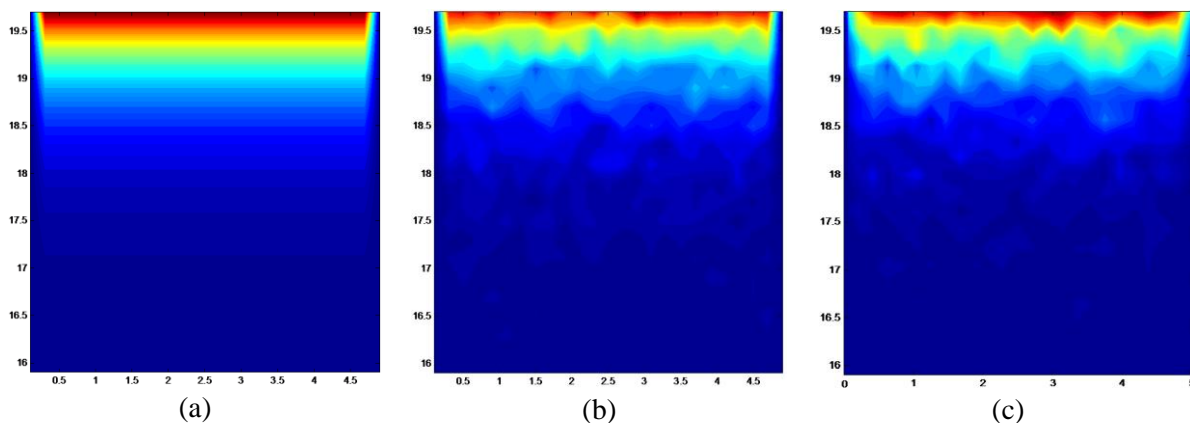
Veljavnost pravkar izpeljanih izrazov smo preverili z numeričnim eksperimentom. V njem smo primerjali simulacije vzgona nafte s tremi različnimi modeli: MBM, MSD_RPO1b in Nafta3D. Z MSD_RPO1b smo označili model, ki deluje na podlagi istih enačb kakor Nafta3D. Ta model smo razvili v programskem okolju Matlab (2012) z namenom testiranja učinkovitosti MSD v petem poglavju. Kratica RPO1b v imenu MSD_RPO1b pove, kater robni pogoj model uporablja. RPO1b imenujemo tudi odboj brez čakanja (Širca, 1992). Zanj velja, da se delec, ki prestopi mejo območja, vrne nazaj na svoj položaj in ima šele v naslednjem časovnem koraku priložnost za spremembo položaja, pri tem pa ostali delci ne čakajo. Nafta3D uporablja za simulacijo odboja delcev od proste gladine robni pogoj, imenovan RPO3 (Širca, 1992). Ta robni pogoj deluje tako, da delec, ki prestopi gladino, vrne 1 cm pod gladino. Prav razlika v obravnavanju odboja delcev od proste gladine bo privedla do rahlih razlik v razporedu koncentracij po globini. Vhodne podatke v preizkusu prikazuje spodnja preglednica:

Preglednica 3.1: Vhodni podatki za numerični preizkus

Table 3.1: Input data for the numerical experiment

Podatek	Vrednost
Število delcev	MSD_RPO1b in Nafta3D - 10000 delcev MBM - ne računa z delci
Časovni korak	0,1 sek
Končni čas	30 minut
Količina razlite nafte	10000 kg
Trajanje izpusta nafte	Trenutni izpust
Turbulentna difuzija v vertikalni in horizontalni smeri	0,22 m ² /s
Gostota nafte	840 kg/m ³
Gostota vode	1000 kg/m ³
Število računskih celic	100 x 25 x 25
Velikost celice	9,28 m x 9,28 m x 2,23 m

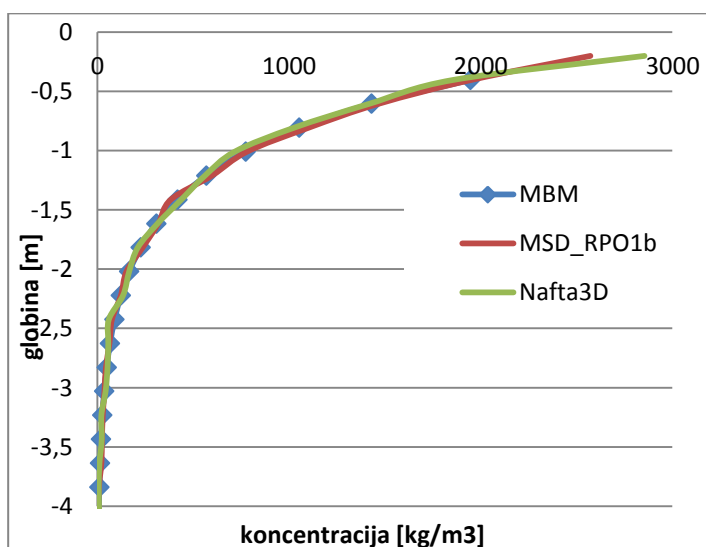
Rezultati numeričnega preizkusa so prikazani na slikah 3.3 in 3.4. Slike 3.3 so kvalitativnega pomena iz njih se vidi stohastična narava MSD (slika 3.3b in 3.3c), kjer so koncentracije nekoliko neurejeno razporejene po prerezu. Medtem ko pri MBM (slika 3.3a) zasledimo zelo urejeno razporeditev koncentracij po globini, kar je bolj v skladu s pričakovano analitično rešitvijo.



Slika 3.3: Prikaz razporeditve koncentracije po globini pri: (a) modelu MBM , (b) MSD_RPO1b in (c) Nafta3D

Figure 3.3: Distribution of concentration with depth for: (a) MBM model, (b) MSD_RPO1b and (c) Nafta3D

Bolj nazoren prikaz majhnih razlik med MBM, MSD_RPO1b in Nafta3D prikazuje slika 3.4. Iz te slike vidimo, da rezultati MBM in MSD_RPO1b praktično sovpadajo, medtem ko model Nafta3D daje nekoliko višje vrednosti koncentracij nafte tik pod površjem. Razlike so posledica uporabe različnih robnih pogojev in bodo tudi v poglavju 5.2 vzrok manjšim razlikam med rezultati MBM in Nafta3D.



Slika 3.4: Primerjava razporeditve povprečnih koncentracij po globini med modeli: MBM, MSD_RPO1b in Nafta3D

Figure 3.4: Comparison of the distribution of average concentrations with depth for MBM, MSD_RPO1b and Nafta3D

Kot smo omenili v poglavju 2.6, ima MBM v primeru ravnih sten zanesljiv robni pogoj drugega reda točnosti. Ker smo rezultate MBM potrdili tudi z uporabo MSD_RPO1b, menimo, da je Nafta3D z uporabo robnega pogoja proste gladine RPO3 nekoliko manj natančna v simuliranju razporeditve koncentracij po globini kakor MBM.

3.5 Mehansko širjenje

Mehansko širjenje imenujemo fizikalni proces, pri katerem nafta zaradi delovanja sile teže in medpovršinskih sil poizkuša zavzeti čim večjo površino (Yapa in sod., 1993). Proces si bomo lažje predstavljali, če ga bomo primerjali z razlitjem nafte na neki večji ravni površini. Nafta se bo širila, dokler učinki gravitacijske sile ne bodo v ravnotežju s strižnimi napetostmi med površino in nafto in medpovršinsko napetostjo na robu območja. Iz tega lahko sklepamo, da bo mehansko širjenje naraščalo s količino razlite nafte in upadalo z viskoznostjo, površinsko napetostjo ter časom.

Modeliranje mehanskega širjenja nafte po vodni površini je možno izračunati na več načinov. Najbolj pogoste metode so (Žagar, 1994): račun mehanskega širjenja po osnovni Fayeve (1971) enačbi, uporaba modificirane Fayeve enačbe (Lehr in sod., 1984) ter upoštevanje strižne difuzije namesto mehanskega širjenja (Elliott in sod., 1986).

Strižna difuzija je pojav, ko nafta zaradi delovanja valov v obliki kapljic preide v vodni stolpec, nato kapljice z večjim premerom pod vplivom vzgona ponovno priplavajo nazaj na vodno gladino in tako tvorijo značilen 'rep' naftnega madeža, medtem ko manjše kapljice ostanejo ujete v vodnem stolpcu (Delvigne in Sweeney, 1988 ter Tkalic in Chan, 2002). Hitrejše širjenje madeža v smeri vetra in raztezanje v smeri strižnih sil so značilnosti strižne difuzije (Žagar, 1994). Tridimenzionalni modeli upoštevajo vpliv strižne difuzije z upoštevanjem delovanja vzgona na naftne kapljice, dispergirane v vodnem stolpcu.

V četrtem poglavju bomo validirali model MBM na primeru razlitja ob libanonski obali in teoretičnega razlitja na Savi. Na primeru razlitja na Savi bomo uporabili tridimenzionalni model in v tem primeru bomo strižno difuzijo modelirali z upoštevanjem vzgona. Na primeru Libanona pa mehanskega širjenja kljub dvodimenzijski simulaciji ne bomo posebej modelirali, ker bo končni čas simulacije presegal 18 dni, iz slike 3.2 pa vidimo, da je mehansko širjene najintenzivnejše v prvih dneh razlitja.

3.6 Emulzifikacija

Emulzija je po definiciji zmes dveh nemešljivih tekočin, od katerih je ena dispergirana v drugi v obliki kapljic (Wertheim in sod., 1994). Pod vplivom valov pride do vdora vodnih kapljic v nafto, nafta in voda se bosta zmešali v peni podobno snov, prišlo bo do emulzifikacije (ITOPF, 2002).



Slika 3.5: Fotografija vode in dizelskega goriva: (a) pred premešanjem in (b) po 5-minutnem mešanju

Figure 3.5: Images of water and diesel fuel: (a) before mixing and (b) after 5 minutes of mixing

Obstajata dve vrsti emulzije: voda v nafti in nafta v vodi (Žagar, 1994). Emulzija vode v nafti močno prevladuje v naravnem okolju, zato jo operativne ekipe na terenu zaradi njenega izgleda imenujejo kar čokoladna pena (angl. chocolate mousse). Viskoznost nafte zelo vpliva na proces emulzifikacije; v bolj viskoznih naftah je prodor vodnih kapljic v nafto težji kot pri naftah z manjšo viskoznostjo. Po drugi plati pa tudi zelo nizko viskozne nafte ne bodo emulzificirale, saj bodo prej izhlapele.

Večina avtorjev za modeliranje emulzifikacije zaradi enostavnosti še danes uporablja enačbe Mackaya in sod. (1980, cit. po Delgado in sod., 2006), čeprav je Fingas (2010) dokazal, da ne dajejo pravih rezultatov. V enačbi (Mackay in sod., 1980)

$$\frac{dF_{em}}{dt} = K_{em} \cdot (1 + u_w)^2 \cdot \left(1 - \frac{F_{em}}{F_{em}^f}\right) \quad (3.11)$$

imajo oznake naslednji pomen:

u_w hitrost vetra

F_{em}^f končni volumski delež vode odvisen od vrste nafte

F_{em} volumski delež vode

K_{em} emulzifikacijska konstanta, dobljena na podlagi eksperimentov

Izdelani model MBM še ne omogoča upoštevanje emulzifikacije, vsekakor pa je to proces, ki bi ga želeli v prihodnosti prvega podrobno raziskati in vgraditi v model.

3.7 Disperzija

Disperzija je proces, pri katerem nafta pod vplivom valov v obliki kapljic preide v vodni stolpec (ITOPF, 2002). Intenzivnost disperzije je odvisna od viskoznosti nafte; manj viskozne nafte se bodo lažje razcepile na kapljice kakor bolj viskozne. Velikost disperzije je mogoče povečati z dodajanjem kemikalij, imenovanih disperzanti. Z njihovo rabo se nafta s površine pomakne v vodni stolpec, s čimer se obale zavarujejo pred onesnaženjem. S tem se omeji gospodarska škoda, ki bi jo onesnaženje povzročilo turizmu, vendar je iz dolgoročnega ekološkega vidika korist povečevanja disperzije nedorečena (Fingas, 2010). Model MBM še ne omogoča upoštevanja vpliva disperzije. Enega od možnih načinov izračuna disperzije, ki bi ga lahko v prihodnosti vgradili v model, podajajo tudi Mackay in sod. (1980, cit. po Delgado in sod., 2006):

$$\frac{dm_d}{dt} = K_d m_{oil} \frac{(1 + u_w)^2}{1 + 5000 \mu^{1/2} h \sigma} \quad (3.12)$$

Pomen oznak:

m_d razpršena masa nafte [kg]

m_{oil} preostala masa nafte [kg]

σ površinska napetost nafta-voda

μ koeficient dinamične viskoznosti

k_d konstanta $3,05 \cdot 10^{-5}$

3.8 Sedimentacija

Sedimentacije je proces, ki povzroči, da nafta potone na dno vodnega telesa (Fingas, 2010). Večina nafte ima manjšo gostoto od vode in zato plava na površini. Do sedimentacije pride, ko se dispergirane naftne kapljice vežejo z drobnimi mineralnimi delci in se jim zato toliko poveča gostota, da potonejo na dno. Sedimentacija je najizrazitejša v plitvih vodah, kjer je velika koncentracija lebdečih delcev. Običajno sedimentacija ne igra pomembne vloge v modeliranju razlitja nafte in le redki obstoječi računalniški modeli upoštevajo tudi ta proces. Eden izmed takih je model ADIOS (Lehr in sod., 2002), ki ima sedimentacijo vgrajeno na podlagi ugotovitev raziskav Payne in sod., (1987). Tudi v tem modelu avtorji omenjajo, da je upoštevanje sedimentacije v splošnem nepotrebno in da je proces potrebno upoštevati le na območjih z veliko vsebnostjo lebdečih mineralnih delcev, kot so npr. območja v bližini peščenih plaž.

3.9 Biološka razgradnja

Ker je nafta biološkega izvora, vsebuje veliko organskih snovi, s katerimi se prehranjujejo mikroorganizmi (MO), živeči v vodi (Biello, 2010). Mikroorganizmi živijo v vodi, zato lahko biološka razgradnja poteka le na površinskem sloju med vodo in nafto. Površina naftnega madeža se lahko poveča bodisi na naraven bodisi na umeten način (z uporabo disperzantov) s formacijo kapljic, da biološka razgradnja poteka hitreje. Mikroorganizmi za presnovo nafte potrebujejo kisik, zato se biološka razgradnja zmanjša v predelih z manjšo vsebnostjo kisika. Biološka razgradnja se začne počasi, saj se morajo MO, živeči v vodi, razmnožiti. Za opaznejši učinek biološke razgradnje so potrebni meseci ali celo leta, poteka pa lahko še desetletja (Slika 3.2). Prav zaradi tako zakasnelega vpliva biološke razgradnje nismo upoštevali v modelu MBM, kjer operiramo z dnevi in v najdaljšem primeru nekaj tedni dolgimi simulacijami.

3.10 Raztapljanje

V primeru, da se atomi in/ali molekule neke snovi, ki jo dodamo v tekočino, enakomerno porazdelijo pravimo, da se je snov raztopila (Kač, 2001). Koliko nafte se bo raztopilo, je odvisno od temperature vode, sestave nafte, stopnje disperzije in turbulence. Grobo rafinirane nafte so v vodi praktično netopljive, pri dobro rafiniranih pa poteka izhlapevanje običajno od 10 do 1000-krat hitreje, kot je raztapljanje (ITOPF, 2002). Zaradi zanemarljivega vpliva na širjenje nafte smo raztapljanje v našem modelu zanemarili. Z ekološkega vidika pa je raztapljanje visoko toksičnih frakcij nafte v vodi izredno pomembno, saj že zelo nizke koncentracije povzročajo hude ekološke posledice, ker se z njimi hranijo MO, ki so prvi člen v prehranjevalni verigi.

3.11 Oksidacija

Izraz oksidacija se je prvotno nanašal na sprejemanje kisika v kemijskih reakcijah, sedaj pa se uporablja bolj splošno kot sprejemanje elektronov (Kač, 2001). Nafta lahko reagira s kisikom, kar privede bodisi do tvorbe topnih produktov bodisi do bolj odpornih katranov. Oksidacijo pospešuje sončna svetloba, vendar je njen vpliv zanemarljiv. Običajno je v zelo sončnem dnevu delež razgradnje, ki jo lahko pripišemo oksidaciji, velikostnega reda 0,1 % (ITOPF, 2002).

4 VALIDACIJA TRANSPORTNEGA MODELA ŠIRJENJA NAFTE PO MREŽNI BOLTZMANNOVI METODI

Najpogostejši način za validacijo rezultatov matematičnega modela je primerjava z meritvami. Meritve v laboratorijih v majhnem merilu običajno niso uporabne za primerjavo z naravnim merilom, zato so nujne meritve v naravi. Pri razlitjih nafte sta možni dve vrsti: prve so vnaprej načrtovane meritve na namernih razlitjih, druge pa meritve na mestih dejanskega razlitja nafte ob neizgodbah. Prvi tip meritev je redek zaradi visokih stroškov in neizogibnega onesnaženja okolja, ki ga s tem povzročimo (Žagar, 1994). Tako nam za validacijo rezultatov modela MBM ostane le še primerjava z meritvami na primerih dejanskih onesnaženj.

Ker je MBM model splošen in uporaben za simulacije prenosa nafte na rekah in morju, lahko tudi validacijo izvedemo na obeh primerih, dobro dokumentiranih razlitij pa je na morju več. Kot najprimernejše za validacijo MBM v poglavju 4.1 smo izbrali razlitje, ki se je zgodilo leta 2006 pred libanonsko obalo. Neizgoda je dobro dokumentirana v literaturi in je bila že večkrat uporabljena za umerjanje modelov širjenja naftnih madežev (Coppini in sod., 2011 ter Perkovič in sod., 2008). Rezultate validacije modela MBM za širjenje nafte pred libanonsko obalo smo objavili tudi v članku Maslo in sod. (2014).

Dobro dokumentiranega primera dejanskega razlitja nafte na reki v literaturi nismo našli. Zato bomo v poglavju 4.2 opravili še primerjavo rezultatov modela MBM s preizkušenim modelom Nafta3D (Žagar in Četina, 2011) na primeru hipotetičnega razlitja na Savi.

4.1 Primerjava rezultatov modela MBM s resničnim razlitjem nafte ob libanonski obali

Za testiranje modela smo izvedli simulacijo razlitja nafte, ki je bila posledica bombardiranja naftne termoelektrarne Jiyeh, ki se nahaja 30 km južno od Bejruta, glavnega mesta Libanona. Termoelektrarna je bila zadeta prvič 13. julija ter nato še dva dni kasneje, 15. julija 2006. Ocena količine razlite nafte znaša med 15.000 in 20.000 tonami. V rezervoarjih je bila nafta tipa IFO (angl. Intermediate Fuel Oil) številka 6, ki smo jo v izvedenih simulacijah, podobno kakor Perkovič in sod., (2008) nadomestili z nafto tipa IFO 180. Podatki za ta tip nafte se nahajajo v Fingasovih (2010) tabelah, nafti pa imata enake lastnosti.

Pomemben del vhodnih podatkov (hitrostna polja morskih tokov in vetra) je bil posredovan s Fakultete za pomorstvo in promet Univerze v Ljubljani (osebna komunikacija, Marko Perkovič). Hidrodinamična slika morskih tokov je bila izračunana z modelom CYCOFOS (Zodiatis in sod., 2008), model teče na Ciprskem oceanografskem centru (angl. Cyprus Oceanography Centre). Vektorska slika vetrov je bila produkt modela za napovedovanje vremena SKIRON (Kallos, 1997). Horizontalna resolucija tokov in vetra je bila grobih 1,8 kilometra, kar se kasneje izkaže kot največji vir nenatančnosti dobljenih rezultatov. Tako podatki vetra kot morskih tokov so bili na voljo v 24-urnih intervalih, ki smo jih z namenom, da bi dobili mehkejše prehode, linearno interpolirali na 12-urne intervale.

V primeru razlitja nafte ob libanonski obali smo se omejili na simulacijo naslednjih fizikalno-kemijskih procesov: izhlapevanja po Fingas (2010) po enačbi (3.2), odlaganja in sproščanja nafte iz obale po Torgrimsonu (1984) po enačbi (3.3), največjo možno količino odložene nafte na obali pa smo omejili po Gundlachu (1987).

Kot smo z vsemi pripadajočimi izrazi opisali v poglavju 2.7, ima MBM za simulacijo advekcije in difuzije na voljo TRT in BGK model. Vsakega od teh modelov je mogoče kombinirati z mrežo D2Q5 (slika 2.11 levo) ali D2Q9 (slika 2.11 desno). Izbiri najboljše kombinacije modela in mreže bomo naredili na podlagi numeričnega poskusa, v katerem bomo preverili natančnost in hitrost izračuna posameznih kombinacij.

4.1.1 Izbira optimalnega modela MBM

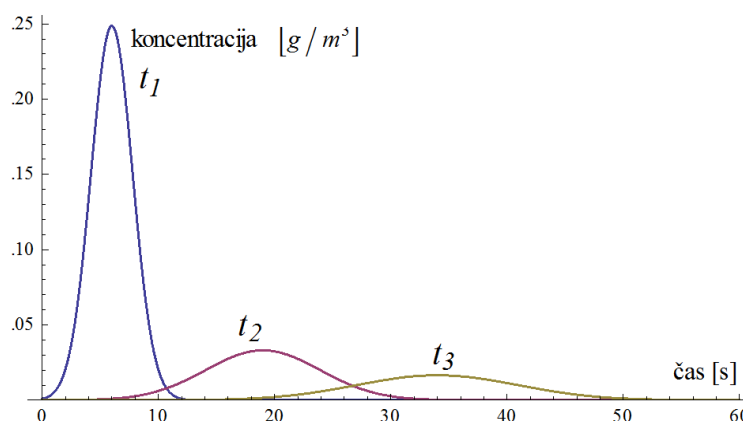
Za izbiro najboljšega možnega modela smo izvedli veliko število numeričnih eksperimentov. Primerjali smo mreži D2Q5 in D2Q9 ter TRT z osnovno BGK shemo. Še prej pa smo morali na optimalno delovanje umeriti parametre TRT sheme. V eksperimentih smo, kot je to pogosto v literaturi (Banda in sod., 2009; Ginzburg in d’Humières, 2007; Li in Huang, 2009), primerjali relativno L^2 napako (4.1) med analitično (4.2) in numerično rešitvijo advekcije in difuzije Gaussovega zvona (slika 4.1):

$$L^2(R_{\text{numerična}}) = \sqrt{\frac{\sum |R_{\text{numerična}}(\vec{x}) - R_{\text{analitična}}(\vec{x})|^2}{\sum |R_{\text{analitična}}(\vec{x})|^2}} \quad (4.1)$$

$$C(x, y, t) = \frac{m}{h} \frac{1}{4\pi Dt} e^{-\frac{(x-x_0-\bar{u}_x t)^2 + (y-y_0-\bar{u}_y t)^2}{4Dt}} \quad (4.2)$$

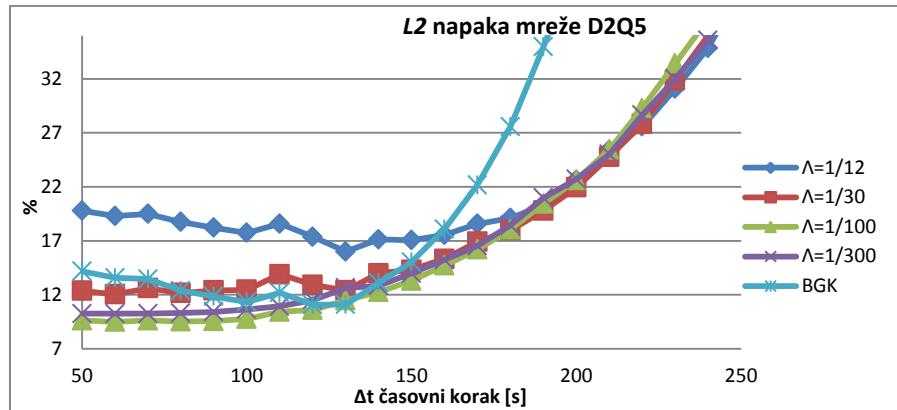
Pomen oznak:

$R_{\text{analitična}}$	vrednosti analitične rešitve
$R_{\text{numerična}}$	vrednosti računalniško modelirane rešitve
m	masa onesnažila [kg]
D	koeficient difuzije [m^2/s]
\bar{u}	povprečni pretok [m/s]
h	globina [m]



Slika 4.1: Prikaz analitične rešitve - Gaussov zvon
 Figure 4.1: Display of the analytical solution of the evolution of a Gaussian hill.

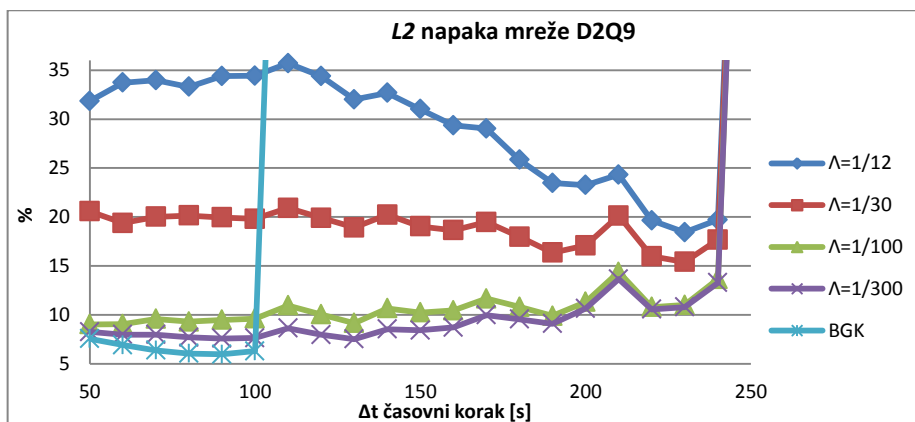
Izbrali smo najnatančnejše rezultate mrež D2Q5 in D2Q9 in jih med seboj primerjali po preciznosti in hitrosti izračuna. Najnatančnejši rezultati D2Q5 mreže so bili doseženi z uporabo TRT modela in vrednostjo magičnega parametra, enako 1/100 (slika 4.2).



Slika 4.2: Primerjava natančnosti TRT in BGK modela na D2Q5 mreži v spremenljivem časovnem koraku in različnih vrednostih magičnega parametra Λ TRT modela.

Figure 4.2: Comparing the accuracy of TRT and BGK models running on D2Q5 lattice and variable time step, while tuning the magic parameter Λ of the TRT model.

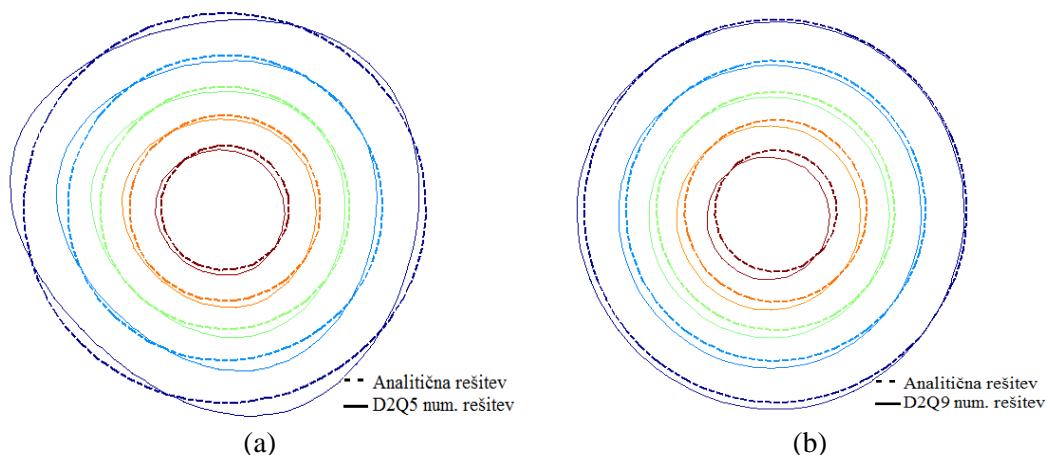
Skupno največja natančnost ob največjem časovnem koraku je bila dosežena ob uporabi D2Q9 mreže in TRT modela z magičnim parametrom Λ , enakim 1/300 (slika 4.3). V vseh numeričnih eksperimentih je bilo vedno mogoče dobiti bodisi natančnejši rezultat bodisi enako natančen rezultat ob uporabi večjega časovnega koraka z uporabo TRT modela in primerne umerjanja njegovih parametrov kakor ob uporabi BGK modela.



Slika 4.3: Primerjava natančnosti TRT in BGK modela na D2Q9 mreži v spremenljivem časovnem koraku in različnih vrednostih magičnega parametra Λ TRT modela.

Figure 4.3: Comparing the accuracy of TRT and BGK models running on D2Q9 lattice and variable time step, while tuning the magic parameter Λ of the TRT model.

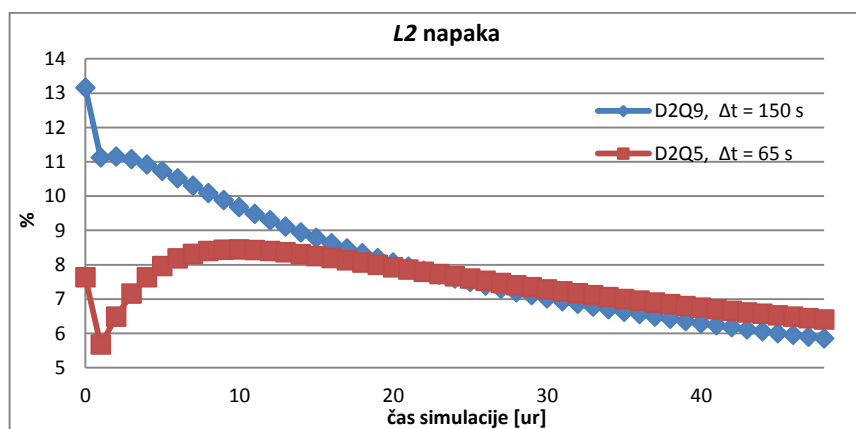
Sliki 4.4a in 4.4b prikazujeta rezultate izolinij koncentracij advekcije in difuzije Gaussovega zvona TRT modela na D2Q5 in D2Q9 mreži z natanko enako natančnostjo. Čeprav so rezultati s TRT D2Q9 modelom nekoliko zamaknjeni izven središča analitične rešitve, se zdijo še vedno bolj primerni za nadaljnjo uporabo, saj prikazujejo boljšo rotacijsko simetričnost.



Slika 4.4: Primerjava izolinij koncentracij numerične in analitične rešitve (a) D2Q5 in (b) D2Q9 modela.

Figure 4.4: Comparing the contour plots of the numerical and analytical solutions of the (a) D2Q5 and (b) D2Q9 model results.

Ker je bilo v numeričnih eksperimentih vedno mogoče toliko zmanjšati časovni korak TRT D2Q5 modela, da se je njegova natančnost izenačila z natančnostjo TRT D2Q9 modela, izbira najboljšega modela ni bila preprosta odločitev. Na koncu smo izbrali boljši model na podlagi njegove natančnosti in potrebnega računskega časa. Izbrali smo časovni korak 150 sekund TRT D2Q9 modela. Sledilo je umerjanje časovnega koraka TRT D2Q5 modela, tako da sta oba modela za določeno simulacijo potrebovala natanko enak računski čas. Časovni korak TRT D2Q5 modela je pri tem znašal 65 sekund. Nato smo testirali natančnost obeh modelov z enakim računskim časom (slika 4.5). Izkazalo se je, da po 20 urah natančnost TRT D2Q9 modela preseže natančnost TRT D2Q5 modela (slika 4.5). Ker v primeru razlitja ob libanonski obali obravnavamo razlitje, ki je trajalo več kakor 30 dni, smo za uporabo v končni simulaciji izbrali TRT D2Q9 model.



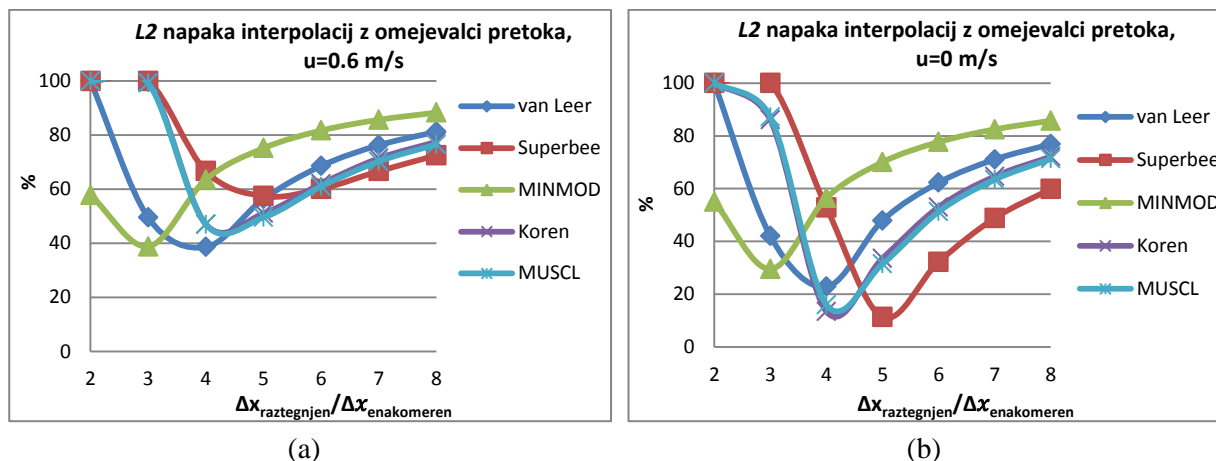
Slika 4.5: Primerjava TRT D2Q9 in D2Q5 L2 napake z enakim končnim časom in časom izračuna simulacije.

Figure 4.5: Comparison of TRT D2Q9 and D2Q5 L2 error with the same simulation and computation time.

Primerjava MBM z interpolacijami in omejevalci pretoka z analitično rešitvijo

Po izbiri najboljšega MBM modela za dolgoročno simulacijo je bilo potrebno poiskati tudi najboljšo kombinacijo teh modelov z interpolacijami in omejevalci pretoka.

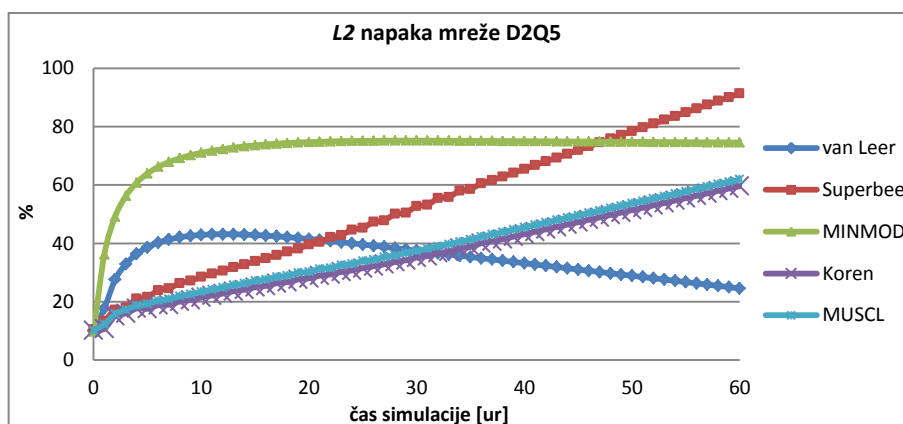
Testirali smo natančnost vseh omejevalcev pretoka, predstavljenih v poglavju 2.9, ob različnih razmerjih med raztegnjeno in enakomerno mrežo ter z dvema hitrostima toka. Najprej smo izmerili natančnost s hitrostjo toka, enako nič $|\vec{u}| = 0 \text{ m/s}$ (slika 4.6b) ter nato še s hitrostjo toka, usmerjeno diagonalno glede na računsko celico in njeno velikostjo, enako največji hitrosti toka v primeru libanonskega razlitja, ki znaša $|\vec{u}_{diag}| = 0.6 \text{ m/s}$ (slika 4.6a). Razmerje 1:4 med stranicami celic enakomerne in raztegnjene mreže se je izkazalo kot najnatančnejše v primerjavi z analitično rešitvijo in smo ga zato uporabili v vseh naslednjih simulacijah, ki so vključevale proces interpolacije (slika 4.6).



Slika 4.6: Primerjava natančnosti različnih omejevalcev pretoka in različnih velikosti raztezanja mreže z diagonalno hitrostjo (a) $|\vec{u}_{diag}| = 0.6 \text{ m/s}$ in (b) $|\vec{u}| = 0 \text{ m/s}$

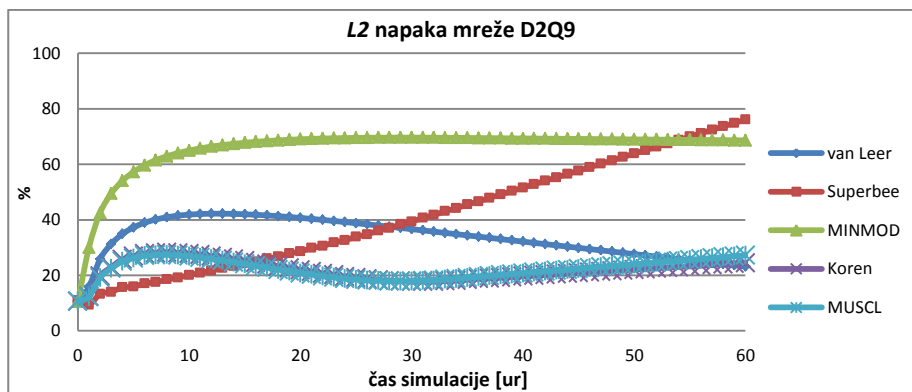
Figure 4.6: Comparing the accuracy of different flux limiters and different amount of grid stretching, with diagonal velocity (a) $|\vec{u}_{diag}| = 0.6 \text{ m/s}$ and (b) $|\vec{u}| = 0 \text{ m/s}$.

V naslednji seriji numeričnih eksperimentov smo želeli primerjati natančnost interpolacij z različnimi omejevalci pretoka z analitično rešitvijo advekcije in difuzije Gaussovega zvona. Iz slik 4.7 in 4.8 lahko razberemo, da je van Leerov omejevalec pretoka (2.291) najpreciznejši za dolgotrajnejše simulacije tako z modelom TRT D2Q5 kakor s TRT D2Q9. Za obravnavani primer razlitja pred libanonsko obalo je bil ponovno izbran TRT D2Q9 model zaradi nekoliko natančnejših rezultatov in boljše rotacijske simetričnosti (slika 4.9).



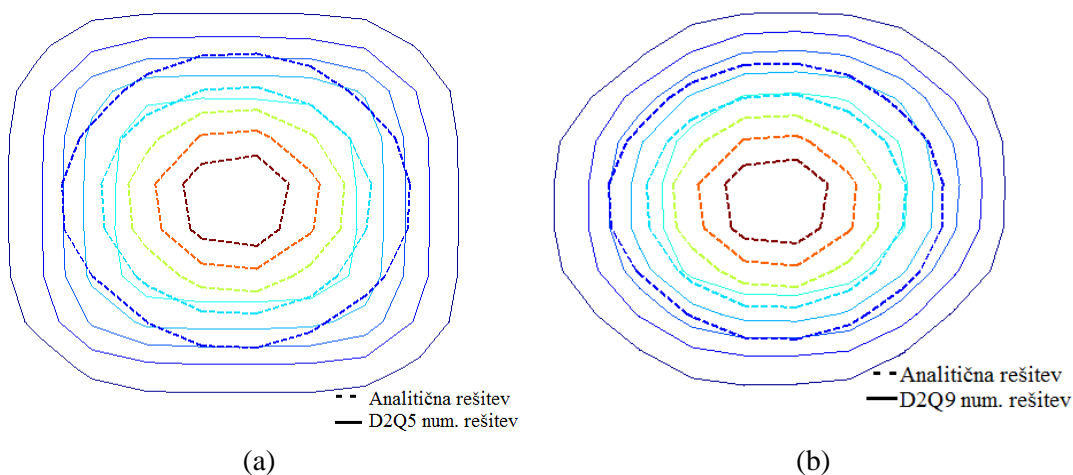
Slika 4.7: Natančnost interpolacij TRT D2Q5 modela z uporabo različnih omejevalcev pretoka

Figure 4.7: Accuracy of the TRT D2Q5 model using different flux limiting interpolations technique



Slika 4.8: Natančnost interpolacij TRT D2Q9 modela z uporabo različnih omejevalcev pretoka
Figure 4.8: Accuracy of the TRT D2Q9 model using different flux limiting interpolations.

Sliki 4.9a in 4.9b prikazujeta izolinije koncentracij modelov TRT D2Q5 in TRT D2Q9 z uporabo van Leerovega omejevalca pretoka na interpolacijah. Čeprav obe sliki prikazujeta rezultate z enako natančnostjo, so rezultati modela TRT D2Q9 ustrežnejši zaradi boljše rotacijske simetričnosti.



Slika 4.9: Primerjava izolinij koncentracij numerične in analitične rešitve (a) TRT D2Q5 in (b) TRT D2Q9 modela z uporabo van Leerovega omejevalca pretoka.
Figure 4.9: Comparing the contour plots of the numerical and analytical solution of the (a) TRT D2Q5 and (b) TRT D2Q9 model using the van Leer flux limiter interpolation.

S tem smo izbrali ustrežni model in tako prišli do vseh potrebnih podatkov, s katerimi smo lahko pognali model MBM. Podatki so povzeti v preglednici 4.1.

Preglednica 4.1: Vhodni podatki modela.

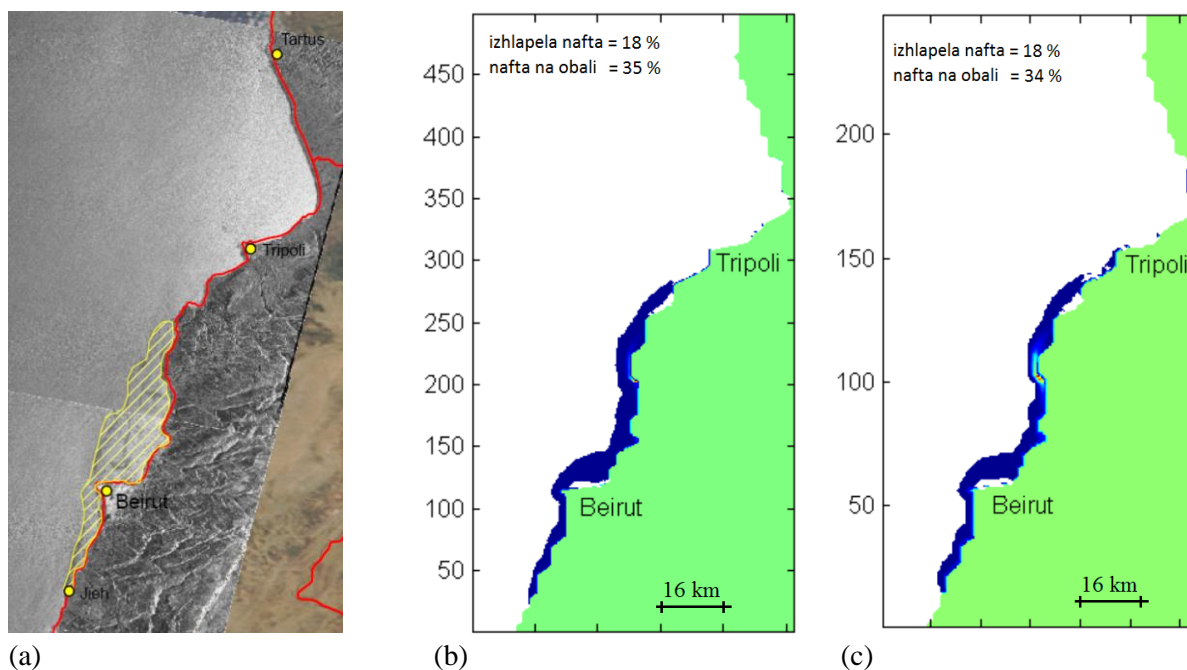
Table 4.1: Model input parameters.

Parameter	Vrednost
Začetek razlitja	15 julij
Trajanje uhajanja nafte iz rezervoarjev	24 ur
Lastnosti nafte	IFO 180, gostota 960 kg/m ³
Količina razlite nafte	18000 ton
Temperatura morja	25 °C
Turbulentna difuzija	10 m ² /s
Največja možna količina odložene nafte na obali	100 ton na tekoči kilometer obale
Razpolovni čas (angl. Half-life constant)	24 ur
Izhlapavanje	Modelirano po Fingasovi enačbi (3.1)
Vpliv vetra	0.2 % jakosti vetra
Mrežni Boltzmannov model	TRT, D2Q9 mreža, $c_e=1/3$, magični parameter = 1/300, časovni korak 150 s
Velikost stranice kvadratne računske celice	320 m in 640 m ob uporabi interpolacij z omejevalci pretoka

4.1.2 Primerjava rezultatov simulacij s satelitskimi posnetki

Glavni cilj opravljenih simulacij je bil kar najbolj realno opisati širjenje in obnašanje razlite nafte. Da bi ocenili natančnosti modela, smo rezultate simulacij primerjali s satelitskimi posnetki MODIS AQUA (Coppini in sod., 2011) (slike 4.10a, 4.11a, in 4.12a). S satelitske slike 4.10a vidimo, da je v prvih dneh razlitja (do 21. julija) nafta polnila Bejrutski zaliv. Kasneje se je nafta začela iz njega prelivati in potovati s tokovi severno proti sirijsko-libanonski meji (slike 4.11a in 4.12a).

Pričakovano je bilo, da bodo rezultati zelo občutljivi na vrednosti vhodnih podatkov. Za najbolj pomembne so se izkazali: začetek in trajanje razlitja, največja možna količina odložene nafte na obali in izbran vpliv vetra. Učinek izbire začetka in trajanja razlitja je še posebej pomemben v prvih desetih dneh. Višanje največje možne količine odložene nafte na obali upočasni širjenje madeža, ker ga odmakne od močnejših tokov, ki se nahajajo dlje od obale. V primeru razlitja ob obali Libanona pihajo vetrovi pretežno proti obali. Vpliv vetra je zato podoben vplivu največje možne količine odložene nafte na obali: upočasnjuje širjenje madeža, ker ga distancira od močnejših tokov, ki se nahajajo dlje od obale, saj madež zadržuje v Bejrutskem zalivu.

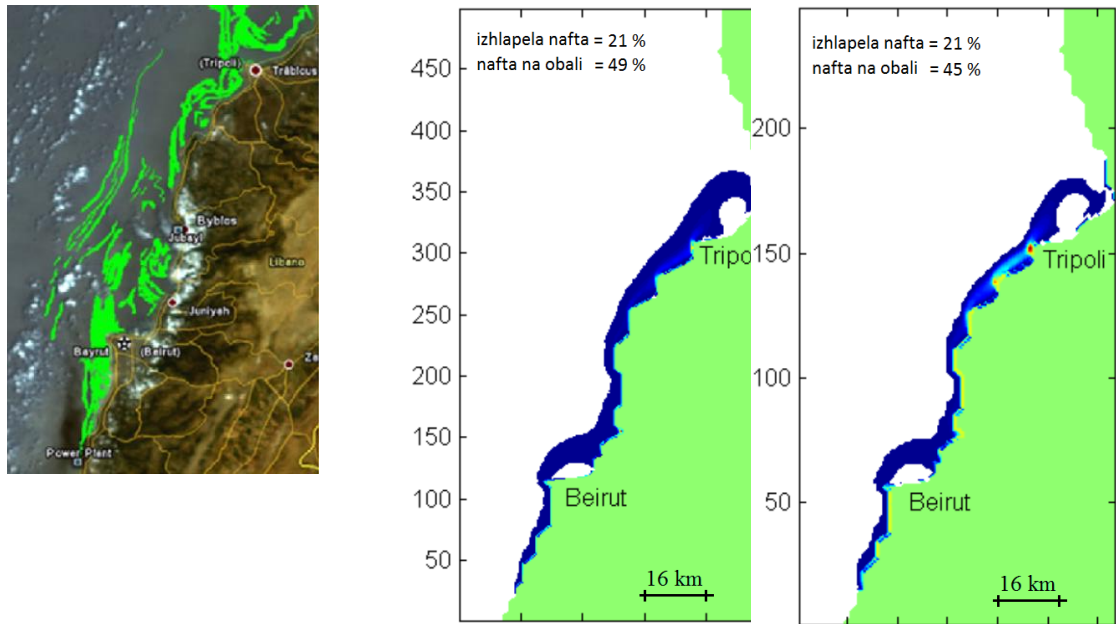


Slika 4.10: Položaj naftnega madeža dne 21. julija 2006, 7:35 GMT: (a) satelitski posnetek naftnega madeža, položaj naftnega madeža simuliran z MBM (b) brez uporabe interpolacij z omejevalci pretoka na 500 krat 250 celični mreži in (c) ob uporabi interpolacij z omejevalci pretoka na 250 krat 125 celični mreži.

Figure 4.10: Oil slick size and location on 21 July 2006, 7:35 GMT: (a) satellite image of the oil slick, LBM simulation results of oil slick and oil concentrations, (b) without the use of flux limiting interpolation technique on a 500 per 250 cell grid and (c) with the use of flux limiting interpolation technique on a 250 per 125 cell grid.

Po natančnem umerjanju teh treh vhodnih parametrov je bilo doseženo dobro ujemanje rezultatov simulacij s satelitskimi posnetki (slika 4.10). S primerjanjem satelitskih posnetkov položaja skrajnega severnega roba naftnega madeža s simulacijami smo ocenili, da je prehitevanje simuliranih rezultatov po približno šestih dnevih od razlitja manj kot tri ure. Tudi to triurno prehitevanje pa je zelo verjetno precenjeno, ker po prvih dnevih razlitja še niso bile na voljo satelitske slike v visoki resoluciji, ki bi lahko prikazale tudi nizke koncentracije nafte enako kakovostno kakor v kasnejših dneh (sliki 4.11a in 4.12a).

Položaj naftnega madeža je praktično enak ne glede na to, ali uporabljamo model z gosto numerično mrežo ali tistega z interpolacijami z omejevalci pretoka (sliki 4.10b in 4.10c). Mreža manjše resolucije z uporabljenimi interpolacijami pa skrajša računski čas za približno štirikrat. Ob uporabi interpolacij in omejevalcev pretoka potuje nafta nekoliko hitreje iz dveh razlogov. Prvi je, da je računski celica večja, kar nafto potisne v hitrejša tokova dlje od obale. Drugi razlog je, da mreža manjše resolucije ne omogoča zapolnitve vsake obalne celice tako učinkovito, kar ponovno povzroči izpostavljenost močnejšim tokovom dlje od obale.



(a)

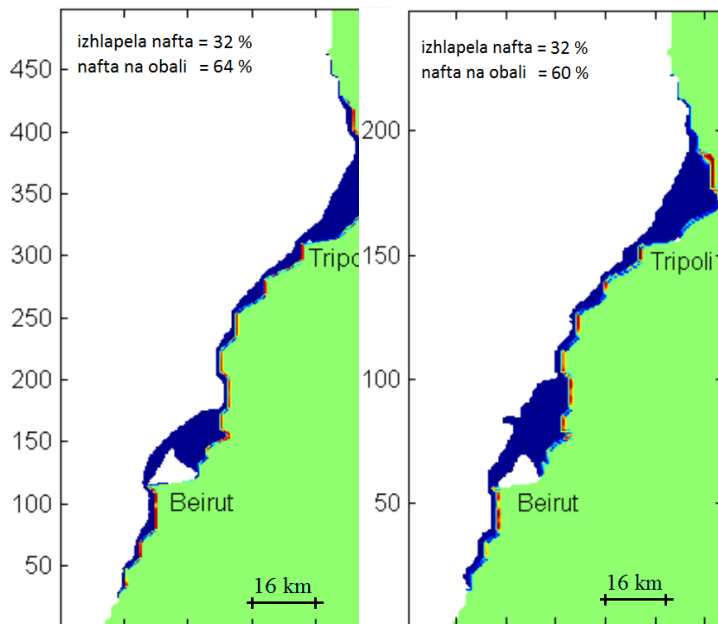
(b)

(c)

Slika 4.11: Položaj naftnega madeža dne 23. julija 2006, 8:35 GMT: (a) MODIS AQUA satelitski posnetek naftnega madeža, položaj naftnega madeža simuliran z MBM (b) brez uporabe interpolacij z omejevalci pretoka na 500 krat 250 celični mreži in (c) ob uporabi interpolacij z omejevalci pretoka na 250 krat 125 celični mreži.

Figure 4.11: Oil slick size and location on 23 July 2006, 8:35 GMT: (a) MODIS AQUA satellite image of the oil slick, LBM simulation results of oil slick and oil concentrations, (b) without the use of flux limiting interpolation technique on a 500 per 250 cell grid and, (c) with the use of flux limiting interpolation technique on a 250 per 125 cell grid.

Po zapolnitvi Bejrutskega zaliva se nafta začne hitro prelivati in premikati proti naslednjemu zalivu severno od Tripolija. S primerjavo satelitske slike 4.11a z rezultati simulacije (sliki 4.11b in 4.11c) lahko opazimo še vedno zelo dobro ujemanje tudi približno osem dni po razlitju. Manjšo difuzijo nafte v simulacijah v primerjavi s satelitskimi posnetki lahko pripišemo slabši resoluciji mreže morskih tokov, izračunanih z modelom CYCOFOS. Ponovno opazimo, da je razlika med rezultati položaja nafte, dobljenimi brez interpolacij (slika 4.11b), ali tistimi z interpolacijami in omejevalci pretoka (slika 4.11c) komaj opazna.



(a) (b) (c)
 Slika 4.12: Položaj naftnega madeža dne 2. avgusta 2006, 10:50 GMT: (a) MODIS AQUA satelitski posnetek naftnega madeža, položaj naftnega madeža, simuliran z MBM (b) brez uporabe interpolacij z omejevalci pretoka na 500 krat 250 celični mreži in (c) ob uporabi interpolacij z omejevalci pretoka na 250 krat 125 celični mreži.

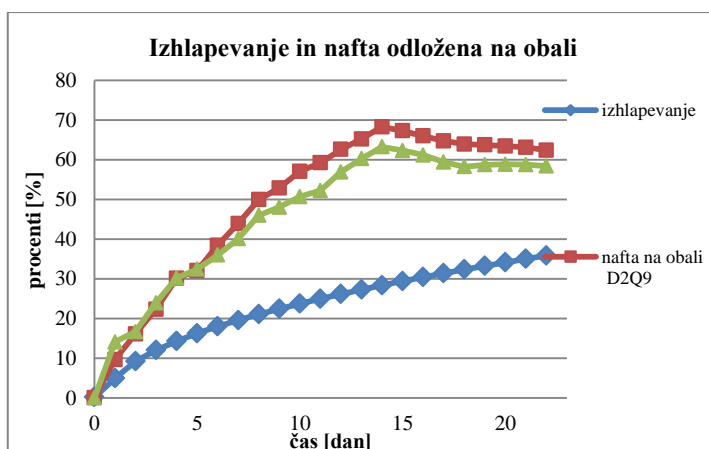
Figure 4.12: Oil slick size and location on 2 August 2006 at 10:50 GMT: (a) MODIS AQUA satellite image of the oil slick, LBM simulation results of oil slick and oil concentrations, (b) without the use of flux limiting interpolation technique on a 500 per 250 cell grid and (c) with the use of flux limiting interpolation technique on a 250 per 125 cell grid.

Rezultate simulacij 18 dni po razlitju prikazujeta sliki 4.12b in 4.12c. Še vedno lahko opazimo zelo dobro ujemanje med rezultati simulacij in satelitskimi posnetki. Rezultati, dobljeni z uporabo interpolacij in omejevalci pretoka, se še vedno odlično ujemajo s tistimi brez uporabe interpolacij. Rezultati modela se tudi odlično ujemajo s terenskimi podatki o najbolj onesnaženih delih obale (slika 4.13) in simuliranimi najvišjimi koncentracijami nafte, obarvanimi z rdečo barvo na slikah 4.12b in 4.12c.



Slika 4.13: Na terenu zbrani podatki o najbolj onesnaženih delih obale (GLA, 2007).

Figure 4.13: Oil-polluted area, field data



Slika 4.14: Prikaz stopnje izhlapevanja in nalaganja nafte na obalo skozi čas.

Figure 4.14: Evaporation and oil onshore deposition rates.

(GLA, 2007).

Z modelom smo izračunali, da je 35 % razlize nafte izhlapelo in da je več kot 60 % nafte pristalo na obali (slika 4.14). Tukaj želimo opozoriti, da model izhlapele nafte ne loči na nafto na obali in tisto v morju ter računa, kot da je vsa nafta v morju. Če nas torej zanima, koliko nafte je po 18 dneh še ostalo v morju, je to 65 % delež neizhlapele od 40 % nenasedle, torej približno 26 % in ne 5 %, kot bi presodili iz rezultatov na prvi pogled. Glavni razlog za majhno razliko med modelom, ki ne uporablja interpolacij, in tistim, ki jih (sliki 4.12b in 4.12c), je v resoluciji računske mreže. V bolj grobi resoluciji mreže so računске celice večje, kar potisne nafto nekoliko dlje od obale v močnejše morske tokove. Tako nafta začne potovati nekoliko hitreje ob obali in ne more zapolniti vsakega manjšega zaliva na svoji poti.

4.1.3 Diskusija

Rezultate modela MBM bi želeli primerjati še z rezultati Coppinija in sod. (2011) in Perkoviča in sod. (2008). Čeprav so v svojih delih uporabili natančnejšo sliko tokov v šesturnih intervalih in so bili v vseh treh simulacijah uporabljeni nekoliko drugačni vhodni podatki, je bilo mogoče priti do nekaterih zanimivih ugotovitev.

Največja očitna razlika med rezultati je velikost površine naftnega madeža. Rezultati MBM prikazujejo bistveno večjo površino naftnega madeža kakor rezultati ostalih dveh študij. Nafta postane vidna s srebrno barvo na vodni površini že pri debelini zgolj 0,0001 mm. To debelino zaznajo tudi sateliti in ekipe za posredovanje, zato je bila ta meja izbrana tudi za vidljivost prikazane nafte v simulacijah z modelom MBM. Coppini in Perkovič v svojih študijah uporabljata modele, ki delujejo po MSD in bi za prikaz tako nizkih koncentracij potrebovala enormno število delcev, kar bi zelo povečalo računski čas MSD modelov.

Druga opazna razlika je v navedeni količini izhlapele nafte: obe primerjani raziskavi navajata, da je od začetne količine nafte izhlapelo manj od 20 % v primerjavi z našimi 35 %. Oba avtorja sta uporabila algoritem za izračun izhlapevanja po Mackay in sod. (1980), ki v nasprotju z zadnjimi Fingasovimi (2010) ugotovitvami za izračun izhlapevanja še vedno uporablja korelacije med površino naftnega madeža in izhlapevanjem ter predpostavlja, da je izhlapevanje odvisno od mejne plasti.

Čeprav primerjava računskih časov različnih modelov na različno zmogljivih računalnikih nima večjega pomena, bi vseeno želeli omeniti še računске čase, potrebne za simulacije. Perkovič in sod. (2008) so poročali, da v času opravljanja simulacij program PISCES ni bil namenjen modeliranju tako obsežnih onesnaženj, ker je model prvenstveno namenjen vajam in usposabljanju in ima posledično zelo majhen, 15-sekundni časovni korak. PISCES je potreboval 12 ur za izračun dvotedenske simulacije. Coppini in sod. (2011) niso navedli računskih časov izvedenih simulacij. Simulacije z modelom MBM so bile opravljene na prenosnem računalniku z vgrajenim procesorjem Intel i7 s frekvenco 1.6 GHz. Koda je delovala v standardnem Matlab (2012) okolju. Za izračun dvotedenske simulacije na 500 krat 250 celični mreži smo potrebovali 37 minut, na 250 krat 125 celični mreži ter ob uporabi interpolacij z omejevalci pretoka pa vsega 11 minut. Primerjava z MSD tridimenzionalnim modelom Nafta3D (Ramšak in sod., 2013) je prav tako pokazala za vsaj en velikostni razred krajši računski čas. Tako kratki računski časi nedvomno predstavljajo pomembno prednost v primeru realnega razlitja nafte, ko modele uporabljamo v taktičnem načinu.

4.2 Primerjava rezultatov modela MBM z rezultati modela Nafta3D na Savi

Ker v literaturi dobro dokumentiranega primera dejanskega razlitja nafte na reki nismo našli, smo v tem poglavju opravili primerjavo rezultatov modela MBM s preizkušenim modelom Nafta3D (Žagar in Četina, 2011) na primeru hipotetičnega razlitja na Savi.

Katedra za mehaniko tekočin UL FGG ima dolgoletne izkušnje z razvojem modelov, namenjenih simulaciji razlitja nafte. Prvi uporabni model po MSD pri nas je izdelal Širca (1992). Model je bil preizkušen s simulacijo širjenja onesnaženja iz reke Pad v severni Jadran, pri čemer je bilo ugotovljeno dobro ujemanje rezultatov s satelitskimi posnetki. Dve leti kasneje je sledil model SIMON (Žagar, 1994), rezultati pa so bili primerjani z rezultati modela MIKE21-SAW (Spill Analysis Workstation), razvitega na Danskem inštitutu za hidravliko (DHI, 1993). Na podlagi dobrega ujemanja rezultatov obeh modelov je bil model SIMON spoznan kot primeren za simulacijo razlitja nafte v morje. Sedaj se na UL FGG uporablja model Nafta3D, razvit v programskem jeziku Fortran (Žagar in Četina, 2011). Nafta3D poleg transportnih procesov, ki so posledica gibanja vode, upošteva še mehansko širjenje, izhlapevanje, vlečenje naftnega madeža zaradi vpliva vetra na gladini, na kvalitativnem nivoju pa tudi emulzifikacijo in disperzijo nafte v vodnem stolpcu.

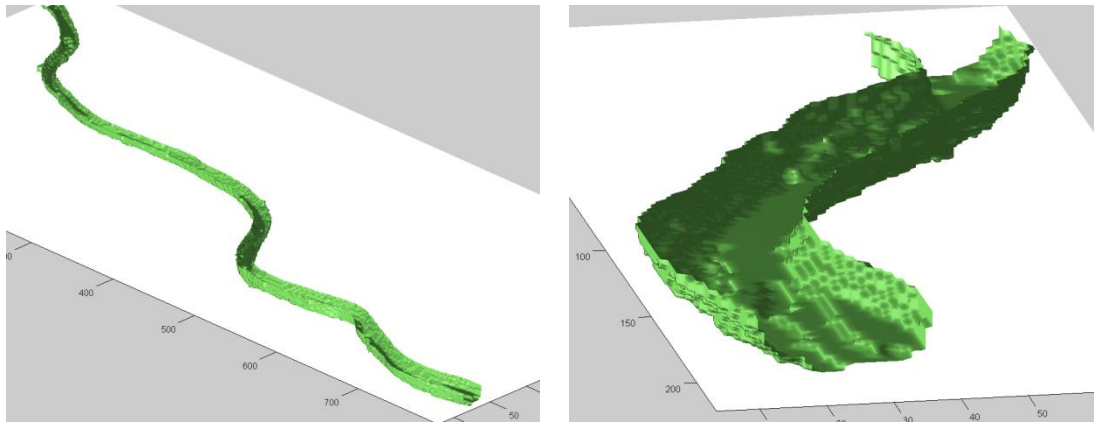
Ker imata MBM in Nafta3D vgrajena različna načina za račun izhlapevanja nafte in ker Nafta3D še ne omogoča upoštevanja interakcije nafte z obalo, smo primerjali le adveksijsko-difuzijske rezultate obeh modelov brez upoštevanja fizikalno-kemijskih procesov. Modela smo primerjali na približno 10 km dolgem odseku Save med hidroelektrarno (HE) Boštanj in HE Blanca. Odsek je prikazan na sliki 4.15.



Slika 4.15: Prikaz računskega območja na reki Savi med HE Boštanj in HE Blanca

Figure 4.15: Computation area on the Sava River between the hydro power plant (HPP) Boštanj and HPP Blanca

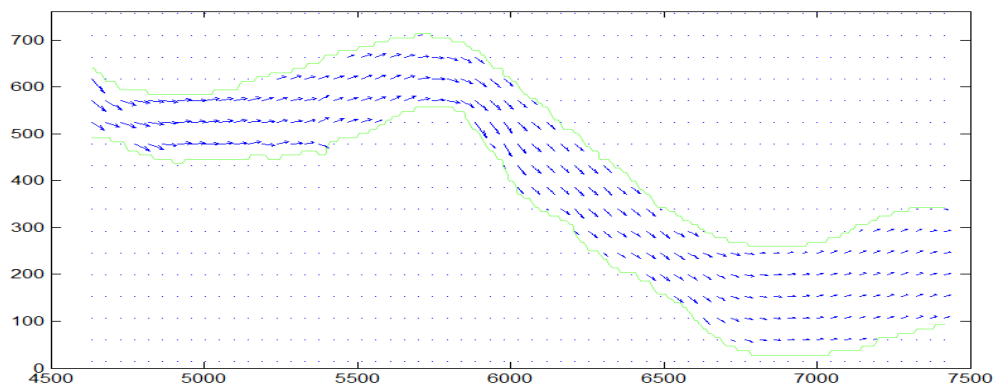
Rečni odsek smo izbrali zaradi primerne dolžine za simulacijo pa tudi, ker smo imeli na voljo dovolj natančno batimetrijo rečnega dna tega območja (slika 4.16).



Slika 4.16: Prikaz tridimenzionalnega odseka struge Save med: HE Boštanj in HE Blanca (levo) in povečan del krajšega odseka pred HE Blanca (desno)

Figure 4.16: A three-dimensional section of the Sava riverbed between HPP Boštanj and HPP Blanca (left) and magnification of a shorter part of the segment before HPP Blanca (right)

Vhodni podatek hitrostnega polja rečnega toka (sliki 4.17 in 4.20 desno) nam je bil posredovan s strani podjetja Harpha Sea (2011) (osebna komunikacija, Dean Mozetič). Rečna struga je bila diskretizirana z neenakomerno numerično mrežo, pri kateri je prostorski korak v horizontalni smeri prečno na strugo znašal približno pet metrov, vzdolž struge približno sedem metrov in v vertikalni smeri približno en meter. Ker je bilo hitrostno polje skupno obema modeloma, to ni povzročalo dodatnih razlik na rezultatih simulacij.



Slika 4.17: Prikaz tokov v površinskem sloju

Figure 4.17: Surface current field

V poglavju 2.7.1 smo z vsemi pripadajočimi izrazi opisali poseben MBM model Zhou (2009). Ta model je zelo primeren za uporabo v konkretnem primeru razlitja na Savi, ker za razliko od običajnih MBM omogoča uporabo neenakomerne tridimenzionalne mreže D3Q7. Ker je globina Save bistveno manjša od njene širine, nam neenakomerna mreža omogoča postavitev večjega števila slojev po globini kot ob uporabi enakomerne mreže.

Koeficient vzdolžne difuzije $D_{vzdolž}$ smo izračunali na podlagi izraza za difuzijo plavajočih polietilenskih delcev, ki ga podajata Sayre in Chang (1963):

$$\begin{aligned} D_{vzdolž} &= 0,6hU_{strig} \\ U_{strig} &= \sqrt{ghl_0} \end{aligned} \quad (4.3)$$

Pomen oznak:

I_0	vzdolžni naklon kanala [°]
U_{strig}	strižna hitrost [m/s]
h	globina [m]
g	gravitacijski pospešek 9.81 [m/s ²]

Fischer (1979) navaja, da je izraz (4.3) v primeru zvijuganih naravnih vodotokov veljaven tudi za izračun prečnega koeficienta difuzije $D_{preč}$. Zato smo lahko v horizontalni smeri za obe smeri uporabljali le en koeficient difuzije $D_{hor} = D_{vzdolž}$. Fischer (1979) podaja tudi izraz za izračun vertikalnega koeficienta difuzije po enačbi:

$$D_{vert} = 0,067hU_{strig} \quad (4.4)$$

Vsi podatki, potrebni za zagon modela MBM, so prikazani v preglednici 4.2.

Preglednica 4.2: Vhodni podatki za model.

Table 4.2: Model input parameters.

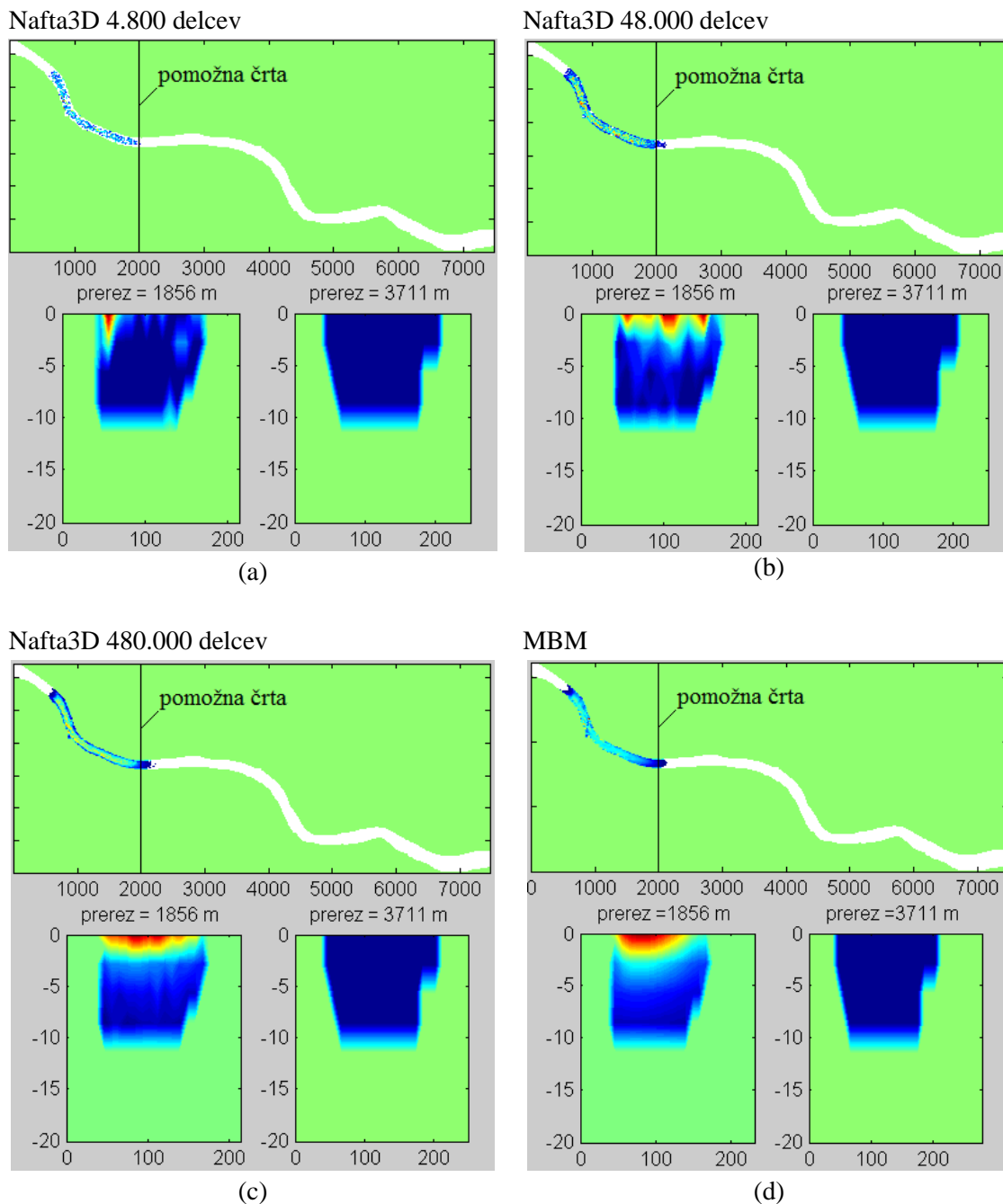
Podatek	Vrednost v MBM	Vrednost v Nafta3D
Število delcev	Ne računa z delci	4.800, 48.000 in 480.000
Časovni korak	1,5 sek	6 sek
Končni čas	4,3 ure	
Količina razlite nafte	10000 kg	
Trajanje uhajanja nafte v reko	30 minut	
Temperatura reke	17° C	
Turbulentna difuzija v vertikalni smeri	0,22 m ² /s	
Turbulentna difuzija v horizontalni smeri	2 m ² /s	
Gostota nafte	840 kg/m ³	
Gostota vode	1000 kg/m ³	
Število računskih celic	810 x 354 x 10	
Velikost celice	9,28 m x 9,28 m x 2,23 m	

4.2.1 Primerjava simulacij modela MBM s simulacijami modela Nafta3D

Rezultate obeh modelov smo primerjali v treh časovnih intervalih: 36 minut, 1 uro in 18 minut ter 3 ure in 6 minut po razlitju. Izbrali smo časovne intervale, pri katerih se je med modeloma pokazala največja razlika. Preverili smo tudi, ali povečevanje števila delcev v modelu Nafta3D povečuje ali zmanjšuje razlike med obema modeloma.

Slike 4.18 prikazujejo rezultate modela MBM in Nafta3D v času 36 minut po razlitju. Slike 4.18a do 4.18c prikazujejo rezultate modela Nafta3D z različnim številom delcev. Iz primerjave v horizontalni ravnini opazimo, da število delcev ne vpliva bistveno na razporeditev madeža po gladini, saj čela in repi madežev v vseh slikah praktično sovpadajo. Ko primerjamo rezultate modela Nafta3D (slike 4.18a do 4.18c) z rezultati modela MBM na sliki 4.18d, opazimo zelo dobro ujemanje položaja madeža po gladini. Vseeno pa lahko ocenimo, da sta detajla oblike repa in čela madeža v modelu MBM še vedno bolj naravnega videza, tudi če ju primerjamo s sliko 4.18c, v kateri je bila simulacija z

modelom Nafta3D izvedena s skoraj pol milijona delcev. Vemo, da je hitrost reke ob brežinah nič. Posledično se bo oblikoval rep madeža v obliki ribje plavuti, kakor ga prikazujejo rezultati modela MBM.



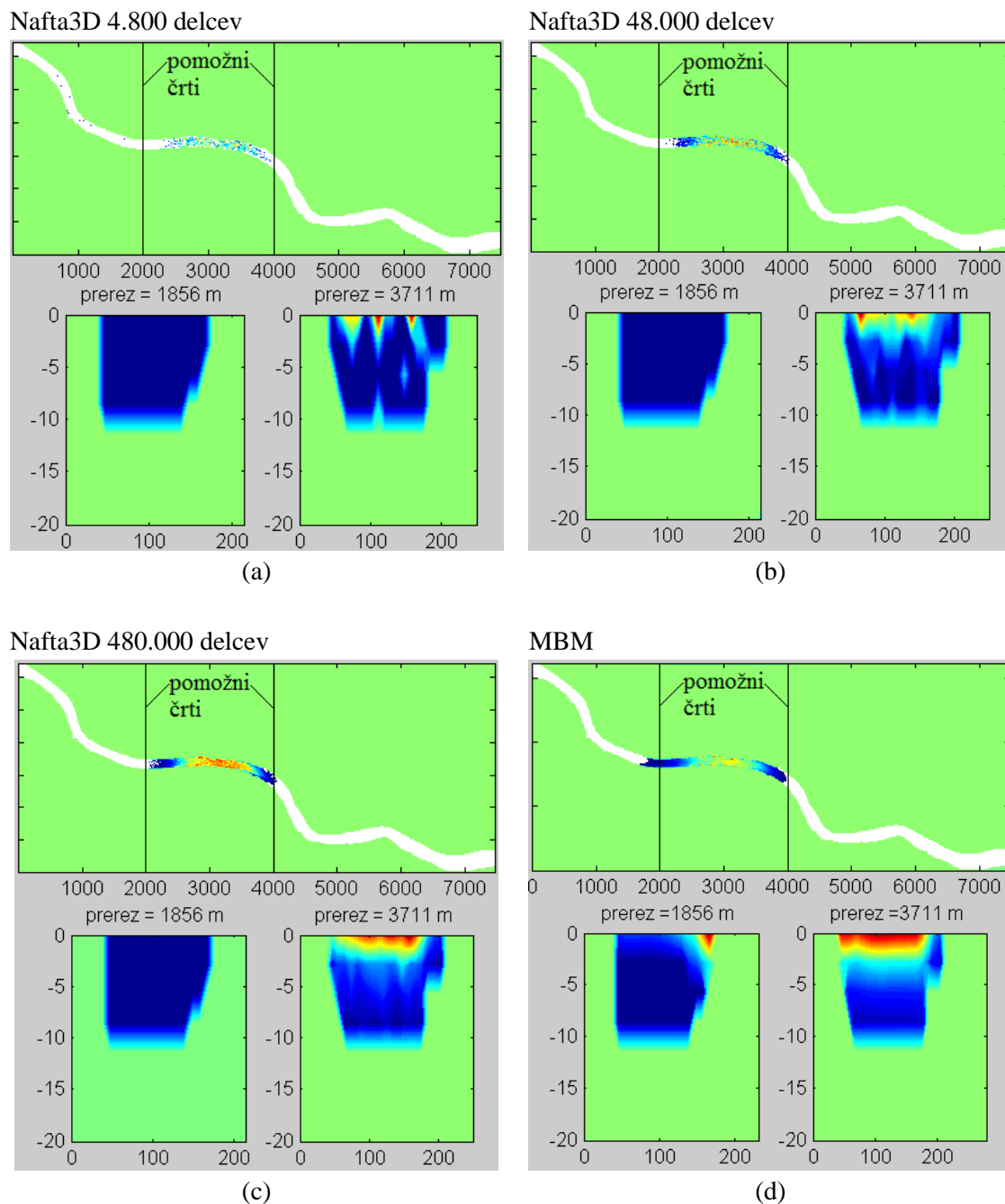
Slika 4.18: Rezultati modeliranja razlitja nafte na Savi v času 36 minut po razlitju z modelom: (a) Nafta3D s 4.800 delci, (b) Nafta3D z 48.000 delci, (c) Nafta3D s 480.000 delci in (d) MBM

Figure 4.18: The oil spill modelling results on the Sava River at the time 36 minutes after the spill with: (a) Nafta3D and 4,800 particles, (b) Nafta3D and 48,000 particles, (c) Nafta3D and 480,000 particles and (d) LBM

Pri primerjavi razporeditve koncentracij po globini opazimo bistveno večje razlike med slikami 4.18a do 4.18c, ki prikazujejo rezultate modela Nafta3D z različnim številom delcev. Ob majhnemu številu

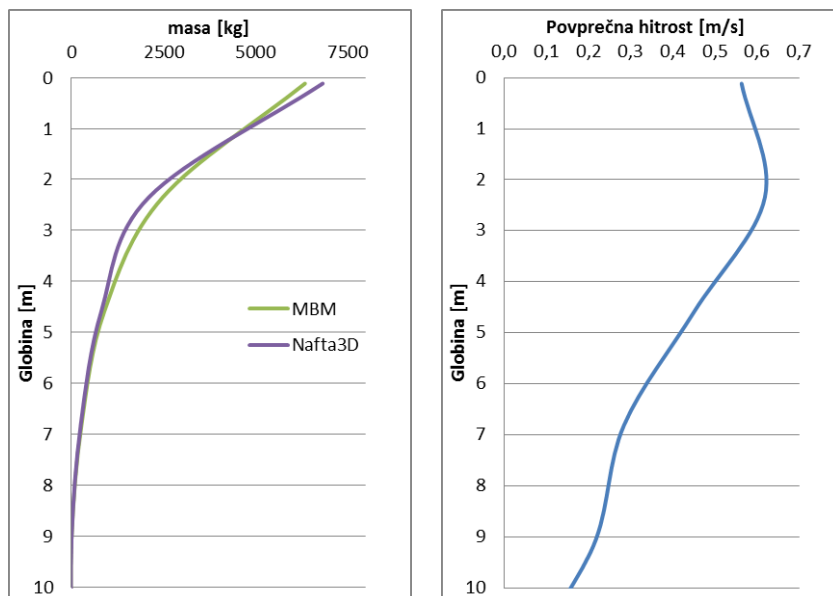
delcev je lahko v posameznem prerezu le nekaj deset delcev in je lahko zato graf zelo popačen. Hiter izračun v primeru uporabe 5000 delcev, ki se razprostirajo čez 200 prerezov, pove, da imamo v prerezu povprečno le 25 delcev. Z večanjem števila delcev postaja prerez modela Nafta3D vedno bolj podoben modelu MBM, kar lahko potrdimo s primerjavo med slikama 4.18c in 4.18d. Iz rezultatov lahko sklepamo, da potrebujemo pri simulacijah razlitij na rekah, kjer imamo zelo raztegnjeno obliko naftnega madeža, za zanesljivo sliko koncentracij po globini z modeli MSD zelo veliko število delcev, kar pa seveda zelo poveča čas izračuna.

Slike 4.19 prikazujejo rezultate modelov MBM in Nafta3D v času 1 ure in 18 minut po razlitju. V tem času se je naftni madež raztegnil že na 2000 m dolžine. Enako kot v prvem opazovanem časovnem intervalu opazimo večanje jasnosti rezultatov z večanjem števila delcev. Pomembna razlika pri primerjavi v horizontalni ravnini je za približno 450 m daljši rep naftnega madeža pri rezultatih modela MBM. Vzrok bi lahko prepisali večji strižni difuziji pri modelu MBM, kjer se koncentracije razporedijo globlje po prerezu (slika 4.20a), saj so tam manjše hitrosti toka (slika 4.20b). Zaradi vzgona nafta ponovno pride na površino, kar povzroči daljši rep madeža. Že ob primerjavi načina računa vzgona v modelih Nafta3D, MBM in MSD_RPO1b v tretjem poglavju smo ugotovili, da se delci pri Nafti3D, ko enkrat dosežejo gladino, morda premočno vežejo nanjo, to pa povzroči manjšo vertikalno difuzijo kakor v drugih dveh modelih.



Slika 4.19: Rezultati modeliranja razlitja nafte na Savi v času 1 ure in 18 minut po razlitju (1,3 ure) s modelom: (a) Nafta3D s 4.800 delci, (b) Nafta3D z 48.000 delci, (c) Nafta3D s 480.000 delci in (d) MBM

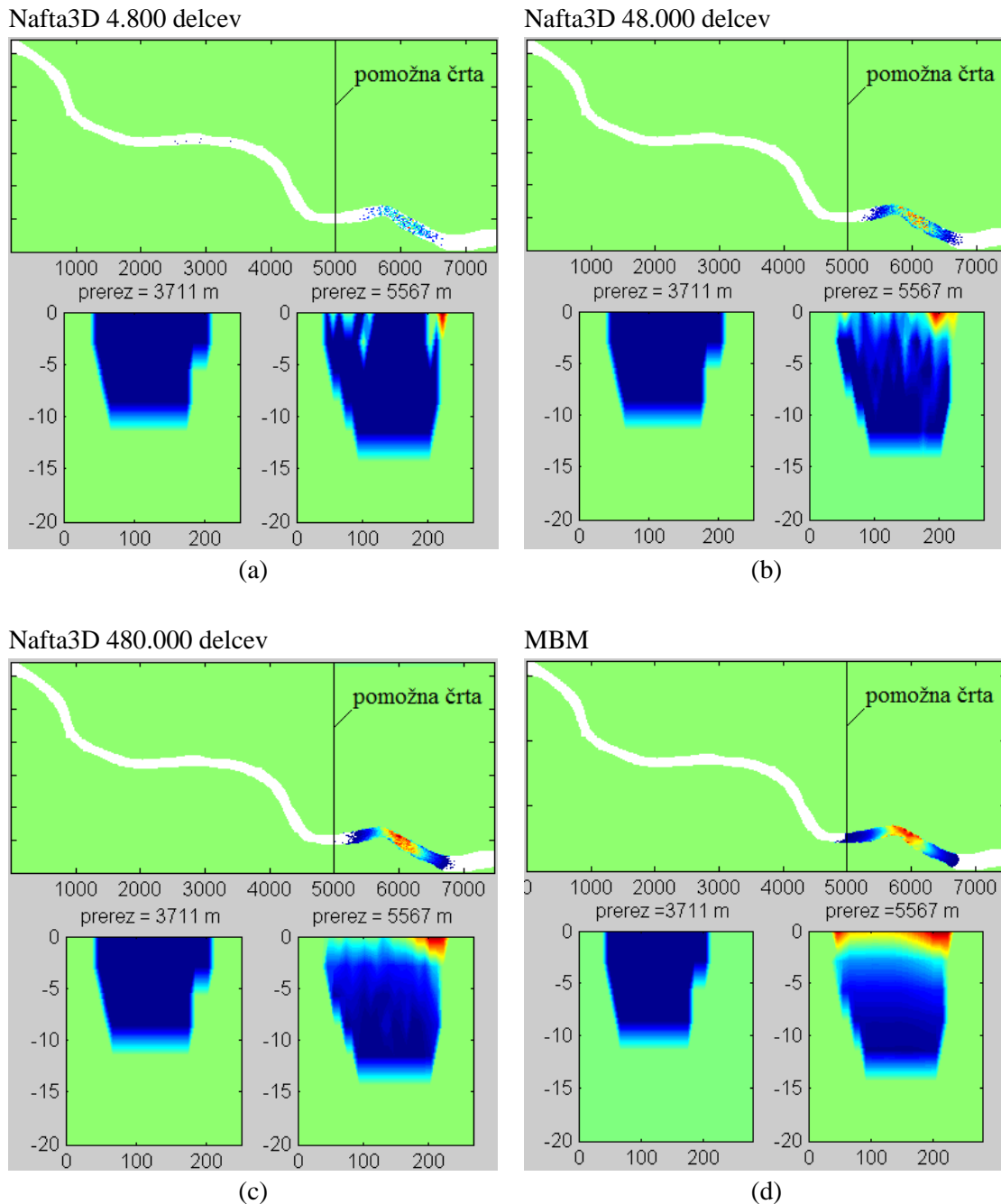
Figure 4.19: The oil spill modelling results on the Sava River at the time 1 hour and 18 minutes (1.3 hours) after the spill with: (a) Nafta3D and 4,800 particles, (b) Nafta3D and 48,000 particles, (c) Nafta3D and 480,000 particles and (d) LBM



Slika 4.20: Razporeditev mase nafte (levo) in povprečnih vodoravnih hitrosti (desno) po globini prereza Save
Figure 4.20: Distribution of the weight of oil (left) and the average horizontal velocity (right) through the depth of the Sava cross-section

Pri primerjavi rezultatov po globini lahko ponovno opazimo bistveno izboljšanje kvalitete rezultatov z večanjem števila delcev pri modelu Nafta3D (Slike 4.19a do 4.19c). Ta časovni interval smo izbrali namenoma, ker se pri primerjavi prereza pri 1856 metrih na slikah 4.19c in 4.19d v modelu MBM še opazi prisotnost nafte, v modelu Nafta3D pa nafte ni več. To le potrjuje ugotovitev, ki smo jo spoznali že pri primerjanju razporeditve nafte po gladini: model MBM za seboj pušča daljšo sled nafte. Opazimo lahko tudi zelo dobro ujemanje rezultatov prerezov pri 3711 metrih (slika 4.19c in 4.19d), koncentracije se ujemajo tako po globini kakor tudi na gladini.

Slike 4.21 prikazujejo rezultate MBM in Nafta3D v času treh ur in 6 minut po razlitju. V tem času se je naftni madež nekoliko skrajšal, ker se je struga razširila. Kakor v prvem in drugem časovnem intervalu lahko tudi tukaj opazujemo izboljševanje jasnosti rezultatov modela Nafta3D z večanjem števila delcev (slike 4.19a do 4.19c). Še vedno je rep naftnega madeža v horizontalni ravnini za približno 450 m daljši pri rezultatih MBM modela v primerjavi z modelom Nafta3D. Vzrok temu lahko ponovno pripišemo večji strižni difuziji pri modelu MBM.



Slika 4.21: Rezultati modeliranja razlitja nafte na Savi v času 3 ur in 6 minut po razlitju (3,1 ure) s modelom: (a) Nafta3D s 4.800 delci, (b) Nafta3D z 48.000 delci, (c) Nafta3D s 480.000 delci in (d) MBM

Figure 4.21: The oil spill modelling results on the Sava River at the time 3 hours and 6 minutes (3.1 hours) after the spill with: (a) Nafta3D and 4,800 particles, (b) Nafta3D and 48,000 particles, (c) Nafta3D and 480,000 particles and (d) LBM

Pri primerjavi rezultatov po globini lahko ponovno opazimo bistveno izboljšanje kvalitete rezultatov z večanjem števila delcev pri modelu Nafta3D (slike 4.21a do 4.21c). Manjša razlika v vertikalni razporeditvi koncentracij v prerezu na 5567 metrih med modeloma Nafta3D (slika 4.21c) in MBM (slika 4.21d) je posledica krajšega repa madeža, simuliranega z Nafta3D.

Na podlagi opravljenih simulacij lahko povzamemo, da v primeru simulacije advekcije in difuzije na reki Savi med modeloma Nafta3D in MBM ni prišlo do večjih razlik. Največja razlika se pojavi v dolžini repa naftnega madeža, ki je pri simulacijah z modelom MBM nekoliko daljši zaradi večjega vpliva strižne difuzije.

Čeprav ne pripisujemo velikega pomena primerjavi računskih časov različnih modelov, razvitih v različnih programskih jezikih, bi komentirali tudi računске čase, potrebne za simulacije, kot jih prikazuje preglednica 2. Razberemo lahko, da je računski čas modela Nafta3D zelo odvisen od števila računov koncentracij, medtem ko model MBM s koncentracijami računa vedno in za to ne potrebuje dodatnega računskega časa. Nafta3D daje rezultate primerljive kvalitete modelu MBM, ko računa s 480000 delci, takrat pa je izračun brez dodatnih računov koncentracij kar 4,5krat počasnejši od modela MBM. Intervencijskim ekipam bi sicer verjetno zadostovali že rezultati modela Nafta3D z minimalnim številom delcev, saj je analiza pokazala, da manjšanje števila delcev v večji meri poslabša kvaliteto rezultatov globinske razporeditve koncentracij, manj pa rezultate na gladini. Intervencijske ekipe pa lahko zadržujejo le nafto, ki se nahaja na gladini.

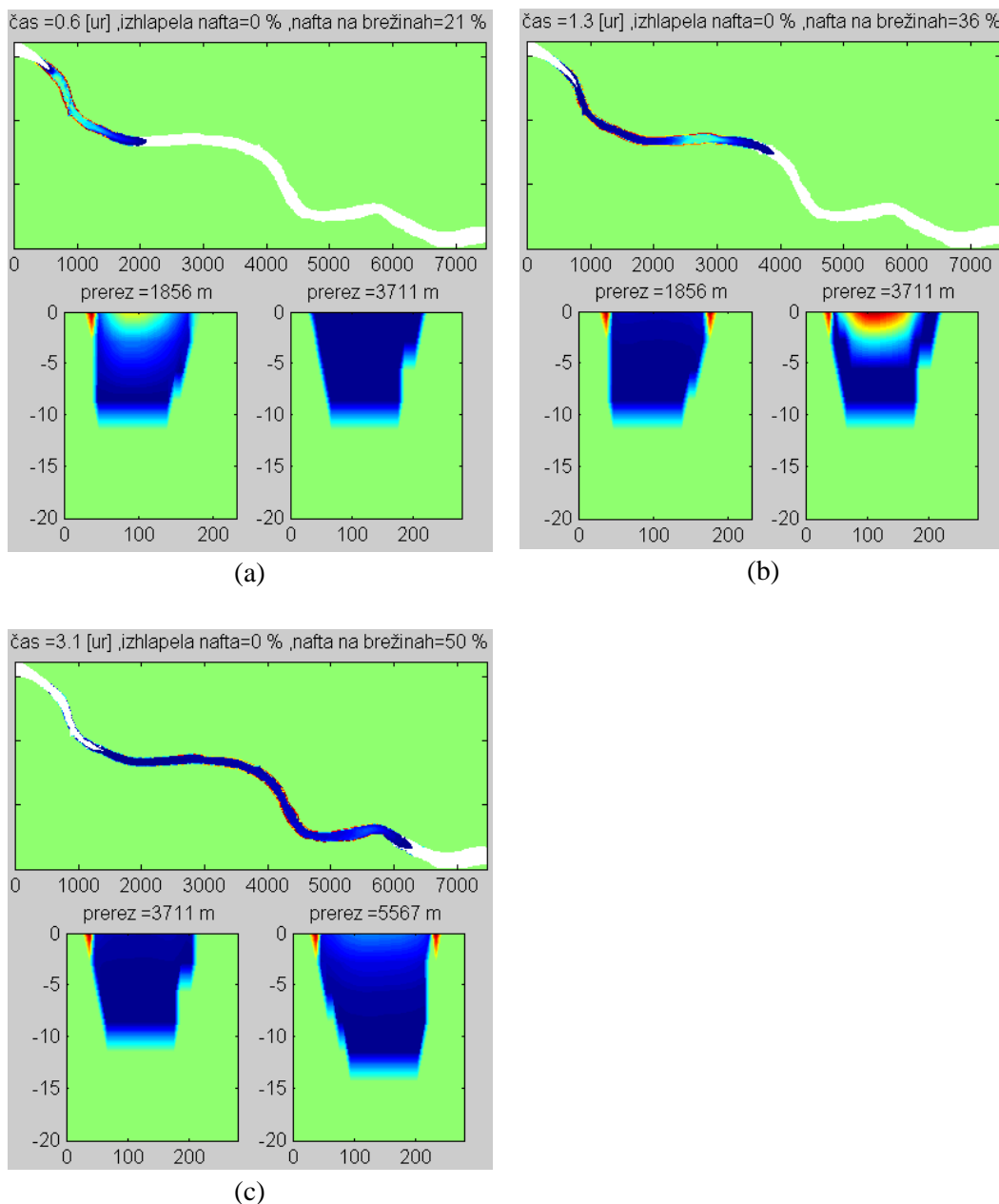
Preglednica 4.3: Primerjava računskih časov (RČ)

Table 4.3: Computation times (CT) comparison

model	CT s tri kratnim računom koncentracij	RČ brez računa koncentracij
Nafta3D 4800 delcev	42 minut	17 minut
Nafta3D 48000 delcev	3 ure	40 minut
Nafta3D 480000 delcev	22 ur	4,5 ure
MBM3D	1 ura	

4.2.2 Prikaz rezultatov modela MBM ob upoštevanju nalaganja nafte na brežine

Ker model Nafta3D še ne omogoča upoštevanja interakcije nafte z obalo, smo lahko v poglavju 4.2.1 med modeloma Nafta3D in MBM primerjali le advekcijo in difuzijo. Model MBM omogoča tudi modeliranje interakcije z obalo, kar smo z validacijo na dvodimenzionalnem primeru Libanona pokazali v poglavju 4.1. V tridimenzionalnem primeru razlitja na Savi smo modeliranje interakcije z obalo omejili le na površinski sloj. Zgolj informativno podajamo še rezultate razlitja na Savi, dobljene z modelom MBM (slika 4.22) v primeru, da upoštevamo tudi nalaganje in sproščanje nafte z brežin.



Slika 4.22: Rezultati modeliranja razlitja nafte na Savi z modelom MBM ob upoštevanju interakcije z brežinami v času: (a) 36 minut, (b) 1 ure in 18 minut (1,3 ure) in (c) 3 ur in 6 minut (3,1 ure) po razlitju

Figure 4.22: The LBM oil spill modelling results on the Sava River, taking into account the interaction of oil with the shores at the time: (a) 36 minutes, (b) 1 hour and 18 minutes (1.3 hours) and (c) 3 hours and 6 minutes (3.1 hours) after the spill

S primerjavo slike 4.21d in slike 4.22c vidimo, da v primeru upoštevanja interakcije z obalo dobimo bistveno daljši rep madeža, kar je posledica počasnega vračanja nafte v vodni tok, potem ko je bila nekaj časa odložena na brežine. V vseh slikah prereзов (slike od 4.22a do 4.22c) se na brežinah površinskega sloja z rdečo barvo vidi prisotnost velikih koncentracij nafte. Tako lahko potrdimo tudi ugotovitve Yapa in sod. (1993), da je modeliranje interakcije nafte z brežinami ključnega pomena pri modeliranju razlitja nafte v rekah.

V kontekstu modeliranja hipotetičnega razlitja nafte na Savi bi želeli prikazati tudi rezultate tridimenzionalnega geografsko informacijskega sistema (GIS), namenjenega podpori ob ukrepanju pri nezgodah z nafto na celinskih vodah, razvitega v sodelovanju s podjetjem Harpha Sea (2011). Ta GIS omogoča trenutno le na obravnavanem odseku Save avtomatizirano komunikacijo z modelom MBM in prikaz njegovih rezultatov (slika 4.23) v tridimenzionalnem prostoru. Nadaljnji razvoj in uporaba tega GIS-a v realnem primeru bi intervencijskim ekipam omogočal natančno lociranje naftnega madeža v času in prostoru in posledično optimalno postavitev zaščitnih plavajočih pregrad, zaradi česar bi bila škoda na okolju zagotovo manjša.



Slika 4.23: Prikaz rezultatov modela MBM v tridimenzionalnem GIS-u, (Harpha Sea, 2011)

Figure 4.23: Results of LBM model in three-dimensional GIS (Harpha Sea, 2011)

5 PRIMERJAVA UČINKOVITOSTI MREŽNE BOLTZMANNOVE METODE S PRIMERLJIVIMI MODELI

Potem, ko smo se prepričali v zanesljivost rezultatov modela MBM, ki smo jo potrdili z validacijo na primeru razlitja na morju in z zelo dobrim ujemanjem tudi z rezultati modela Nafta3D na reki, smo želeli preveriti še, če je model MBM res enakovreden ali celo boljši od obstoječih modelov, delujočih po Eulerjevem ali Lagrangeevem principu tudi po učinkovitosti, kakor predpostavljamo v hipotezi.

Učinkovitost numerične metode smo definirali kot sposobnost doseči čim večjo natančnost v primerjavi z analitično rešitvijo ob čim krajšem računskem času. Učinkovitost smo testirali z numeričnim eksperimentom, v katerem smo merili natančnost in računski čas posamezne metode pri simulaciji advekcije in difuzije točkovnega izpusta onesnažila.

Testiranje hipoteze je potekalo v dveh korakih. V prvem koraku (poglavje 5.2.2) preverimo učinkovitost metod brez vpliva oblike računskega območja na računski čas. To je enako primeru razlitja nafte na odprtem morju. V drugem koraku (poglavje 5.2.3) pa preverimo še vpliv oblike računskega območja na večanje računskega časa. To storimo z dodajanjem ovire v računsko območje in merjenjem povečanja računskega časa posamezne metode. V kolikor uspemo v prvem koraku dokazati, da je model MBM brez vpliva oblike računskega območja učinkovitejši od primerljivih Eulerjevih in Lagrangeevih modelov in nato v drugem koraku, da tudi oblika računskega območja nima večjega vpliva na povečanje računskega časa modela MBM, uspemo potrditi zastavljeno hipotezo.

V literaturi nismo zasledili primera s hkratno primerjavo vseh treh metod. Tudi parnih primerjav med MBM in MSD ali MBM in Eulerjevimi modeli je v literaturi malo. Zhang in Chen (2007) sta npr. primerjala rezultate simulacij po Eulerjevem in Lagrangeevem principu, Körner in sod. (2006) pa so analizirali razlike med metodama MBM in FDM. Tudi če bi lahko združili ugotovitve iz teh člankov in opravili posredno primerjavo med uporabljenimi metodami, bi primerjali kodo različnih avtorjev, ki ni optimirana do iste stopnje, simulacije pa so bile opravljene na različno zmogljivih računalnikih. Zato tudi računski časi posameznih modelov ne bi bili primerljivi med seboj.

Ker različne metode dosegajo največjo natančnost ob različnih računskih časih in so pri tem različno natančne, smo izbrali mejo napake $L2 = 7\%$, pri kateri so rezultati za izbrano simulacijo dovolj natančni, in spremljali, pri katerem računskem času se posamezna metoda prvič spusti pod to mejo. Manjši računski čas pri tem pomeni večjo učinkovitost metode.

Pri testiranju nismo hkrati primerjali še drugih oblik MBM, opisanih v poglavju 2.7, saj bi bila predstavitev rezultatov prezapletena, iz nje pa ne bi bilo mogoče dobiti smiselnih zaključkov. Drugi razlog je, da se prav osnovna različica MBM z enostavnim BGK trknim operatorjem največ uporablja v praksi (Chen in Doolen, 1998).

5.1 Osnovne enačbe

Tukaj podajamo osnovne enačbe MSD in Eulerjeve metode, osnovne enačbe MBM BGK modela smo podali že v poglavju 2.7. Kot predstavnico Eulerjeve metode smo izbrali TOP12 (angl. Third-Order Polynomial) shemo (Tkalic in Chan, 2003), ker je izmed redkih tovrstnih metod za simulacijo nafte, dostopnih v literaturi, ta najbolj natančno opisana in validirana s številnimi članki (Tkalic in Chan,

2002; Tkalic in Chan, 2003; Tkalic, 2006a; Tkalic, 2006b) ter specifično razvita za simulacijo širjenja nafte.

Osnovne enačbe vseh treh metod smo vgradili v računalniški program v okolju Matlab (2012). Matlab je zelo primeren za numerično računanje z matrikami, matematično modeliranje in vizualizacijo rezultatov. Vse enačbe smo zapisali v program po istem postopku, tako da je bila hitrost izračuna med različnimi metodami primerljiva. Posebno pozornost smo posvetili natančni uskladitvi mreže, izvora koncentracij in končnega časa pri primerjavi numeričnih rezultatov z analitično rešitvijo.

5.1.1 Osnovne enačbe MSD

Osnovne enačbe MSD povzemamo po literaturi (Žagar in Četina, 2011). V primeru uporabe metode MSD maso nafte razdelimo na končno število diskretnih delcev, katerih širjenje v prostoru opišemo s krajevnim vektorjem \vec{r} z enačbo:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{u}(\vec{r}(t), t)\Delta t \quad (5.1)$$

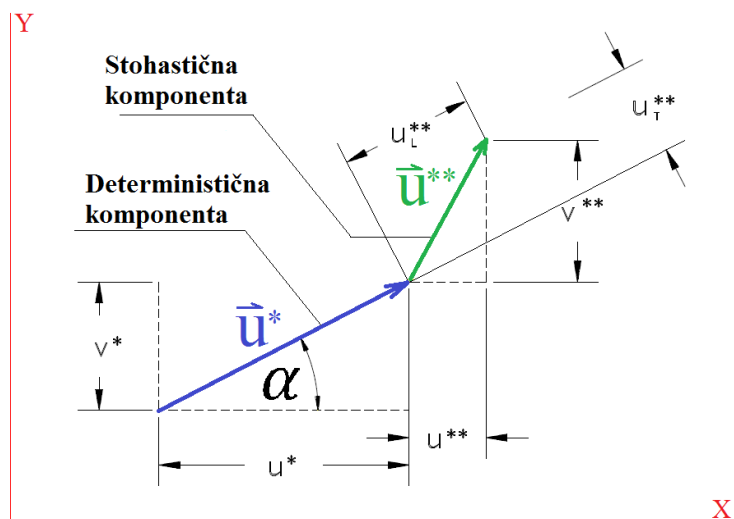
Hitrost delca \vec{u} razdelimo na njeno \vec{u}^* deterministično in \vec{u}^{**} stohastično komponento.

$$\vec{u} = \vec{u}^* + \vec{u}^{**} \quad (5.2)$$

Deterministično komponento \vec{u}^* predstavlja adveksijska hitrost, predhodno izračunana s hidrodinamičnim modelom. Stohastično komponento hitrosti $\vec{u}^{**} = (u^{**}, v^{**})$ lahko ob uporabi konstantnega in homogenega koeficienta turbulentne difuzije D opišemo kot:

$$\begin{aligned} u^{**} &= u_L^{**} \cos(\alpha) - u_T^{**} \sin(\alpha) \\ v^{**} &= u_L^{**} \sin(\alpha) - u_T^{**} \cos(\alpha) \end{aligned} \quad (5.3)$$

Hitrost u_L^{**} je stohastična hitrost v smeri vektorja \vec{u}^* , hitrost u_T^{**} pa je pravokotna na isti vektor, kakor prikazuje slika 5.1.



Slika 5.1: Komponente hitrosti delca
 Figure 5.1: Components of particle velocity

Komponente stohastične hitrosti u_T^{**} in u_L^{**} izračunamo po enačbah:

$$u_L^{**} = r \sqrt{\frac{2D}{\Delta t}}, u_T^{**} = r \sqrt{\frac{2D}{\Delta t}} \quad (5.4)$$

Pri tem je r vrednost, izračunana z generatorjem naključnih števil, porazdeljenih po standardni normalni porazdelitvi.

Pri MSD ni težav s stabilnostjo, vendar pa začnejo z izbiro prevelikega časovnega koraka Δt delci preskakovati mrežne celice, v katerih so izračunane hitrosti, in zato vsem spremembam toka ne sledijo dovolj natančno. Zato v izračunih nismo upoštevali rezultatov, dobljenih s časovnim korakom, ki je večji od tistega, ko delci začnejo preskakovati celice.

5.1.2 Osnovne enačbe TOP12 sheme

Po Eulerjevem pristopu gibanje nafte opišemo s PDE, ki v splošnem nimajo analitične rešitve, zato njihovo aproksimativno rešitev iščemo s tremi klasičnimi numeričnimi metodami: MKD, MKV in MKE (Peiró in Sherwin, 2005). Shema TOP12 uvrščamo med MKD, ki jo lahko izpeljemo z razvojem posameznih členov PDE v Taylorjevo vrsto ali z njihovo aproksimacijo z višjerrednim polinomom (Hriberšek, 2010). Slednji način sta pri razvoju TOP12 uporabila tudi Tkalic in Chan (2003), ki sta za aproksimacijo debeline naftnega sloja uporabila polinom tretjega reda.

Tukaj predstavimo nekaj izrazov TOP12 sheme z namenom prikaza njihovega osnovnega delovanja in numerične kompleksnosti v primerjavi z enačbami MBM ter tudi MSD, kar že samo po sebi nakazuje daljši čas numeričnega reševanja.

Številka dvanajst v imenu TOP12 pomeni, da shema izračuna vrednosti koncentracije v naslednjem časovnem koraku na podlagi vrednosti koncentracij v dvanajstih sosednjih točkah. S TOP12 izračunamo koncentracijo nafte v časovnem koraku $n + 1$ v računski točki z indeksom (i, j) po formuli:

$$C_{i,j}^{n+1} = C_{i,j}^n - \underbrace{(\alpha_E C_E - \alpha_W C_W) - (\beta_N C_N - \beta_S C_S)}_{\text{Advekcija}} + \underbrace{(\lambda_E C'_E - \lambda_W C'_W) + (\mu_N C'_N - \mu_S C'_S)}_{\text{Difuzija}} \quad (5.5)$$

Indeksi W, E, S in N (angl. West, East, South, North) v enačbi povedo, na katerem licu računске celice računamo neznanu količino. S C'_E in C_E smo označili tako imenovana difuzijski in advekcijski pretok na vzhodni stranici celice. V numeričnem preizkusu smo računali s konstantnim in homogenim koeficientom difuzije D in kvadratno obliko računске celice $\Delta x = \Delta y$, zato dobimo enostavne izraze za Courantova števila α , β in difuzijska števila λ , μ v različnih smereh koordinatnih osi.

$$\begin{aligned} (\alpha_E)_{i,j} &= \alpha = \frac{v_x \Delta t}{\Delta x} \quad \text{in} \quad (\beta_N)_{i,j} = \beta = \frac{v_y \Delta t}{\Delta x} \\ (\lambda_E)_{i,j} &= \lambda = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad \text{in} \quad (\mu_N)_{i,j} = \mu = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \end{aligned} \quad (5.6)$$

Spodaj zapisani pogoji (enačba (5.7)) zagotavljajo ohranitev mase pri advekciji in difuziji in jih upoštevamo pri reševanju enačbe (5.5):

$$\begin{aligned}(\alpha_W C_W)_{i,j} &= (\alpha_E C_E)_{i-1,j} \text{ in } (\beta_S C_S)_{i,j} = (\beta_N C_N)_{i,j-1}, \\ (\lambda_W C'_W)_{i,j} &= (\lambda_E C'_E)_{i-1,j} \text{ in } (\mu_S C'_S)_{i,j} = (\mu_N C'_N)_{i,j-1}\end{aligned}\quad (5.7)$$

Advekcijski pretok v n -tem časovnem koraku na vzhodnem licu celice izračunamo po enačbi:

$$\begin{aligned}C_E^n &= \frac{1}{6}(1-\alpha)(2-\alpha)(1-\beta)C_{i+1,j}^n - \frac{1}{6}(1-\alpha^2)(1-\beta)C_{i-1,j}^n \\ &\quad + \frac{1}{6}[(5+3\alpha-2\alpha^2) - \beta(2+3\alpha-2\alpha^2)]C_{i,j}^n \\ &\quad + \frac{1}{6}(1-\alpha)(2-\alpha)\beta C_{i+1,j-1}^n + \frac{1}{6}(2+3\alpha-2\alpha^2)\beta C_{i,j-1}^n \\ &\quad - \frac{1}{6}(1-\alpha^2)\beta C_{i-1,j-1}^n\end{aligned}\quad (5.8)$$

Izračun difuzijskega pretoka v časovnem koraku n na vzhodnem licu celice pa izračunamo z izrazom:

$$\begin{aligned}C_E^m &= (1-\alpha)(1-\beta)C_{i+1,j}^n - (1-2\alpha)(1-\beta)C_{i,j}^n - \alpha(1-\beta)C_{i-1,j}^n \\ &\quad + (1-\alpha)\beta C_{i+1,j-1}^n - (1-2\alpha)\beta C_{i,j-1}^n - \alpha\beta C_{i-1,j-1}^n\end{aligned}\quad (5.9)$$

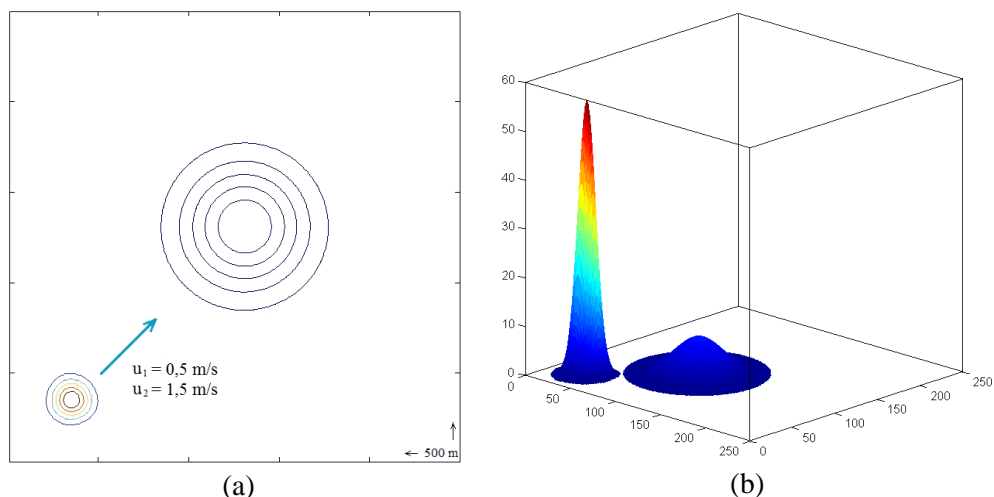
Avtorja sta določila tudi območje stabilnosti za numerično shemo TOP12, pri čemer mora biti za numerično stabilnost zadoščeno naslednjim izrazom:

$$\begin{aligned}|\alpha| &\leq 1 \text{ in } |\beta| \leq 1 \\ 0 &\leq \lambda \leq \frac{1}{4} \text{ in } 0 \leq \mu \leq \frac{1}{4}\end{aligned}\quad (5.10)$$

5.2 Opis numeričnega eksperimenta

V prvem koraku testiranja hipoteze (poglavje 5.2.2) analiziramo učinkovitost posamezne metode z numeričnim eksperimentom, v katerem merimo natančnost in računski čas metod pri simulaciji advekcije in difuzije točkovnega izpusta (slika 5.2) v primerjavi z analitično rešitvijo. Natančnost modela merimo z napako $L2$ (4.1) v primerjavi z analitično rešitvijo (4.2) kakor smo to storili v poglavju 4.1.1 in ki je pogost način v literaturi (Širca, 1992; Zhang in sod., 2002; Banda in sod., 2009; Li in Huang 2009; Ginzburg, 2013;).

Primerjavo med različnimi metodami smo izvedli na 500 m x 500 m velikem območju (slika 5.2a). Izbrana je bila realna vrednost koeficienta difuzije $D = 2 \frac{m^2}{s}$, uporabljena tudi v poglavju 4.2 za simulacijo razlitja na reki Savi. Končni čas simulacij je bil pri testiranjih učinkovitosti enak petim minutam. Za iskanje optimalne učinkovitosti je bilo v vsaki metodi preizkušeno štiriintrideset različnih časovnih korakov (preglednica 5.1). V vseh simulacijah numeričnega poskusa je bila masa razlite nafte enaka 100 kg.



Slika 5.2: Prikaz širjenja Gaussovega zvona v tlorisu (a) in v 3D (b)
Figure 5.2: The propagation of the Gaussian bell in plain view (a) and 3D (b)

Zanimal nas je vpliv hitrosti toka na učinkovitost različnih metod, zato smo vse teste opravili z dvema hitrostima toka. Najprej smo izmerili natančnost s hitrostjo, enako $|\vec{u}| = 0,5 \frac{m}{s}$, ter nato še s hitrostjo toka, ki v praksi še dovoljuje varno posredovanje z zaščitnimi plavajočimi pregradami (Četina in sod., 2012) in znaša $|\vec{u}| = 1.5 \text{ m/s}$. Natančnost metod smo testirali s tokom, usmerjenim diagonalno na računске celice, ker ta modelom v splošnem povzroča največje težave z numerično difuzijo (Širca, 1992).

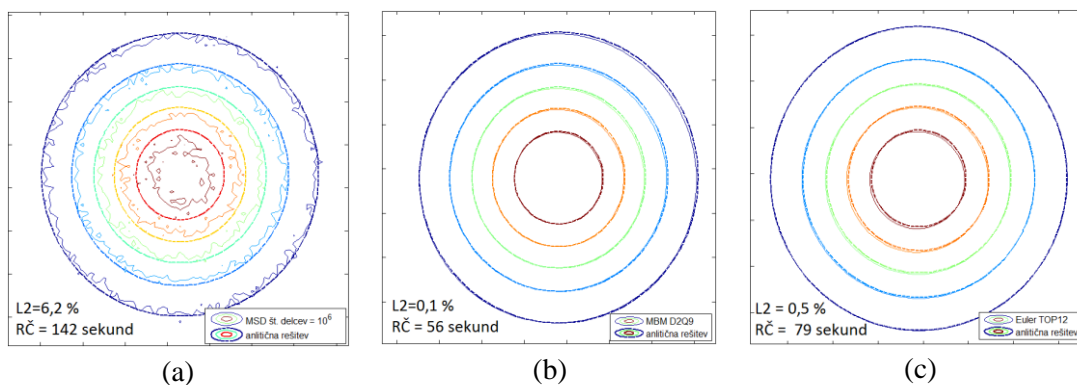
Preverili smo tudi, če spreminjanje gostote mreže vpliva na učinkovitost različnih metod, zato smo v testih uporabili mreže z različnim številom računskih celic: 50 x 50 celic, 250 x 250 celic in 500 x 500 celic. Iz spodnje preglednice vhodnih podatkov lahko izračunamo, da smo za osnovno analizo učinkovitosti opravili 1428 različnih simulacij.

Preglednica 5.1: Vhodni podatki za numerični eksperiment

Table 5.1: Input data for the numerical experiment

Metoda:	Računska mreža:	Hitrosti:	Časovni korak:
MBM D2Q5	50 x 50 celic	0,5 m/s	Uporabljenih je bilo 34 različnih časovnih korakov od 0,1 sekunde do 10 sekund v razmikih 0,3 sekunde
MBM D2Q9	250 x 250 celic	1,5 m/s	
TOP12	500 x 500 celic		
MSD št. delcev = 10^4			
MSD št. delcev = 10^5			
MSD št. delcev = 10^6			
MSD št. delcev = 10^7			

Različne metode so lahko ob enakih vhodnih podatkih izračunale zelo različno natančne rezultate in za to potrebovale različne računске čase (RČ), kar prikazuje tudi slika 5.3.

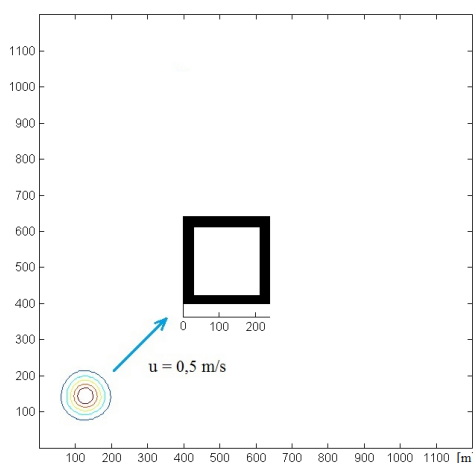


Slika 5.3: Primerjava izolinij koncentracij, napake $L2$ in računskih časov ($R\check{C}$) različnih metod z enakim časovnim korakom 0,4 sekunde in mrežo z 250 x 250 celicami: (a) MSD, (b) MBM D2Q9 in (c) TOP12.

Figure 5.3: Comparison of the contour plots, $L2$ errors and simulation running times of the: (a) PTM, (b) LBM D2Q9 and (c) TOP12 model results

Za testiranje učinkovitosti smo uporabljali le petminutni končni čas simulacij, zato nas je zanimalo, ali smo s tem naredili oz. povečali napako. V naslednjem poglavju (5.2.1) smo zato s primerjavo metod v dveh časovnih intervalih računa $t = 5$ minut in $t = 28$ minut preverili tudi vpliv končnega časa simulacij na njihovo natančnost.

V drugem koraku testiranja hipoteze preverimo vpliv oblike računskega območja na povečanje računskega časa posameznih metod. Postavili smo oviro kvadratne oblike v računsko območje (slika 5.4) in ugotavljali, kateri metodi se je ob oviri najbolj povečal čas izračuna.



Slika 5.4: Vpliv ovire na računski čas
Figure 5.4: The influence of obstacle on the computational time

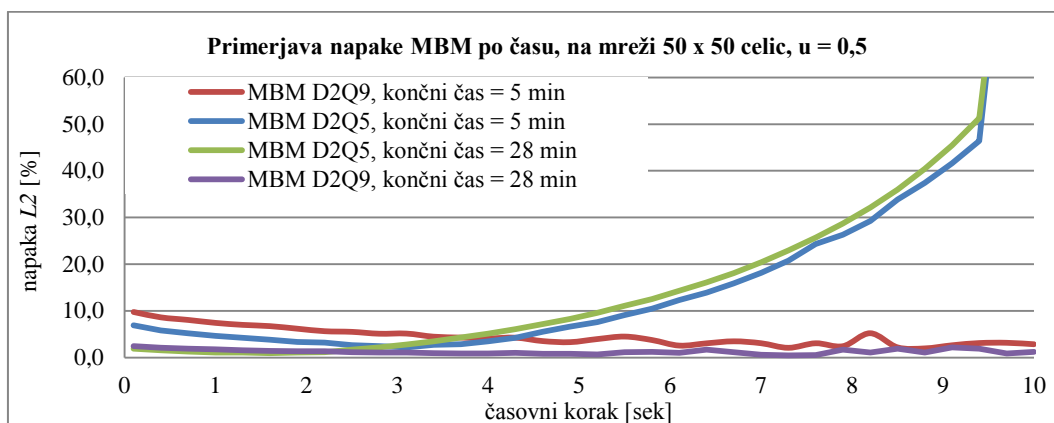
Zaradi ovire smo računsko območje povečati s 500 m x 500 m na 1200 m x 1200 m in uporabili mrežo s 600 x 600 celicami. Uporabili smo nekoliko daljši, 28-minutni končni čas simulacij, da bi dobili večji vpliv na spremembo računskega časa. Uporabili smo le eno diagonalno hitrost $|\vec{u}| = 0,5$ m/s in časovni korak $\Delta t = 0,4$ sekunde.

5.2.1 Primerjava natančnosti MBM, Euler TOP12 in MSD po času

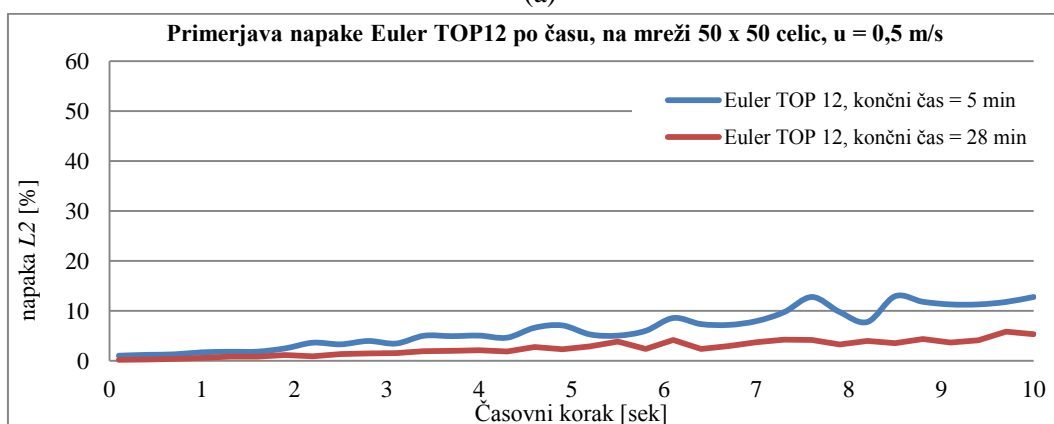
S primerjavo metod v dveh časovnih intervalih računa $t = 5$ minut in $t = 28$ minut preverimo tudi vpliv končnega časa simulacije na njihovo natančnost. Na slikah 5.5 vidimo, kako se pri spreminjanju časovnega koraka spreminjajo natančnosti posameznih metod.

Modelu MBM z D2Q5 mrežo se z večanjem časovnega koraka napaka $L2$ povečuje, vendar je lahko pri manjših časovnih korakih ta model enako ali bolj natančen kakor model MBM z D2Q9 mrežo (slika 5.5a). Napaka modela MBM D2Q9 je le malo odvisna od izbire časovnega koraka in je pri daljših časovnih korakih celo nekoliko manjša (slika 5.5a). Modelu, ki uporablja shemo TOP12, se z večanjem časovnega koraka napaka povečuje (slika 5.5b). Rezultati modela MBM D2Q9 in TOP12 so pri 28-minutnem končnem času natančnejši kakor pri 5-minutnem, kar pomeni, da njihova rešitev s časom konvergira k analitični rešitvi (sliki 5.5a in 5.5b).

Ker model MSD praktično ne pozna numerične difuzije, v simulacijah pa uporabljamo enakomerno in homogeno hitrostno polje, izbira velikosti računskega koraka ne vpliva na točnost rezultatov (slika 5.5c). Na sliki 5.5c vidimo tudi, da napaka v rezultatih MSD narašča z večanjem računskega časa, ker so delci vedno bolj narazen in je znotraj računске celice vedno manj delcev, s katerimi bi lahko natančno izračunali koncentracijo.



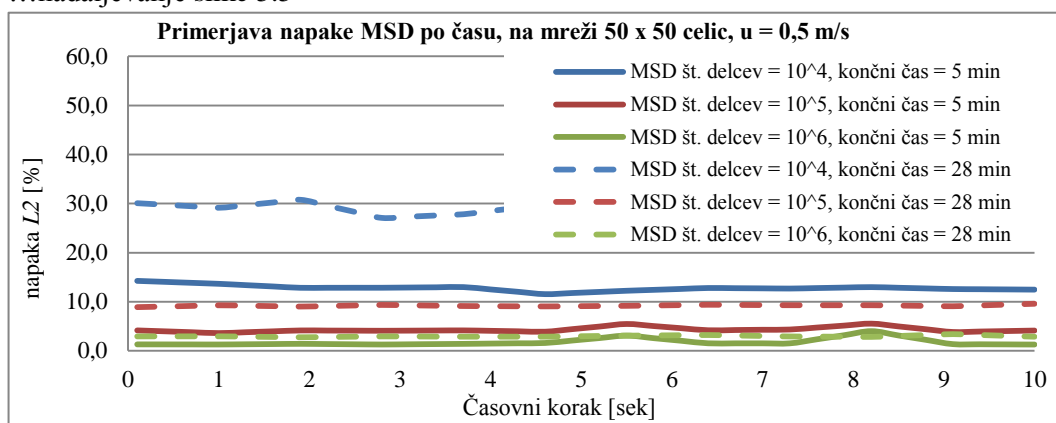
(a)



(b)

se nadaljuje...

...nadaljevanje slike 5.5



(c)

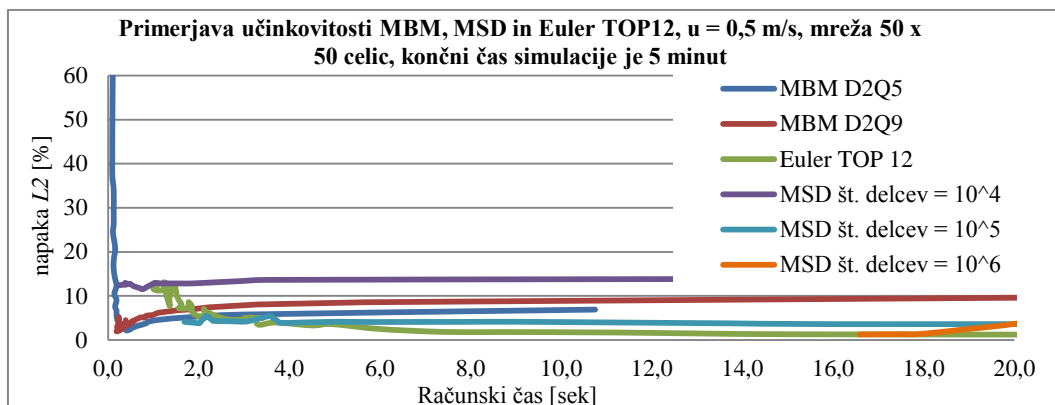
Slika 5.5: Primerjava L_2 napake modelov (a) MBM, (b) Euler TOP12 in (c) MSD v dveh časovnih intervalih, na mreži s 50 x 50 celicami in diagonalno hitrostjo toka $u = 0,5$ m/s
Figure 5.5: Comparison of L_2 error using different models (a) LBM, (b) Euler TOP12 and (c) PTM in two time frames on a 50 x 50 computational grid and a diagonal velocity $u = 0.5$ m/s

Opravljen je bila tudi analiza z območjem, diskretiziranim na 250 x 250 in 500 x 500 celicami, vendar se oblika grafov ni razlikovala od tistih s 50 x 50 celicami (slika 5.5), zato omenjenih rezultatov posebej ne prikazujemo. Na podlagi ugotovitev tega poglavja lahko trdimo, da s primerjavo učinkovitosti v le enem končnem času simulacij pri modelih MBM in TOP12 nismo naredili večje napake, ker se njihova natančnost s časom še nekoliko povečuje, medtem ko pa se natančnost MSD s časom manjša in bo njena učinkovitost z naraščanjem končnega časa padala.

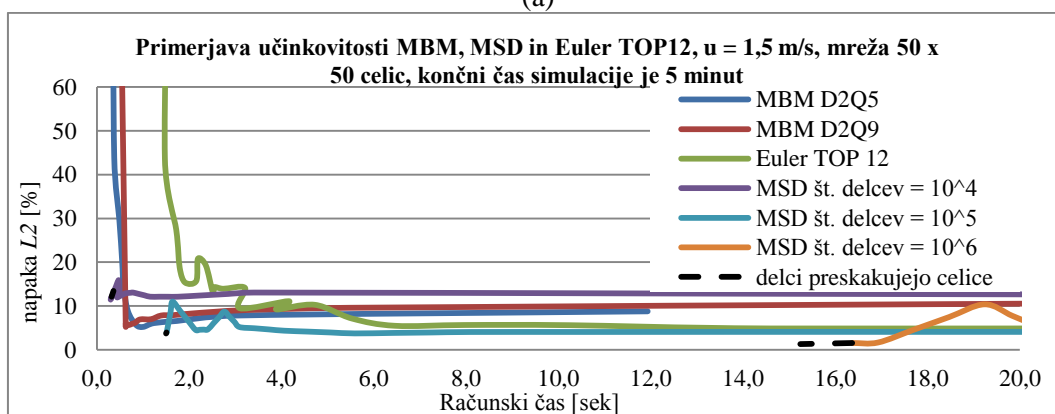
5.2.2 Analiza učinkovitosti

Slike 5.6 prikazuje rezultate učinkovitosti modelov na mreži s 50 x 50 celicami. Najbolj učinkoviti so modeli, katerih krivulje imajo minimum najbližje izhodišču, kar pomeni, da sta njihova napaka L_2 in računski čas izmed vseh simulacij najmanjša. Iz omenjenih slik je vidno različno obnašanje posamezne metode, ko med seboj primerjamo napake L_2 in računske čase. Opazimo, da so grafi MSD neodvisni od števila delcev in praktično vedno s konstantno vrednostjo L_2 (slika 5.6). Vzrok je v enakomernem, homogenem hitrostnem polju in v dejstvu, da v MSD praktično ne nastopa numerična difuzija, zato velikost računskega koraka ne more vplivati na točnost rezultatov,

Rezultati TOP12 pri krajšem računskem času, ko metoda uporablja daljše časovne korake, niso najbolj natančni, kasneje z manjšanjem časovnega koraka in naraščanjem računskega časa natančnost narašča (slika 5.6). MBM kaže spet drugačno obnašanje, krivuljo začne praktično takoj z največjo natančnostjo, kar pomeni da so rezultati zelo natančni pri velikih časovnih korakih, z manjšanjem časovnega koraka pa začne natančnost rahlo upadati (slika 5.6). MBM D2Q5 začne z nekoliko slabšo natančnostjo kakor D2Q9 pri krajših računskih časih, kar pomeni, da je D2Q5 manj natančna od D2Q9 pri večjih časovnih korakih (slika 5.6).



(a)



(b)

Slika 5.6: Primerjava učinkovitosti modelov MBM, MSD in Euler TOP12 z mrežo s 50×50 celicami, 5 minutnim končnim časom simulacije in z diagonalno hitrostjo toka (a) $u = 0,5$ m/s in (b) $u = 1,5$ m/s

Figure 5.6: Efficiency comparison between LBM, PTM and TOP12 on a 50×50 computational grid, 5 minutes simulation time and diagonal velocity (a) $u = 0.5$ m/s in (b) $u = 1.5$ m/s

Opravili smo tudi analizo učinkovitosti z 250×250 in 500×500 celicami, vendar se oblika grafov ni razlikovala od tistih s 50×50 celicami, zato omenjenih rezultatov ne prikazujemo.

Med izvajanjem simulacij smo naredili tudi nekaj poskusov pri katerih v modelu TOP12 nismo upoštevali stabilnostnega pogoja, ker nas je zanimalo, ali lahko na ta način povečamo časovni korak. Dobljeni rezultat, ki je v preglednici 5.2 obarvan zeleno in prikazan z vrednostmi v oklepaju, nas je presenetil; računski čas pri simulacijah TOP12 z diagonalno hitrostjo $1,5$ m/s je bil krajši, kot pri hitrosti $0,5$ m/s. Vzrok temu je, da diagonalna hitrost $1,5$ m/s povzroči določeno numerično difuzijo, ki dvigne stabilnost nad s stabilnostnim pogojem določeni časovni korak (iz $0,1$ na $0,3$ sekunde) in na ta način skrajša računski čas. Da bi se prepričali, ali je šlo res za numerično difuzijo, smo le nekoliko zmanjšali adveksijsko hitrost in modelu se je takoj zmanjšala stabilnost na izračunani stabilnostni pogoj. Pri MBM podobnega obnašanja nismo zasledili. Ko smo modelu MBM zmanjšali adveksijsko hitrost, je metoda ohranila stabilnost. Omenjeni preizkus kaže, da je numerična difuzija v TOP12 posledica interpolacij advekcije, medtem ko MBM tega pojava ne pozna, saj se pri slednji metodi adveksijski korak pomakne natanko za dolžino celice in interpolacije niso potrebne. V preglednicah 5.2 in 5.3 smo uporabljali kratico RČ za računski čas in oznako $\widehat{RČ}$ za njegovo normirano vrednost v razmerju do najučinkovitejšega modela MBM D2Q9. Modeli so v preglednicah razvrščeni po računskih časih od najhitrejšega do najpočasnejšega.

Preglednica 5.2: Rezultati primerjave učinkovitosti med: MBM, MSD in TOP12

Table 5.2: Comparison of efficiency between LBM, PTM and TOP12

Mreža 50 x 50 celic							
$u = 0,5$ [m/s]				$u = 1,5$ [m/s]			
model	RČ [s]	$\widehat{R\check{C}}$ [/]	Δt [s]	model	RČ [s]	$\widehat{R\check{C}}$ [/]	Δt [s]
D2Q9	0,2	1,0	10	D2Q9	0,6	1,0	3,7
D2Q5	0,3	1,5	4,9	D2Q5	0,8	1,3	1,6
MSD 10^5 delcev	1,8	9,0	10	MSD 10^5 delcev	1,5	2,5	9,4
TOP1 2	1,9	9,5	5,8	TOP1 2	6,5	10,8	1,6

Mreža 250 x 250 celic							
$u = 0,5$ [m/s]				$u = 1,5$ [m/s]			
model	RČ [s]	$\widehat{R\check{C}}$ [/]	Δt [s]	model	RČ [s]	$\widehat{R\check{C}}$ [/]	Δt [s]
D2Q9	10	1,0	2,2	D2Q9	32	1,0	0,7
D2Q5	13,7	1,4	0,7	TOP1 2	82	2,6	0,4
MSD 10^6 delcev	31	3,1	5,5	MSD 10^6 delcev	87	2,7	1,9
TOP1 2	79	7,9	0,4	D2Q5	123,6	3,9	0,1

Mreža 500 x 500 celic							
$u = 0,5$ [m/s]				$u = 1,5$ [m/s]			
model	RČ [s]	$\widehat{R\check{C}}$ [/]	Δt [s]	model	RČ [s]	$\widehat{R\check{C}}$ [/]	Δt [s]
D2Q9	117	1,0	1	D2Q9	360	1,0	0,35
D2Q5	135	1,2	0,4	D2Q5	581	1,6	0,1
MSD 10^7 delcev	658	5,6	2,8	TOP1 2	1632 (489)	4,5 (1,3)	0,1 (0,3)
TOP1 2	1476	12,6	0,1	MSD 10^7 delcev	9375	26,0	1

Pri pregledu rezultatov, prikazanih v preglednici 5.2, ni bilo moč ugotoviti jasnega vzorca, po katerem bi lahko povzeli splošne razlike med metodami. V veliki meri je to povezano z numerično naravo eksperimenta, v katerem smo testirali sicer zelo veliko, vendar še vedno omejeno količino različnih kombinacij vhodnih podatkov. Tako npr. računski čas ni bil nikoli odčitan pri napaki, natančno enaki 7 %, ampak je bila to prva vrednost pod to mejo. Za zelo natančno analizo obnašanja učinkovitosti uporabljenih metod in odvisnosti rezultatov od vhodnih podatkov bi bilo potrebno še bistveno povečati število različnih časovnih korakov, uporabljenih mrež in hitrosti, kar pa bi zahtevalo izredno veliko

časa in zato presegle zastavljene okvire te naloge. Za potrditev hipoteze v prvem koraku smo potrebovali splošno potrditev ali zavrnitev, da je MBM učinkovitejša od primerljivih metod, kar dokažemo s povprečenjem rezultatov iz preglednice 5.2. Te rezultate, normirane v razmerju do najučinkovitejšega modela MBM D2Q9, prikazujemo v preglednici 5.3.

Preglednica 5.3: Končni rezultati primerjave učinkovitosti med: MBM, MSD in TOP12

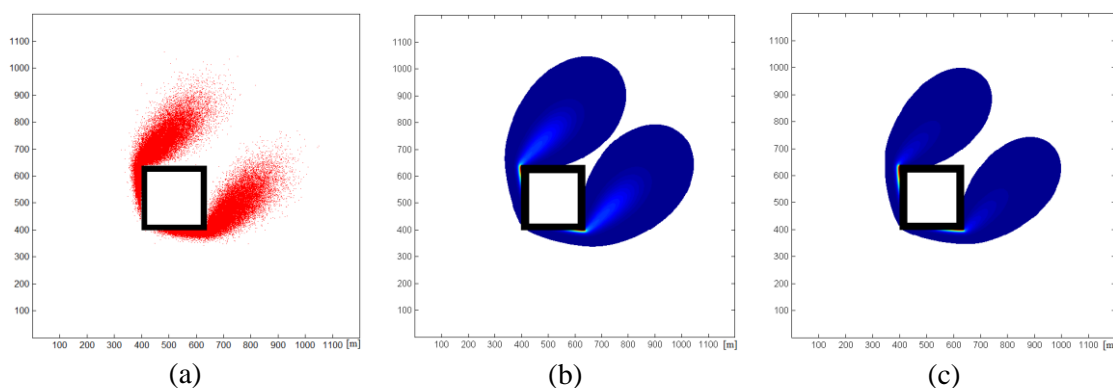
Table 5.3: Final results of the efficiency comparison between: LBM, PTM and TOP12

$\widetilde{R\check{C}}$ [°]	Delno povprečje $u = 0,5$	Delno povprečje $u = 1,5$	Skupno povprečje
D2Q9	1	1	1
D2Q5	1,3	2,3	1,8
TOP12	10,0	6,0	8,0
MSD	5,9	10,4	8,2

V delnem povprečenju rezultatov po različnih numeričnih resolucijah numeričnih mrež ni bilo opaziti značilnih vzorcev obnašanja učinkovitosti, zato rezultatov tukaj ne prikazujemo. Opazili pa smo lahko določene trende, če smo rezultate delno povprečili po različnih hitrostih toka; te rezultate prikazujemo v drugem in tretjem stolpcu preglednice 5.3. Vidimo, da model MBM D2Q9 z večanjem hitrosti toka izgublja prednost pred shemo TOP12. Vzrok temu je nestabilnost modela MBM, ki se začne pojavljati pri majhnih vrednosti časa relaksacije. Iz skrajnega desnega stolpca preglednice 5.3 je razvidna najpomembnejša ugotovitev tega poglavja: model MBM je v povprečju osemkrat hitrejši od modelov MSD in TOP12. S tem je potrjen prvi korak testiranja hipoteze, da je torej model MBM brez upoštevanja vpliva računskega območja učinkovitejši od modelov MSD in TOP12

5.2.3 Primerjava računskega časa z ali brez ovire

V drugem koraku želimo dokazati, da tudi oblika računskega območja nima večjega vpliva na povečanje računskega časa modelov MBM. Za testiranje tega dela hipoteze smo v računsko območje postavili oviro kvadratne oblike (slika 5.7) in merili razliko v računskem času posameznih metod z ali brez ovire. Rezultate posameznih izračunov prikazuje preglednica 5.4:



Slika 5.7: Prikaz testiranja vpliva ovire na povečanje računskega časa: (a) model MSD z 10^5 delci, (b) model MBM D2Q9 in (c) model TOP12

Figure 5.7: Testing the increase of computational time due to an obstacle with: (a) PTM model with 10^5 particles, (b) LBM D2Q9 model and (c) TOP12 model

Preglednica 5.4: Povečanje računskega časa zaradi ovire v računskem območju

Table 5.4: The increase of computational time due to obstacle in computation area

metoda	RČ brez ovire [s]	RČ z oviro [s]	Povečanje RČ zaradi ovire [%]
D2Q5	1135,3	1152,6	1,5
D2Q9	2415,4	2424,6	0,4
TOP12	1928,9	1933,4	0,2
MSD 10^4	119,86	122,26	2,0
MSD 10^5	293,24	319,8	9,1
MSD 10^6	2334,2	2594,4	11,1

Iz preglednice lahko razberemo, da se ob oviri modelu MBM D2Q5 poveča računski čas za 1,5 %, modelu MBM D2Q9 za 0,4 %, shemi TOP12 pa le za 0,2 %. Tako majhno povečanje računskega časa ima zanemarljiv vpliv na povečanje skupnega računskega časa modelov MBM in TOP12. Največji vpliv ima ovira na računski čas metode MSD, ki narašča z večanjem števila delcev in v izvedenem testu z uporabo 10^6 delcev izkazuje povečanje za več kot 10 %. S potrditvijo drugega koraka v testiranju hipoteze lahko trdimo, da z uporabo MBM učinkoviteje modeliramo prenos razlite nafte v vodnem okolju kakor z drugimi obstoječimi modeli, ki delujejo bodisi po Eulerjevem bodisi po Lagrangeevem principu, saj potekajo simulacije v realnih računskih območjih nepravilnih oblik znatno hitreje.

6 ZAKLJUČKI IN NAPOTKI ZA NADALJNJE DELO

Pri pregledu svetovne literature smo naleteli le na en članek, ki je obravnaval modeliranje razlitja nafte z MBM, zato smo z idejo testiranja uporabe MBM na tem področju postavili hipotezo, v kateri smo predpostavili, da lahko z uporabo MBM učinkoviteje modeliramo prenos razlite nafte v reki kakor z obstoječimi modeli na osnovi NS enačb po Eulerjevem ali Lagrangeevem principu, saj potekajo simulacije v realnih računskih območjih nepravilnih oblik znatno hitreje.

Novo razviti model MBM je splošen in uporaben za simulacije prenosa nafte na rekah in morju, zato smo lahko tudi validacijo izvedli na obeh primerih. Kot najprimernejše za validacijo smo izbrali razlitje, ki se je zgodilo leta 2006 pred libanonsko obalo. Čeprav smo uporabili dvodimenzijski model MBM, smo dosegli odlično ujemanje s satelitskimi posnetki in terenskimi podatki. Kot največji prednosti uporabe MBM pri modeliranju razlitja nafte sta se izkazali zmožnost simuliranja zelo nizkih naftnih koncentracij in visoka hitrost izračunov.

Dobro dokumentiranega primera dejanskega razlitja nafte na reki v literaturi nismo zasledili, zato smo opravili primerjavo rezultatov modela MBM s preizkušenim modelom Nafta3D na primeru hipotetičnega razlitja na Savi. Simulacije so pokazale, da v primeru, ko smo upoštevali advekcijo in difuzijo, na reki Savi med modeloma Nafta3D in MBM ni prišlo do večjih razlik. Največja razlika se pojavi v dolžini repa naftnega madeža, ki je pri simulacijah z modelom MBM nekoliko daljši zaradi večjega vpliva strižne difuzije, kar je posledica različnega robnega pogoja proste gladine v obeh modelih.

Poleg razvoja in validacije povsem novega modela MBM za širjene nafte predstavlja prispevek k znanosti tudi primerjava učinkovitosti modela MBM z modeloma MSD in TOP12 ter analitičnimi rezultati. Testiranje učinkovitosti je potekalo v dveh korakih in je podalo konkreten odgovor na zastavljeno hipotezo. V prvem koraku smo z več kot 1400 različnimi simulacijami preverili učinkovitost metod brez vpliva oblike računskega območja na računski čas in pri tem prišli do pomembne ugotovitve, da je model MBM v povprečju osemkrat hitrejši od modelov MSD in TOP12 ob doseganju enake natančnosti.

V drugem koraku smo preverili še vpliv oblike računskega območja na povečanje računskega časa z dodajanjem ovire v računsko območje. Ker smo uspeli v prvem koraku dokazati, da je model MBM brez vpliva oblike računskega območja učinkovitejši od primerljivih modelov, ki delujejo po Eulerjevem in Lagrangeevem principu, v drugem koraku pa, da tudi oblika računskega območja nima večjega vpliva na povečanje njegovega računskega časa, smo uspeli v celoti potrditi zastavljeno hipotezo.

V realnem primeru razlitja nafte v naravnem okolju sta odzivni čas ekip za posredovanje in tudi uspešnost uporabljenih ukrepov pogosto odvisna tako od natančnosti kot od hitrosti izračuna uporabljenega modela. Pri taktičnem načinu modeliranja lahko uporaba metode MBM pomeni pomemben prihranek računskega časa od nekaj minut pa vse do nekaj ur, kar lahko bistveno prispeva k zmanjšanju obsega in posledic onesnaženja. Novi model se izkaže kot dragoceno orodje na obeh področjih, na morju in v rekah in ga zato lahko priporočimo za uporabo ob razlitjih nafte v realnih primerih. Po izkušnjah pridobljenih ob izvedenih raziskavah in izdelavi disertacije bi uporabo metode MBM zagotovo predlagali kot ustrezno in učinkovito orodje pri razvoju bodočih modelov za simulacijo razlitij nafte v naravnem okolju.

Napotki za nadaljnje delo

Ob razlitju nafte v vodno okolje se začne odvijati večje število fizikalno-kemijskih procesov. V model MBM smo doslej vgradili le t.i. kratkotrajne procese, tiste z bistvenim vplivom na transport in razgradnjo nafte v krajšem času po razlitju, zato bi bilo potrebno čim prej vgraditi še nekatere od preostalih procesov, začenši z emulzifikacijo.

Velike možnosti napredka se ponujajo tudi pri metodi MBM, kjer so v ospredju možne izboljšave numerične stabilnosti metode. Ta naloga je znatno zahtevnejša, saj se s tem izzivom trenutno ubada večina znanstvene skupnosti MBM.

Poleg naštetih možnih izboljšav bi bilo potrebno v prihodnje preizkusiti še druge oblike numeričnega reševanja BBGK enačbe, kot je uporaba MKV (Zarghami in sod., 2012) ali MKD (El-Amin in sod., 2013), ki že nakazujeta uporabne in dobre rezultate.

7 POVZETEK

V praksi sta se za modeliranje razlitja nafte uveljavila dva numerična pristopa: Lagrangeev pristop metode sledenja delcev (MSD) in Eulerjev pristop. Mrežna Boltzmannova metoda (MBM) se je pojavila šele v zadnjem desetletju in jo lahko smatramo kot vez med omenjenima pristopoma.

Glavna prednost MBM je v uporabi enostavnejšega sistema enačb, zato je računski čas modelov po metodi MBM običajno krajši. To je še posebej pomembno v realnih primerih razlitja nafte, ko je odzivni čas ekip za posredovanje in uspeh uporabljenih ukrepov pogosto odvisen od hitrosti izračuna uporabljenega modela. Pri taktičnem načinu modeliranja to lahko pomeni pomemben prihranek računskega časa od nekaj minut pa vse do nekaj ur, kar lahko bistveno zmanjša obseg onesnaženja.

Ob pregledu svetovne literature smo odkrili le en članek, ki je povezoval MBM z razlitjem nafte, zato je bila z idejo testiranja uporabe MBM na tem področju postavljena hipoteza, da lahko z uporabo mrežne Boltzmannove metode učinkoviteje modeliramo prenos razlite nafte v reki kakor s sedanjimi modeli, ki delujejo na osnovi NS enačb po Eulerjevem ali Lagrangeevem principu, saj potekajo simulacije v realnih računskih območjih nepravilnih oblik znatno hitreje.

Za razumevanje in kasnejšo uporabo MBM smo iz Boltzmannove enačbe izpeljali Navier-Stokesove (NS) in adveksijsko-difuzijsko (AD) enačbo. Ključno vlogo pri tem je imelo poznavanje perturbacijske metode, Fourierevih vrst in Hermitovih polinomov. Za izpeljavo AD enačbe je zadostoval že razvoj porazdelitvene funkcije v Fourierovo vrsto prvega reda, za izpeljavo NS enačb pa smo uporabili razvoj do drugega reda Fouriereve vrste. Tako smo iz molekularnega nivoja Boltzmannove enačbe dobili klasične enačbe dinamike tekočin.

MBM smo dobili z diskretizacijo Boltzmannove Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) enačbe. Glede na željeno natančnost diskretizacije, rotacijsko simetričnost njenih rezultatov in prostorsko dimenzijo, je mogoče izpeljati manj natančne D2Q5, D3Q7 in bolj natančne D2Q9 in D3Q27 numerične sheme. Algoritem MBM razdelimo na dva koraka, propagacijo delcev in trke. Propagacijski korak je enak za vse modele MBM in predstavlja gibanje delcev od enega do drugega vozlišča, obstaja pa več različic modeliranja trknega koraka. Glede na število relaksacijskih časov uporablja ločimo trkni korak z enim relaksacijskim časom, dvema relaksacijskima časoma (TRT) ali več relaksacijskimi časi (MRT).

Ob razlitju nafte v vodno okolje se začne hkrati odvijati večje število fizikalno-kemijskih procesov. Vsak od teh procesov ima določen vpliv na širjenje in razgradnjo nafte. Upoštevanje vseh procesov bi znatno povečalo računski čas simulacij, zato smo se v doktorski nalogi omejili le na tiste, ki imajo bistven vpliv na transport in razgradnjo nafte. To so hidrodinamika toka, izhlapevanje ter odlaganje nafte na obalo in njeno sproščanje nazaj z obale.

V programskem okolju Matlab razviti model MBM je splošen in uporaben za simulacije prenosa nafte na rekah in morju, zato je bila lahko tudi validacija izvedena na obeh primerih. Za validacijo na morju smo izbrali razlitje, ki se je zgodilo leta 2006 pred libanonsko obalo. Čeprav je bil uporabljen dvodimenzijski model MBM (shema D2Q9), je bilo doseženo odlično ujemanje s satelitskimi posnetki in terenskimi podatki. Kot največji prednosti uporabe MBM pri modeliranju razlitja nafte sta se izkazali zmožnost simuliranja zelo nizkih naftnih koncentracij in visoka hitrost izračunov. Poleg validacije modela na morju je bila opravljena še primerjava rezultatov tridimenzionalnega modela MBM (shema D3Q7) s preizkušenim modelom Nafta3D na primeru hipotetičnega razlitja na Savi. Simulacije so pokazale dobro ujemanje v rezultatih med obema modeloma. Manjša razlika se je

pojavi pri dolžini repa naftnega madeža, ki je bil pri simulacijah z modelom MBM nekoliko daljši, kar je posledica različnega obravnavanja robnega pogoja proste gladine v uporabljenih modelih.

Potem, ko smo se prepričali v zanesljivost rezultatov modela MBM, smo želeli preveriti še, če je model MBM tudi po učinkovitosti enakovreden ali celo boljši od obstoječih modelov, delujočih po Eulerjevem ali Lagrangeevem principu, kakor predpostavljamo v hipotezi. Za predstavnico Eulerjeve metode smo izbrali shemo metode končnih diferenc (MKD), ki za iskanje aproksimativne rešitve uporablja polinom tretjega reda od tod tudi njeno ime TOP12 (angl. Third-Order Polynomial). Učinkovitost numerične metode smo definirali kot sposobnost doseči čim večjo natančnost v primerjavi z analitično rešitvijo pri čim krajšem računskem času. Prav primerjava učinkovitosti modela MBM z modeloma MSD in TOP12 ter analitičnimi rezultati je bila poleg razvoja in validacije povsem novega modela MBM ključen prispevek k znanosti izvedene raziskave.

Testiranje učinkovitosti je potekalo v dveh korakih. V prvem koraku je bila z več kot 1400 različnimi izračuni preverjena učinkovitost naštetih metod brez vpliva oblike računskega območja na računski čas. Pri tem smo ugotovili, da je model MBM v povprečju osemkrat hitrejši od modelov MSD in Eulerjevega TOP12. V drugem koraku smo preverili še vpliv oblike računskega območja na povečanje računskega časa. V računsko območje smo dodali oviro in merili povečanja računskega časa posamezne metode. Ker smo v prvem koraku dokazali, da je model MBM brez vpliva oblike računskega območja znatno učinkovitejši od primerljivih modelov, v drugem koraku pa, da tudi oblika računskega območja nima večjega vpliva na povečanje njegovega računskega časa, je bila zastavljena hipoteza potrjena v celoti.

V realnem primeru razlitja nafte je odzivni čas ekip za posredovanje in uspeh uporabljenih ukrepov pogosto odvisen tako od natančnosti kot od hitrosti izračuna uporabljenega modela. Novi model se odlično izkaže glede obeh zahtevanih lastnosti in ga zato lahko kot dragoceno orodje priporočimo za uporabo ob razlitjih nafte v realnih primerih. Po izkušnjah pridobljenih med raziskavo bi uporabo metode MBM zagotovo predlagali pri razvoju bodočih modelov za simulacijo razlitja nafte.

8 SUMMARY

Two numerical approaches are generally used for oil spill modelling: the Lagrangian particle tracking method and the Eulerian method. The lattice Boltzmann method (LBM) has only appeared recently and can be regarded as a link between the two methods.

The main advantage of LBM is that a simpler set of equations is used, which greatly reduces the calculation time of LBM-based models. This is especially important in actual oil spill events, where the response time of emergency response teams and the effectiveness of the measures taken often depend on the calculation speed of the model used. In tactical modelling, this can result in significant reductions in calculation time, ranging from minutes to hours, which can contribute significantly to reducing pollution due to oil spills.

Since the literature review only revealed a single article that connected LBM with oil spills, we decided to test the use of LBM in this area, hypothesising that the lattice Boltzmann method could be used to model river oil spills more efficiently than existing models based on Navier-Stokes (NS) equations using Eulerian or Lagrangian algorithms, as simulations in realistic calculation domains of irregular shapes are performed much faster.

To facilitate the understanding and the subsequent use of LBM, we derived NS and advection-diffusion (AD) equations from the Boltzmann equation. A key role in this was played by perturbation method, Fourier series and Hermite polynomials. The AD equation was derived by expanding the distribution function into a first-order Fourier series, whereas the NS equations were derived by expanding the function into a second-order Fourier series. We were thus able to transform the Boltzmann equations at the molecular level to classical fluid dynamics equations.

LBM can be obtained by the discretisation of the Boltzmann Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) equation. Depending on the degree of accuracy, rotational symmetry of its results and the dimension of space, it is possible to derive less accurate D2Q5, D3Q7 or more accurate D2Q9 and D3Q27 scheme. LBM algorithm is divided into two steps; propagation of particles and collisions. While the propagation step is equal for all the LBM models, the collision step may have different forms depending on the number of the relaxation times used: single-relaxation time, two-relaxation times (TRT) and multiple relaxation times (MRT).

When an oil spill occurs in an aquatic environment, a number of physical and chemical processes take place simultaneously. Each of these processes has a certain effect on the dispersion and degradation of the oil. Taking all of these processes into account would significantly increase the simulation calculation time; therefore our work was restricted to the processes that have a major effect on the transport and degradation of oil. These processes are current hydrodynamics, evaporation and deposition of oil on the shoreline and the release of oil back into the water from the shoreline.

LBM model is a general model that can be used to simulate the transport of oil in rivers and seas and we were able to validate it for both cases. We chose an oil spill that occurred along the coast of Lebanon in 2006 as the most suitable case for the validation of our newly developed LBM model for sea spills. Although we employed a two-dimensional LBM model, we achieved an excellent match with satellite images and actual field data. We found that the greatest advantages of using LBM to model oil spills were its ability to simulate very low oil concentrations and its fast calculation time.

Since we were unable to find any well-documented cases of actual river oil spills in the literature, we compared the results of the LBM model to the validated Nafta3D model for a hypothetical spill on the river Sava. The simulations showed that if only advection and diffusion are taken into account, there are no significant differences between the results of Nafta3D and LBM models. The greatest difference is in the length of the tail of the oil slick, which is somewhat longer in simulations with the LBM model due to the greater shear-induced diffusion, a consequence of the differences in the free-surface boundary conditions of the models.

Another contribution to science beside the development and validation of a completely new LBM-based oil dispersion model was the comparison of the efficiency of the LBM model with the particle tracking method (PTM) and third-order polynomial (TOP12) models and analytical results. The efficiency of a numerical method was defined as the ability to achieve the highest possible accuracy in comparison with the analytical results in the shortest possible calculation time. We tested the efficiency of the methods with a numerical experiment in which we measured the accuracy and calculation time of each method.

The efficiency of the model was tested in two steps and provided a concrete answer to our hypothesis. In the first step, we carried out more than 1400 different calculations to assess the efficiency of the methods without taking into account the impact of the calculation domain on their calculation time, which led us to the significant finding that the LBM model was on average eight times faster than the PTM and TOP12 models. In the second step, we assessed the effect of the shape of the calculation domain on the calculation time by adding barriers in the calculation domain and measuring the increase in calculation time for each method. The first step demonstrated that the LBM model is significantly more efficient than other comparable Eulerian and Lagrangian models. The second step proved that the shape of the calculation domain does not have a major impact on the calculation time. Our hypothesis has thus been successfully confirmed.

In actual oil spill events, the response time of emergency response teams and the effectiveness of the measures taken often depend on the accuracy and calculation speed of the model used. The new model has proved to be a valuable tool in both areas and can therefore be recommended for use in real oil spill events. Based on our experience, we certainly recommend the use of the LBM method in the future development of oil spill models.

VIRI

Alhumaizi, K., 2007. Flux-limiting solution techniques for simulation of reaction–diffusion–convection system. *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* 12, 6: 953–965.

Banda, M.K., Saïd, M., Thömmes, G., 2009. Lattice Boltzmann simulation of dispersion in two-dimensional tidal flows. *Int. J. Numer. Methods Eng.* 77, 6: 878–900.

Batchelor, G.K., 2000. *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge idr., Cambridge University Press: 615 str.

Beegle-Krause, J., 2001. General NOAA Oil Modeling Environment (GNOME): a new spill trajectory model. *Int. Oil Spill Conf. Proc.* 2001. Washington, American Petroleum Institute: 865–871.

Bernsdorf, J.M., 2008. *Simulation of complex flows and multi-physics with the Lattice-Boltzmann method*. Doctoral Disseratition. Amsterdam, University of Amsterdam, Section Computational Science: 156f.

Bhatnagar, P.L., Gross, E.P., Krook, M., 1954. A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems. *Phys. Rev.* 94: 511–525.

Biello, D., 2010. How Fast Can Microbes Clean Up the Gulf Oil Spill? *Scientific American*: 3 str. <http://www.scientificamerican.com/article/how-fast-microbes-consume-gulf-oil-spill/> (pridobljeno 18. 4. 2014)

Bouzidi, M., Firdaouss, M., Lallemand, P., 2001. Momentum transfer of a Boltzmann-lattice fluid with boundaries. *Phys. Fluids 1994-Present* 13, 11: 3452–3459.

Bronštejn, I.N., Semendjajev, K.A., Musiol, G., Muhling, H., 1997. *Matematični priročnik*. Ljubljana, Tehniška založba Slovenije: 967 str.

Camas, B.S., 2008. *Lattice Boltzmann Modeling for Mass Transport Equations in Porous Media*. Doctoral Disseratition. Louisiana, Louisiana State University (samozaložba B.S. Camas): 141 f.

Camilli, R., Reddy, C.M., Yoerger, D.R., Van Mooy, B.A., Jakuba, M.V., Kinsey, J.C., McIntyre, C.P., Sylva, S.P., Maloney, J.V., 2010. Tracking hydrocarbon plume transport and biodegradation at Deepwater Horizon. *Science* 330, 6001: 201–204.

Camp, J.S., LeBoeuf, E.J., Abkowitz, M.D., 2010. Application of an enhanced spill management information system to inland waterways. *J. Hazard. Mater.* 175, 1-3: 583–592.

Carey, V.P., 1999. *Statistical thermodynamics and microscale thermophysics*. Cambridge idr., Cambridge University Press: 432 str.

Četina, M., Banovec, P., Fesel, M., Cerk, M., Cilenšek, A., Sirmik, N., Džebo, E., 2012. Študija učinkovite uporabe vodnih baraž - Končno poročilo. Ljubljana, Ministrstvo za obrambo republike Slovenije: 105 f.

Chapman, S., 1916. On the law of distribution of molecular velocities, and on the theory of viscosity and thermal conduction, in a non-uniform simple monatomic gas. *Philos. Trans. R. Soc. Lond. Ser. Contain. Pap. Math. Phys. Character*: 279–348.

Chapman, S., 1918. On the kinetic theory of a Gas. Part II: a composite monatomic gas: diffusion, viscosity, and thermal conduction. *Philos. Trans. R. Soc. Lond. Ser. Contain. Pap. Math. Phys. Character*: 115–197.

Chen, L., Luan, H., Feng, Y., Song, C., He, Y.-L., Tao, W.-Q., 2012. Coupling between finite volume method and lattice Boltzmann method and its application to fluid flow and mass transport in proton exchange membrane fuel cell. *Int. J. Heat Mass Transf.* 55, 13-14: 3834–3848.

Chen, S., Doolen, G.D., 1998. Lattice Boltzmann method for fluid flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.* 30: 329–364.

Chopard, B., Droz, M., 1998. Cellular automata modeling of physical systems. Cambridge idr., Cambridge University Press: 351 str.

Coppini, G., De Dominicis, M., Zodiatis, G., Lardner, R., Pinardi, N., Santoleri, R., Colella, S., Bignami, F., Hayes, D.R., Soloviev, D., Georgiou, G., Kallos, G., 2011. Hindcast of oil-spill pollution during the Lebanon crisis in the Eastern Mediterranean, July–August 2006. *Mar. Pollut. Bull.* 62, 1: 140–153.

Dabbaghitehrani, M., 2013. Lattice Boltzmann method for two immiscible components. Master of Science Thesis. Stockholm, Royal Institute of Technology. (samozaložba M. Dabbaghitehrani): 30 f.

Dawson, S.P., Chen, S., Doolen, G.D., 1993. Lattice Boltzmann computations for reaction-diffusion equations. *J. Chem. Phys.* 98, 2: 1514–1523.

De Dominicis, M., Pinardi, N., Zodiatis, G., Lardner, R., 2013. MEDSLIK-II, a Lagrangian marine surface oil spill model for short-term forecasting – Part 1: Theory. *Geosci Model Dev* 6, 6: 1851–1869.

Delgado, L., Kumzerova, E., Martynov, M., 2006. Simulation of oil spill behaviour and response operations in PISCES. *WIT Trans. Ecol. Environ.* 88: 279–292.

Delvigne, G.A., Sweeney, C.E., 1988. Natural dispersion of oil. *Oil Chem. Pollut.* 4, 4: 281–310.

Deng, J.Q., Ghidaoui, M.S., Gray, W.G., Xu, K., 2001. A Boltzmann-based mesoscopic model for contaminant transport in flow systems. *Adv. Water Resour.* 24, 5: 531–550.

DHI, 1993. Spill Analysis Workstation (SAW). User Guide. Horsholm, Danish Hydraulic Institute and Water Quality Institute: 25 str.

Dippner, J., 2004. Mathematical Modeling of the Transport of Pollution in Water. Paris, *Encycl. Life Support Syst. EOLSS Hydrol. Syst. Model*, Vol 2: 43 str.

- El-Amin, M.F., Sun, S., Salama, A., 2013. On the Stability of the Finite Difference based Lattice Boltzmann Method. 2013 Int. Conf. Comput. Sci. 18: 2101–2108.
- Elliott, A.J., Hurford, N., Penn, C.J., 1986. Shear diffusion and the spreading of oil slicks. Mar. Pollut. Bull. 17, 7: 308–313.
- Enskog, D., 1917. Kinetische Theorie der Vorgänge in mässig verdünnten Gasen: I. Teil. Uppsala, Almqvist & Wiksell: 160 str.
- Fay, J.A., 1971. Physical processes in the spread of oil on a water surface. Int. Oil Spill Conf. Proc. 1971, 1: 463–467.
- Fingas, M., 2004. Oil Spill Behavior in the Freshwater Environment. V: Proceedings of the Fifth Biennial Freshwater Spills Symposium. Washington, US Environmental Protection Agency: 60 str.
- Fingas, M., 2010. Oil Spill Science and Technology. Amsterdam idr., Elsevier Science: 1192 str.
- Fischer, H.B., 1979. Mixing in inland and coastal waters. San Diego idr., Academic press: 483 str.
- Flekkøy, E.G., 1993. Lattice Bhatnagar-Gross-Krook models for miscible fluids. Phys. Rev. 47, 6: 4247-4257.
- Frisch, U., Hasslacher, B., Pomeau, Y., 1986. Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation. Phys Rev Lett 56: 4 str.
- Fulling, S., 2009. Perturbation Theory (Asymptotic Approximations). College Station, Texas A&M University: 56 str.
- Ginzburg, I., 2005. Equilibrium-type and link-type lattice Boltzmann models for generic advection and anisotropic-dispersion equation. Adv. Water Resour. 28: 1171–1195.
- Ginzburg, I., 2013. Multiple anisotropic collisions for advection–diffusion Lattice Boltzmann schemes. Adv. Water Resour. 51: 381–404.
- Ginzburg, I., d' Humières, D., 2007. Lattice Boltzmann and analytical modeling of flow processes in anisotropic and heterogeneous stratified aquifers. Adv. Water Resour. 30, 11: 2202–2234.
- Ginzburg, I., d' Humières, D., Kuzmin, A., 2010. Optimal stability of advection-diffusion lattice Boltzmann models with two relaxation times for positive/negative equilibrium. J. Stat. Phys. 139: 1090–1143.
- GLA, 2007. Lebanon oil spill. Beirut, Green Line Association: 127 str.
- Grad, H., 1949. On the kinetic theory of rarefied gases. Commun. Pure Appl. Math. 2, 4: 331–407.
- Gundlach, E.R., 1987. Oil-holding Capacities And Removal Coefficients For Different Shoreline Types To Computer Simulate Spills In Coastal Waters. V: Proceedings 1977 International Oil Spill Conference. Washington, American Petroleum Institute: p. 451-457.

Guo, Z., Shu, C., 2013. Lattice Boltzmann Method and Its Applications in Engineering. New Jersey idr., World Scientific: 404 str.

Hammou, H., Ginzburg, I., Boulerhcha, M., 2011. Two-relaxation-times Lattice Boltzmann schemes for solute transport in unsaturated water flow, with a focus on stability. *Adv. Water Resour.* 34: 779–793.

Hardy, J., Pomeau, Y., De Pazzis, O., 1973. Time evolution of a two-dimensional model system. I. Invariant states and time correlation functions. *J. Math. Phys.* 14: 1746–1759.

HARPHA SEA, 2011. Svetovanje in pomoč pri vzpostavitvi ter razvoju geografsko informacijskega sistema v okviru projekta mladega raziskovalca iz gospodarstva.

Ha, S., Ku, N., Lee, K.-Y., 2012. Lattice Boltzmann Simulation for the Prediction of Oil Slick Movement and Spread in Ocean Environment. V: *The Twenty-Second International Offshore and Polar Engineering Conference*. Rhodes, Greece, June 17–22, 2012. International Society of Offshore and Polar Engineers: p. 783-788.

He, X., Luo, L.-S., 1997. A priori derivation of the lattice Boltzmann equation. *Phys. Rev. E* 55: R6333–R6336.

Heydariha, J., Ghiassi, R., 2010. Oil Spill Simulation in Mouth of Persian Gulf. *Adv. WASTE Manag:* 56–60.

Higuera, F.J., Jimenez, J., 1989. Boltzmann approach to lattice gas simulations. *EPL Europhys. Lett.* 9: 663–668.

Hriberšek, M., 2010. Računalniška dinamika Tekočin–osnutek skripte. Maribor, Univerza v Mariboru, Fakulteta za strojništvo: 146 str.

Huang, K., 1987. *Statistical mechanics*. New York idr., Wiley: 493 str.

ITOPF, 2002. Technical Information Paper: Fate of Marine Oil Spills: 8 str.
<http://www.itopf.com/assets/documents/tip2.pdf> (Pridobljeno 14.4.2014)

Josza, J., 1989. Two-Dimensional Particle Model for Predicting Dept-Integrated Pollutant and Oil Slick Transport in Rivers. *Hydraul. Environ. Model. Coast. Eastuarine River Waters* 1989: 332–340.

Kač, M., 2001. *Leksikon kemije*. Ljubljana, Mladinska knjiga: 245 str.

Kallos, G.B., 1997. The Regional weather forecasting system SKIRON. V: *Proceedings of the Symposium on Regional Weather Prediction on Parallel Computer Environments: October 15-17, 1997*. Athens, University of Athens, Department of Physics, Department of Informatics: 12 str.

Kandhai, D., Koponen, A., Hoekstra, A., Kataja, M., Timonen, J., Slood, P.M.A., 1999. Implementation aspects of 3D lattice-BGK: boundaries, accuracy, and a new fast relaxation method. *J. Comput. Phys.* 150, 2: 482–501.

- Kladnik, R., 1985. Visokošolska fizika: Mehanski in toplotni pojavi. Del 1. Ljubljana, Državna založba Slovenije: 231 str.
- Kladnik, R., 1996. Fizika za srednješolce +1, Pot k maturi iz fizike. Ljubljana, Državna založba Slovenije: 252 str.
- Körner, C., Pohl, T., Rüde, U., Thürey, N., Zeiser, T., 2006. Parallel Lattice Boltzmann Methods for CFD Applications. V: Bruaset, A. (ur.), Tveito, A. (ur.). Numerical Solution of Partial Differential Equations on Parallel Computers, Lecture Notes in Computational Science and Engineering. New York idr., Springer: p. 439–466.
- Kuzmin, A., 2009. Multiphase simulations with lattice Boltzmann scheme. Doctoral Dissertation. Calgary, University of Calgary, Faculty of Graduate Studies (samozaložba A. Kuzmin): 133 f.
- Kuzmin, A., Ginzburg, I., Mohamad, A.A., 2011. The role of the kinetic parameter in the stability of two-relaxation-time advection–diffusion lattice Boltzmann schemes. *Comput. Math. Appl.* 61: 3417–3442.
- Lallemand, P., Luo, L.-S., 2000. Theory of the lattice Boltzmann method: Dispersion, dissipation, isotropy, Galilean invariance, and stability. *Phys. Rev.* 61, 6, no. 6: 6546–6562.
- Lehr, W.J., Cekirge, H.M., Fraga, R.J., Belen, M.S., 1984. Empirical studies of the spreading of oil spills. *Oil Petrochem. Pollut.* 2, 1: 7–11.
- Lehr, W., Jones, R., Evans, M., Simecek-Beatty, D., Overstreet, R., 2002. Revisions of the ADIOS oil spill model. *Environ. Model. Softw.* 17, 2: 189–197.
- Liboff, R.L., 2003. Kinetic Theory: Classical, Quantum, and Relativistic Descriptions. New York idr., Springer Science & Business Media: 571 str.
- Li, Y., Huang, P., 2009. A coupled lattice Boltzmann model for the shallow water-contamination system. *Int. J. Numer. Methods Fluids* 59: 195–213.
- Li, Y., Shock, R., Zhang, R., Chen, H., 2004. Numerical study of flow past an impulsively started cylinder by the lattice-Boltzmann method. *J. Fluid Mech.* 519: 273–300.
- Mackay, D., P., Bruist, I.A., Mascarenhas, R., Paterson, S., 1980. Oil Spill Processes and Models. Quebec, Environment Canada: 192 str.
- Maki, A.W., 1991. The Exxon Valdez oil spill: Initial environmental impact assessment. Part 2. *Environ. Sci. Technol.* 25, 1: 24–29.
- Malaspinas, O., 2009. Lattice Boltzmann method for the simulation of viscoelastic fluid flows. Doctoral Dissertation. Lausanne, Ecole Polytechnique Federale de Lausanne (samozaložba O. Malaspinas): 142 f.

Maslo, A., Fesel, M., 2014. Vrednotenje vpojnih sredstev namenjenih vpijanju nafte in njenih derivatov. Študija vpojnih sredstev v okviru projekta mladega raziskovalca iz gospodarstva. Ptuj, VGP Drava Ptuj d.d.: 13 f.

Maslo, A., Panjan, J., Žagar, D., 2014. Large-scale oil spill simulation using the lattice Boltzmann method, validation on the Lebanon oil spill case. *Mar. Pollut. Bull.* 84, 1-2: 225–235.

Matlab, 2012. Release 2012b, The MathWorks, Inc., Natick, Massachusetts, United States.

McNamara, G.R., Zanetti, G., 1988. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. *Phys. Rev. Lett.* 61: 2332–2335.

Mohamad, A.A., 2011. *Lattice Boltzmann Method: Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes*. New York idr., Springer: 178 str.

Mussa, A., Asinari, P., Luo, L.-S., 2009. Lattice Boltzmann simulations of 2D laminar flows past two tandem cylinders. *J. Comput. Phys.* 228: 983–999.

Payne, J.R., Kirstein, B.E., Clayton, J.R., Clary, C., Redding, R., 1987. Integration of suspended-particulate matter and oil-transportation study. Final report, September 1984–September 1987. San Diego, CA (USA). Tysons Corner, Science Applications International Corp.: 215 f.

Peiró, J., Sherwin, S., 2005. Finite Difference, Finite Element and Finite Volume Methods for Partial Differential Equations. V: Yip, S. (ur.). *Handbook of Materials Modeling. Volume I*. New York idr., Springer: 32 str.

Peng, C., 2011. *The Lattice Boltzmann Method for Fluid Dynamics: Theory and Applications*. Doctoral Dissertation. Lausanne, Department of Mathematics in Ecole Polytechnique Federale de Lausanne (samozaložba C. Peng): 150f.

Perkovič, M., Delgado, L., David, M., Petelin, S., Harsh, R., 2008. The Necessity of Applying Sar Imagery to Oil Spill Modeling in Cases of Data Obfuscation. V: Davidson, W.F. (ur.), Lee, K. (ur.), Cogswell, A. (ur.), *Oil Spill Response: A Global Perspective*, NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security. Amsterdam, Springer Netherlands: p. 237–256.

Rajar, R., 1997. *Hidromehanika: Učbenik*. Ljubljana, Univerza v Ljubljani, Fakulteta za gradbeništvo in geodezijo: 235 str.

Rajar, R., Četina, M., 1997. Hydrodynamic and water quality modelling: An experience. *Ecol. Model.* 101, 2–3: 195–207.

Ramšak, V., Malačič, V., Ličer, M., Kotnik, J., Horvat, M., Žagar, D., 2013. High-resolution pollutant dispersion modelling in contaminated coastal sites. *Mercury Contam. Sites Identif. Charact. Remediat. Impact* 125: 103–112.

Rathakrishnan, E., 2004. *Gas Dynamics*. Delhi, Prentice Hall India Pvt., Limited. 416 str.

- Rettinger, C., 2013. Fluid flow simulations using the lattice Boltzmann method with multiple relaxation times. Master of Science Thesis. Nürnberg, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (smozaložba C. Rettinger): 38 f.
- Ricot, D., Marié, S., Sagaut, P., Bailly, C., 2009. Lattice Boltzmann method with selective viscosity filter. *J. Comput. Phys.* 228, 12: 4478–4490.
- Saint-Raymond, L., 2009. Hydrodynamic limits of the Boltzmann equation, *Lecture Notes in Mathematics*. New York idr., Springer: 203 str.
- Samuels, W.B., Amstutz, D.E., Bahadur, R., Pickus, J.M., 2006. RiverSpill: a national application for drinking water protection. *J. Hydraul. Eng.* 132, 4: 393–403.
- Sayre, W.W., Chang, F.M., 1963. A laboratory investigation of open-channel dispersion processes for dissolved, suspended, and floating dispersants. Washington, U.S. Geological Survey: 71 f.
- Silberberg, M., 2012. *Principles of General Chemistry*. Columbus, McGraw-Hill Education: 960 str.
- Širca, A., 1992. Modeliranje transporta polutantov po metodi sledenja delcev. Magistrska naloga. Ljubljana, Univerza v Ljubljani, Fakulteta za arhitekturo, gradbeništvo in geodezijo, Oddelek za gradbeništvo in geodezijo, Podiplomski študij hidrotehnične smeri (samozaložba A. Širca): 87 f.
- Stensholt, S.K., 2010. Lattice-Boltzmann modelling of spatial variation in surface tension and wetting effects. Doctoral Dissertation. Bergen, The University of Bergen (samozaložba S.K. Stensholt): 90 f.
- Succi, S., 2001. *The Lattice Boltzmann Equation: For Fluid Dynamics and Beyond*. Oxford, Oxford University Press: 288 str.
- Sukop, M.C., Thorne, D.T., 2010. *Lattice Boltzmann Modeling: An Introduction for Geoscientists and Engineers*. New York idr., Springer: 172 str.
- Sullivan, S.P., Sani, F.M., Johns, M.L., Gladden, L.F., 2005. Simulation of packed bed reactors using lattice Boltzmann methods. *Chem. Eng. Sci.* 60: 3405–3418.
- Tkalich, P., 2006a. A CFD solution of oil spill problems. *Environ. Model. Softw.* 21, 2: 271–282.
- Tkalich, P., 2006b. Derivation of high-order advection-diffusion schemes. *J. Hydroinformatics* 8, 3: 149–164.
- Tkalich, P., Chan, E.S., 2002. Vertical mixing of oil droplets by breaking waves. *Mar. Pollut. Bull.* 44, 11: 1219–1229.
- Tkalich, P., Chan, E.S., 2003. The third-order polynomial method for two-dimensional convection and diffusion. *Int. J. Numer. Methods Fluids* 41, 9: 997–1019.
- Torgrimson, G.M., 1984. *The On-scene Spill Model*, NOAA technical memorandum NOS OMA. Washington U.S., Department of Commerce, National Oceanic and Atmospheric Administration, National Ocean Service: 103 str.

Tosi, F., Ubertini, S., Succi, S., Chen, H., Karlin, I.V., 2006. Numerical stability of entropic versus positivity-enforcing lattice Boltzmann schemes. *Math. Comput. Simul.* 72, 2: 227–231.

Violeau, D., Buvat, C., Abed-Meraïm, K., De Nanteuil, E., 2007. Numerical modelling of boom and oil spill with SPH. *Coast. Eng.* 54, 12: 895–913.

Von Neumann, J., Burks, A.W., 1966. *Theory of self-reproducing automata*. Urbana-Champaign, Univ. of Illinois Press: 388 str.

Wertheim, J., Oxlade, C., Waterhouse, J., Uršič, M., Potter, T., Stockley, C., Chen, K.K., Blundell, K., Smith, G., Lyon, C., 1994. *Slikovni pojmovnik: Kemija*. Ljubljana, Tehniška založba Slovenije: 128 str.

Wolf-Gladrow, D.A., 2005. *Lattice-gas cellular automata and lattice Boltzmann models: An Introduction*. New York idr., Springer: 311 str.

Wolfram Research, I., 2010. *Mathematica, Version 8*. Wolfram Research, Inc., Champaign, Illinois.

Wolfram, S., 1983. Statistical mechanics of cellular automata. *Rev. Mod. Phys.* 55: 601–644.

Wolfram, S., 1986. Cellular automaton fluids 1: Basic theory. *J. Stat. Phys.* 45: 471–526.

Yapa, P.D., Shen, H.T., Angamma, K.S., 1994. Modeling oil spills in a river-lake system. *J. Mar. Syst.* 4, 6: 453–471.

Yoshino, M., Inamuro, T., 2003. Lattice Boltzmann simulations for flow and heat/mass transfer problems in a three-dimensional porous structure. *Int. J. Numer. Methods Fluids* 43: 183–198.

Yoshioka, G., Carpenter, M., 2002. Characteristics of reported inland and coastal oil spills. V: *Fourth Biennial Freshwater Spills Symposium*. Washington, US Environmental Protection Agency: p. 11.

Zarghami, A., Maghrebi, M.J., Ghasemi, J., Ubertini, S., 2012. Lattice Boltzmann finite volume formulation with improved stability. *Commun. Comput. Phys.* 12, 1: 42 str.

Zhang, X., Bengough, A.G., Crawford, J.W., Young, I.M., 2002. A lattice BGK model for advection and anisotropic dispersion equation. *Adv. Water Resour.* 25, 1: 1–8.

Zhang, Z., Chen, Q., 2007. Comparison of the Eulerian and Lagrangian methods for predicting particle transport in enclosed spaces. *Indoor Air 2005 - 10th Int. Conf. Indoor Air Qual. Clim. Part II* 41, 25: 5236–5248.

Zhou, J.G., 2009. A lattice Boltzmann method for solute transport. *Int. J. Numer. Methods Fluids* 61, 8: 848–863.

Ziegler, D., 1993. Boundary conditions for lattice Boltzmann simulations. *J. Stat. Phys.* 71, 5-6: 1171–1177.

Zodiatis, G., Lardner, R., Hayes, D.R., Georgiou, G., Sofianos, S., Skliris, N., Lascaratos, A., 2008. Operational ocean forecasting in the Eastern Mediterranean: implementation and evaluation. *Ocean Sci* 4: 31–47.

Zou, Q., He, X., 1997. On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model. *Phys. Fluids 1994-Present* 9, 6: 1591–1598.

Žagar, D., 1994. Matematični model za simuliranje razlitja nafte na morju in njegova aplikacija. Magistrska naloga. Ljubljana, Univerza v Ljubljani, Fakulteta za arhitekturo, gradbeništvo in geodezijo, Oddelek za gradbeništvo in geodezijo: 68 f.

Žagar, D., Četina, M., 2011. Končno poročilo o izdelavi strokovne naloge NAFTA3d. Ljubljana, Nacionalni inštitut za biologijo: 21 f.