

České vysoké učení technické v Praze  
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

Katedra fyzikální elektroniky  
Obor: Počítačová fyzika



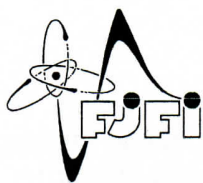
**Cell-centered  
lagrangeovsko-eulerovský kód pro  
hydrodynamické simulace**

**Cell-Centered Lagrangian-Eulerian  
Code for Hydrodynamic  
Simulations**

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Vypracovala: Maryia Butsko  
Vedoucí práce: doc. Ing. Pavel Váchal, Ph.D.  
Rok: 2023





ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE  
FAKULTA JADERNÁ A FYZIKÁLNĚ INŽENÝRSKÁ  
*Katedra fyzikální elektroniky*

## ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

<i>Student:</i>	<b>Maryia B u t s k o</b>
<i>Studijní program:</i>	<b>Fyzikální inženýrství</b>
<i>Specializace:</i>	<b>Počítačová fyzika</b>
<i>Akademický rok:</i>	<b>2022/2023</b>
<i>Název práce:</i> (česky)	<b>Cell-centered lagrangeovsko-eulerovský kód pro hydrodynamické simulace</b>
<i>Název práce:</i> (anglicky)	<b>Cell-Centered Lagrangian-Eulerian Code for Hydrodynamic Simulations</b>
<i>Jazyk práce:</i>	<b>Čeština</b>

### *Cíl práce:*

Navrhněte, implementujte a otestujte cell-centered lagrangeovsko-eulerovský (ALE) hydrodynamický kód za použití stávajícího lagrangeovského modulu vyvinutého na KFE [4].

### *Pokyny pro vypracování*

1. Seznamte se se základními přístupy k simulaci tekutin a fyziky plazmatu pomocí lagrangeovských a lagrangeovsko-eulerovských (ALE) metod, např. [1,3].
2. V jedné dimenzi implementujte a otestujte jednoduchý cell-centered indirect ALE kód používající vybrané stávající metody pro lagrangeovský krok, adaptaci sítě (rezone) a přenos řešení (remap).
3. Navrhněte, rozpracujte a implementujte zobecnění stávajícího dvourozměrného cell-centered lagrangeovského kódu pro nestrukturované sítě [4] na simulační kód typu indirect ALE. Pro adaptaci sítí a interpolaci řešení mezi nimi zvolte a naprogramujte některé stávající metody, např. z [2], strukturu celého kódu však navrhněte modulární, aby bylo v budoucnu možné bloky pro lagrangeovský krok, rezone a remap snadno rozšířit či nahradit.

4. Výsledný kód odlaďte a vyzkoušejte na sadě vhodných testovacích úloh pro ověření jeho validity a průběžnou kontrolu během dalšího vývoje.

*Doporučená literatura:*

1. Barlow A. J. et al., Arbitrary Lagrangian–Eulerian methods for modeling high-speed compressible multimaterial flows, *Journal of Computational Physics* 322, 603-665, 2016.
2. Galera S., Maire P.-H., Breil J., A two-dimensional unstructured cell-centered multi-material ALE scheme using VOF interface reconstruction, *Journal of Computational Physics*, 229, 5575-5787, 2010.
3. Maire P.-H., Contribution to the Numerical Modeling of Inertial Confinement Fusion. Habilitation thesis, University Bordeaux I, 2011.
4. Tarant I., Multidimenzionální numerické cell-centered lagrangeovské metody. Bakalářská práce, FJFI ČVUT v Praze, 2019.

*Jméno a pracoviště vedoucího práce:*

**doc. Ing. Pavel Váchal, Ph.D.**

Katedra fyzikální elektroniky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT v Praze


*Datum zadání:* 12. říjen 2022

*Datum odevzdání:* 2. srpen 2023

Doba platnosti zadání je dva roky od data zadání.



.....  
*Garant programu*



.....  
*Vedoucí katedry*



.....  
*Děkan*

## Prohlášení

Prohlašuji, že jsem svou bakalářskou práci vypracovala samostatně a použila jsem podklady uvedené v příloženém seznamu.

V Praze dne 08.01.2024.....



.....  
Maryia Butsko

## **Poděkování**

Ráda bych poděkovala svému vedoucímu práce, doc. Ing. Pavlu Váchalovi, Ph.D., za jeho nezlomný optimismus, podporu a neocenitelné rady v průběhu celé práce.

Maryia Butsko

*Název práce:*

Cell-centered lagrangeovsko-eulerovský kód pro hydrodynamické simulace

*Autor:* Maryia Butsko

*Studijní program:* Fyzikální inženýrství

*Obor:* Počítačová fyzika

*Druh práce:* Bakalářská práce

*Vedoucí práce:* doc. Ing. Pavel Váchal, Ph.D.

*Abstrakt:* Tato práce se zabývá teoretickým úvodem do problematiky hydrodynamických simulací, diskutuje základní přístupy a zaměřuje se na lagrangeovsko-eulerovské metody. Nabízí podrobnější náhled na jednodimenzionální a dvojdimenzionální případy rezonování a remapování v kontextu nepřímých lagrangeovsko-eulerovských simulací. Hlavním cílem je vývoj nepřímého cell-centered lagrangeovsko-eulerovského simulačního programu s důrazem na snadné rozšíření nebo nahrazení specifických bloků implementovaného kódu v budoucnu.

*Klíčová slova:* ALE, rezonování, remapování

*Title:*

Cell-Centered Lagrangian-Eulerian Code for Hydrodynamic Simulations

*Author:* Maryia Butsko

*Abstract:* This thesis provides a theoretical introduction to hydrodynamic simulations, discusses basic approaches and focuses on Lagrangian-Eulerian methods. It offers a detailed insight into the one- and two-dimensional cases of rezoning and remapping in the context of indirect Arbitrary Lagrangian-Eulerian simulations. The key purpose is the development of indirect cell-centered Lagrangian-Eulerian simulation with an explicit focus on the ability to easily extend or replace specific blocks of implemented code in the future.

*Key words:* ALE, rezoning, remapping

# Obsah

<b>Seznam obrázků</b>	<b>ix</b>
<b>Úvod</b>	<b>1</b>
<b>1 Numerické metody pro hydrodynamické simulace</b>	<b>3</b>
1.1 Eulerovská metoda . . . . .	3
1.2 Lagrangeovská metoda . . . . .	3
1.3 ALE metoda . . . . .	6
<b>2 Nepřímá cell-centered ALE metoda</b>	<b>8</b>
2.1 Lagrangeovský krok . . . . .	8
2.2 Rezone a remap: jednodimenzionální popis . . . . .	10
2.2.1 Rezone . . . . .	10
2.2.2 Remap . . . . .	11
2.3 Rezone a remap: rozšíření do dvoudimenzionálního prostoru . . . . .	15
2.3.1 Rezone . . . . .	15
2.3.2 Remap . . . . .	17
<b>3 Implementace</b>	<b>24</b>
3.1 Volba jazyka . . . . .	24
3.2 Simulační program . . . . .	25
<b>4 Numerické výsledky</b>	<b>26</b>
4.1 Sodův problém . . . . .	26
4.2 Vilarův problém . . . . .	27
4.3 Sedovův problém . . . . .	30
4.4 Nohův problém . . . . .	30
<b>Závěr</b>	<b>35</b>
<b>Literatura</b>	<b>36</b>



# Seznam obrázků

1.1	Fragment sítě: vizualizace rozdílu mezi eulerovským a lagrangeovským chováním sítě. . . . .	4
1.2	Fragmenty sítě: středově symetrická exploze s počátkem v $(0, 0)$ , rozdíl mezi eulerovskou, ALE a lagrangeovskou metodou. . . . .	5
1.3	Fragment sítě: vizualizace staggered diskretizace a cell-centered diskretizace sítě. . . . .	6
2.1	Fragment 1D sítě: značení pro buňky a uzly. . . . .	10
2.2	Fragment 1D sítě: objem průniku $\delta V_i$ a remapovací tok $F_i^\phi$ . . . . .	11
2.3	Fragment sítě: vizualizace po částech konstantní a po částech lineární rekonstrukce. . . . .	12
2.4	Fragment sítě: vizualizace "Lagrange + remap" simulace. Černá čára představuje síť před lagrangeovským krokem a po rezonování, červená čárkovaná představuje síť po lagrangeovském kroku. . . . .	15
2.5	Fragment sítě: značení pro CN rezonování. . . . .	16
2.6	Fragment sítě: značení pro rezonování okrajového uzlu pomocí Bézierovy křivky, $i$ je kontrolní bod. . . . .	17
2.7	Fragment sítě: značení pro výpočet průměrné derivace v okolí. . . . .	19
2.8	Intersection based metoda (nalevo) a swept based metoda (napravo). . . . .	20
2.9	Fragment sítě: značení pro objem průniku (swept area) ve 2D. . . . .	21
4.1	Počáteční podmínky pro Sodův test. . . . .	26
4.2	Sodův test, výsledky pro 1D kód. . . . .	27
4.3	Sodův test, výsledky pro 2D kód (1D řez). . . . .	27
4.4	Znázornění konvergence hustoty pro hladký Vilarův test za použití metody "Lagrange + Remap" s lagrangeovským schématem 2. řádu a "donor" remapováním. . . . .	29
4.5	Znázornění konvergence hustoty pro hladký Vilarův test za použití metody "Lagrange + Remap" s lagrangeovským schématem 2. řádu a lineárním remapováním. . . . .	29
4.6	Sedovův test za použití CN rezonování a lineárního remapování na trojúhelníkové síti s 2546 buňkami, pole hustoty. . . . .	31
4.7	Sedovův test za použití CN rezonování a lineárního remapování na trojúhelníkové síti s 2546 buňkami, scatterplot. . . . .	31
4.8	Sedovův test za použití CN rezonování a lineárního remapování na kartézské síti $51 \times 51$ , pole hustoty. . . . .	32
4.9	Sedovův test za použití CN rezonování a lineárního remapování na kartézské síti $51 \times 51$ , scatterplot. . . . .	32
4.10	Sedovův test za použití metody "Lagrange + remap", "donor" a lineárního remapování na polygonální síti s 2465 buňkami, pole hustoty. . . . .	33

- 
- 4.11 Nohův test za použití čistě lagrangeovského výpočtu, výpočtu ALE a metody "Lagrange + remap" na polární síti  $12 \times 50$ , pole hustoty. . 34

# Úvod

Hydrodynamické simulace mají za sebou bohatou historii vývoje, která sahá několik století zpět. Studium mechaniky tekutin a snaha pochopit chování tekutin, jako je voda a vzduch, má nesmírný význam v různých oborech, od leteckého inženýrství až po předpověď počasí. Počátky hydrodynamických simulací lze vysledovat až k pracím průkopnických vědců a matematiků. Princip Daniela Bernoulliho, formulovaný v 18. století, položil základy pro pochopení vztahů mezi tlakem, rychlostí a potenciální energií v proudění tekutin. Práce Leonharda Eulera a Clauda-Louise Naviera v 19. století významně přispěly k rozvoji matematického aparátu dynamiky tekutin a vedly k vytvoření Eulerových a Navier-Stokesových rovnic, kterými se řídí pohyb tekutin.

V polovině 20. století, s nástupem vysokorychlostních počítačů a výpočetní techniky, začali vědci zkoumat numerické metody řešení parciálních diferenciálních rovnic, včetně Eulerových a Navier-Stokesových rovnic. Zavedení metod konečných diferencí, konečných prvků a konečných objemů umožnilo diskretizaci a aproximaci těchto složitých rovnic, a otevřelo tak prostor pro simulace jevů proudění tekutin na počítačích.

V 60. a 70. letech 20. století došlo v oblasti hydrodynamických simulací k významnému pokroku. Objevily se tehdy první kódy pro výpočetní dynamiku tekutin (Computational Fluid Dynamics, **CFD**). Tyto první kódy byly založeny především na eulerovských metodách.

V této bakalářské práci se pouštíme do zkoumání numerických metod pro hydrodynamické simulace, s důrazem na cell-centered nepřímý lagrangeovsko-eulerovský (Arbitrary Lagrangian-Eulerian, **ALE**) přístup. Cílem této práce je vyvinout cell-centered nepřímý ALE kód pro nestrukturované sítě za použití stávajícího lagrangeovského modulu vyvinutého na naší fakultě [1]. Toho se docílí implementací rezonování a remapování, které nabízí větší flexibilitu a přesnost při simulaci proudění tekutin se složitou geometrií. Důležitým požadavkem na vyvíjený kód je zachovat modularitu stávajícího kódu pro snadnější rozšíření nebo nahrazení jednotlivých bloků v budoucnu.

Samotná práce je strukturována následovně: v 1. kapitole uvádíme přehled základních numerických metod používaných při hydrodynamických simulacích. Začneme stručným úvodem do eulerovské metody, dále se zabýváme Lagrangeovou metodou, a nakonec se seznámíme s metodou ALE, hybridním přístupem, který kombinuje silné stránky eulerovské i lagrangeovské metody.

V 2. kapitole představíme popis základních součástí nepřímé cell-centered ALE metody, abychom ukázali klíčové momenty tohoto přístupu, tedy zásady Lagrangeova kroku, fáze rezonování a fáze remapování. Popíšeme zde implementované metody

pro rezony a remap v 1D s následujícím rozšířením jejich popisu do dvojdimenzionálního prostoru, tedy uvedeme úpravy nutné pro zvládnutí složitostí vícedimenzionální geometrie.

3. kapitola je věnována samotné implementaci ALE v simulačním programu, včetně volby programovacího jazyka a vizualizačních aspektů.

Ve 4. kapitole představíme numerické výsledky získané pomocí implementovaných metod na klasických hydrodynamických problémech používaných k hodnocení přesnosti a účinnosti hydrodynamických simulačních kódů. Konkrétně se jedná o Sodův test, Vilarův test, Sedovův test a Nohův test.

# Kapitola 1

## Numerické metody pro hydrodynamické simulace

V této kapitole se budeme zabývat metodami používanými pro popis dynamiky stlačitelných tekutin. Obecně tedy rozebereme eulerovské metody, lagrangeovské metody a tzv. ALE (Arbitrary Lagrangian-Eulerian) metody, které jsou hlavním předmětem zájmu této práce.

### 1.1 Eulerovská metoda

Rodina eulerovských metod řeší systém zákonů zachování pro stlačitelné tekutiny ve tvaru

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\rho \mathbf{U}) &= 0, \\ \frac{\partial(\rho \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) + \nabla_x P &= 0, \\ \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\mathbf{U}(\rho E + P)) &= 0,\end{aligned}\tag{1.1}$$

kde  $\rho$  je hustota,  $\mathbf{U}$  rychlostní pole,  $P$  tlak a  $E$  hustota celkové energie tekutiny.

Pro termodynamický popis je třeba daný systém rovnic doplnit ještě o stavovou rovnici  $P = P(\rho, \varepsilon)$ , kde  $\varepsilon$  je tzv. specifická vnitřní energie,  $\varepsilon = E - \frac{1}{2}\mathbf{U}^2$ . Například pro ideální plyn se používá stavová rovnice ve tvaru  $P = \rho\varepsilon(\gamma - 1)$ , kde  $\gamma$  je adiabatická plynová konstanta, která je definovaná jako poměr tepelných kapacit při konstantním tlaku a objemu, tedy  $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$ .

Je důležité si uvědomit, že při eulerovských simulacích je síť pevná, a tekutina se přes ni pohybuje. Sledujeme tedy tok tekutiny hranicemi buněk, a nikdy zde nedojde k zaplétání sítě (angl. mesh tangling). Zatímco velké deformace v řešení lze zvládnout relativně snadno, samotná řešení jsou difúzní a je obtížné udržet ostrá materiálová rozhraní a rozlišení detailů proudění.

### 1.2 Lagrangeovská metoda

Lagrangeovské metody řeší systém zákonů zachování pro stlačitelné tekutiny ve tvaru

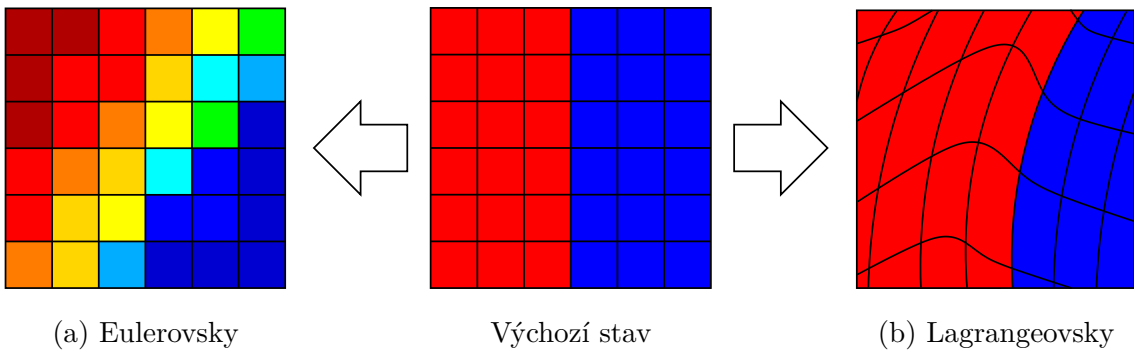
$$\begin{aligned}
\rho \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{\rho} \right) - \nabla \cdot \mathbf{U} &= 0, \\
\rho \frac{d\mathbf{U}}{dt} + \nabla P &= 0, \\
\rho \frac{dE}{dt} + P \nabla \cdot \mathbf{U} &= 0,
\end{aligned} \tag{1.2}$$

kde  $\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla_x$  je tzv. materiálová derivace a operátory gradientu a divergence jsou v lagrangeovských souřadnicích. Systém je opět uzavřen stavovou rovnicí.

Přestože lagrangeovské metody řeší systém rovnic ekvivalentní tomu, který se řeší v eulerovských metodách, jejich filozofie je dost odlišná: charakteristickým rysem lagrangeovských metod je to, že se síť pohybuje s lokální rychlostí tekutiny určené obyčejnou diferenciální rovnicí

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{U}, \tag{1.3}$$

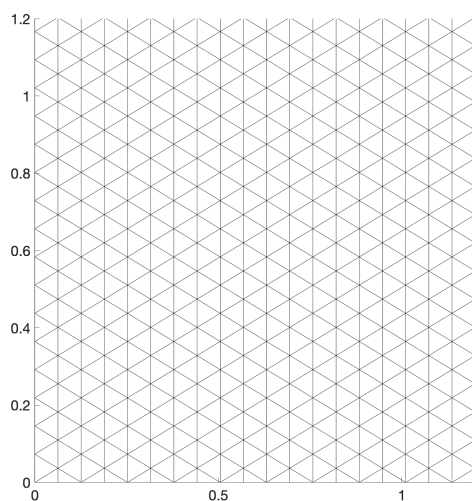
kde  $\mathbf{X}$  je vektor polohy uzlu a  $\mathbf{U}$  je vektor rychlosti příslušné danému uzlu. Tedy každý jednotlivý uzel výpočetní sítě sleduje při svém pohybu odpovídající částici materiálu. Z pohledu numeriky to znamená, že musíme diskretizovat nejen rovnice zákonů zachování (1.2), ale i pohybovou rovnici (1.3).



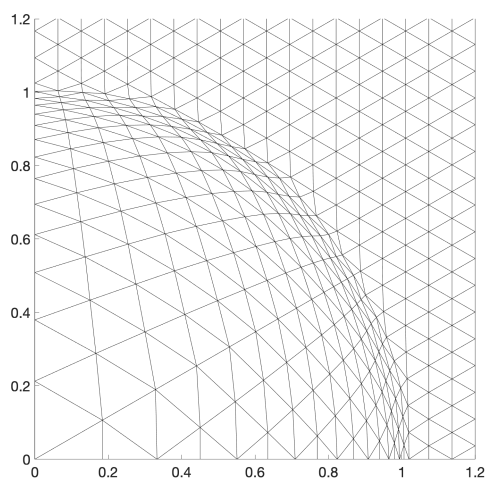
**Obrázek 1.1:** Fragment sítě: vizualizace rozdílu mezi eulerovským a lagrangeovským chováním sítě.

Lagrangeovský přístup umožňuje zachovat dobré rozlišení pro velké komprese/expanze, složité chování tekutin a multimateriálové proudění. Advektivní členy v něm identicky mizí. Trpí ale nedostatkem robustnosti: velké deformace sítě mohou vést ke ztrátě přesnosti, chybám výpočtu a selhání simulace.

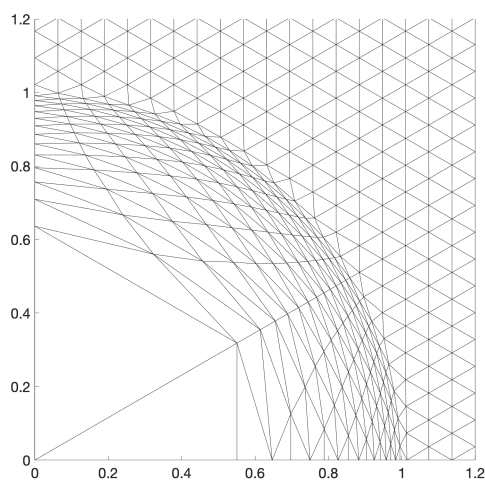
Rozdíl mezi eulerovskou a lagrangeovskou metodou je znázorněn na Obrázcích 1.1 a 1.2.



(a) Eulerovská metoda



(b) ALE metoda



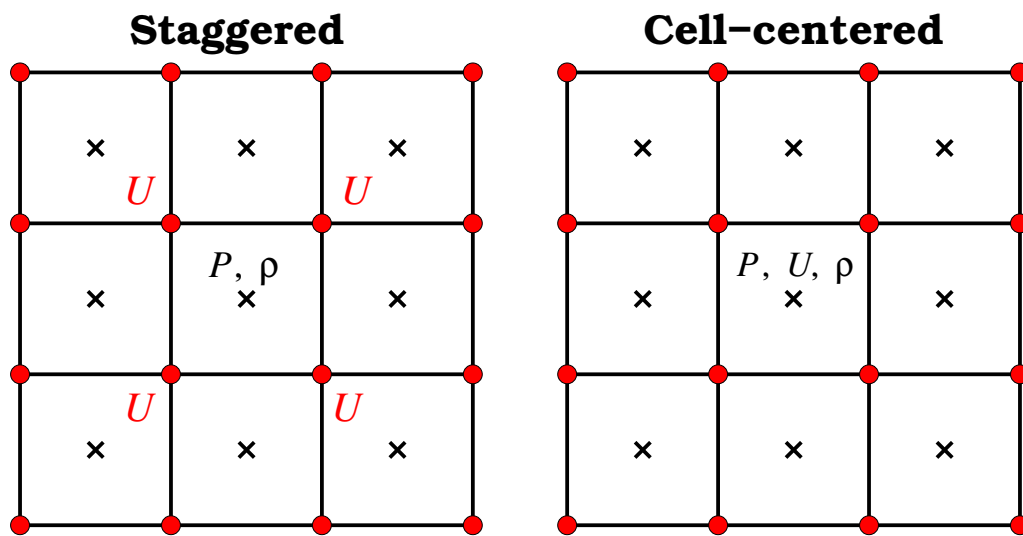
(c) Lagrangeovská metoda

**Obrázek 1.2:** Fragменты сítě: středově symetrická exploze s počátkem v  $(0, 0)$ , rozdíl mezi eulerovskou, ALE a lagrangeovskou metodou.

## 1.3 ALE metoda

Vzhledem k omezením čistě Lagrangeova a čistě Eulerova popisu byla vyvinuta tzv. Arbitrary Lagrangian-Eulerian metoda (dále jen ALE), která celkem úspěšně kombinuje silné stránky obou přístupů (Obrázek 1.2). Podstatou myšlenky ALE je, že pohyb sítě lze zvolit libovolně, což poskytuje dodatečnou flexibilitu a přesnost. Tento přístup byl poprvé formulován ve slavné práci Hirta a kolegů [2].

V numerických metodách pro hydrodynamické simulace se užívá dvou hlavních typů diskretizačních schémat: tzv. staggered a cell-centered (viz Obrázek 1.3).



**Obrázek 1.3:** Fragment sítě: vizualizace staggered diskretizace a cell-centered diskretizace sítě.

Staggered schémata jsou charakterizovaná tím, že skalární fyzikální proměnné, tedy hustota, tlak a vnitřní energie, jsou umístěny ve středech buněk sítě, zatímco vektorové, jako jsou rychlosti, jsou definovány jinde [3] (například v uzlech jako na Obrázku 1.3). Koncept staggered schémat se objevil v 50. a 60. letech 20. století a od té doby byl dále rozvíjen a zdokonalován v rámci výzkumu proudění tekutin a numerického modelování.

V cell-centered schématech jsou na rozdíl od staggered schémat všechny proměnné (včetně rychlosti) umístěny uprostřed buněk sítě. Nemáme zde ale přirozený návod jak pohybovat sítí. To do jisté míry vysvětluje proč vývoj cell-centered schémat byl oproti staggered schématům pomalejší.

To, že naše katedra má dobře rozvinuté staggered hydrodynamické kódy v porovnání s cell-centered kódy, se stalo motivací pro zkoumání cell-centered schématu v této práci.

Metody ALE se obvykle dělí do dvou skupin: přímé (direct) a nepřímé (indirect) ALE metody.

Přímé metody ALE spočívají v diskretizaci rovnic dynamiky kontinua pomocí pohyblivé sítě, přičemž rychlost sítě se obvykle odvozuje z pohybu hranic [11]. Advekce sítě je tedy přímo obsažena v řešených rovnicích.

Nepřímé metody ALE [2], které jsou předmětem zájmu této bakalářské práce, lze formulovat pomocí tří oddělených opakujících se kroků: Lagrangeova fáze, v níž se



---

aktualizují fyzikální proměnné a síť, fáze rezonování, v níž se za určitých podmínek zlepšuje kvalita sítě, a fáze remapování, v níž se proměnné konzervativně interpolují z Lagrangeovy sítě na novou, rezonovanou síť.

# Kapitola 2

## Nepřímá cell-centered ALE metoda

V této kapitole popíšeme tři kroky cell-centered nepřímé ALE metody pro hydrodynamické simulace. Vzhledem k náplni dané práce bude popis lagrangeovského kroku poněkud stručným. Podrobněji si ale rozebereme fáze rezonování a remapování a představíme výpočty nezbytné pro pochopení procesu. Popis a vysvětlení fází rezonu a remapu provedeme nejdříve v jednodimenzionálním výpočetním prostoru, pak rozvineme popis do 2D. Poznamenejme, že metoda je popsána pro jednomateriálový případ. Multimateriálový popis lze nalézt např. v [3, 10].

### 2.1 Lagrangeovský krok

První fáze nepřímé cell-centered ALE metody je Lagrangeův krok. Ten sleduje pohyb částic tekutiny při pohybu materiálu ve výpočetní oblasti a je také zodpovědný za pohyb sítě s tekutinou během výpočtu. Poloha, rychlost a další důležité vlastnosti každé buňky jsou během Lagrangeovy fáze aktualizovány na základě rovnice dynamiky tekutin.

Pro lagrangeovský krok musíme nejdříve převést Eulerovy rovnice pro ne vazkou stlačitelnou tekutinu (1.1) do lagrangeovských souřadnic. Převod provedeme pomocí materiálové derivace a obdržíme soustavu rovnic (1.2) (odvození je možné najít např. v [1]). Rovnice pro rychlost tekutiny je stejná jako při popisu lagrangeovské metody (1.3). Tato transformace vlastně představuje přechod od eulerovského přístupu k lagrangeovskému.

Dále je potřeba diskretizovat systém rovnic (1.2) a pohybovou rovnici (1.3). K tomu se využívají speciální diskretizační schémata. V našem 2D kódu pro lagrangeovský krok [1] bylo implementováno EUCCLHYD (Explicit Unstructured Cell-Centered Lagrangian HYDrodynamics) schéma navržené P.-H. Mairem v [8, 12] a FLW (Fridrich, Liska, Wendroff) schéma typu prediktor-korektor představené v [9].

Důležitou součástí úspěšného lagrangeovského kroku je kompatibilita diskretizace s deformací buňky. Jinak řečeno požadujeme, aby objem buňky spočtený přímo ze souřadnic poloh jejích uzlů odpovídal objemu spočtenému přes tzv. geometrický zákon zachování (Geometric Conservation Law, **GCL**), který vypadá následovně:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} dV - \int_{\partial V(t)} \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} \, ds = 0, \quad (2.1)$$

kde  $V(t)$ , resp.  $\partial V(t)$  je referenční objem (v našem případě buňka), resp. hranice buňky, a  $\mathbf{n}$  je vnější normálový vektor příslušející hranici buňky.

Musíme také podotknout, že důležitou podmínkou pro úspěšnou Lagrangeovou fázi je správné určení délky časového kroku. Volba jeho délky není vůbec univerzální. V našem kódu je možné délku časového kroku určovat pomocí následujících podmínek:

- Klasická **CFL** (Courant-Friedrichs-Lewy) **podmínka stability**, která v daném případě má termodynamický smysl [10]:

$$\Delta t_{\text{cff}} = C \min_c \left( \frac{\lambda_c^n}{\sigma_c^n} \right), \quad (2.2)$$

kde  $\lambda_c^n$  je nejmenší vzdálenost dvou uzlů dané buňky a  $\sigma_c^n$  je rychlost zvuku v buňce  $c$  v čase  $t^n$ .  $C$  je zde tzv. CFL koeficient,  $C \in (0, 1)$ .

- Omezení na změnu objemu buněk při jednom časovém kroku, kde vzorec pro časový krok vypadá jako

$$\Delta t_V = C_V \min_c \left( \frac{V_c^n}{\left| \frac{dV_c^n}{dt} \right|} \right), \quad (2.3)$$

kde  $C_V$  je uživatelem zadaný koeficient a nabývá hodnot z intervalu  $(0, 1)$ .

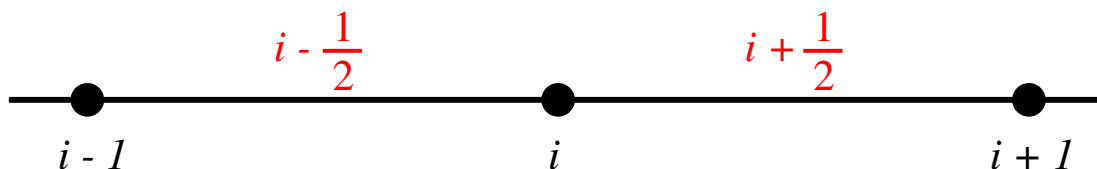
- Dodatečné omezení na prodloužení časového kroku mezi dvěma lagrangeovskými kroky. Tedy pro předchozí časový krok  $t^n$  a zavedené číslo  $C_m$ , které představuje dovolené zvětšení časového kroku, bereme

$$\Delta t_m = C_m \Delta t^n. \quad (2.4)$$

V závislosti na použitém lagrangeově (diskretizačním) schématu se zvolí určitá kombinace podmínek a vyhodnotí se konečná hodnota délky časového kroku  $\Delta t$ .

Podrobnější informace a další důležité součásti lagrangeovského kroku lze nalézt v [1].

Při dalším vysvětlení, pokud není označeno jinak, se budou používat hodnoty proměnných v časové rovině  $t^{n+1}$ , tedy hodnoty po lagrangeovském kroku, proto index časové roviny při popisu uvádět nebudeme.



Obrázek 2.1: Fragment 1D sítě: značení pro buňky a uzly.

## 2.2 Rezone a remap: jednodimenzionální popis

### 2.2.1 Rezone

Dalším krokem nepřímých cell-centered ALE metod je rezonování, což jinými slovy je proces vyhlazování (či obecně zlepšování kvality) sítě. Správná strategie rezonování by měla zachovat rozumnou geometrickou kvalitu sítě. Důležitým požadavkem je udržet rezonovanou síť co nejlépe Lagrangeově síti. Toto omezení je třeba vzít v úvahu, aby byla zachována přesnost výpočtu, kterou přináší Lagrangeova fáze. Požadavkem, aby se rezonovaná síť co nejvíce blížila síti po lagrangeovském kroku, ve skutečnosti snižujeme chybu fáze remapování a také umožňujeme použití tzv. *lokálního remapování*, při němž se hmotnost, hybnost a energie jednoduše vyměňují pouze mezi sousedními buňkami.

Přirozenou otázkou v tuto chvíli je, jak často musíme rezonování provádět. V jednodimenzionálním případě jsme se rozhodli krok rezonování provádět po předem určeném počtu časových kroků. Ve vícedimenzionálních případech se ale vyhlazování sítě většinou provádí po detekci určité míry deformace sítě.

Pro další popis v jednodimenzionálním prostoru zavedeme následující značení: pro každý uzel  $i$  označíme buňku vlevo, resp. vpravo jako  $i - \frac{1}{2}$ , resp.  $i + \frac{1}{2}$ , viz Obrázek 2.1.

Přejdeme k popisu použitých druhů rezonu. Pro 1D schéma byly implementovány následující typy:

- **Laplaceovské vyhlazování**, při němž je nová poloha uzlu zvolena na základě poloh sousedních vrcholů. Pro vnitřní uzly zde počítáme průměr z poloh tří uzlů:

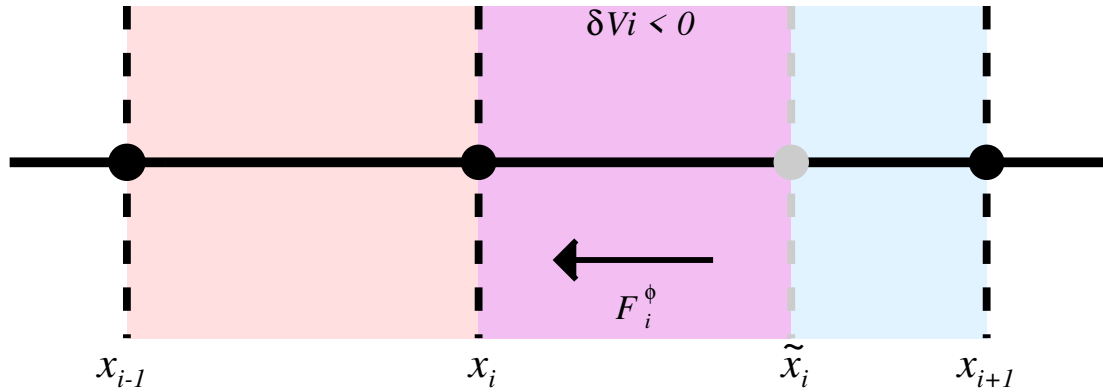
$$\tilde{x}_i = \frac{x_{i-1} + 2x_i + x_{i+1}}{4}, \quad (2.5)$$

kde  $\tilde{x}_i$  je poloha uzlu nové rezonované sítě.

Nejsou-li aplikovány periodické okrajové podmínky, necháváme polohy okrajových uzlů beze změny.

- **Eulerovský "pohyb" sítě**, při němž se všechny uzly sítě po lagrangeovském časovém kroku  $n + 1$  vracejí do poloh uzlů před ním, t.j.

$$\tilde{x}_i = x_i^n, \quad (2.6)$$



**Obrázek 2.2:** Fragment 1D sítě: objem průniku  $\delta V_i$  a remapovací tok  $F_i^\phi$ .

tím pádem při provádění rezonování v každém kroku během simulace síť vlastně zůstává "nehybná" (z hlediska celého cyklu ALE). Tento typ simulace je často označován jako "Lagrange + remap". Vizualizace ve dvoudimenzionálním prostoru je na Obrázku 2.4.

### 2.2.2 Remap

Posledním krokem nepřímé ALE metody je fáze remapování, kterou lze interpretovat jako konzervativní interpolaci fyzikálních proměnných mezi sítěmi vzniklou po lagrangeovském kroku a rezonovanou sítí. Interpolace se provádí pomocí tzv. toků. Toky v kontextu remapování označují vlastně přechod určitého množství fyzikální veličiny z jedné buňky do druhé v pozastaveném čase.

Zdefinujeme tedy tok přes určitý uzel. Tok přes  $i$ -tý uzel označíme jako  $F_i^\phi$  (z anglického Flux), kde  $\phi$  bude hustota fyzikální proměnné, pro kterou tok počítáme.

Pro výpočet těchto toků je potřeba najít průniky buněk a spočítat **objemy průníků**, které označíme  $\delta V_i$  (Obrázek 2.2). Důležité je zde dávat pozor na znaménko objemu, abychom se správně rozhodli v jakém směru by měl hledaný tok působit. V jednodimenzionálním prostoru je objem průniku jednoduchou úsečkou, a tedy se počítá přímočaře:

$$\delta V_i = x_i - \tilde{x}_i, \quad (2.7)$$

kde  $x_i$  je stará poloha uzlu po lagrangeovském kroku a  $\tilde{x}_i$  je poloha uzlu po provedení fáze rezonování. Tedy je-li  $\delta V_i$  záporné, tok míří z buňky  $i + \frac{1}{2}$ , která je od uzlu  $i$  napravo, do buňky  $i - \frac{1}{2}$  nalevo od uzlu. Je-li  $\delta V_i$  naopak kladné, určité množství materiálu přeteče z buňky nalevo do buňky napravo od uzlu (viz Obrázek 2.2).

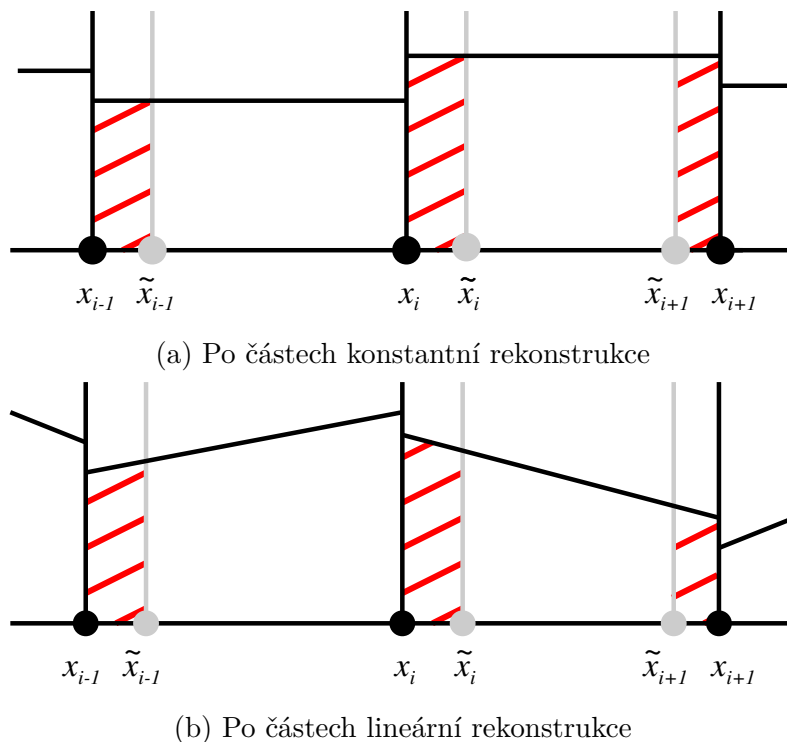
Proces remapování obvykle začíná hustotou, na jejímž příkladě další proces remapování ukážeme.

Obecně se samotný tok přes uzel počítá jako integrál hustoty přes příslušný objem průniku, t.j. pro tok hmoty přes  $i$ -tý uzel je

$$F_i^\rho = \int_{\delta V_i} \rho_j(x) dx, \quad (2.8)$$

kde  $\rho_j(x)$  představuje funkci rozložení hustoty v buňce  $j$ , ze které hmota přeteče, tedy

$$j = \begin{cases} i - \frac{1}{2} & \text{pro } \delta V_i > 0, \\ i + \frac{1}{2} & \text{pro } \delta V_i < 0. \end{cases} \quad (2.9)$$



**Obrázek 2.3:** Fragment sítě: vizualizace po částech konstantní a po částech lineární rekonstrukce.

Pro určení tohoto toku bychom potřebovali znát příslušnou funkci rozložení hustoty v objemu buňky, kterou ale přesně nevíme. Musíme proto tuto funkci nějakým způsobem rekonstruovat z diskrétních hodnot. V této bakalářské práci používáme dva nejjednodušší způsoby jak toto rozložení aproximovat (Obrázek 2.3):

- **po částech konstantní rekonstrukce** (tato metoda je občas označovaná jako "donor"), kde se předpokládá, že rozložení veličiny je v celém objemu buňky konstantní. Hustota v určitém místě buňky je pak přímo

$$\rho_{i+\frac{1}{2}}(x) = \rho_{i+\frac{1}{2}}. \quad (2.10)$$

Tok hmoty pro daný typ rekonstrukce v 1D počítáme jako

$$F_i^\rho = \frac{\delta V_i + |\delta V_i|}{2} \rho_{i-\frac{1}{2}} + \frac{\delta V_i - |\delta V_i|}{2} \rho_{i+\frac{1}{2}}. \quad (2.11)$$

- **po částech lineární rekonstrukce**, kde se předpokládá, že se rozložení veličiny může v rámci buňky měnit. Rozložení hustoty v buňce v jednodimenzionálním prostoru pak vypadá jako

$$\rho_{i+\frac{1}{2}}(x) = \rho_{i+\frac{1}{2}} + \left( \frac{\partial \rho}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2}} (x - x_{i+\frac{1}{2}}), \quad (2.12)$$

kde  $x_{i+\frac{1}{2}}$  je poloha středu buňky  $i + \frac{1}{2}$  a

$$\left( \frac{\partial \rho}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2}} = \Psi_{i+\frac{1}{2}}^\rho \left( \frac{\partial \rho}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2}}^{\text{unlim}}. \quad (2.13)$$

kde  $\Psi_{i+\frac{1}{2}}^\rho$  je tzv. limiter.

Derivaci  $\left( \frac{\partial \rho}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2}}^{\text{unlim}}$  (tedy směrnici rekonstrukční funkce v dané buňce) v 1D počítáme pomocí tzv. *metody nejmenších čtverců* (Least-squares minimization process, **LSQ**), o které podrobněji řekneme v další kapitole. Při remapování ale občas dochází k oscilacím. Abychom tomu zabránili, aplikujeme limiter na získané hodnoty derivací. V této práci používáme Barth-Jespersenův limiter [7]:

$$\Psi_{i+\frac{1}{2},j}^\rho = \begin{cases} \min \left( 1, \frac{\rho_{i+\frac{1}{2}}^{\max} - \rho_{i+\frac{1}{2}}}{\rho_{i+\frac{1}{2}}^{\text{unlim}}(x_j) - \rho_{i+\frac{1}{2}}} \right) & \text{pro } \rho_{i+\frac{1}{2}}^{\text{unlim}}(x_j) > \rho_{i+\frac{1}{2}} \\ \min \left( 1, \frac{\rho_{i+\frac{1}{2}}^{\min} - \rho_{i+\frac{1}{2}}}{\rho_{i+\frac{1}{2}}^{\text{unlim}}(x_j) - \rho_{i+\frac{1}{2}}} \right) & \text{pro } \rho_{i+\frac{1}{2}}^{\text{unlim}}(x_j) < \rho_{i+\frac{1}{2}} \\ 1 & \text{pro } \rho_{i+\frac{1}{2}}^{\text{unlim}}(x_j) = \rho_{i+\frac{1}{2}} \end{cases}, \quad (2.14)$$

$$\Psi_{i+\frac{1}{2}}^\rho = \min(\Psi_{i+\frac{1}{2},i}^\rho, \Psi_{i+\frac{1}{2},i+1}^\rho), \quad (2.15)$$

kde  $\rho_{i+\frac{1}{2}}^{\max}$ ,  $\rho_{i+\frac{1}{2}}^{\min}$  jsou maximální a minimální hodnoty hustoty v okolí buňky a  $\rho_{i+\frac{1}{2}}^{\text{unlim}}(x_j)$  představuje nelimitovanou rekonstrukci hustoty v uzlu s polohou  $x_j$ .

Výsledný tvar vzorce pro tok hmoty při po částech lineární rekonstrukci je pak

$$F_i^\rho = \frac{\delta V_i + |\delta V_i|}{2} \left( \rho_{i-\frac{1}{2}} + \left( \frac{\partial \rho}{\partial x} \right)_{i-\frac{1}{2}} (x_i^r - x_{i-\frac{1}{2}}) \right) + \frac{\delta V_i - |\delta V_i|}{2} \left( \rho_{i+\frac{1}{2}} + \left( \frac{\partial \rho}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2}} (x_i^r - x_{i+\frac{1}{2}}) \right), \quad (2.16)$$

kde  $x_i^r$  je střed průniku:

$$x_i^r = \frac{x_i + \tilde{x}_i}{2}. \quad (2.17)$$

Tedy, jak bylo naznačeno dříve, je-li znaménko objemu průniku  $\delta V_i$  kladné, pak se hmota opravdu bere z buňky nalevo od uzlu, zatímco je-li znaménko záporné, bere se z buňky napravo.

Vzorec pro remapovanou hodnotu hmotnosti pak má tvar

$$\tilde{m}_{i+\frac{1}{2}} = m_{i+\frac{1}{2}} + (F_i^\rho - F_{i+1}^\rho). \quad (2.18)$$

Analogicky, t.j. rovněž ve tvaru toků, se provede remapování ostatních zachovávaných se veličin z rovnic (1.1), tedy hybnosti a celkové energie.

V jednodimenzionálním prostoru vektor rychlosti má jednu složku, t.j.  $\mathbf{U} = u$ . Remapovaná rychlost je pak definována jako podíl remapované hybnosti a remapované hmotnosti:

$$\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{m_{i+\frac{1}{2}} u_{i+\frac{1}{2}} + (F_i^{\rho u} - F_{i+1}^{\rho u})}{\tilde{m}_{i+\frac{1}{2}}}. \quad (2.19)$$

Pro remapování energie existují dva způsoby její konzervativní rekonstrukce: rekonstrukce samotné energie s ohledem na hmotný střed, anebo standardní přístup, při němž se rekonstruuje součin energie s hustotou. Jak už bylo řečeno, v této práci používáme poslední z uvedených. Tím pádem remapovaná specifická celková energie má tvar

$$\tilde{E}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{m_{i+\frac{1}{2}} E_{i+\frac{1}{2}} + (F_i^{\rho E} - F_{i+1}^{\rho E})}{\tilde{m}_{i+\frac{1}{2}}}. \quad (2.20)$$

Dále musíme aktualizovat hodnoty hustoty a specifické vnitřní energie pro každou buňku:

$$\tilde{\rho}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\tilde{m}_{i+\frac{1}{2}}}{\tilde{V}_{i+\frac{1}{2}}}, \quad (2.21)$$

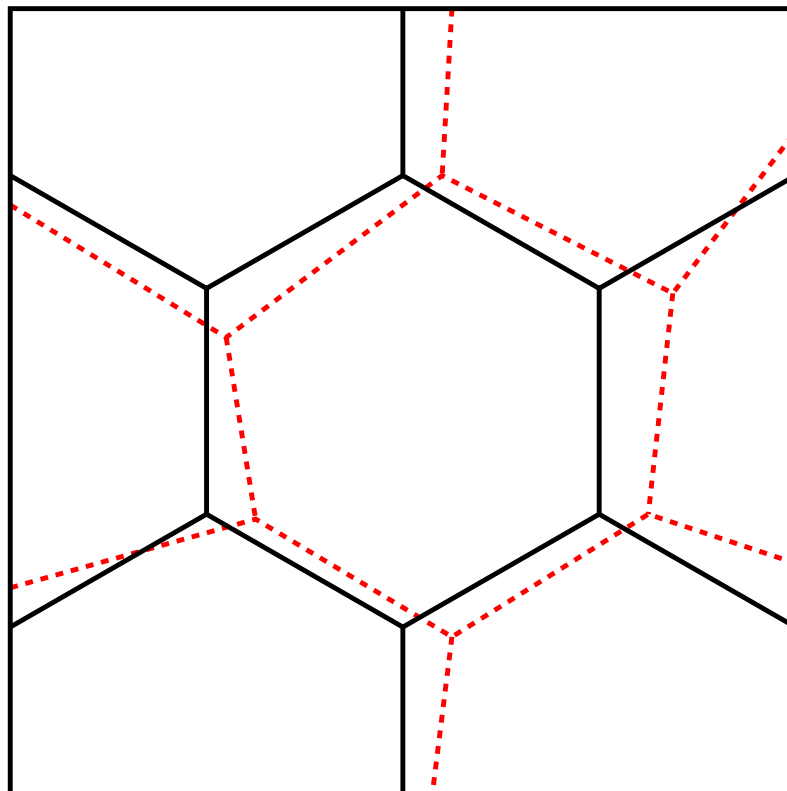
kde  $\tilde{V}_{i+\frac{1}{2}}$  je nový objem buňky, neboli objem po rezonu, a

$$\tilde{\varepsilon}_{i+\frac{1}{2}} = \tilde{E}_{i+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^2, \quad (2.22)$$

kde  $\tilde{\varepsilon}_{i+\frac{1}{2}}$  představuje výše zmíněnou specifickou vnitřní energii.

Nakonec pomocí stavové rovnice aktualizujeme hodnoty tlaku  $P$  a rychlosti zvuku  $\sigma$ .





**Obrázek 2.4:** Fragment sítě: vizualizace "Lagrange + remap" simulace. Černá čára představuje síť před lagrangeovským krokem a po rezonování, červená čárkovaná představuje síť po lagrangeovském kroku.

## 2.3 Rezone a remap: rozšíření do dvoudimenzionálního prostoru

Na základě všech informací uvedených v předchozí kapitole nyní můžeme rozšířit popis do dvoudimenzionálního prostoru. Vektor rychlosti zde označíme jako  $\mathbf{U} = (u, v)$ .

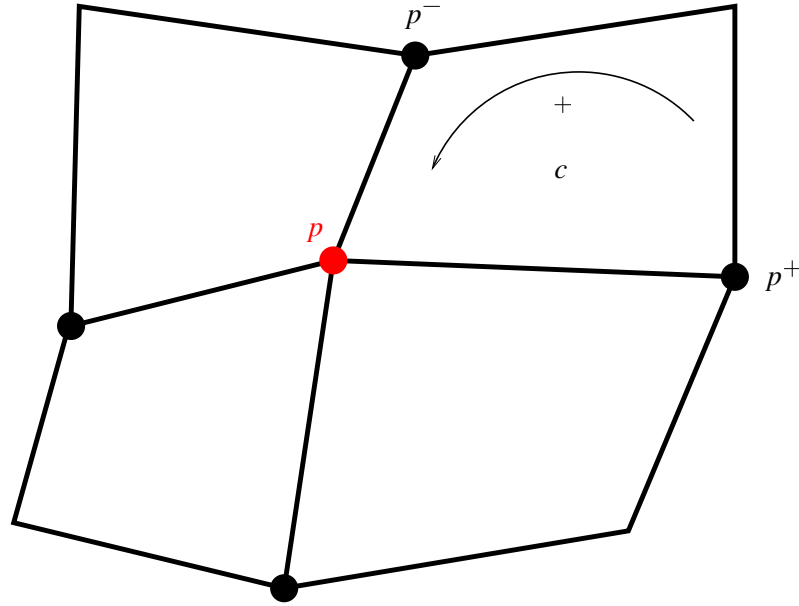
### 2.3.1 Rezone

V dané práci se omezíme na rezonování pomocí změny poloh uzlů, aniž bychom měnili konektivitu sítě. Pro zajímavost uvedeme, že existuje originální strategie rezonování, kde je umožněno měnit konektivitu sítě. Tento nový přístup poskytuje strategie ReALE (Reconnection-based Arbitrary Lagrangian-Eulerian) a je popsán v [6].

Ve 2D případě princip pohybu sítě pro "**Lagrange + remap**" (Obrázek 2.4) popsáný dříve zůstává stejný, pouze se provádí pro obě dvě, tedy  $x$ -ové a  $y$ -ové, složky poloh uzlů.

Druhý typ rezonování, který ve 2D kódu používáme, je rezonování založené na **optimalizaci míry hladkosti** (angl. condition number smoothing, **CN**).

V kontextu fixní topologie sítě si lze rezonování snadno představit jako optimalizační problém, kdy se minimalizuje určitý funkcionál kvality sítě. Funkcionál typicky obsahuje informace o hladkosti sítě, její ortogonalitě atd.



**Obrázek 2.5:** Fragment sítě: značení pro CN rezonování.

CN rezonování se skládá ze dvou hlavních kroků: vyhlazování sítě a její následné relaxace, cílem které je udržet rezonovanou síť co nejblíže k Lagrangeově síti. Vzhledem k charakteru této práce uvedeme pouze hlavní myšlenku, detailnější popis je k dispozici v [11].

Pro každý vnitřní uzel  $p$  sítě s vektorem polohy  $\mathbf{X}_p$  a každý úhel ("roh") u daného uzlu se určí následující  $p^+$  a předcházející  $p^-$  uzly vzhledem k  $p$  v seznamu vrcholů buňky  $c$  proti směru hodinových ručiček (Obrázek 2.5). Označíme-li seznam buněk, které mají společný uzel  $p$ , jako  $C(p)$ , a seznam vrcholů ("rohů")  $q$  buňky  $c$ , které jsou připojeny k  $p$  (včetně samotného  $p$ ), jako  $Q_c(p)$ , dostaneme funkcionál příslušný danému uzlu  $p$ :

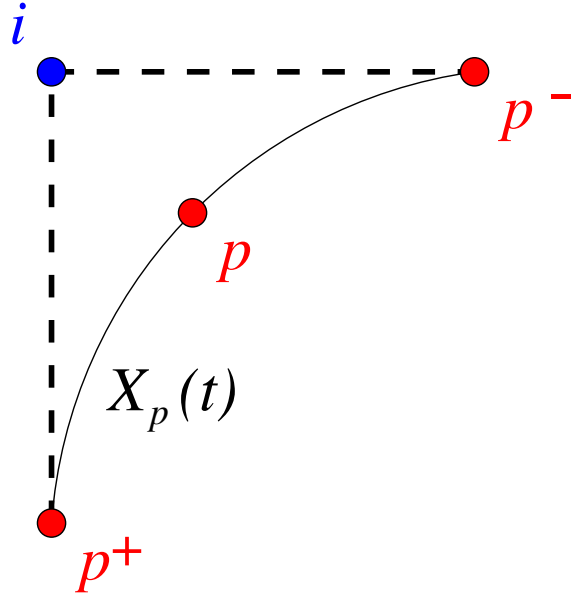
$$F_p(\mathbf{X}_p) = \sum_{c \in C(p)} \sum_{q \in Q_c(p)} \kappa(J_{cpq}), \quad (2.23)$$

kde  $J_{cpq}$  je Jakobián příslušející vrcholu  $q$  u uzlu  $p$  buňky  $c$  a

$$\kappa(J_{cpq}) = \frac{\|\mathbf{X}_{cpq_+} - \mathbf{X}_{cpq}\|^2 + \|\mathbf{X}_{cpq_-} - \mathbf{X}_{cpq}\|^2}{|(\mathbf{X}_{cpq_+} - \mathbf{X}_{cpq}) \times (\mathbf{X}_{cpq_-} - \mathbf{X}_{cpq})|}. \quad (2.24)$$

Hodnota funkcionálu  $F_p(\mathbf{X}_p)$  tedy slouží jako indikátor hladkosti v okolí uzlu  $p$ . Minimalizací tohoto funkcionálu (přesněji řečeno snížením jeho hodnoty pomocí jednoho kroku Newtonova algoritmu) se pak vypočítá rezonovaná poloha vrcholu.

Pro okrajové uzly se funkcionál vypočítá pomocí parametrizace tak, aby hledaný bod ležel na Bézierově křivce dané jeho sousedy, které jsou rovněž hraničními uzly (Obrázek 2.6). Kontrolní bod  $i$  je zde volen tak, aby původní uzel  $p$  také ležel na této Bézierově křivce.



**Obrázek 2.6:** Fragment sítě: značení pro rezonování okrajového uzlu pomocí Bézierovy křivky,  $i$  je kontrolní bod.

Relaxační koeficient pro každý rezonovaný uzel se určí pomocí vlastních hodnot tzv. pravého Cauchy-Greenova deformačního tenzoru a vypadá následovně:

$$\omega_p = 1 - \frac{\alpha_p - \alpha_{\min}}{1 - \alpha_{\min}}, \quad (2.25)$$

kde  $\alpha_p = \frac{\lambda_{1,p}}{\lambda_{2,p}}$ ,  $\alpha_{\min} = \min_p \alpha_p$ ,  $\lambda_{1,p}$  a  $\lambda_{2,p}$  jsou vlastní hodnoty tenzoru s konvencí  $\lambda_1 \leq \lambda_2$ ,  $\omega_p \in [0, 1]$ .

Konečná nová poloha uzlu je pak spočtena jako kombinace mezi jeho rezonovanou polohou získanou z výše popsané metody a jeho polohou na konci Lagrangeovy fáze:

$$\tilde{\mathbf{X}}_{\mathbf{p}}^{\text{relax}} = \mathbf{X}_{\mathbf{p}} + \omega_p(\tilde{\mathbf{X}}_{\mathbf{p}} - \mathbf{X}_{\mathbf{p}}), \quad (2.26)$$

kde  $\mathbf{X}_{\mathbf{p}}$  je poloha vrcholu  $p$  na konci Lagrangeovy fáze a  $\tilde{\mathbf{X}}_{\mathbf{p}}$  je jeho rezonovaná poloha odpovídající CN vyhlazení. Tímto postupem je zajištěno, že se vyhlazování soustředí pouze na oblasti, kde během Lagrangeovy fáze docházelo k velkým deformacím.

Popsaný algoritmus používá jednu Newtonovu iteraci a Cauchy-Greenův tenzor, fázi rezonování při daném přístupu provádíme každý krok.

### 2.3.2 Remap

Přejdeme k rozšíření metod použitých při popisu remapování v jednodimenzionálním prostoru do dvoudimenzionálního. Filozofie rozložení skalárních veličin v buňkách při po částech konstantní rekonstrukci zde zůstává stejná, t.j.

$$\phi_c(x, y) = \phi_c. \quad (2.27)$$

Při po částech lineární rekonstrukci ve 2D případě přibývá závislost rozložení veličiny v rámci buňky na druhém, tedy na  $y$ -ovém, směru. Rekonstrukce veličiny  $\phi$  pro buňku  $c$  v určitém bodě dvoudimenzionálního prostoru pak vypadá následovně:

$$\phi_c(x, y) = \phi_c + \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_c (x - x_c) + \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_c (y - y_c), \quad (2.28)$$

kde  $x_c$  a  $y_c$  jsou souřadnice středu buňky  $c$ .

Derivace veličin zde počítáme dvěma způsoby. První způsob, který, jak bylo předesláno v minulé sekci, zde popíšeme, je **metoda nejmenších čtverců**, neboli metoda založená na minimalizaci určitého funkcionalu, který sleduje míru rozdílu daných hodnot veličin v okolních buňkách od nelimitovaných rekonstruovaných hodnot extrapolovaných do středů těchto buněk:

$$\begin{aligned} F \left( \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_c^{\text{unlim}}, \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_c^{\text{unlim}} \right) &= \sum_{c' \in c(c)} \left( \phi_{c'} - \phi_c^{\text{unlim}}(x_{c'}, y_{c'}) \right)^2 = \\ &= \sum_{c' \in c(c)} \left( \phi_{c'} - \phi_c - \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_c^{\text{unlim}} (x_{c'} - x_c) - \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_c^{\text{unlim}} (y_{c'} - y_c) \right)^2, \end{aligned} \quad (2.29)$$

kde  $c(c)$  je množina sousedů buňky  $c$  přes všechny hrany a uzly.

Chceme najít minimum daného funkcionalu, tedy aby rekonstruovaná funkce rozložení byla co nejbliž reálné funkci. Hledáme tedy  $\left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_c^{\text{unlim}}$  a  $\left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_c^{\text{unlim}}$  takové, aby platilo

$$\frac{\partial F \left( \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_c^{\text{unlim}}, \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_c^{\text{unlim}} \right)}{\partial \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_c^{\text{unlim}}} = 0, \quad (2.30)$$

$$\frac{\partial F \left( \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_c^{\text{unlim}}, \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_c^{\text{unlim}} \right)}{\partial \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_c^{\text{unlim}}} = 0. \quad (2.31)$$

Vyřešením daných rovnic dostaneme následující lineární systém:

$$\begin{pmatrix} a_{xx} & a_{xy} \\ a_{xy} & a_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_c^{\text{unlim}} \\ \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_c^{\text{unlim}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_x \\ b_y \end{pmatrix}, \quad (2.32)$$

kde

$$b_x = \sum_{c' \in C(c)} (x_{c'} - x_c)(\phi_{c'} - \phi_c), \quad (2.33)$$

$$b_y = \sum_{c' \in C(c)} (y_{c'} - y_c)(\phi_{c'} - \phi_c), \quad (2.34)$$

$$a_{xx} = \sum_{c' \in C(c)} (x_{c'} - x_c)(x_{c'} - x_c), \quad (2.35)$$

$$a_{xy} = \sum_{c' \in C(c)} (x_{c'} - x_c)(y_{c'} - y_c), \quad (2.36)$$

$$a_{yy} = \sum_{c' \in C(c)} (y_{c'} - y_c)(y_{c'} - y_c). \quad (2.37)$$

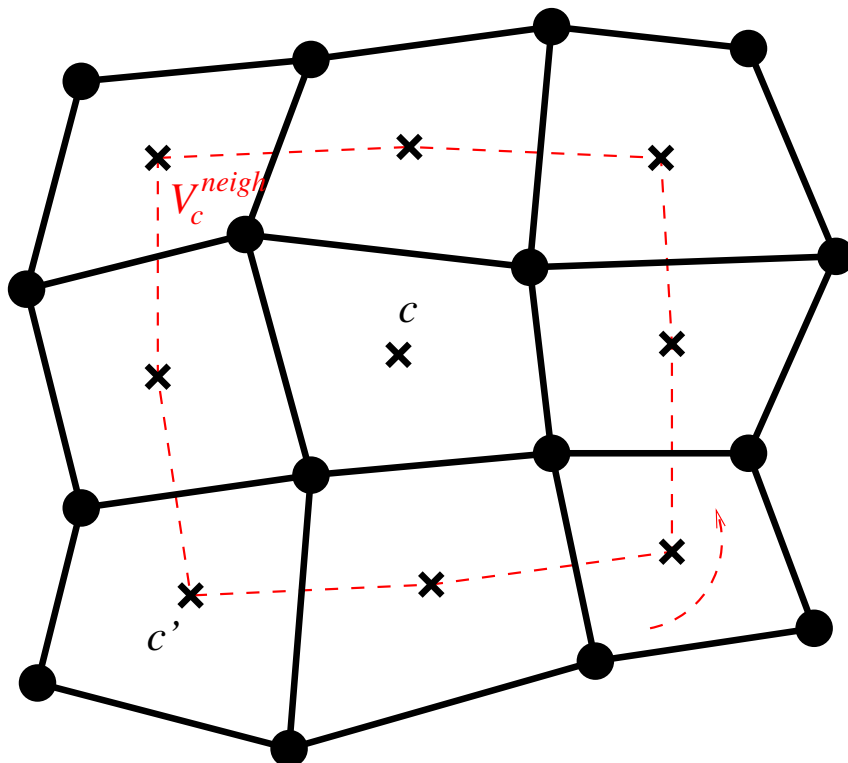
Požadované hodnoty derivací určíme řešením rovnic

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_c^{\text{unlim}} = \frac{1}{D}(b_x a_{yy} - b_y a_{xy}), \quad (2.38)$$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial y}\right)_c^{\text{unlim}} = \frac{1}{D}(b_y a_{xx} - b_x a_{xy}), \quad (2.39)$$

$$D = a_{xx} a_{yy} - a_{xy}^2. \quad (2.40)$$

Případ kdy se  $D$  blíží nule je v našem kódu ošetřen tak, že je-li hodnota  $D$  menší, než akceptovaná hodnota  $\epsilon_D$ , položíme  $D = \text{sgn}(D)\epsilon_D$ , čímž se vyhneme nule a zachováme znaménko pro správnost výpočtu.



Obrázek 2.7: Fragment sítě: značení pro výpočet průměrné derivace v okolí.

Druhým způsobem výpočtu derivací, který byl implementován do kódu, je **průměrná derivace v okolí**. Zde, jak přirozeně vyplývá z názvu metody, se derivace průměruje přes objem okolí  $V_c^{\text{neigh}}$ , který je definován spojením středů okolních buněk jako na Obrázku 2.7. Nelimitované derivace pro směry  $x$  a  $y$  pak mají tvar

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_c^{\text{unlim}} = \frac{\oint_{\delta V_c^{\text{neigh}}} \phi \, dy}{|V_c^{\text{neigh}}|}, \quad (2.41)$$

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)_c^{\text{unlim}} = -\frac{\oint_{\delta V_c^{\text{neigh}}} \phi \, dx}{|V_c^{\text{neigh}}|}, \quad (2.42)$$

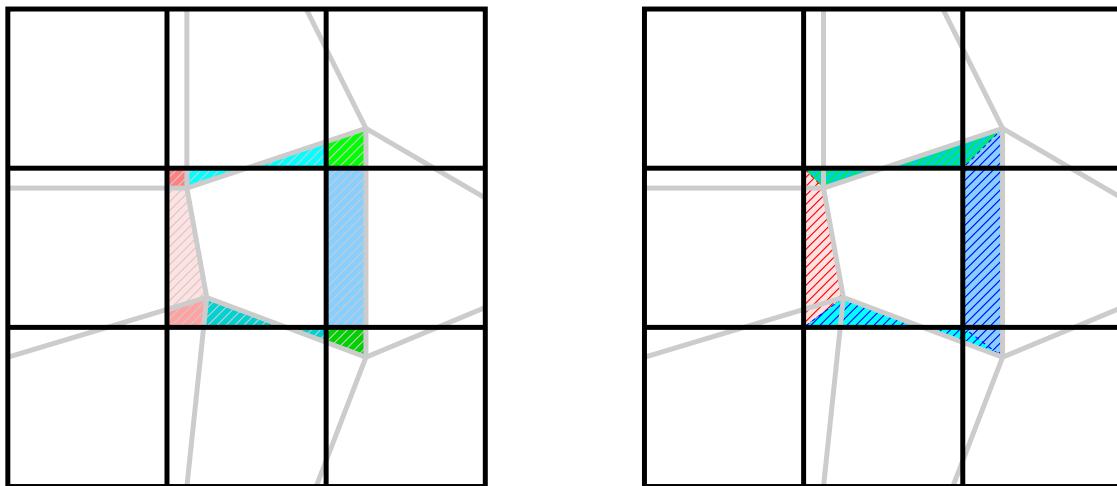
kde  $\delta V_c^{\text{neigh}}$  je hranice objemu  $V_c^{\text{neigh}}$ .

Podrobnější popis této metody pro výpočet derivace veličiny lze nalézt v [5].

Derivace veličin se limituje po složkách analogicky tomu jak bylo uvedeno v minulé sekci, tedy pomocí skalárního Barth-Jespersenova limiteru (2.14).

Jelikož objemy průniků už nejsou pouze úsečky jak tomu bylo v 1D případě, ale opravdové plochy dané hranami buněk, vysvětlíme podrobněji jak se dané objemy vypočítávají.

Pro výpočet objemů průniků se obecně používají dvě metody (znázorněné na Obrázku 2.8):

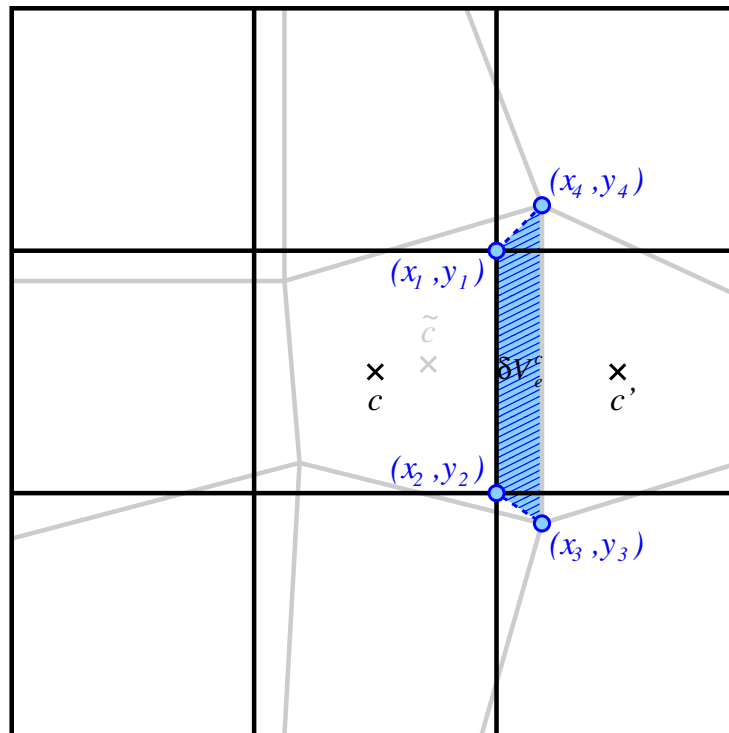


**Obrázek 2.8:** Intersection based metoda (nalevo) a swept based metoda (napravo).

- exaktní numerická integrace, neboli anglicky tzv. **intersection based method**, při níž se pro danou rezonovanou buňku přesně vypočítávají její průniky s buňkami Lagrangeovy sítě. Tato metoda je dost nákladná, protože vyžaduje přesný výpočet všech průsečíků mezi hranami všech buněk. Dokáže se ale vypořádat se sítěmi, které mají zcela odlišnou konektivitu,
- **swept based method**, která je založena na výpočtu objemu tvořeného starou a novou polohou hrany buňky. Tato metoda je poměrně levná, protože nevyžaduje přesné hledání průniků mezi starými a novými buňkami a nebere v úvahu sousedy přes vrcholy. Její použití je však omezeno na sítě se stejnou

konektivitou. Vzhledem k tomu, že v bakalářské práci využíváme typy rezonování zachovávající konektivitu sítě, pro výpočet průníků byla zvolena tato konkrétní metoda, již si podrobněji popíšeme níže.

Pro další popis je potřeba zavést dodatečné značení v rámci buněk (viz Obrázek 2.9). Pro buňku  $c$  označme jí odpovídající rezonovanou buňku jako  $\tilde{c}$ . Zavádíme zde pojem hrany, kterou značíme jako  $e$  (angl. edge) a pojem souseda  $c'$  přes hranu  $e$ . Objem průniku (angl. swept area) buňky  $c$  se sousedem  $c'$  přes hranu  $e$  označíme jako  $\delta V_e^c$ . Množinu všech hran buňky  $c$  označíme  $E(c)$ . Okolí buňky  $c$ , neboli množinu jejích sousedů  $c'$  přes všechny hrany, označíme  $C(c)$ .



**Obrázek 2.9:** Fragment sítě: značení pro objem průniku (swept area) ve 2D.

Logika přiřazení znaménka objemu průniku zůstává stejná jako při popisu jednodimenzionálního případu, tedy jestliže byla hrana posunuta "ven" z příslušné buňky, pak má objem průniku kladné znaménko vzhledem k dané buňce a remapovaný materiál se bere ze sousední buňky (přes hranu  $e$ ), jestliže naopak byla posunuta "dovnitř", pak má záporné znaménko a materiál "uteče" z dané buňky do sousední.

Tok  $F_{c_e}^\phi$  přes hranu  $e$  buňky  $c$  se analogicky 1D případu vypočítá jako integrál z rozložení po celém objemu průniku:

$$F_{c_e}^\phi = \int_{\delta V_e^c} \phi_{c^*}(x, y) dx dy, \quad (2.43)$$

kde  $c^*$  značí buňku, ze které se materiál bere, tedy

$$c^* = \begin{cases} c' & \text{pro } \delta V_e^c > 0, \\ c & \text{pro } \delta V_e^c < 0. \end{cases} \quad (2.44)$$

Pro po částech konstantní rekonstrukci (2.27) je postup dostatečně přímočarý. Jelikož rozložení veličiny v prostoru buňky je konstantní, hodnota toku v konkrétní buňce se vypočte jako

$$F_{c_e}^\phi = \delta V_e^c \phi_{c^*}. \quad (2.45)$$

Objem průniku  $\delta V_e^c$  (swept regionu) je tvořen "starou" a "novou" polohou hrany  $e$ . Označíme  $e_1 = [(x_1, y_1), (x_2, y_2)]$  pomocí souřadnic okrajových bodů určujících "starou" polohu hrany, respektive  $e_2 = [(x_4, y_4), (x_3, y_3)]$  pomocí souřadnic okrajových bodů "nové" polohy (viz Obrázek 2.9). Vzorec pro výpočet velikosti objemu průsečíku pak vypadá jako

$$\begin{aligned} \delta V_e^c = \int_{\delta V_e^c} 1 \, dx \, dy = & \frac{1}{2} ((y_1 + y_2)(x_2 - x_1) + (y_2 + y_3)(x_3 - x_2) + \\ & + (y_3 + y_4)(x_4 - x_3) + (y_4 + y_1)(x_1 - x_4)). \end{aligned} \quad (2.46)$$

V případě po částech lineární rekonstrukce (2.28) je výpočet o trochu složitější. Vzorec pro výpočet toku  $F_{c_e}^\phi$  přes hranu  $e$  buňky  $c$  vypadá následujícím způsobem:

$$\begin{aligned} F_{c_e}^\phi &= \int_{\delta V_e^c} \phi_{c^*}(x, y) \, dx \, dy = \\ &= \int_{\delta V_e^c} \left( \phi_{c^*} + \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{c^*} (x - x_{c^*}) + \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_{c^*} (y - y_{c^*}) \right) \, dx \, dy, \end{aligned} \quad (2.47)$$

což můžeme přepsat jako

$$\begin{aligned} F_{c_e}^\phi &= \left( \phi_{c^*} - \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{c^*} x_{c^*} - \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_{c^*} y_{c^*} \right) \int_{\delta V_e^c} 1 \, dx \, dy + \\ &+ \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{c^*} \int_{\delta V_e^c} x \, dx \, dy + \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_{c^*} \int_{\delta V_e^c} y \, dx \, dy, \end{aligned} \quad (2.48)$$

kde integrál z jedničky je přímo objem průniku  $\delta V_e^c$  (2.46). Integrály z  $x$  a  $y$  přes  $\delta V_e^c$  s výše předpokládanými polohami okrajových bodů hran mají následující vzorce:

$$\begin{aligned} \int_{\delta V_e^c} x \, dx \, dy = & \frac{1}{6} ((y_2 - y_1)(x_1^2 + x_1 x_2 + x_2^2) + (y_3 - y_2)(x_2^2 + x_2 x_3 + x_3^2) \\ & + (y_4 - y_3)(x_3^2 + x_3 x_4 + x_4^2) + (y_1 - y_4)(x_4^2 + x_1 x_4 + x_1^2)), \end{aligned} \quad (2.49)$$

$$\begin{aligned} \int_{\delta V_e^c} y \, dx \, dy = & \frac{1}{6} ((x_1 - x_2)(y_1^2 + y_1 y_2 + y_2^2) + (x_2 - x_3)(y_2^2 + y_2 y_3 + y_3^2) \\ & + (x_3 - x_4)(y_3^2 + y_3 y_4 + y_4^2) + (x_4 - x_1)(y_4^2 + y_1 y_4 + y_1^2)). \end{aligned} \quad (2.50)$$



Nyní máme tok veličiny  $\phi$  přes hranu  $e$  a konečně přejdeme k samotnému remapování veličin. Jelikož jsme ve dvoudimenzionálním prostoru, musíme uvažovat, že rychlost zde je vektorová veličina a má dvě složky. Pro zjednodušení bylo rozhodnuto provádět její remapování po složkách, což vlastně znamená, že pro jednotlivé složky používáme stejný přístup jako pro ostatní skalární veličiny.

Proces remapování opět začneme hustotou, pak vypočteme nové složky rychlosti  $\mathbf{U} = (u, v)$  a novou energii. To provedeme úplně analogicky jednodimenzionálnímu případu. Dostaneme

$$\tilde{\rho}_c = \frac{\tilde{m}_c}{\tilde{V}_c} = \frac{m_c + \sum_{e \in E(c)} F_{c_e}^\rho}{\tilde{V}_c}, \quad (2.51)$$

$$\tilde{u}_c = \frac{m_c u_c + \sum_{e \in E(c)} F_{c_e}^{\rho u}}{\tilde{m}_c}, \quad (2.52)$$

$$\tilde{v}_c = \frac{m_c v_c + \sum_{e \in E(c)} F_{c_e}^{\rho v}}{\tilde{m}_c}, \quad (2.53)$$

$$\tilde{E}_c = \frac{m_c E_c + \sum_{e \in E(c)} F_{c_e}^{\rho E}}{\tilde{m}_c}. \quad (2.54)$$

Při výpočtu nové specifické vnitřní energie nesmíme ale opět zapomenout na vektorovou podstatu rychlosti, tedy pro remapovanou hodnotu rychlosti  $\tilde{\mathbf{U}}_c = (\tilde{u}_c, \tilde{v}_c)$  dostáváme

$$\tilde{\varepsilon}_c = \tilde{E}_c - \frac{1}{2} \tilde{u}_c^2 - \frac{1}{2} \tilde{v}_c^2 \quad (2.55)$$

Příklady dalších technik pro remapování (i pro multimateriálové případy) jsou k nahlédnutí např. v [3, 10].

# Kapitola 3

## Implementace

Další text je věnován vlastnímu simulačnímu programu. Popíšeme zde hlavní důvody pro výběr jazyka a jeho výhody pro danou práci, uvedeme některé aspekty, které se vztahují přímo k implementaci fází rezonování a remapování a popíšeme celkový běh simulačního programu.

### 3.1 Volba jazyka

Při výběru programovacího jazyka pro psaní kódu v bakalářské práci bylo pečlivě zvažováno několik možností a nakonec byl za jazyk programování zvolen **Fortran**. **Fortran** (zkratka pro "**F**ormula **T**ranslation"), je vysokoúrovňový programovací jazyk s dlouholetou historií vývoje a použití ve vědeckých a technických aplikacích.

Pro psaní kódu byla zvolena verze jazyka **Fortran 90**, která oproti starším verzím, jako například **Fortran 77**, má několik zjevných výhod. Jedním z důležitých přínosů pro danou práci bylo zavedení odvozených datových typů, které umožňují předávat pole s hodnotami všech proměnných jednotlivým částem kódu bez nutnosti výpisu proměnných.

**Fortran** je také významný kompatibilitou s předchozími verzemi, tedy umožňuje bezproblémovou integraci se stávajícím starším kódem. Dovoluje také volání funkcí z knihoven napsaných v jiných jazycích, například v jazycích C nebo C++, což umožňuje opětovné využití cenných zdrojů kódu a podporuje spolupráci v rámci různých, často i internacionálních, projektů.

Pro samotnou implementaci (jak v 1D, tak i ve 2D) jsme si vystačili pouze s vestavěnými funkcemi **Fortranu**, tedy nebyla žádná potřeba využití externích knihoven.

Jelikož jedním z úkolů práce bylo rozdělit kód do modulů, pro potřeby rezonování a remapování byly příslušné moduly vytvořeny.

## 3.2 Simulační program

Samotný program lze rozdělit na tři fáze:

- **Inicializace**, neboli definování úlohy, kterou budeme počítat. Tedy z příslušného vstupního souboru se načtou proměnné nezbytné pro přípravu domény (jako např. rozměry), počáteční a okrajové podmínky, a zároveň parametry, které se týkají konkrétně výpočtu (volba schématu, režimu a řádu přesnosti výpočtu, délka časového kroku, CFL koeficient, typy rezonu a remapu).

Vzhledem k tomu, že metody rezonu a remapu byly implementovány s ohledem na možnost jejich použití pro výpočty na nestrukturovaných sítích, existuje v našem kódu možnost volby simulace na různých sítích: na kartézské či polární síti, která je generována na začátku simulace, nebo na trojúhelníkových a jiných obecně polygonálních sítích, které jsou načteny ze souboru.

Jakmile se úloha načte a nastaví se parametrické proměnné, program je připraven k následujícímu kroku.

- **Výpočet**, jehož hlavní součástí je cyklus, který postupně aplikuje lagrangeovský krok, fázi rezonování a fázi remapování dle potřeby. V průběhu této fáze se ošetřuje správnost výpočtu a jeho případné selhání. Cyklus běží, dokud program nedojde do předepsaného konečného času.
- **Ukládání výsledků a jejich vizualizace**. Pro zaznamenání výsledku je na začátku simulace uložena konektivita a ve finálním čase jsou generovány příslušné soubory, obsahující polohy uzlů a hodnoty proměnných v každé buňce. Pro vizualizaci výsledků 2D simulace v rámci této práce se používá MATLAB. Z uložených souborů se načtou požadovaná data (tedy hodnoty odpovídající určité fyzikální veličině) a vykreslí se samotná síť pomocí barevného grafu. Osy reprezentují prostorové souřadnice a hodnoty vybrané veličiny jsou zobrazeny v každé buňce barevným gradientem.

Druhou možností vizualizace jsou tzv. scatterploty, které jsou často používány pro zobrazení výsledků sféricky nebo cylindricky symetrických testů. Skript pro scatterploty byl napsán v jazyce Python.

# Kapitola 4

## Numerické výsledky

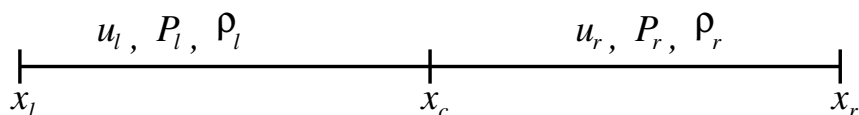
Funkčnost simulačního programu jsme ověřovali pomocí série klasických numerických testů na různých typech sítí (strukturovaných a nestrukturovaných) se všemi možnými kombinacemi metod rezonování a remapování. V následujícím textu uvedeme vybrané výsledky numerických problémů: Sodova, Vilarova, Sedovova a Novhova. Všechny číselné hodnoty jsou uvedeny v jednotkové soustavě CGS.

### 4.1 Sodův problém

První hydrodynamická testovací úloha je tzv. Sodův problém, nebo Sodova trubice. Jde v podstatě o 1D Riemannův problém, který popisuje dva konstantní stavy plynu oddělené přepážkou uprostřed trubice, viz Obrázek 4.1. Ve 2D se tento test provádí podél jednoho ze souřadných směrů, tedy ve druhém směru je stav konstantní. Počáteční podmínky jsou:

	left	right
$\rho_0$	1,0	0,125
$P_0$	1,0	0,1
$u_0$	0	0

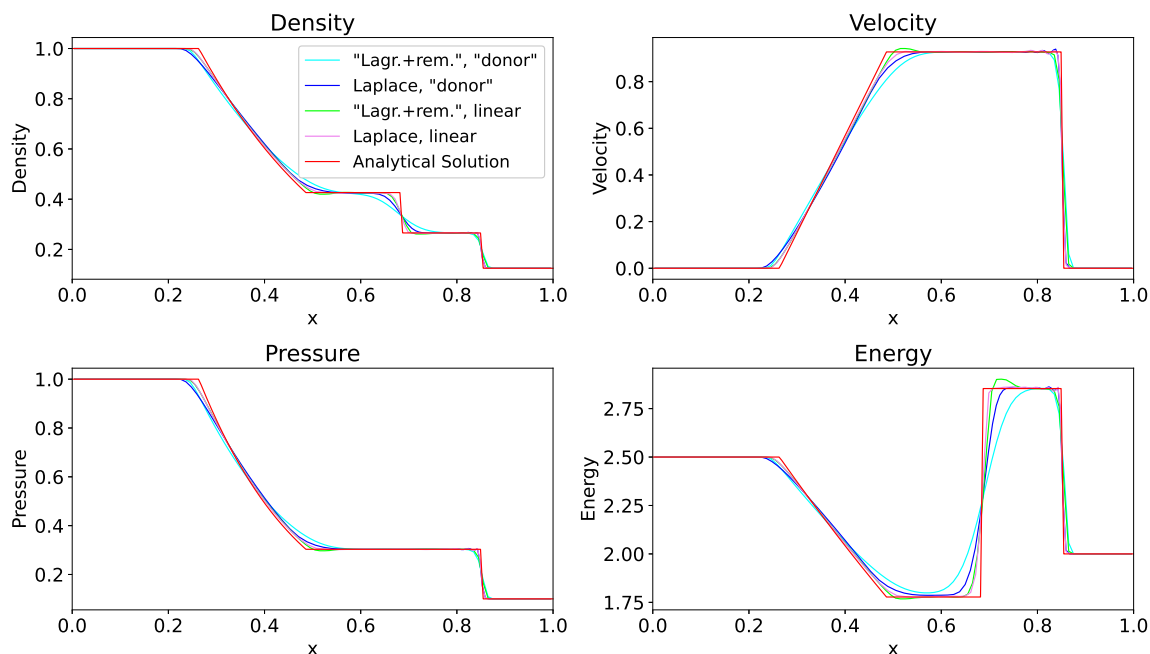
Výpočetní doménu volíme  $\langle x_l; x_r \rangle = \langle 0; 1 \rangle$  (někdy se používá  $\langle x_l; x_r \rangle = \langle -0,5; 0,5 \rangle$ ).  $x_c$  je střed domény, tedy  $x_c = \frac{x_l + x_r}{2}$ . Adiabatická konstanta je zde pro oba dva stavy  $\gamma = 1,4$ . Konečný čas pro daný test je  $t^{\text{fin}} = 0,2$ .



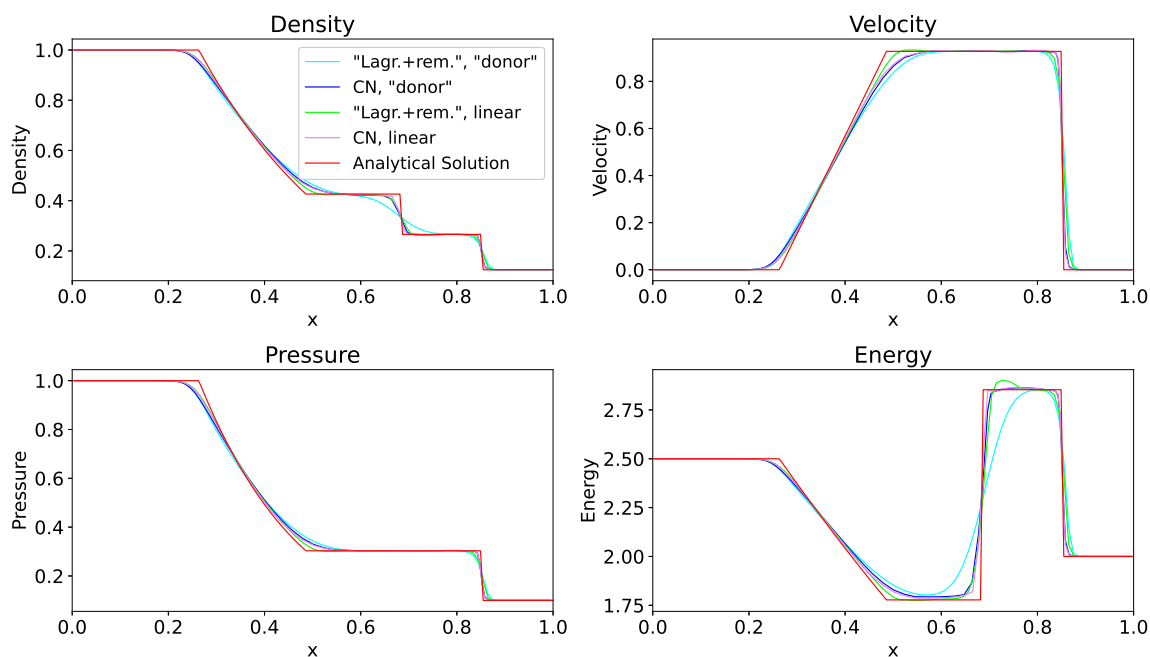
Obrázek 4.1: Počáteční podmínky pro Sodův test.

Sodův test byl proveden na sítích různých rozměrů, zde ale uvádíme výsledky pro srovnání dříve popsanych metod rezonování a remapování na síti složené ze 100 buněk pro 1D simulaci (Obrázek 4.2) a na kartézské síti  $100 \times 2$  pro 2D simulaci (Obrázek 4.3).

Jak je vidět z obrázků, "donor" remapování je více difúzní, zatímco lineární remapování poskytuje ostřejší rozlišení nespojitostí, i když se občas objevují malé oscilace nebo přestřely.



Obrázek 4.2: Sodův test, výsledky pro 1D kód.



Obrázek 4.3: Sodův test, výsledky pro 2D kód (1D řez).

## 4.2 Vilarův problém

Vilarův test [13] je hladký 1D testovací problém s konstantní hustotou narušenou sinusovým signálem  $\rho_0(x) = 1 + 0,1 \sin(2\pi x)$ , s počátečním tlakem daným izotropickým vztahem  $P_0(x) = \rho_0^\gamma$ , s adiabatickou konstantou  $\gamma = 3$  a nulovou počáteční rychlostí  $u_0(x) = 0$ . Počáteční výpočetní doména pro daný problém je  $\langle 0; 1 \rangle$  a konečný čas je  $t^{\text{fin}} = 0,8$ . Na tento test aplikujeme periodické okrajové podmínky.

Na Vilarově testu zde ukážeme vliv implementovaných metod remapování na přesnost výpočtu a rychlost konvergence pro postupně zjemňované sítě za použití simulace "Lagrange + remap". Poznamenejme, že hladkost problému umožňuje zkoumání konvergence bez použití limiterů.

Konvergence hustoty pro simulaci za použití lagrangeovského schématu 2. řádu při čistě lagrangeovském výpočtu, při "donor" remapu, resp. lineárním remapu je vidět v Tabulkách 4.1, 4.2, resp. 4.3.  $L_1, L_2, L_\infty$  je zde absolutní chyba ve stejnojmenných normách,  $q_1, q_2$  a  $q_\infty$  jsou pak příslušné numerické řády konvergence. Ukazuje se zde, že "donor" remapování sníží řád výpočtu na první, zatímco lineární remapování druhý řád přesnosti daný lagrangeovským krokem zachová. Ilustrace konvergence pro hustotu je na Obrázcích 4.4 a 4.5.

mesh	$L_1$	$q_1$	$L_2$	$q_2$	$L_\infty$	$q_\infty$
40	2.76e-03	N/A	4.51e-03	N/A	1.52e-02	N/A
80	8.88e-04	1.64	1.97e-03	1.19	9.26e-02	0.71
160	2.72e-04	1.71	7.29e-03	1.43	4.34e-03	1.09
320	7.35e-05	1.89	2.31e-04	1.66	1.70e-03	1.35
640	1.84e-05	2.00	6.32e-05	1.87	5.40e-04	1.65
1280	4.51e-06	2.03	1.60e-05	1.98	1.45e-04	1.90
2560	1.12e-06	2.01	4.00e-06	2.00	3.67e-05	1.98
5120	2.79e-07	2.00	9.97e-07	2.00	9.18e-06	2.00

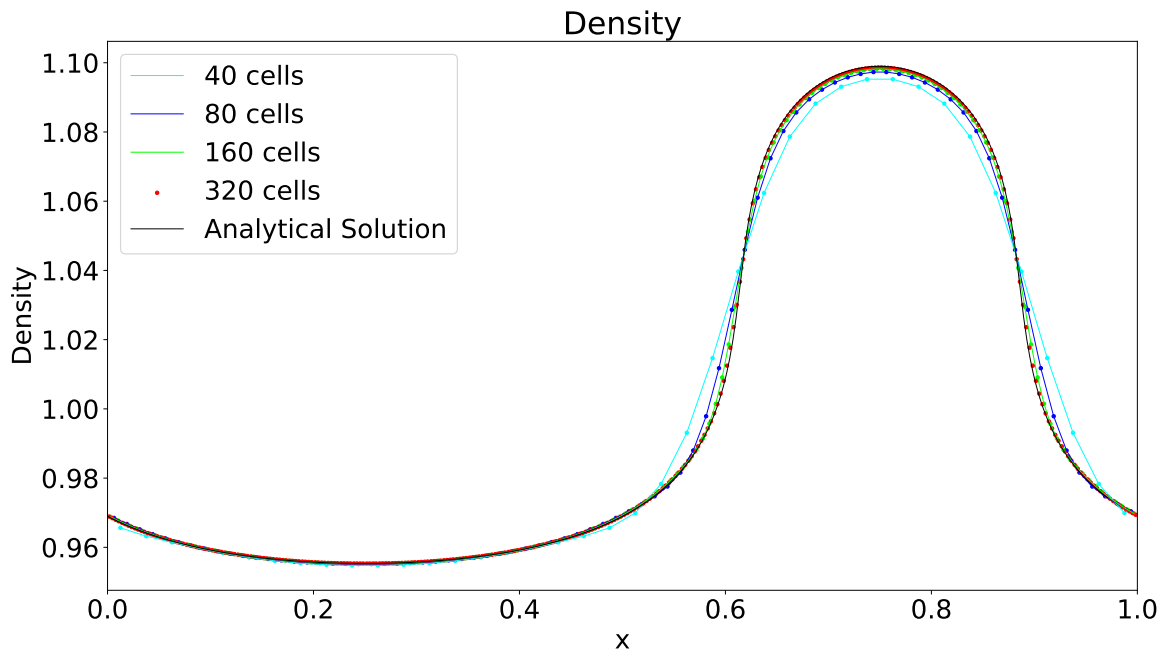
**Tabulka 4.1:** Konvergence hustoty pro hladký Vilarův test za použití lagrangeovského výpočtu pomocí schématu 2. řádu.

mesh	$L_1$	$q_1$	$L_2$	$q_2$	$L_\infty$	$q_\infty$
40	3.64e-03	N/A	5.77e-03	N/A	1.76e-02	N/A
80	1.46e-03	1.32	2.80e-03	1.04	1.06e-02	0.73
160	6.66e-04	1.13	1.23e-03	1.19	5.62e-03	0.92
320	3.09e-04	1.11	5.24e-04	1.23	2.67e-03	1.07
640	1.49e-04	1.05	2.31e-04	1.18	1.07e-03	1.32
1280	7.27e-05	1.04	1.08e-04	1.10	4.30e-04	1.32
2560	3.60e-05	1.01	5.30e-05	1.02	1.95e-04	1.14
5120	1.80e-05	1.00	2.64e-05	1.01	9.55e-05	1.03

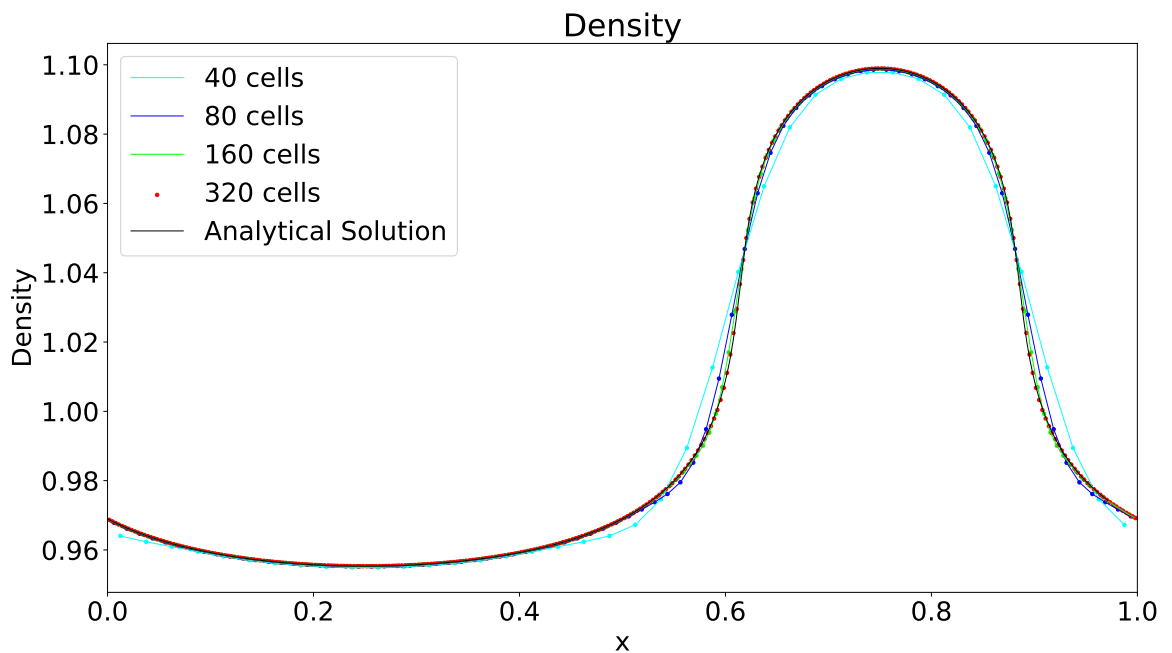
**Tabulka 4.2:** Konvergence hustoty pro hladký Vilarův test za použití metody "Lagrange + Remap" s lagrangeovským schématem 2. řádu a "donor" remapováním.

mesh	$L_1$	$q_1$	$L_2$	$q_2$	$L_\infty$	$q_\infty$
40	2.94e-03	N/A	4.76e-03	N/A	1.56e-02	N/A
80	9.51e-04	1.62	2.14e-03	1.15	9.88e-03	0.66
160	3.05e-04	1.64	8.06e-04	1.41	4.75e-03	1.06
320	8.34e-05	1.87	2.60e-04	1.63	1.91e-03	1.32
640	2.08e-05	2.00	7.17e-05	1.86	6.13e-04	1.64
1280	5.06e-06	2.04	1.82e-05	1.98	1.67e-04	1.89
2560	1.25e-06	2.02	4.52e-06	2.01	4.32e-05	1.98
5120	3.12e-07	2.01	1.12e-06	2.01	1.08e-06	2.00

**Tabulka 4.3:** Konvergence hustoty pro hladký Vilarův test za použití metody "Lagrange + Remap" s lagrangeovským schématem 2. řádu a lineárním remapováním.



**Obrázek 4.4:** Znázornění konvergence hustoty pro hladký Vilarův test za použití metody "Lagrange + Remap" s lagrangeovským schématem 2. řádu a "donor" remapováním.



**Obrázek 4.5:** Znázornění konvergence hustoty pro hladký Vilarův test za použití metody "Lagrange + Remap" s lagrangeovským schématem 2. řádu a lineárním remapováním.

### 4.3 Sedovův problém

Dalším testem je tzv. Sedovův test ve 2D. Sedovův test představuje explozi způsobenou soustředěním velkého množství energie v počátku souřadnic. Jako následek vznikne rázová vlna šířící se z počátku. Označíme okolí počátku (epicentrum exploze) jako  $O(0)$ , objemy buněk v epicentru jako  $V_c$ . Adiabatická konstanta pro daný test je  $\gamma = 1,4$ . Počáteční podmínky jsou:

	$x_c \in O(0)$	$x_c \notin O(0)$
$\rho_0$	1,0	1,0
$P_0$	$10^{-6}$	$\rho_0(1 - \gamma) \frac{E_{\text{tot}}}{\sum_{c \in O(0)} V_c}$
$\mathbf{U}_0$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$

Výpočetní doménu pro Sedovův test v případě výpočtu ve čtyřech kvadrantech volíme  $\langle -1,2; 1,2 \rangle \times \langle -1,2; 1,2 \rangle$ . Počáteční celková energie pro čtyři kvadranty je  $E_{\text{tot}} = 4 \times 0,244816$ . Konečný čas je  $t^{\text{fin}} = 1$ .

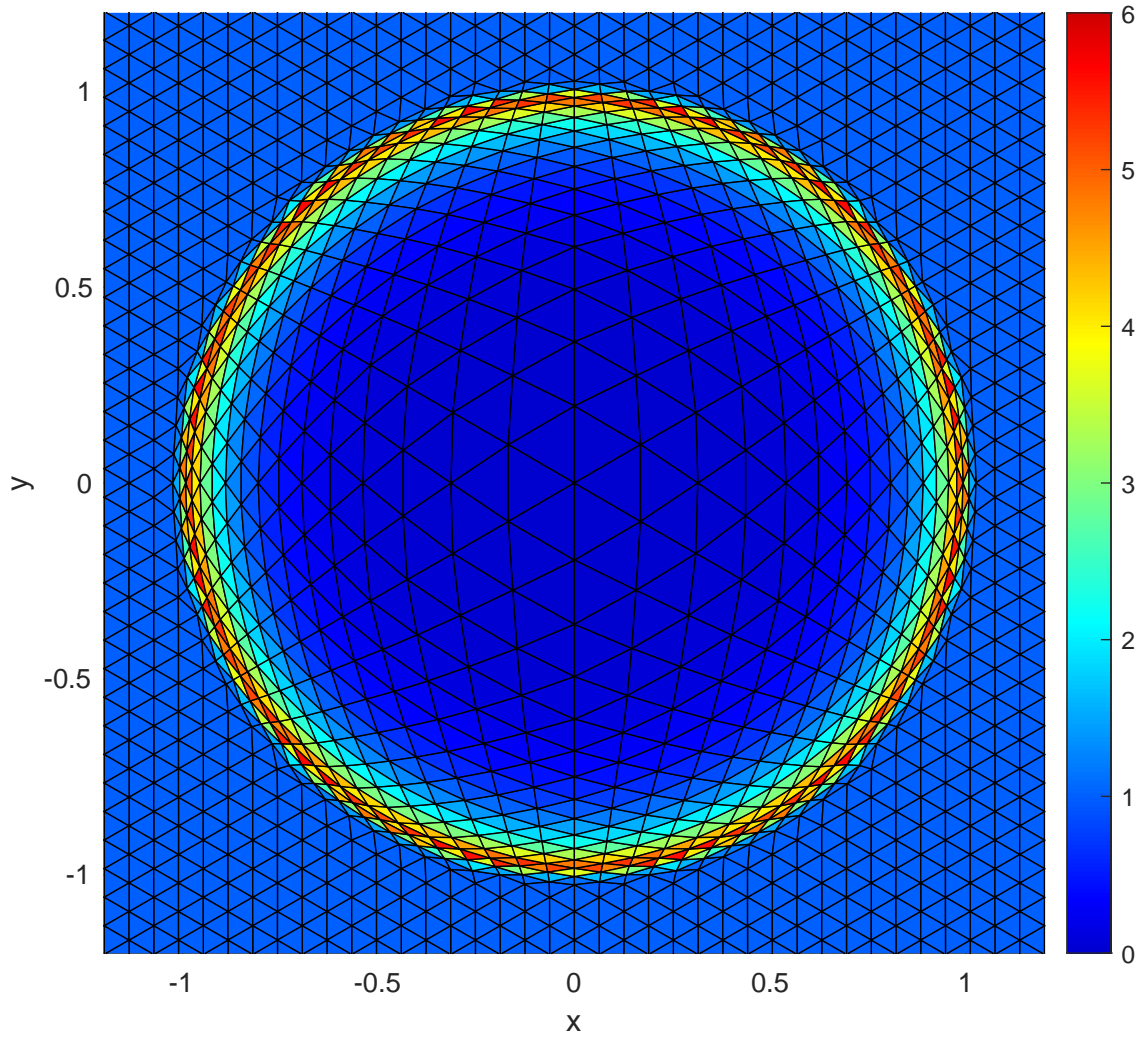
Sedovův problém byl řešen na řadě nestrukturovaných sítí s různou konektivitou. Předkládáme výsledky testu na trojúhelníkové síti s 2546 buňkami (Obrázek 4.6) a na kartézské síti  $51 \times 51$  (Obrázek 4.8) za použití CN rezonování a lineárního remapování, čímž ilustrujeme vliv sítě na výpočet, a dále jejich scatterploty na Obrázcích 4.7 a 4.9. Srovnání "donor" a lineárního remapu za použití metody "Lagrange + remap" na polygonální síti s 2465 buňkami lze nalézt na Obrázku 4.10.

### 4.4 Nohův problém

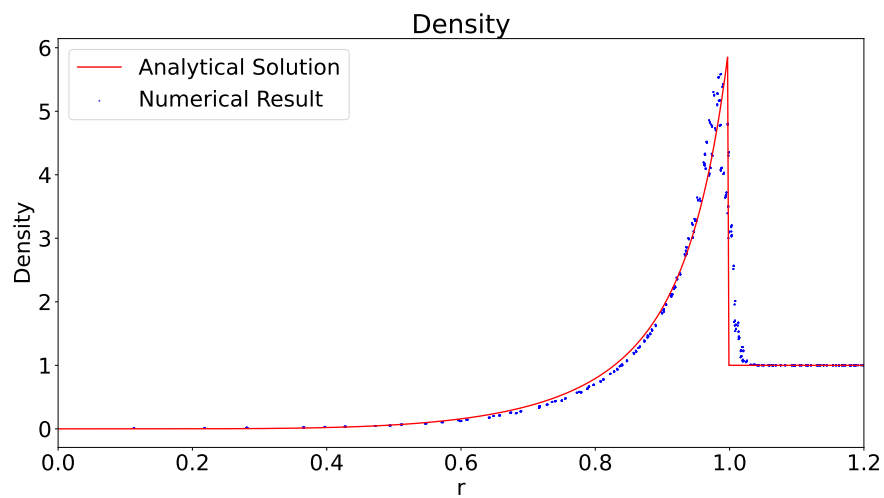
Poslední test, který zde předvedeme, je tzv. Nohova imploze. V počátku souřadného systému dochází k implozi, která pak vytváří silnou rázovou vlnu pohybující se směrem od počátku. Nohův test vlastně ověřuje schopnost simulačního kódu převádět kinetickou energii na vnitřní energii. V daném testu konstanta  $\gamma$  nabývá hodnoty  $\frac{5}{3}$ . Výpočetní doména pro čtyři kvadranty je  $\langle -1,0; 1,0 \rangle \times \langle -1,0; 1,0 \rangle$ . Konečný čas je  $t^{\text{fin}} = 0,6$ .

Nohův test byl proveden na kartézských a polárních sítích různých rozměrů. Uvedeme zde výsledky simulací spuštěných na polární síti  $12 \times 50$  (jeden kvadrant jednotkového kruhu) za použití čistě lagrangeovského výpočtu (Obrázek 4.11(a)), a pak za použití CN rezonování (Obrázek 4.11(b)) a metody "Lagrange + remap" (Obrázek 4.11(c)) v kombinaci s "donor" remapem. Ilustrujeme tím pádem rozdíl mezi třemi hlavními metodami hydrodynamických simulací: Lagrangeovou, ALE a "Eulerovou" (přesněji řečeno "Lagrange + remap").

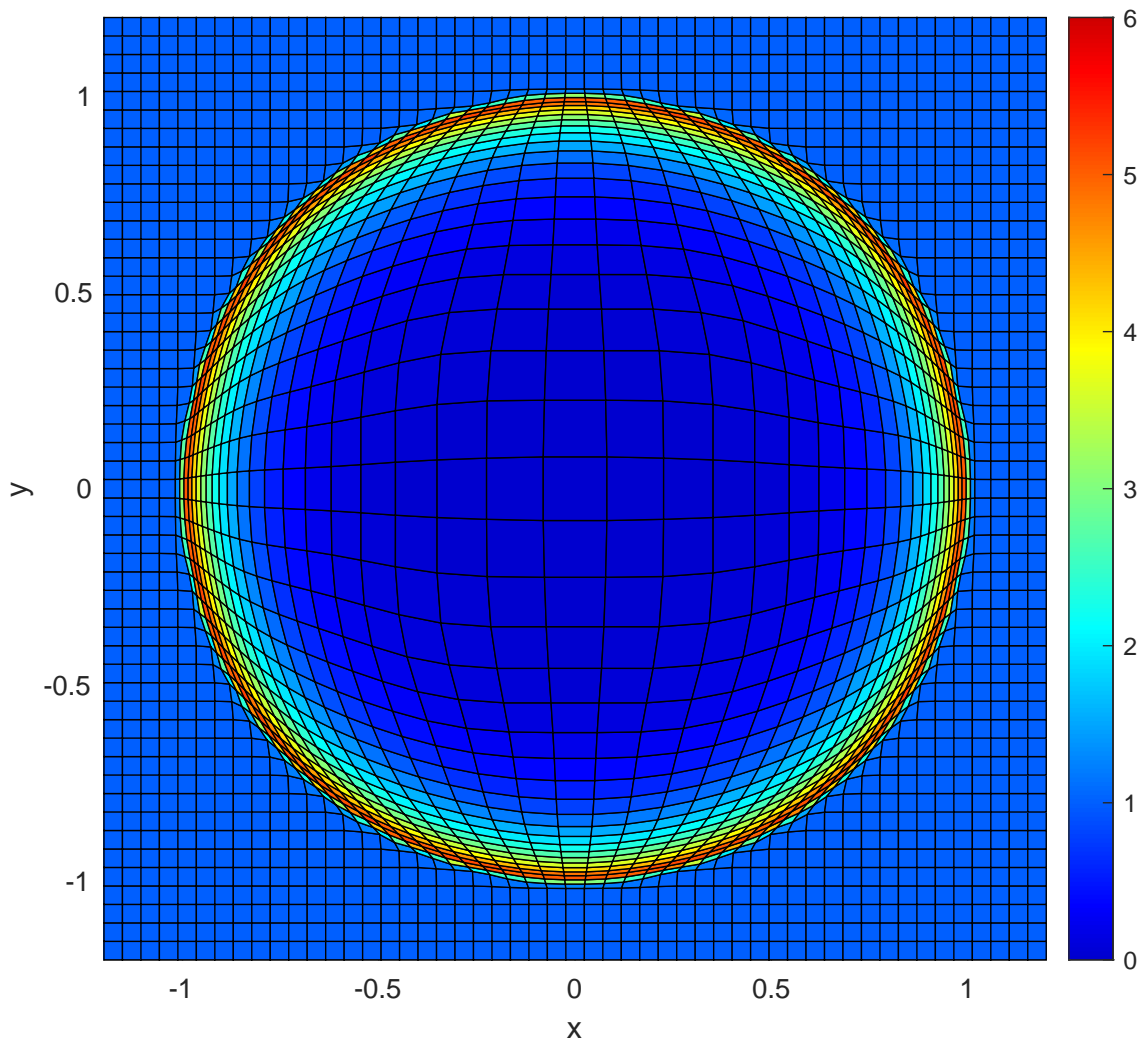




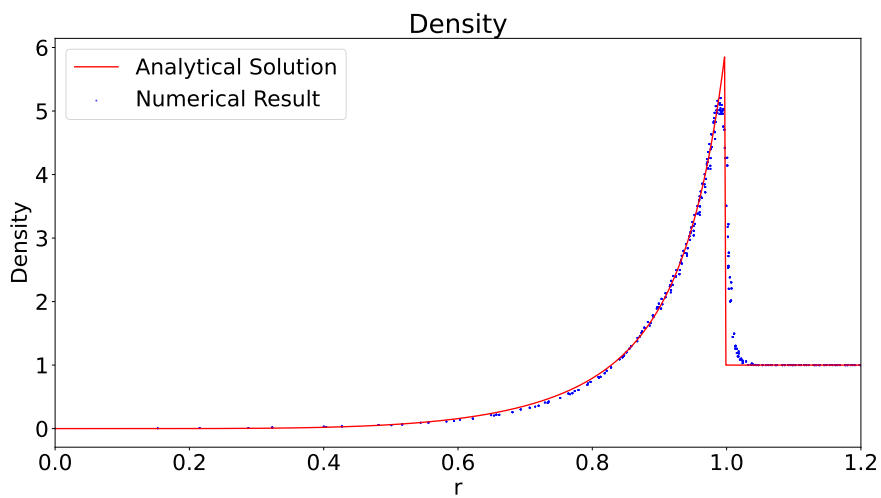
**Obrázek 4.6:** Sedovův test za použití CN rezonování a lineárního remapování na trojúhelníkové síti s 2546 buňkami, pole hustoty.



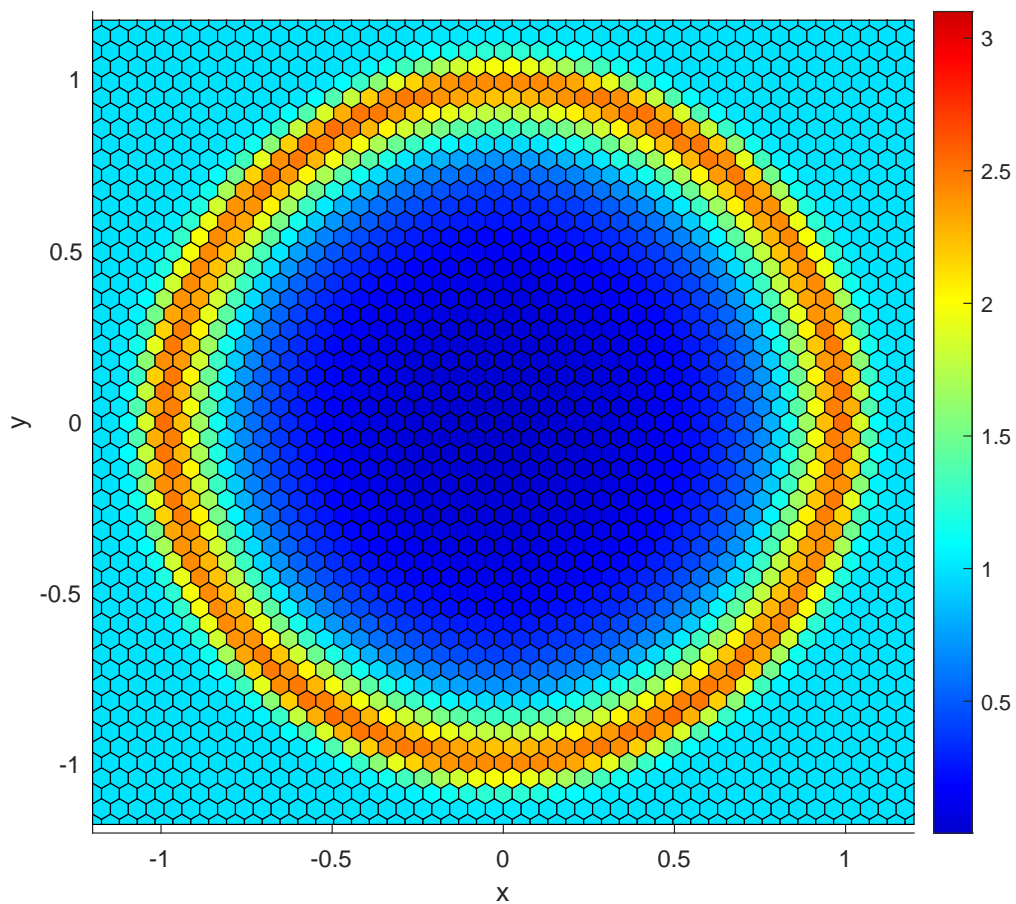
**Obrázek 4.7:** Sedovův test za použití CN rezonování a lineárního remapování na trojúhelníkové síti s 2546 buňkami, scatterplot.



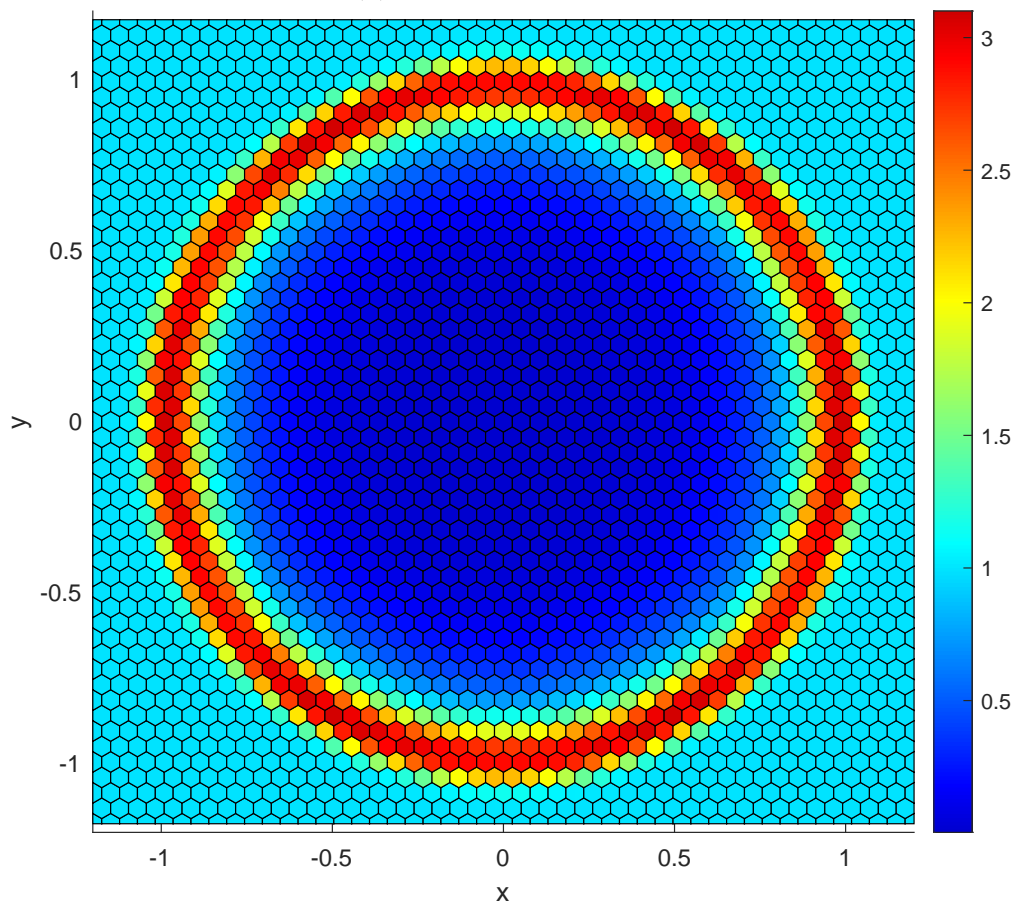
**Obrázek 4.8:** Sedovův test za použití CN rezonování a lineárního remapování na kartézské síti  $51 \times 51$ , pole hustoty.



**Obrázek 4.9:** Sedovův test za použití CN rezonování a lineárního remapování na kartézské síti  $51 \times 51$ , scatterplot.

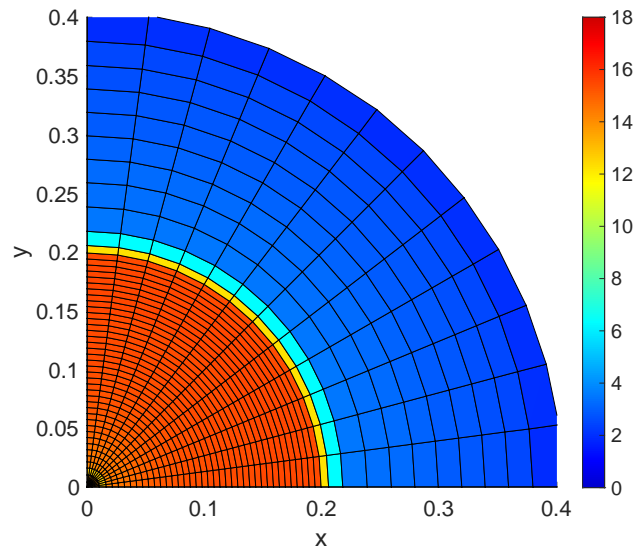


(a) "Donor" remapování.

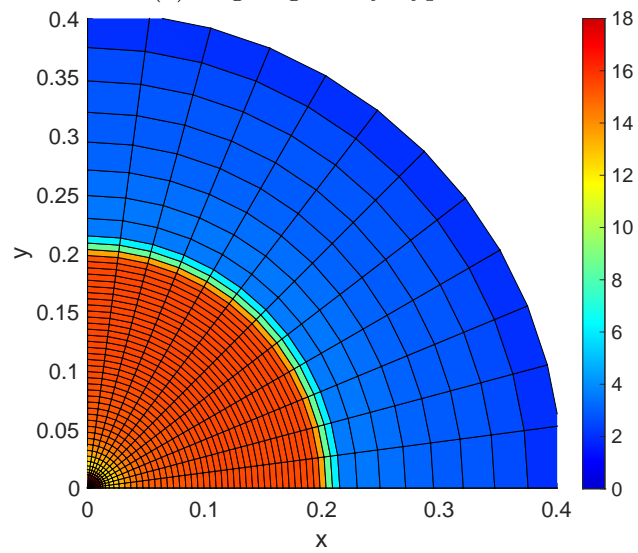


(b) Lineární remapování.

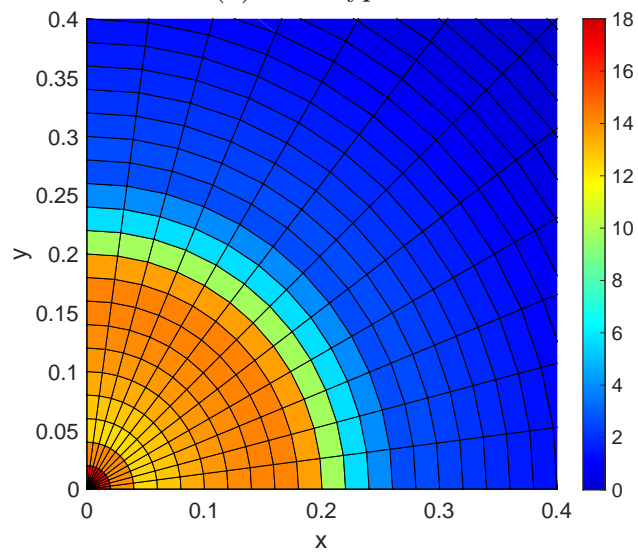
**Obrázek 4.10:** Sedovův test za použití metody "Lagrange + remap", "donor" a lineárního remapování na polygonální síti s 2465 buňkami, pole hustoty.



(a) Lagrangeovský výpočet



(b) ALE výpočet



(c) "Eulerovský" výpočet

**Obrázek 4.11:** Nohův test za použití "donor" remapování a metody "Lagrange + re-map" (c) a CN rezonování (b) a při čistě lagrangeovském výpočtu (a) na polární síti  $12 \times 50$ , pole hustoty, zoom na  $\langle 0; 0,4 \rangle \times \langle 0; 0,4 \rangle$ .

# Závěr

Účelem této práce bylo prozkoumání nepřímého cell-centered lagrangeovsko-eulerovského přístupu v numerických metodách pro hydrodynamické simulace a následné rozšíření stávajícího lagrangeovského modulu na cell-centered indirect ALE kód pro nestrukturované sítě.

Teoretická část práce poskytuje náhled do numerických metod používaných v hydrodynamických simulacích, především se ale věnuje popisu dvou nezbytných kroků nepřímé cell-centered ALE metody: rezonování a remapování, a to v jedno- a dvoudimenzionálních prostorech. V rámci této části jsou také podrobně popsány implementované metody pro fáze rezonu, jmenovitě laplaceovské vyhlazování v 1D, eulerovský pohyb sítě v 1D a 2D a tzv. condition number vyhlazování ve 2D, a metody remapu: tzv. "donor" a lineární v jedno- a dvoudimenzionálních případech.

Ke splnění požadavku na modularitu vyvíjeného kódu byly vytvořeny příslušné moduly pro rezonování a remapování, obsahující zmíněné implementované metody.

Samotné metody byly implementovány v obecném formátu, což umožňuje provádění výpočtu jak na vygenerovaných strukturovaných (kartézských, polárních), tak i na nestrukturovaných (trojúhelníkových, šestiúhelníkových či obecně polygonálních) sítích načítaných z externích souborů.

Testování implementovaných metod pro rezonování a remapování bylo realizováno na standardních numerických testech, tedy Sodově, Vilarově (kde se mimo jiné zkoumala konvergence), Sedovově a Nohově, za použití různých kombinací metod rezonu a remapu na různých typech sítí, a to včetně kartézských, trojúhelníkových, šestiúhelníkových a polárních sítí.

Implementací zde popsaných metod pro rezonování a remapování a jejich spojením s lagrangeovským modulem byl vytvořen cell-centered indirect ALE kód, čímž byly splněny všechny cíle této práce.

V rámci dalšího rozvoje vyvinutého kódu by bylo možné zvážit přidání funkcí a metod, zejména pro simulace v cylindrických nebo křivočarých souřadnicích, a rovněž rozšíření o další metody rezonování a remapování. V budoucnu lze tento kód také rozšířit o simulace jiných problémů, jako jsou například simulace laserového plazmatu.

# Literatura

- [1] I. Tarant. *Multidimensional Numerical Cell-centered Lagrangian Methods*. Bc thesis. Czech Technical University in Prague; 2019.
- [2] C. W. Hirt, A. A. Amsden, J. L. Cook. An Arbitrary Lagrangian–Eulerian Computing Method for All Flow Speeds. *Journal of Computational Physics*. 1974; 14(3):227-253.
- [3] M. Klíma. *Multimateriálová hydrodynamika tekutin*. Bc thesis. Czech Technical University in Prague; 2012.
- [4] M. Kucharik, M. Shashkov, B. Wendroff. An Efficient Linearity-and-bound-preserving Remapping Method. *Journal of Computational Physics*. 2003; 188:462-471.
- [5] M. Kucharik. *Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) Methods in Plasma Physics*. PhD thesis. Czech Technical University in Prague; 2006.
- [6] R. Loubère, P.-H. Maire, M. Shashkov, J. Breil, S. Galera. ReALE: a Reconnection-based Arbitrary Lagrangian–Eulerian Method. *Journal of Computational Physics*. 2010; 229:4724–4761.
- [7] T. J. Barth, D. C. Jespersen. The Design and Application of Upwind Schemes on Unstructured Meshes. *AIAA paper* 89-0366, 27th Aerospace Sciences Meeting, Reno, Nevada; 1989.
- [8] P.-H. Maire. *Contribution to the Numerical Modeling of Inertial Confinement Fusion*. Habilitation thesis. Université Bordeaux I; 2011.
- [9] D. Fridrich, R. Liska, and B. Wendroff. Some Cell-centered Lagrangian Lax–Wendroff HLL Hybrid Schemes. *Journal of Computational Physics*. 2016; 326:878–892.
- [10] A. J. Barlow et al. Arbitrary Lagrangian–Eulerian Methods for Modeling High-speed Compressible Multimaterial Flows. *Journal of Computational Physics*. 2016; 322:603-665.
- [11] S. Galera, P.-H. Maire, J. Breil. A Two-dimensional Unstructured Cell-centered Multi-material ALE Scheme Using VOF Interface Reconstruction. *Journal of Computational Physics*. 2010; 229:5755–5787.
- [12] P.-H. Maire. A high-order cell-centered Lagrangian scheme for two-dimensional compressible fluid flows on unstructured meshes. *Journal of Computational Physics*. 2009; 228:2391-2425.

- 
- [13] F. Vilar. *A High-order Discontinuous Galerkin Discretization for Solving Two-dimensional Lagrangian Hydrodynamics*. PhD thesis. Université Bordeaux I; 2012.