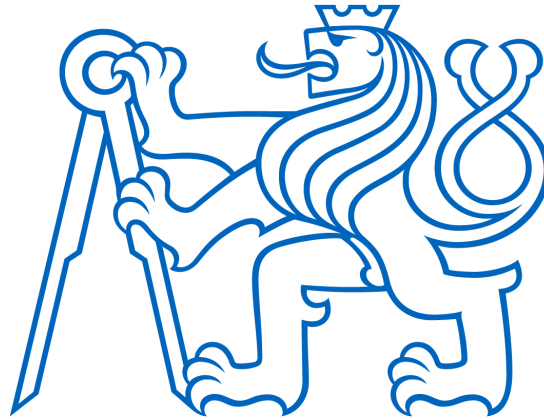


ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE

Fakulta strojní - Ústav technické matematiky



BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

**Numerické simulace nestlačitelného
proudění a transportu pasivních příměsí**

**Numerical simulations of incompressible flows
including transport of passive pollutants**

Anna Lancmanová

2017/2018

Prohlašuji, že jsem tuto práci vypracovala samostatně s použitím literárních pramenů a informací, které cituji a uvádím v seznamu použité literatury a zdrojů informací.

Datum:

.....
podpis

Poděkování

Ráda bych poděkovala panu Ing. Tomáši Bodnárovi Ph.D. za cenné rady, věcné připomínky, trpělivost a ochotu, kterou mi v průběhu zpracování bakalářské práce věnoval. Rovněž patří můj dík rodině za podporu při studiu a tvorbu potřebného zázemí.



ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

I. OSOBNÍ A STUDIJNÍ ÚDAJE

Příjmení: **Lancmanová** Jméno: **Anna** Osobní číslo: **458543**
Fakulta/ústav: **Fakulta strojní**
Zadávající katedra/ústav: **Ústav technické matematiky**
Studijní program: **Teoretický základ strojního inženýrství**
Studijní obor: **bez oboru**

II. ÚDAJE K BAKALÁŘSKÉ PRÁCI

Název bakalářské práce:

Numerické simulace nestlačitelného proudění a transportu pasivních příměsí

Název bakalářské práce anglicky:

Numerical simulations of incompressible flows including transport of passive pollutants

Pokyny pro vypracování:

- 1) Odvození základních rovnic popisujících proudění nestlačitelné tekutiny.
- 2) Formulace dvojrozměrné úlohy s advekcí a difúzí.
- 3) Popis numerického řešení úlohy metodou konečných diferencí.
- 4) Naprogramování metody její odladění a provedení ověřovacích výpočtů.
- 5) Modifikace numerické metody s využitím různých variant prostorové diskretizace.
- 6) Grafické zpracování a zhodnocení výsledků.

Seznam doporučené literatury:

- [1] Kozel K. a kol.: Numerické řešení problémů proudění I - III, skripta ČVUT, FS.
- [2] Fořt J. a kol.: Numerická simulace proudění I, skripta ČVUT, FS.
- [3] Ferziger J.H., Peric M. Computational Methods for Fluid Dynamics, 2nd ed., Springer-Verlag (2001)
- [4] Oertel H. Prandtl-Essentials of Fluid Mechanics, Series: Applied Mathematical Sciences, Vol. 158, 3rd ed., Springer-Verlag (2010)
- [5] Dvořák R., Kozel K. Matematické modelování v aerodynamice, Vydavatelství ČVUT (1996)

Jméno a pracoviště vedoucí(ho) bakalářské práce:

ing. Tomáš Bodnár, Ph.D., ústav technické matematiky FS

Jméno a pracoviště druhé(ho) vedoucí(ho) nebo konzultanta(ky) bakalářské práce:

Datum zadání bakalářské práce: **19.04.2018**

Termín odevzdání bakalářské práce: **19.08.2018**

Platnost zadání bakalářské práce: _____



ing. Tomáš Bodnár, Ph.D.
podpis vedoucí(ho) práce



prof. Ing. Jaroslav Fořt, CSc.
podpis vedoucí(ho) ústavu/katedry



prof. Ing. Michael Valášek, DrSc.
podpis děkana(ky)

III. PŘEVZETÍ ZADÁNÍ

Studentka bere na vědomí, že je povinna vypracovat bakalářskou práci samostatně, bez cizí pomoci, s výjimkou poskytnutých konzultací. Seznam použité literatury, jiných pramenů a jmen konzultantů je třeba uvést v bakalářské práci.

7.5.2018

Datum převzetí zadání

Lancmanova Anna

Podpis studentky

Abstrakt

Bakalářská práce se zabývá numerickou simulací nestlačitelného proudění a transportu pasivních příměsí. Součástí této práce je odvození základních rovnic popisujících proudění nestlačitelné tekutiny. V této práci se řeší numerická simulace dvou dvojrozměrných případů – proudění mezi dvěma pevnými deskami a proudění kolem válce – u kterých se uvažuje advekce a difuze. K numerickému řešení těchto úloh se využívá metody konečných diferencí s využitím různých variant prostorové diskretizace.

Klíčová slova : numerická simulace, nestlačitelné proudění, transport pasivní příměsí, advekce, difuze, metoda konečných diferencí, diskretizace, modifikovaná rovnice, metoda vnořené hranice

Abstract

This bachelor work deals with numerical simulations of incompressible flows including transport of passive pollutants. Part of this work is derivation of basic equations describing flow of incompressible fluid. In this work we solve the numerical simulation of two two-dimensional cases - the flow between two parallel plates and the flow around cylinder - in which advection and diffusion is considered. Numerical solution of these cases is based on finite difference method using different variants of spatial discretization.

Keywords : numerical simulations, incompressible flows, transport of passive pollutants, advection, diffusion, finite difference method, discretization, modified equation, immersed boundary method

Obsah

1	Úvod	7
1.1	Cíl a motivace práce	7
1.2	Struktura práce	7
I	Matematické modelování	9
2	Matematický popis proudění	11
2.1	Základní rovnice a pojmy	11
2.1.1	Bilance hmoty	12
2.1.2	Bilance hybnosti	14
2.1.3	Stavová rovnice	15
2.1.4	Transportní rovnice pasivní příměsi	16
2.2	Shrnutí rovnic	18
3	Formulace úloh v \mathbb{E}_2	19
3.1	Okrajové podmínky	19
II	Numerické metody	22
4	Numerické řešení úlohy metodou konečných diferencí	22
4.1	Princip metody sítí/konečných diferencí	22
4.2	Vybraná schémata pro rovnici advekce	26
4.3	Odvození modifikované rovnice	29
4.4	Stabilita a chování vybraných schémat	32
III	Numerické experimenty	33
5	Základní nastavení úloh	33
5.1	Geometrické nastavení	33
5.2	Parametrické nastavení	33
6	Proudění mezi dvěma deskami	35
6.1	Analytické řešení proudění mezi dvěma deskami	35
6.2	Numerické řešení proudění mezi dvěma deskami	39
6.3	Porovnání numerického a analytického řešení	44
7	Obtékání válce	52
7.1	Výsledky numerických simulací	52
7.2	Vliv hustoty sítě na proudnici pro obtékání válce	59
8	Závěr	61
	Seznam použitého značení, symbolů a zkratk	62
	Reference	64
	Seznam použitého softwaru	65

1 Úvod

1.1 Cíl a motivace práce

Účelem této práce bylo vytvořit numerické simulace proudění na základně základních znalostí nabytých během tříletého bakalářského studia teoretického základu strojního inženýrství a připravit se na plánované následující magisterské studium na oboru *Matematické modelování v technice*. Základní znalosti byli získány například z předmětů *Numerická matematika*, *Mechanika tekutin*, *Termomechanika* či například *Přenos hybnosti, tepla a hmoty*. Hlavním cílem bylo vyzkoušet si vytvoření vlastního řešiče na problémy proudění, aniž by bylo nutné využívat existujících externích programů. Na základě bakalářského studia byla během pár týdnů naprogramována základní struktura řešiče, který se s dostudovanými znalostmi a konzultacemi dále měnil. Dalším cílem bakalářské práce bylo vytvoření numerické simulace nestlačitelného proudění a transportu pasivních příměsí pro dva případy, u kterých se uvažovala advekce a difuze. Mezi dílčí úkoly patří :

- odvození základních rovnic popisujících proudění nestlačitelné tekutiny
- formulace dvojrozměrné úlohy s advekcí a difuzí
- popis numerického řešení úlohy metodou konečných diferencí
- naprogramování metody, její odladění a provedení ověřovacích výpočtů
- modifikace numerické metody s využitím různých variant prostorové diskretizace
- grafické zpracování a zhodnocení výsledků.

1.2 Struktura práce

Práce je rozčleněna do tří větších logických částí nazvaných *Matematické modelování*, *Numerické metody* a *Numerické experimenty*.

Matematické modelování je sekce, kde je přiblížen pojem matematické modelování. Je zde zmíněno jakým způsobem se obvykle postupuje při modelaci věrohodného modelu. V této sekci je kladen důraz především na odvození výchozích rovnic a zavedení potřebných veličin a pojmů, které budou později v práci využity. K příslušné soustavě rovnic je připojena omezená oblast s okrajovými podmínkami, které jsou nejdříve uvedeny obecně a následně jsou vztaženy na dva řešené numerické experimenty - proudění mezi dvěma deskami a obtékání válce. Pro tyto dva případy se zde nachází základní formulace úlohy, která bude v dalších částech řešena.

Obsahem druhé části, **Numerické metody**, je numerické řešení diferenciálních rovnic pomocí metody konečných diferencí. Je zde přiblížen princip metody a jsou zde rozvinuty základní schémata. Dále se zde kromě chyb aproximace nachází například nutná CFL podmínka ke stabilizaci schématu a základní rozdělení sítí dle strukturovanosti. Na závěr jsou rozšířeny předchozí úvahy na \mathbb{E}_2 a pro snadnější zápis v dalších částech bakalářské práce jsou zavedeny pomocné operátory.

Třetí část pojmenována **Numerické experimenty** se zabývá dvěma numerickými případy - proudění mezi dvěma rovinnými, paralelními deskami a obtékání válce. V této části se nachází základní nastavení, které se používá pro všechny zde řešené numerické experimenty.

Je zde navázáno na druhou část, z které jsou zde podrobněji rozepsány použité varianty diskretizace. Odvozené numerické řešení je následně naprogramováno a řešeno v Matlabu. Po odladění jsou provedeny kontrolní výpočty. Pro porovnání analytického a numerického řešení pro proudění mezi dvěma deskami je odvozeno analytické řešení. Srovnávanou veličinou je zde pak gradient tlaku. Numerický gradient tlaku je porovnáván v různých variacích v závislosti na volbě prostorové diskretizace a různého nastavení hodnot volitelných veličin. Jsou zde rozebrány jednotlivé schémata, různá Reynoldsova čísla Re a z volitelných parametrů koeficienty ζ, α, β , které ovlivňují lineární kombinaci schémat a koeficient umělé stlačitelnosti \mathcal{B} . Z volitelných parametrů je dále rozberán například vliv volby časového a prostorového kroku či zjemnění sítě. U obtékání válce je simulace spuštěna pro různá Reynoldsova čísla a výsledky jsou porovnány s vybranými laboratorními experimenty z [4]. Kromě porovnání výsledků jsou zde dále zobrazena pole veličin.

Pro přehlednější ověření, zda bylo dosaženo dílčích cílů práce, je na str. 61 uvedeno shrnutí výsledků dosažených v jednotlivých částech práce.

Část I

Matematické modelování

Matematické modelování hraje v dnešní době významnou roli ve vývoji mnoha odvětví. Setkáváme se s ním v řadě významných oblastí, mezi které patří například strojírenství, letectví, mechanika, stavební technika, fyzika, chemie, fyziologie a medicína [5]. Tato práce bude dále zaměřena na matematické modelování nestlačitelného proudění a transportu pasivních příměsí.

Při řešení určitého problému se opíráme o zjednodušený model, který je vytvořen na míru našeho problému. Vybudovat ideální model je obtížná záležitost, proto je vhodné se držet základních kroků, které uvedl například Rudolf Dvořák a Karel Kozel v knize *Matematické modelování v aerodynamice* [5] v těchto bodech :

- **Formulace problému**
- **Sestavení matematického modelu**
- **Řešení okrajové, či počáteční úlohy**
- **Analýza a interpretace výsledků**

Při formulaci problému je potřeba vytvořit co nejúplnější fyzikální model. K jeho vytvoření je žádoucí, aby popis obsahoval formulaci počátečních podmínek, geometrická, konstrukční, technologická a jiná omezení, aproximace, které lze z fyzikálního hlediska provést, dále termodynamické vztahy definující tekutinu, materiálové vztahy a nakonec vymezení rozsahu použitelnosti a platnosti všech výše uvedených vztahů. V dalších bodech je nutno sestavit soustavy rovnic, které popisují fyzikální model na základě předcházejícího popisu jevu, analyticky či numericky řešit úlohu a na závěr analyzovat a interpretovat výsledky řešení. Jev je řešen pouze v rozsahu předpokladů a parametrů na základě kterých byl formulován model. Aby bylo dosaženo co největší přesnosti je třeba vysoká preciznost při zpracovávání všech požadavků na model. Každá odchylka od skutečného stavu, který by jinak nastal, je pouze důsledek naší nepřesnosti v minimálně v jednom z vyčtených bodů. Nedosáhnutí předpokládaného správného výsledků bývá většinou způsobena nevhodně zvoleným modelem, špatnou závěrečnou interpretací výsledků či nedostatečnou znalostí modelovaného jevu. Abychom se těmito odchylkám vyhnuli je vhodné využívat experimentu, který se v rámci matematického modelování vyskytuje většinou ve dvou fázích - v úvodní a v závěrečné. Experiment v úvodní fázi slouží k vytvoření přesnějšího fyzikálního modelu. Zadaný systém je zkoumán, jsou sbírána data a na základě následující analýzy modelu je experiment přizpůsoben tak, aby byly získány co nejpresnější data k řešené problematice a aby bylo možno vytvořit co nejrealističtější model. Naopak experiment v závěrečné fázi již

není ve formě kvalitativního výzkumu, ale kvantitativního. Zde je pozornost zaměřena na to zda byl správně zvolen model, s jakou přesností byla popsána fyzikální struktura a jak výsledky numerické simulace vystihují skutečnost.[5], [2]

Při modelování procesů atmosféry se využívá matematických modelů a jejich numerického řešení. Mimo to se používá i fyzikální modelování, které je realizováno například pomocí tunelových měření. Fyzikální modely se využívají hlavně pro modelování rozměrově malých oblastí a útvarů jako jsou například bloky domů či jednotlivé ulice. Tedy objekty u kterých nedochází ve zmenšeném měřítku k problému se zachováním dynamické podobnosti. Abychom mohli hovořit o dynamické podobnosti mezi modelem a skutečností musíme splnit dle [5] tyto dva hlavní body :

1. Zachovat geometrickou podobnost použitého modelu se skutečností
2. Zachovat geometricky podobné pole proudnic při obtékání modelu poli proudnic ve skutečnosti

Pokud jsme schopni tyto body splnit je výhodné pro nás využít fyzikální model a vyhnout se zahrnutí složitých detailních popisů fyzikálních procesů do matematických modelů. Numerické modely se naopak využívají hlavně pro modelování proudění nad rozsáhlejšími oblastmi, kde kvůli velkému zmenšení modelu vůči skutečnosti nelze dosáhnout dynamické podobnosti. [5], [2]

2 Matematický popis proudění

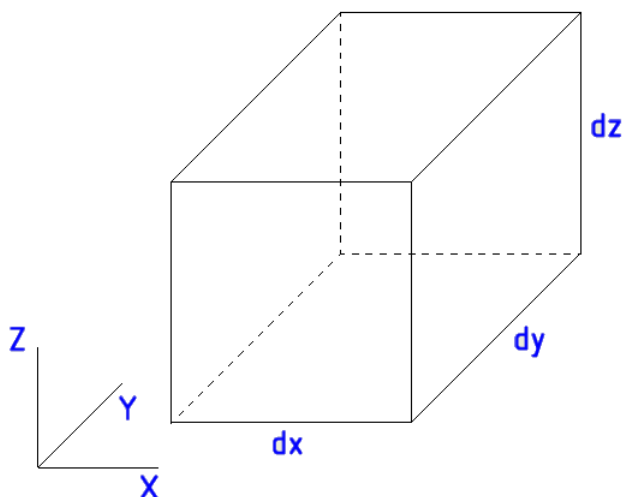
Proudění tekutin lze popsat například parciálními diferenciálními rovnicemi. V této kapitole si definujeme výchozí rovnice, které se nejčastěji používají jako výchozí rovnice pro aerodynamické úlohy. Budeme vycházet z případu vazkého, nestlačitelného proudění, z kterého získáme soustavy rovnic. Zároveň si také zavedeme veličiny a pojmy, které se v rámci modelování proudění využívají.

2.1 Základní rovnice a pojmy

Za výchozí rovnice se často využívá soustava základních zákonů zachování - hlavně zákon zachování hmoty, hybnosti a energie. Tuto soustavu je nutné doplnit dalšími konstitučními vztahy, které byly stanoveny při formulaci problému v rámci termodynamických a materiálových vztahů. Soustava základních zákonů zachování totiž obsahuje více neznámých než obsahuje rovnic. Neznámé reprezentují pole veličin - vektorové pole rychlosti a skalární pole tlaku, teploty a koncentrace. Dále bude využit pouze zákon zachování hmoty a hybnosti. V této práci se při modelování považuje chování tekutiny za adiabatické, takže rovnice energie nebude uvažována, její podrobné odvození lze však nalézt např. v [7].

2.1.1 Bilance hmoty

Zákon zachování hmotnosti vyjadřuje rovnice kontinuity, která může být dle [2] odvozena například pomocí pevného kontrolního objemu. Z tohoto zdroje bude při odvozování vycházeno. Budeme-li uvažovat elementární objem, který je znázorněn na obr. 1 (str. 12),



Obr. 1: Elementární objem

můžeme tento pevně zvolený elementární objem zapsat ve tvaru $dV = dx dy dz$. V souladu se zachováním hmoty může být změna hmotnosti tekutiny uvnitř elementárního objemu zapsána jako rozdíl mezi vtokem a výtokem tekutiny. Stěnou ve směru osy x vtéká do kontrolního objemu za jednotku času množství tekutiny o hmotnosti $\rho u dy dz$, naopak protilehlou stěnou vytéká za jednotku času množství tekutiny o hmotnosti $[\rho u + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) dx] dy dz$. Změnu hmotnosti tekutiny v objemu dV způsobenou prouděním ve směru osy x lze matematicky vyjádřit jako

$$\rho u dy dz - \left[\rho u + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) dx \right] dy dz = \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) dx dy dz = -\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) dV. \quad (1)$$

Pro proudění ve směru osy y a osy z vzniknou podobné výrazy.

$$-\frac{\partial}{\partial y}(\rho v) dV \quad \text{resp.} \quad -\frac{\partial}{\partial z}(\rho w) dV \quad (2)$$

Celková změna hmotnosti v pevně zvoleném kontrolním objemu za jednotku času je dána součtem složek změn hmotnosti ve směru osy x, y, z .

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} dV = - \left(\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w) \right) dV \quad (3)$$

Což musí platit pro libovolný kontrolní objem, takže můžeme celou rovnost vydělit dV .

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \left(\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w) \right) \quad (4)$$

Rozderivováním pravé strany a převedením parciálních derivací hustoty na stranu levou získáme rovnici ve tvaru

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} + v \frac{\partial \rho}{\partial y} + w \frac{\partial \rho}{\partial z} = -\rho \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \quad (5)$$

respektive ve vektorovém zápisu

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho = -\rho (\nabla \cdot \mathbf{u}), \quad (6)$$

kde operátor nabla je definován (v kartézském souřadném systému) jako

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)^T. \quad (7)$$

Zavedením Eulerova vztahu mezi materiálovou a lokální časovou změnou veličiny

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho \equiv \frac{d\rho}{dt} \quad (8)$$

lze přepsat rovnici (6 / str. 14) do tvaru

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho (\nabla \cdot \mathbf{u}). \quad (9)$$

V práci se dále budeme uvažovat nestlačitelný model. V důsledku nestlačitelnosti (izochoričnosti) pohybu se zákon zachování hmoty v podstatě rozštěpí na zákon zachování objemu a zákon zachování hustoty. Rovnice kontinuity se zredukuje na tzv. nestlačitelnou rovnici kontinuity

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (10)$$

a transportní rovnici pro hustotu

$$\frac{d\rho}{dt} = 0, \quad \text{resp.} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho = 0, \quad (11)$$

kteřá v případě dodatečného požadavku konstantní hustoty $\rho = \textit{konst.}$ je splněna automaticky (a není součástí modelu).

2.1.2 Bilance hybnosti

Bilanci hybnosti vyjadřuje Cauchyova rovnice, která je zobecněním 2. Newtonova pohybového zákona pro libovolný kontrolní objem V . Její odvození lze nalézt například v [15]. Z tohoto díla bude dále vycházeno. Označíme-li hranici objemu V jako $S = \partial V$

$$\int_V \frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} dV + \int_S \rho \mathbf{u}(\mathbf{u} \mathbf{n}) dS = \mathbf{F}, \quad (12)$$

kde \mathbf{F} je výslednicí všech vnějších sil působících na kontrolní objem. Tyto síly jsou dvojího typu - síly objemové a povrchové.

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_g + \mathbf{F}_p \quad (13)$$

Síly objemové \mathbf{F}_g lze zapsat ve tvaru

$$\mathbf{F}_g = \int_V \rho \mathbf{f} dV, \quad (14)$$

kde \mathbf{f} je hustota objemových sil. Síly povrchové \mathbf{F}_p mohou být vyjádřeny pomocí tenzoru napětí jako

$$\mathbf{F}_p = \int_S (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) dS. \quad (15)$$

Pro Newtonovskou tekutinu lze tenzor napětí vyjádřit jako

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbb{1} + \boldsymbol{\tau}, \quad (16)$$

kde $\mathbb{1}$ je tenzor identity a p je normálová složka napětí. Pro Newtonovské tekutiny platí vztah

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \mu' (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbb{1}, \quad (17)$$

kde μ značí dynamickou viskozitu vyjadřující vazká napětí vzniklá smykovou deformací a μ' je druhý koeficient viskozity, který reprezentuje vazké napětí vzniklé při změně objemu. Kinematická ν a dynamická viskozita μ je vázána vztahem

$$\nu = \frac{\mu}{\rho}. \quad (18)$$

V [4] se uvádí, že při běžném proudění je druhá vazkost velmi malá a není třeba jí uvažovat. V této práci se dále zaměříme na modelování nestlačitelného proudění a transportu pasivních příměsí. Pro nestlačitelné proudění bylo uvedeno, že platí $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, proto bude poslední člen rovnice (17) nulový.

V rovnici (15 / str. 14) lze symetrický tenzor druhého řádu rozložit na sférickou (kulovou) a deviatorickou část viz (16).

$$\mathbf{F}_p = \int_S \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} dS = \int_S (-p\mathbf{n} + \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n}) dS \quad (19)$$

Transformací integrálu lze získat

$$\mathbf{F}_p = \int_V -\nabla p dV + \int_V \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} dV. \quad (20)$$

Vrátíme-li se k výchozí rovnici (12 / str. 14) a transformujeme plošný integrál přes kontrolní povrch na objemový integrál přes kontrolní objem, dosadíme získané vztahy pro síly působící na kontrolní objem a budeme předpokládat, že funkce v integrálech jsou dostatečně hladké, pak získáme bilanci hybnosti ve tvaru

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{u})}{\partial t} + (\rho\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho\mathbf{f}. \quad (21)$$

Při předpokladu konstantní hustoty ρ lze vytknutím a vydělením zjednodušit rovnici do tvaru

$$\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \frac{1}{\rho}\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{f} \quad (22)$$

respektive ve vektorovém zápisu do tvaru

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \frac{1}{\rho}\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{f}. \quad (23)$$

Dosazením do pohybové rovnice (22) vztah (17 / str. 14) získáme nestlačitelné Navierovy Stokesovy rovnice ve tvaru

$$\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\Delta\mathbf{u} + \mathbf{f}. \quad (24)$$

2.1.3 Stavová rovnice

Mezi základní rovnice dále patří stavová rovnice, která v našem případě kvůli předpokladu nestlačitelného proudění nebude později uvažována. Ve stlačitelném proudění stavová rovnice vyjadřuje závislost mezi stavovými veličinami pro ideální plyn. Pro plyn o jednotkovém objemu může být vyjádřena například jako

$$p = \rho RT, \quad (25)$$

kde p je absolutní tlak, ρ hustota, T absolutní teplota a R měrná plynová konstanta, jejíž hodnota pro ideální plyn je $R = 287 \text{ Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$.

Při modelování atmosféry můžou být procesy dle [2] považovány, zvláště ty krátkodobé, za termodynamické děje, při kterých nedochází k výměně tepla mezi zvolenou soustavou a okolím. Pro adiabatické děje platí $\frac{p^\varkappa}{T} = konst.$ Kde \varkappa je Poissonova konstanta, která je definována pomocí měrných tepelných kapacit za konstantního tlaku c_p a objemu c_v .

$$\varkappa = \frac{c_p}{c_v} > 1 \quad (26)$$

Po zavedení počáteční teploty T_1 a počátečního tlaku p_1 získáme rovnici

$$\frac{T}{T_1} = \left(\frac{p}{p_1} \right)^\varkappa, \quad (27)$$

kteřá nám umožní definovat tzv. potenciální teplotu θ , která je interpretována jako teplota, kterou by měl uvažovaný plyn po adiabatické expanzi (kompresi) na referenční tlak, jehož hodnota je stanovena $p_o \simeq 10^5 Pa$.

$$\theta = T \left(\frac{p_o}{p} \right)^\varkappa \quad (28)$$

V numerických simulacích prezentovaných v této práci nebyla potenciální teploty θ využita. Její zadefinování by bylo využito například při rozšíření práce pro stratifikované proudění v atmosféře.

2.1.4 Transportní rovnice pasivní příměsi

Pasivní příměsí rozumíme látku, která během transportu neovlivňuje proudění svou reakcí s tekutinou či jinými látkami. Považujeme jí za zcela nereagující. Budeme-li uvažovat pasivní příměs, která je unášena proudovým polem, lze odvodit transportní rovnici pasivní příměsi například z rovnice kontinuity.

Vydeme-li z rovnice kontinuity (9 / str. 13), která nám vyjadřuje zachování hmotnosti, můžeme stanovit změnu hmotnosti příměsi jako součet hmotnostní produkce m_{pr} a toku hmotnosti m_{tok} .

$$\frac{d}{dt}m_p = m_{pr} + m_{tok} \quad (29)$$

Hmotnostní produkce je dána výskytem zdroje příměsi, jehož intenzita může být vyjádřena pomocí zdrojové funkce f_C . Hmotnostní produkci můžeme zapsat například ve tvaru

$$m_{pr} = \int_V \rho_p f_C dV, \quad (30)$$

kde ρ_p vyjadřuje hustotu pasivní příměsi. Tok hmotnosti uvažujeme přes hranici kontrolního objemu. Označíme-li hustotu hmotnostního toku jako \mathbf{j}_m , vnější normálový vektor k hranici

kontrolního objemu ∂V jako \mathbf{n} , můžeme zapsat tok hmotnosti ve tvaru

$$m_{tok} = - \int_{\partial V} \mathbf{j}_m \cdot \mathbf{n} dS, \quad (31)$$

kde ∂V vyjadřuje hranici oblasti v prostoru. Dosazením rovnic (30 / str. 16) a (31 / str. 16) do (29 / str. 16) dostaneme

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho_p \cdot C dV = \int_V \rho_p f_C dV - \int_{\partial V} \mathbf{j}_m \cdot \mathbf{n} dS. \quad (32)$$

Aplikováním Reynoldsovy transportní věty na levou část rovnice a Gaussovy věty na vyjádření m_{tok} získáme

$$\int_V \left[\frac{\partial(\rho_p C)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_p C \mathbf{u}) \right] dV = \int_V \rho_p f_C dV - \int_V \operatorname{div} \mathbf{j}_m dV. \quad (33)$$

Za předpokladu, že funkce v integrálech jsou dostatečně hladké, můžeme napsat diferenciální tvar rovnice pasivní příměsi ve tvaru

$$\frac{\partial(\rho_p C)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_p C \mathbf{u}) = \rho_p f_C - \operatorname{div} \mathbf{j}_m. \quad (34)$$

Hustota hmotnostního toku \mathbf{j}_m může být vyjádřena jako

$$\mathbf{j}_m = -\rho_p (K_C \operatorname{grad} C), \quad (35)$$

kde K_C je molekulární difuze. V našem případě budeme uvažovat pouze molekulární difuzi a transportní rovnici pasivní příměsi dostaneme ve tvaru

$$\frac{\partial(\rho_p C)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_p C \mathbf{u}) = \operatorname{div}(\rho_p K_C \operatorname{grad} C) + \rho_p f_C. \quad (36)$$

Pokud budeme považovat ρ_p za konstantní můžeme rovnici tímto parametrem vydělit a napsat

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \operatorname{grad} C = \operatorname{div}(K_C \operatorname{grad} C) + f_C. \quad (37)$$

V případě, že K_C je konstantní dostaneme

$$\frac{dC}{dt} = K_C \Delta C + f_C. \quad (38)$$

Tato transportní rovnice (advekce-difuze) doplní náš systém pohybových rovnic při výpočtech šíření pasivní příměsi.

2.2 Shrnutí rovnic

Shrneme-li si tyto rovnice, získáme systém rovnic, pomocí kterých můžeme řešit simulaci nestlačitelného proudění a transportu pasivních příměsí.

Dále budeme vycházet z případu vazkého, nestlačitelného proudění Newtonovské tekutiny s adiabatickým chováním. Transportovanou příměsí bude látka nereagující s okolím a s konstantní hustotou. U transportu budeme uvažovat advekci a molekulární difuzi. Pro tyto předpoklady dostaneme systém rovnic ve tvaru

– **Bilance hmotnosti**

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (39)$$

– **Bilance hybnosti**

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{f} \quad (40)$$

– **Rovnice transportu pasivních příměsí**

$$\frac{dC}{dt} = K_C \Delta C + f_C \quad (41)$$

Pro vyřešení těchto rovnic je potřeba připojit další konstituční vztah, z kterého lze získat hodnotu tlaku. Je možné využít metodu umělé stlačitelnosti (*artificial compressibility method*), kterou v roce 1967 publikoval A. J. Chorin v [3]. Uvádí se, že lze pro numerické výpočty rozšířit rovnici kontinuity (9 / str. 13) do tvaru

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (42)$$

kde

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{\mathcal{B}^2} \frac{\partial p}{\partial t} \quad (43)$$

kde \mathcal{B} je koeficient umělé stlačitelnosti, který má rozměr rychlosti (\mathcal{B} je tzv. umělá rychlost zvuku). [6], [3]

Zkombinováním rovnice (42) a vztahu (43) je možné vyjádřit hodnotu tlaku ve tvaru

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\mathcal{B}^2 (\nabla \cdot \mathbf{u}). \quad (44)$$

Tuto rovnici použijeme v našem numerickém modelu místo rovnice (39) k výpočtu tlaku ze známé rychlosti předem určené z hybnostních rovnic (40).

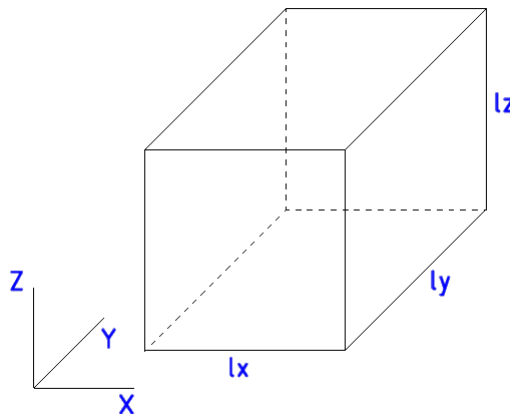
3 Formulace úloh v \mathbb{E}_2

Mezi nejužívanější matematické modely proudění pro stlačitelné a nestlačitelné tekutiny patří systém Navierových-Stokesových rovnic a systém Eulerových rovnic. Pro řešení nestlačitelného proudění budu dále využívat systém Navierových-Stokesových rovnic. Rovnici kontinuity budeme uvažovat v rozšířeném tvaru - viz rovnice (42 / str. 18), kde se promítné člen umělé stlačitelnosti.

V této práci se dále budu při numerické simulaci zabývat dvěma situacemi, které budou podrobněji rozebrány v části **II** a **III**. Pro porovnání výsledků numerického a analytického řešení je zvoleno proudění mezi dvěma pevnými deskami. Na tomto případě bude také ukázána modifikace numerické metody s využitím různých variant prostorové diskretizace a její vliv na výsledek. Pro další ověření správných výpočtů je zvoleno proudění kolem válce. Tato simulace proběhne pro různá Reynoldsova čísla, která budou porovnána s obtékáním publikovaném v [4].

3.1 Okrajové podmínky

Aby v rámci matematického modelování mohla být řešena příslušná soustava rovnic, musí být zvolena omezená oblast, která je doplněna o okrajové podmínky, které definují chování na hranicích zvolené oblasti. Charakter hranic je dán zadanou fyzikální situací.



Obr. 2: Schéma výpočtové oblasti

K základnímu přiblížení okrajových podmínek uvažujme část poloprostoru v \mathbb{E}_3 v kterém uvažujme omezenou oblast ve tvaru boxu se 6 stěnami viz obr. 2. Hranicím, které představují stěny boxu, jsou zadávány hodnoty rychlosti, tlaku a koncentrace pasivní příměsi. Ve směrech os x , y , z se nacházejí u uvažovaného elementu dvě stěny - první označme jako vstupní, druhou jako výstupní.

Podmínky pro výstupní hranici v ose x , vstupní, výstupní hranici v ose y a výstupní v ose z mohou být předepsány například jako Neumannovy nebo Dirichletovy okrajové podmínky. V této práci jsou dále předepsány Neumannovy homogenní podmínky ve tvaru

$$\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = 0; \frac{\partial v}{\partial \mathbf{n}} = 0; \frac{\partial w}{\partial \mathbf{n}} = 0; \frac{\partial C}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad (45)$$

kde \mathbf{n} je normálový vektor k dané stěně.

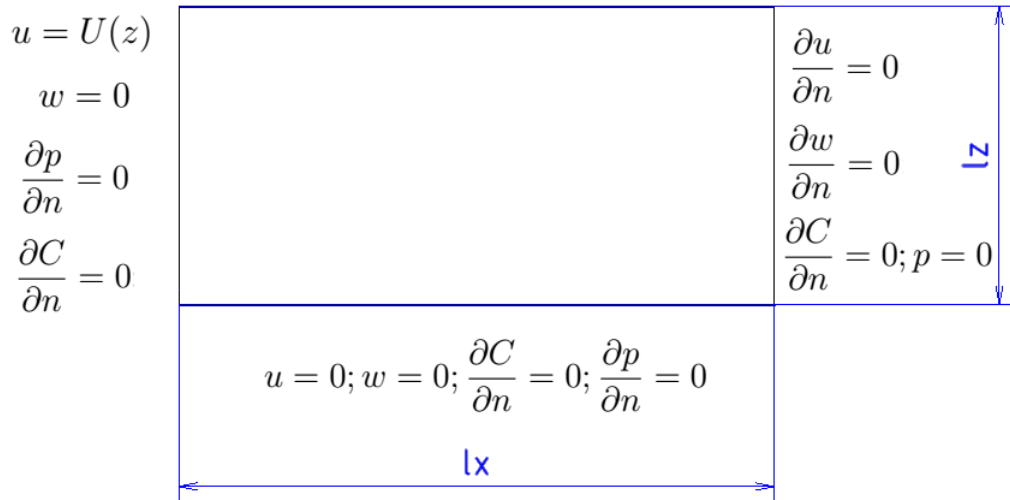
Pro vstupní hranici v ose x jsou předepsány vstupní hodnoty veličin. Tlak je zde předepsán pomocí Neumannovy podmínky.

Stejně tak mohou být předepsány podmínky pro vstupní hranici v osy z . Například pro proudění v mezní vrstvě atmosféry bývá tato hranice považována za zemský povrch, který může být vyjádřen jako funkce $z = h(x, y)$, která vyjadřuje tvar zemského povrchu v závislosti na nerovnostech a případných překážkách. Pro vazkou tekutinu zde předpokládáme tzv. *no-slip condition*, což je podmínka ulpívání proudu, která předepisuje $u = 0, v = 0, w = 0$.

V této práci se budu dále zabývat dvěma numerickými experimenty, které budou podrobněji rozebrány v části **III**. V obou případech se bude jednat o proudění ve směru x, z , které bude řešeno v \mathbb{E}_2 . Numerickým experimentem bude proudění mezi dvěma rovinnými paralelními deskami (kapitola 6) a obtékání válce (kapitola 7). Provede-li se podélný řez uvažovaným 3D boxem vznikne jedna stěna. Pro ní zde budou dále předepsány okrajové podmínky pro oba řešené numerické experimenty. Okrajové podmínky pro proudění mezi dvěma deskami jsou znázorněny na obr. 3 (str. 21), pro obtékání překážky ve tvaru válce na obr. 4 (str. 21).

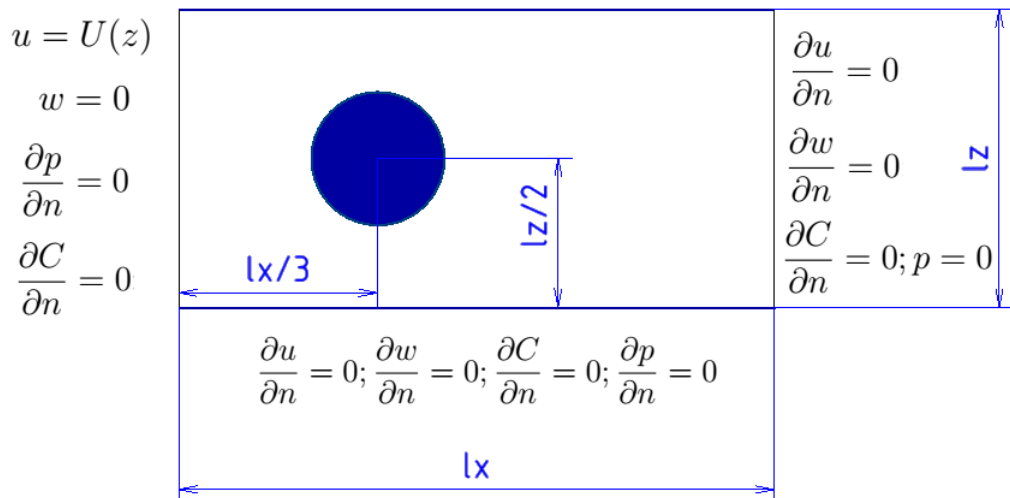
Na obr. 4 je kromě okrajových podmínek vyobrazen i modrý kruh, který reprezentuje překážku. Jedná se o kruh na souřadnicích $[\frac{lx}{2}, \frac{lz}{2}]$ s poloměrem $0.2 lz$. Místo okrajových podmínek pro překážku se zde využívá metody vnořené hranice, o které se v [14] uvádí, že byla poprvé publikována v [12] Charlesem S. Peskinem. V cizí literatuře je tato metoda dohledatelná pod zkratkou *IBM (immersed boundary method)*. Dle ní je v oblasti tekutiny vytvořena síť bodů, která reprezentuje překážku - v našem případě válec. V této definované oblasti dochází k nulování hodnot rychlostí, koncentrace, koeficientu tlumení ζ a koeficientu molekulární difuze pasivní příměsi K_C .

$$u = 0; w = 0; \frac{\partial C}{\partial n} = 0; \frac{\partial p}{\partial n} = 0$$



Obr. 3: Okrajové podmínky pro proudění mezi dvěma deskami

$$\frac{\partial u}{\partial n} = 0; \frac{\partial w}{\partial n} = 0; \frac{\partial C}{\partial n} = 0; \frac{\partial p}{\partial n} = 0$$



Obr. 4: Okrajové podmínky pro obtékání válce

Část II

Numerické metody

4 Numerické řešení úlohy metodou konečných diferencí

4.1 Princip metody sítí/konečných diferencí

K numerickému řešení diferenciálních rovnic se může využít například metoda konečných diferencí (*FDM - Finite difference method*). V [10] se o diferenčních metodách uvádí :

Jde o metody, které aproximují původní diferenciální úlohu samotou. Výsledkem diskretizace je soustava algebraických rovnic pro hodnoty přibližného řešení v konečné síti bodů x_0, x_1, \dots, x_n .

Do diferenční metody, občas nazývané metodou sítí, nespadá pouze metoda konečných diferencí, ale i metoda integrálních identit o které se lze více dočíst například v [10]. Metoda konečných diferencí nahrazuje derivace v diferenciální rovnici diferencemi v uzlových bodech. Diskretizaci pomocí této metody lze dle [10] popsat třemi kroky :

- nahrazení oblasti spojité změny argumentu sítí uzlů
- nahrazení funkcí v diferenciální rovnici sít'ovými funkcemi
- nahrazení derivací v uzlech sítě poměrnými diferencemi a sestavení soustavy diferenčních rovnic

Metoda konečných diferencí vychází z Taylorova rozvoje pomocí něž jsou nahrazeny derivace pomocí diferencí na rozdíl od jiných metod (např. metoda konečných objemů nebo konečných prvků), které využívají jinou formulaci úloh a odlišný princip diskretizace. Při metodě konečných diferencí vycházíme z diferenciální formulace, při metodě konečných objemů z integrální formulace a v případě metody konečných prvků ze slabé formulace.

Pro aproximaci derivací v diferenciální rovnici diferencemi bude v této práci dále využívána aproximace derivací diferenčními podíly. Mezi tři základní schémata difference patří : dopředná, zpětná a centrální. Derivace je pro 1D pro libovolnou veličinu ϕ definována jako

$$\frac{d\phi}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\phi(x + \Delta x) - \phi(x)}{\Delta x}. \quad (46)$$

Pomocí Taylorova rozvoje v $(x + \Delta x)$ ve tvaru

$$\phi(x + \Delta x) = \phi(x) + \frac{d\phi(x)}{dx} \Delta x + \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} \frac{\Delta x^2}{2!} + \frac{d^3\phi(x)}{dx^3} \frac{\Delta x^3}{3!} + \dots \quad (47)$$

získáme derivaci v konečné přesnosti

$$\frac{d\phi(x)}{dx} = \frac{\phi(x + \Delta x) - \phi(x)}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x), \quad (48)$$

kde $\mathcal{O}(\Delta x)$ symbolizuje chybu diskretizace závislou na volbě kroku. Pokud budeme zmenšovat prostorový krok $\Delta x \rightarrow 0$, pak se bude zmenšovat i diskretizační chyba $\mathcal{O}(\Delta x) \rightarrow 0$ a numerické řešení se bude blížit k přesnému řešení. Označíme-li dva uzly sítě s dolními indexy i , resp. $i + 1$ mající x -ové souřadnice x_i , resp. $x_{i+1} = x_i + \Delta x$ lze derivaci aproximovat dle vztahu

$$\phi'(x_i) \approx \frac{\phi(x_{i+1}) - \phi(x_i)}{\Delta x}. \quad (49)$$

Výraz (48) je nazýván **1. dopředná difference**. Další typy difference můžeme dle [11] a [16] vyjádřit ve tvarech

1. zpětná difference

$$\phi'(x) = \frac{\phi(x) - \phi(x - \Delta x)}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \quad (50)$$

$$\phi'(x_i) \approx \frac{\phi(x_i) - \phi(x_{i-1})}{\Delta x} \quad (51)$$

1. centrální difference

$$\phi'(x) = \frac{\phi(x + \Delta x) - \phi(x - \Delta x)}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (52)$$

$$\phi'(x_i) \approx \frac{\phi(x_{i+1}) - \phi(x_{i-1})}{2\Delta x} \quad (53)$$

2. centrální difference

$$\phi''(x) = \frac{\phi(x + \Delta x) - 2\phi(x) + \phi(x - \Delta x)}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (54)$$

$$\phi'(x_i) \approx \frac{\phi(x_{i+1}) - 2\phi(x_i) + \phi(x_{i-1}))}{\Delta x^2} \quad (55)$$

U simulací použitých v této práci vycházíme z diskretizace funkcí v prostoru a čase. Pro diskretizaci v prostoru využijeme různé varianty, které si porovnáme v další kapitole. V případě diskretizace v čase využíváme v této práci pouze Eulerova explicitního schématu. Zavedeme-li dále označení dvou uzlů s horními indexy n , respektive $n + 1$ mající časové souřadnice t_n , respektive $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ lze derivaci vyjádřit dle vztahu

$$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = \frac{\phi(x, t + \Delta t) - \phi(x, t)}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t) \quad (56)$$

aproximovaného jako

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi(x_i, t_n) \approx \frac{\phi(x_i, t_{n+1}) - \phi(x_i, t_n)}{\Delta t}. \quad (57)$$

Použitím této aproximace vnášíme do řešení chybu o které se lze dále dočíst například v [10], kde lze nalézt i odhad chyby pro různé aproximace. Tato chyba je v případě stacionárních případů, které budou dále v této práci řešeny, dána hlavně prostorovou diskretizací. Při změně časového kroku je vnesená chyba oproti prostorové diskretizaci malá, protože numerický výpočet je ukončen až poté, kdy časová derivace vymizí. Další chybou vnesenou použitím diskretizace může být například vnesení numerické difuze/disperze dle volby prostorové diskretizace, která bude rozebrána v další kapitole.

Při volbě velkého časového a prostorového kroku může dojít k destabilizaci schématu. Nutnou podmínkou k zajištění stability zvolené metody je zvolit vhodný časový a prostorový krok. Stabilitu můžeme zajistit například pomocí **CFL podmínky** pojmenované podle Courant, Friedrichs, Lewy

$$\Delta t \leq \frac{CFL}{\left(\frac{|a|}{\Delta x} + \frac{|b|}{\Delta z} + 2\mu \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right) \right)}, \quad (58)$$

kde CFL je Courantovo číslo, a rychlost ve směru osy x , b rychlost ve směru osy z . [13], [1] V publikacích [13], [1] se uvádí limitní hodnota Courantova čísla pro explicitní schémata, která je rovna 1. Jedná se o hodnotu na hraně stability, doporučuje se volit menší hodnotu.

Pro numerické řešení je dále důležitý výběr vhodné sítě. Síť dle strukturovanosti mohou být rozděleny do tří kategorií : strukturovaná, nestrukturovaná a hybridní. Pro metodu konečných diferencí se využívají většinou ortogonální kartézské sítě. Tato síť je dále s rovnoměrným dělením využita i v této práci. Pro zachycení přesné geometrie úlohy je často vhodné použít kombinaci sítí. Při předpokladu, že lokální chyba v řešení bude úměrně klesat se zmenšující se velikostí buňky lze získat odhad lokální chyby v buňkách. Na základě tohoto odhadu dále zjemnit síť v potřebných místech a vytvořit nejvhodnější síť pro danou úlohu. O dalším možném dělení sítí je možné se dočíst například v knize [13] či [1].

Rozšířením předchozích úvah do \mathbb{E}_2 aproximujeme hodnotu funkce ϕ v bodě $[x_i, z_j, t_n]$ sít'ovou hodnotou $\phi_{i,j}^n$. V této bakalářské práci budou dále řešeny numerické experimenty v \mathbb{E}_2 , proto je vhodné si pro snadnější zápis schémat v \mathbb{E}_2 definovat operátory dopředných, zpětných a dalších diferencí. Toto zavedené značení bude dále použito například v následující kapitole či v kapitole 6.2, v které bude detailněji rozebráno numerické řešení experimentu.

Dopředná

$$\vec{\delta}_x \phi_{i,j}^n = \frac{\phi_{i+1,j}^n - \phi_{i,j}^n}{\Delta x}, \quad \vec{\delta}_z \phi_{i,j}^n = \frac{\phi_{i,j+1}^n - \phi_{i,j}^n}{\Delta z} \quad (59)$$

Zpětná

$$\overleftarrow{\delta}_x \phi_{i,j}^n = \frac{\phi_{i,j}^n - \phi_{i-1,j}^n}{\Delta x}, \quad \overleftarrow{\delta}_z \phi_{i,j}^n = \frac{\phi_{i,j}^n - \phi_{i,j-1}^n}{\Delta z} \quad (60)$$

1. centrální

$$\delta_x \phi_{i,j}^n = \frac{1}{2} (\vec{\delta}_x + \overleftarrow{\delta}_x) \phi_{i,j}^n = \frac{1}{2\Delta x} (\phi_{i+1,j}^n - \phi_{i-1,j}^n) \quad (61)$$

$$\delta_z \phi_{i,j}^n = \frac{1}{2} (\vec{\delta}_z + \overleftarrow{\delta}_z) \phi_{i,j}^n = \frac{1}{2\Delta z} (\phi_{i,j+1}^n - \phi_{i,j-1}^n) \quad (62)$$

2. centrální

$$\delta_{xx} \phi_{i,j}^n = \frac{1}{\Delta x} (\vec{\delta}_x - \overleftarrow{\delta}_x) \phi_{i,j}^n = \frac{1}{\Delta x^2} (\phi_{i+1,j}^n - 2\phi_{i,j}^n + \phi_{i-1,j}^n) \quad (63)$$

$$\delta_{zz} \phi_{i,j}^n = \frac{1}{\Delta z} (\vec{\delta}_z - \overleftarrow{\delta}_z) \phi_{i,j}^n = \frac{1}{\Delta z^2} (\phi_{i,j+1}^n - 2\phi_{i,j}^n + \phi_{i,j-1}^n) \quad (64)$$

4.2 Vybraná schémata pro rovnici advekce

Modifikace numerické metody s využitím různých variant prostorové diskretizace bude ukázána na rovnici advekce.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (65)$$

Mezi základní explicitní metody prostorové diskretizace patří například schéma Up-wind $[U]$, Down-wind $[D]$, Centrální $[C]$ a Lax-Friedrichs $[LF]$. Pod pojmem Up-wind (protiproudové) bývá často zahrnuto schéma $[U]$ a $[D]$, respektive dopředná a zpětná diference dle znaménka advekční rychlosti. Toto souhrné označení lze nalézt například v [4]. Samostatné schéma Down-wind $[D]$ se díky své nestabilitě nevyužívá.

Budeme-li pro jednodušší zápis uvažovat $1D$ situaci, lze numerické řešení rovnice advekce (76 / str. 29) zapsat pro jednotlivá schémata dle [4] a [9] jako

$$\begin{aligned} [U] : \vec{\delta}_t u_i^n + a \left(\overleftarrow{\delta}_x u_i^n \right) &= 0 \\ \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a \left(\frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} \right) &= 0 \\ u_i^{n+1} &= u_i^n - \frac{a\Delta t}{\Delta x} (u_i^n - u_{i-1}^n) \end{aligned} \quad (66)$$

$$\begin{aligned} [D] : \vec{\delta}_t u_i^n + a \left(\overrightarrow{\delta}_x u_i^n \right) &= 0 \\ \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a \left(\frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x} \right) &= 0 \\ u_i^{n+1} &= u_i^n - \frac{a\Delta t}{\Delta x} (u_{i+1}^n - u_i^n) \end{aligned} \quad (67)$$

$$\begin{aligned} [C] : \vec{\delta}_t u_i^n + a (\delta_x u_i^n) &= 0 \\ \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a \left(\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} \right) &= 0 \\ u_i^{n+1} &= u_i^n - \frac{a\Delta t}{2\Delta x} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n). \end{aligned} \quad (68)$$

Schéma Lax-Friedrichs $[LF]$ je velmi podobné centrálnímu schématu $[C]$, liší se hlavně tím, že u $[LF]$ je hodnota u_i^n nahrazena jako průměr okolních hodnot.

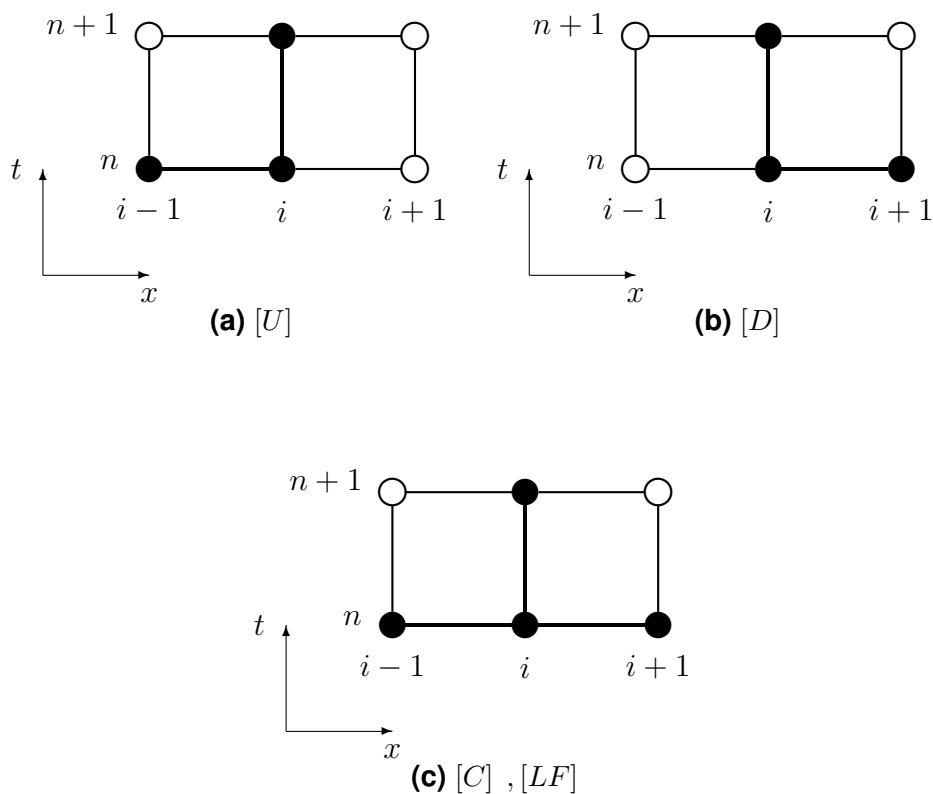
$$[LF] : u_i^{n+1} = \frac{1}{2} (u_{i-1}^n + u_{i+1}^n) - \frac{a\Delta t}{2\Delta x} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) \quad (69)$$

Ve 2D situacích lze pro rovnici advekce $u_t + au_x + bu_z = 0$ zapsat numerické řešení pro schéma $[LF]_2$, které využívá průměru přes více okolních hodnot.

$$[LF]_2 : u_i^{n+1} = \frac{1}{4} (u_{i-1,j}^n + u_{i+1,j}^n + u_{i,j-1}^n + u_{i,j+1}^n) - \frac{a\Delta t}{2\Delta x} (u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n) - \frac{b\Delta t}{2\Delta z} (u_{i,j+1}^n - u_{i,j-1}^n) \quad (70)$$

Na obr. 5 je ukázáno jak lze v případě 1D schémat zobrazit použité výpočtové body. Čemuž se v cizí literatuře říká *computational stencils*. Je zde vidět které body jsou při výpočtech použity a z jakých jsou časových vrstev. V případě těchto schémat se využívá pouze jednoho bodu z $n + 1$ vrstvy, jedná se proto o tzv. explicitní třídu schémat. Pokud by bodů z $n + 1$ vrstvy bylo využito více jednalo by se o schémata implicitní.

Z 1D schémat jsou zde ukázána tři schémata : Centrální $[C]$, Down-wind $[D]$ a Up-wind $[U]$. Centrální schéma $[C]$ lze získat kombinací schémat Up-wind $[U]$ a Down-wind $[D]$. Toto schéma využívá stejné výpočtové okolí jako schéma $[LF]$, které také patří do rodiny centrálních schémat, ale liší se od centrálního schématu $[C]$ využitím jiné aproximace.



Obr. 5: Výpočtové body (okolí) (*Computational stencils*) pro různá schémata v 1D

V této práci se dále využívá třídy explicitních schémat vycházejících z lineární kombinace schémat Up-wind $[U]$ a Down-wind $[D]$ ve tvaru

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a \left[\alpha [D] + (1 - \alpha) [U] \right] = 0. \quad (71)$$

resp. po rozpisu

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a \left[\alpha \left(\frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x} \right) + (1 - \alpha) \left(\frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} \right) \right] = 0 \quad (72)$$

Specifickým nastavením parametru α v rovnici (71) lze vyjádřit všechna zde zmíněná schémata. Odpovídající hodnoty α jsou vypsány v tab. 1. Každé z těchto schémat vnáší do numerického výpočtu numerickou vazkost μ_n , kterou lze definovat pomocí modifikované rovnice.

$$\underbrace{u_t + au_x = 0}_{\text{původní rovnice advekce}} \Rightarrow \underbrace{u_t + au_x = \mu_n u_{xx}}_{\text{modifikovaná rovnice}} \quad (73)$$

Koeficienty numerické viskozity pro jednotlivá schéma je možné získat z modifikované rovnice, která bude následně pro třídu explicitních schémat obecně odvozena. Koeficienty numerické viskozity a modifikované rovnice pro vybrané schémata jsou vypsány v tab. 1. Výsledné modifikované rovnice odpovídají modifikovaným rovnicím uvedených například v [9].

Schéma	Koeficient α	Modifikovaná rovnice	Koeficient μ_n
$[U]$ Up-wind	0	$u_t + au_x = \frac{a\Delta x}{2}(1 - \gamma) u_{xx}$	$\frac{a\Delta x}{2}(1 - \gamma)$
$[D]$ Down-wind	1	$u_t + au_x = -\frac{a\Delta x}{2}(1 + \gamma) u_{xx}$	$-\frac{a\Delta x}{2}(1 + \gamma)$
$[C]$ Centrální	$\frac{1}{2}$	$u_t + au_x = -\frac{a\Delta x}{2}\gamma u_{xx}$	$-\frac{a\Delta x}{2}\gamma$
$[LF]$ Lax-Friedrichs	$\frac{1}{2} - \frac{\Delta x}{2a\Delta t}$	$u_t + au_x = \frac{a\Delta x}{2}\left(\frac{1}{\gamma} - \gamma\right) u_{xx}$	$\frac{a\Delta x}{2}\left(\frac{1}{\gamma} - \gamma\right)$

Tab. 1: Schémata, jejich koeficienty a modifikované rovnice

4.3 Odvození modifikované rovnice

Při odvození obecné modifikované rovnice pro zmíněná schémata vyjdeme z rovnice advekce.

$$u_t + au_x = 0 \quad (74)$$

Konvektivní člen (prostorovou derivaci) lze diskretizovat užitím lineární kombinace dopředné a zpětné difference resp. Up-wind [U] a Down-wind [D] schématu.

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a \left[\alpha \left(\frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x} \right) + (1 - \alpha) \left(\frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} \right) \right] = 0 \quad (75)$$

Vrátíme-li se k původnímu (spojitému) značení $u_i^n \Rightarrow u(x_i, t_n)$ lze psát

$$\begin{aligned} \frac{u(x_i, t_{n+1}) - u(x_i, t_n)}{\Delta t} + a \left[\alpha \left(\frac{u(x_{i+1}, t_n) - u(x_i, t_n)}{\Delta x} \right) \right. \\ \left. + (1 - \alpha) \left(\frac{u(x_i, t_n) - u(x_{i-1}, t_n)}{\Delta x} \right) \right] = 0. \end{aligned} \quad (76)$$

Pro dostatečně hladkou funkci $u(x_i, t_n)$ lze zapsat její Taylorův rozvoj jako

$$u(x_i, t_{n+1}) = u(x_i, t_n) + u_t(x_i, t_n)\Delta t + u_{tt}(x_i, t_n)\frac{\Delta t^2}{2!} + u_{ttt}(x_i, t_n)\frac{\Delta t^3}{3!} + \mathcal{O}(\Delta t^4)$$

$$u(x_{i-1}, t_n) = u(x_i, t_n) - u_x(x_i, t_n)\Delta x + u_{xx}(x_i, t_n)\frac{\Delta x^2}{2!} - u_{xxx}(x_i, t_n)\frac{\Delta x^3}{3!} + \mathcal{O}(\Delta x^4)$$

$$u(x_{i+1}, t_n) = u(x_i, t_n) + u_x(x_i, t_n)\Delta x + u_{xx}(x_i, t_n)\frac{\Delta x^2}{2!} + u_{xxx}(x_i, t_n)\frac{\Delta x^3}{3!} + \mathcal{O}(\Delta x^4)$$

respektive

$$\frac{u(x_i, t_{n+1}) - u(x_i, t_n)}{\Delta t} = u_t(x_i, t_n) + u_{tt}(x_i, t_n)\frac{\Delta t}{2!} + u_{ttt}(x_i, t_n)\frac{\Delta t^2}{3!} + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (77)$$

$$\frac{u(x_i, t_n) - u(x_{i-1}, t_n)}{\Delta x} = u_x(x_i, t_n) - u_{xx}(x_i, t_n)\frac{\Delta x}{2!} + u_{xxx}(x_i, t_n)\frac{\Delta x^2}{3!} + \mathcal{O}(\Delta x^3) \quad (78)$$

$$\frac{u(x_{i+1}, t_n) - u(x_i, t_n)}{\Delta x} = u_x(x_i, t_n) + u_{xx}(x_i, t_n)\frac{\Delta x}{2!} + u_{xxx}(x_i, t_n)\frac{\Delta x^2}{3!} + \mathcal{O}(\Delta x^3). \quad (79)$$

Dosazením vztahů (77), (78), (79) do (76) lze získat

$$\begin{aligned} u_t(x_i, t_n) + u_{tt}(x_i, t_n)\frac{\Delta t}{2} + u_{ttt}(x_i, t_n)\frac{\Delta t^2}{6} + \mathcal{O}(\Delta t^3) \\ + a \left[\alpha \left(u_x(x_i, t_n) + u_{xx}(x_i, t_n)\frac{\Delta x}{2} + u_{xxx}(x_i, t_n)\frac{\Delta x^2}{6} + \mathcal{O}(\Delta x^3) \right) \right. \\ \left. + (1 - \alpha) \left(u_x(x_i, t_n) - u_{xx}(x_i, t_n)\frac{\Delta x}{2} + u_{xxx}(x_i, t_n)\frac{\Delta x^2}{6} + \mathcal{O}(\Delta x^3) \right) \right] = 0. \end{aligned} \quad (80)$$

Po menších úpravách

$$\begin{aligned}
 u_t(x_i, t_n) + a \left[\alpha + (1 - \alpha) \right] u_x(x_i, t_n) = \\
 - u_{tt}(x_i, t_n) \frac{\Delta t}{2} - u_{ttt}(x_i, t_n) \frac{\Delta t^2}{6} + \mathcal{O}(\Delta t^3) \\
 - a\alpha \left(u_{xx}(x_i, t_n) \frac{\Delta x}{2} + u_{xxx}(x_i, t_n) \frac{\Delta x^2}{6} + \mathcal{O}(\Delta x^3) \right) \\
 - a(1 - \alpha) \left(-u_{xx}(x_i, t_n) \frac{\Delta x}{2} + u_{xxx}(x_i, t_n) \frac{\Delta x^2}{6} + \mathcal{O}(\Delta x^3) \right).
 \end{aligned} \tag{81}$$

Na pravé straně se nacházejí prostorové i časové derivace. K jejich eliminaci bude využito původní rovnice advekce (74 / str. 29), kterou lze přepsat do tvaru

$$u_t = -au_x. \tag{82}$$

Jejím užitím pak lze vyjádřit i vyšší časové derivace pomocí prostorových.

$$u_{tt} = a^2 u_{xx} \quad u_{ttt} = -a^3 u_{xxx} \tag{83}$$

Aplikováním vztahů (82), (83) do (81) dostáváme

$$\begin{aligned}
 u_t(x_i, t_n) + au_x(x_i, t_n) = -u_{xx}(x_i, t_n) \frac{a^2 \Delta t}{2} + \mathcal{O}(\Delta t^3) \\
 - a\alpha \left(+u_{xx}(x_i, t_n) \frac{\Delta x}{2} + \mathcal{O}(\Delta x^3) \right) \\
 - a(1 - \alpha) \left(-u_{xx}(x_i, t_n) \frac{\Delta x}{2} + \mathcal{O}(\Delta x^3) \right).
 \end{aligned} \tag{84}$$

Po vytknutí lze (84) upravit do tvaru

$$u_t + au_x = - \left[\frac{a^2 \Delta t}{2} + a \frac{\Delta x}{2} \left(\underbrace{\alpha - (1 - \alpha)}_{2\alpha - 1} \right) \right] u_{xx} + \mathcal{O}(\Delta t^3; \Delta x^3) \tag{85}$$

a dále zjednodušit

$$u_t + au_x = - \frac{a \Delta x}{2} \left[(2\alpha - 1) + \frac{a \Delta t}{\Delta x} \right] u_{xx}. \tag{86}$$

Zavedením substituce

$$\gamma = \frac{a \Delta t}{\Delta x} \tag{87}$$

lze (86) přepsat do finálního tvaru

$$u_t + au_x = - \frac{a \Delta x}{2} \left[(2\alpha - 1) + \gamma \right] u_{xx}. \tag{88}$$

Z původní rovnice advekce tedy vznikne aplikací numerického schématu modifikovaná rovnice, která je typově rovnicí advekce-difuze. To znamená, že numerické řešení dosažené daným schématem bude blíž k přesnému řešení modifikované rovnice advekce-difuze.

$$u_t + au_x = 0 \Rightarrow u_t + au_x = - \underbrace{\frac{a\Delta x}{2} [(2\alpha - 1) + \gamma]}_{\text{Numerická viskozita } \mu_n} u_{xx} \quad (89)$$

Vnesením numerické vazkosti se obvykle zlepší stabilita numerické metody, zároveň však do řešení vnášíme chybu, kterou lze ovlivnit vhodnou modifikací daného schématu [8]. Numerickou diskretizací dle zvoleného schématu v podstatě pozměníme rovnici, kterou řešíme. Vnesenou numerickou difuzí/disperzí modifikujeme řešený případ a k tomu je třeba přihlídnout při interpretaci numerických výsledků.

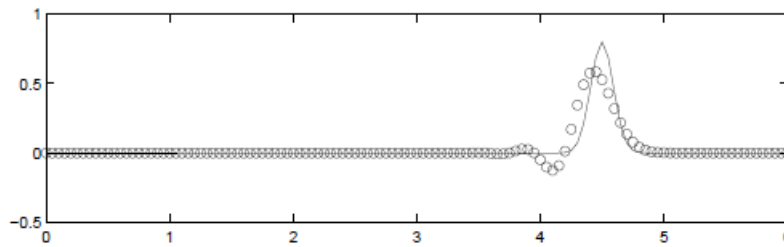
Při konzistenci numerické metody s diferenciální rovnicí by mělo být možné se dostat blízko k řešení původní rovnice. Konzistence je zjednodušeně řečeno vlastnost zajišťující při dostatečném zjemnění sítě (jak v prostoru, tak i v čase) schopnost dostat se libovolně blízko k původní rovnici.

4.4 Stabilita a chování vybraných schémat

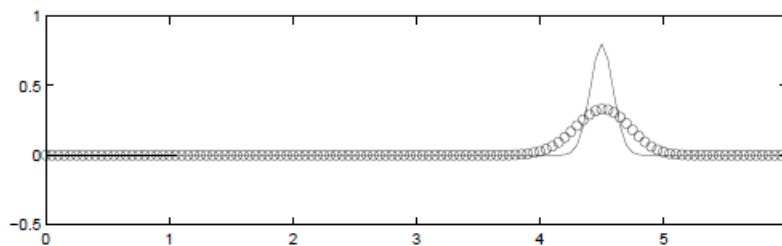
U schémat prvního řádu je dominantním členem difuze, která se v řešení projeví podobně jako v obr. 6b, tzn. tlumením jednotlivých komponent řešení. U schémat druhého řádu je dominantním členem disperze, která se v řešení projeví podobně jako v obr. 6a, tzn. numerickou oscilací v blízkosti velkých gradientů řešení.[9] Stručná charakteristika stability a chování je u vybraných schémat uvedena v tab. 2.

Schéma	Stabilita	Chování
[U]	Stabilní	Difuzní
[D]	Nestabilní	Disperzní
[C]	Nestabilní	Disperzní
[LF]	Stabilní	Difuzní

Tab. 2: Stabilita a chování schémat



(a) Disperzní [9]



(b) Difuzní [9]

Obr. 6: Příklad disperzního a difuzního charakteru schémat pro rovnici advekce (převzato z [9]).

Část III

Numerické experimenty

V této kapitole budou podrobněji rozebrány dva numerické případy - proudění mezi dvěma rovinnými, paralelními deskami a obtékání válce. K numerickému řešení zmíněných úloh bylo využito metody konečných diferencí s využitím různých variant prostorové diskretizace, které byly rozebrány v předchozích kapitolách a jejichž použití bude dále specifikováno v této kapitole. Zvolená numerická metoda je řešena v Matlabu. Nejdříve je provedeno odladění zvolené metody na základě známého řešení a provedení ověřovacích výpočtů. U proudění mezi dvěma deskami je porovnáno numerické a analytické řešení, u proudění kolem válce je simulace porovnána s experimentem z [4].

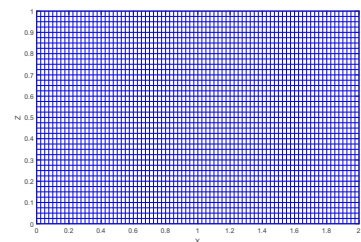
5 Základní nastavení úloh

V této práci byla úspěšně provedena numerická simulace nestlačitelného proudění a transportu pasivních příměsí. Na rozvinutých znalostech bakalářského studia *Teoretického základu strojího inženýrství* byl vytvořen řešič, který poskytuje relativně přesné výsledky. Nejdříve byla naprogramována metoda po jejímž odladění byly provedeny ověřovací výpočty. Program byl vytvořen v Matlabu. Je napsán tak, že stačí zadefinovat pouze geometrické a parametrické nastavení.

5.1 Geometrické nastavení

Pro oba řešené případy je geometrické nastavení stejné. Při formulaci vycházíme ze souřadného systému $x - z$ a v obou případech je použita kartézská síť s počtem buněk nx, nz a oblast o rozměrech lx, lz .

- souřadný systém $x - z$
 - kartézská síť 80×40
- $$nx = 80; lx = 2.0; \Delta x = \frac{lx}{nx}; x_0 = 0.0$$
- $$nz = 40; lz = 1.0; \Delta z = \frac{lz}{nz}; z_0 = 0.0$$



Obr. 7: Síť

5.2 Parametrické nastavení

Program je napsán tak, že v rámci parametrického nastavení stačí zadefinovat pouze vstupní hodnoty veličin jako jsou počáteční rychlosti u_0, w_0 , umístění a velikost vstupní koncentrace a její počáteční hodnota C_0 , hustota ρ , funkce pomocí které je definována překážka a volitelné hodnoty parametrů jako je Courantovo číslo CFL, koeficient umělé stlačitelnosti \mathcal{B} a koeficienty rozhodující o lineární kombinaci schémat ζ, α, β .

- $\rho = 1$
- $u_0 = 1$
- $w_0 = 0.0$
- $C_0 = 1.0$
- $\mathcal{B} = 1.0 u_0$
- $CFL = 0.9$
- $\zeta = 0.001$ ($\zeta_p = 0.001, \zeta_u = 0.001, \zeta_w = 0.001, \zeta_C = 0.001$)
- $\alpha = 0.5; \beta = 0.5$ - což odpovídá tzv. centrálnímu schématu prostorové diskretizace

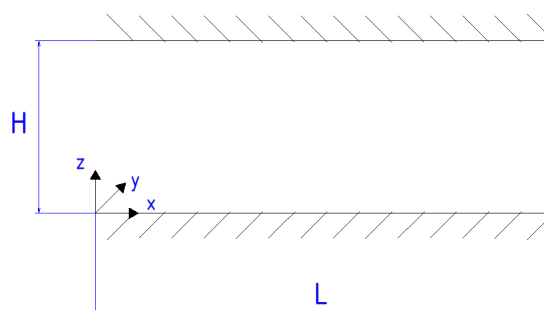
Matlab si dále sám spočítá kinematickou viskozitu ν na základě vztahu (18 / str. 14) mezi kinematickou ν , dynamickou μ viskozitou a Reynoldsově čísle Re . Automatický výpočet je nastaven také pro volbu vhodného časového kroku v souladu s CFL podmínkou zvláště pro každou iteraci dle rovnice (58 / str. 24). Ve snaze snížit časovou náročnost výpočtu byl zapsaný kód zjednodušen a byla zavedena další volitelná veličina *nim* která udává počet vykreslených iterací. Ukončení výpočtu lze nastavit buď volbou počtu iterací *nit* nebo volbou časového úseku (*cas* = 100), kterého se má sumou časových kroků dosáhnout.

Dále běží výpočet již bez nutnosti zásahu dle uvedených podmínek a rovnic v této práci. Pro časovou diskretizaci bylo použito Eulerovo explicitní schéma. Pro prostorovou diskretizaci je pro difuzní členy použito pouze centrální diference, pro konvektivní členy je využito modifikovaného Lax-Friedrichsova schématu, centrálního schéma a kombinace dopředné a zpětné diference. Tato kombinace takzvaného protiproudého schématu je ovládána koeficienty α, β . V programu dochází k jejich automatické změně, podle velikosti rychlosti ve směru osy x ($u \Rightarrow \alpha$) a z ($w \Rightarrow \beta$).

6 Proudění mezi dvěma deskami

Proudění v potrubí, které ve $2D$ představuje proudění mezi dvěma rovinnými, paralelními, deskami, je v literatuře dohledatelné jako zvláštní případ *rovinného Poiseuilleova (Hagen-Poiseuilleova) proudění*. Pro toto proudění je známé analytické řešení, které bude v následující sekci odvozeno ze systému Navierových-Stokesových rovnic a pomocí tohoto získaného přesného řešení bude následně provedeno ověření vyvinutého řešiče. Porovnání numerického a analytického řešení v závislosti na volbě parametrů bude podrobněji rozebráno v kapitole 6.3 .

6.1 Analytické řešení proudění mezi dvěma deskami



Obr. 8: Schéma dvou desek

Analytické řešení můžeme odvodit vyjdeme-li z odvozené rovnice bilance hmotnosti (39 / str. 18) a bilance hybnosti (40 / str. 18) pro nestlačitelné tekutiny.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (90)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{f} \quad (91)$$

respektive ve složkovém zápisu

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (92)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) + f_x \quad (93)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \right) + f_y \quad (94)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right) + f_z \quad (95)$$

Při předpokladech

– časově ustálené proudění

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

– nestlačitelná Newtonovská kapalina (s konst. hustotou $\rho = konst.$).

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu \mathcal{D}$$

$$\mathcal{L} = \nabla \mathbf{u} = \underbrace{\frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T]}_{\mathcal{D}} + \underbrace{\frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} - (\nabla \mathbf{u})^T]}_{\mathcal{W}} \quad (96)$$

kde \mathcal{D} resp. \mathcal{W} představuje symetrickou, resp. antisymetrickou část gradientu rychlosti \mathcal{L} . Tzn.

$$\mathcal{D} = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T], \quad \text{resp.} \quad \mathcal{W} = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} - (\nabla \mathbf{u})^T]. \quad (97)$$

– jednorozměrné proudění

$$u \neq 0, v = 0, w = 0$$

$$u(\mathbf{x}) = u(x, z)$$

– plně vyvinuté proudění

$$u(x, z) = u(z), \quad \nabla p(x, z) = \nabla p(z)$$

– proudění v gravitačním poli

$$\mathbf{f} = \mathbf{g} = (0; 0; g)$$

dostaneme

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (98)$$

$$D_{xx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \quad (99)$$

$$D_{yx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad (100)$$

$$D_{zx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \quad (101)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) + f_x \quad (102)$$

Soustava rovnic se zredukuje na

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} = \frac{p_{out} - p_{in}}{L} \quad (103)$$

$$\tau_{zx} = \mu \frac{\partial u}{\partial z} \quad (104)$$

$$\mu \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = \frac{p_{out} - p_{in}}{L}. \quad (105)$$

Zavedením konstanty A

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = \frac{p_{out} - p_{in}}{L} \frac{1}{\mu} = A \quad (106)$$

a následnou integrací lze získat

$$\frac{\partial u}{\partial z} = A z + C_1 \quad (107)$$

$$u(z) = A \frac{z^2}{2} + C_1 z + C_2. \quad (108)$$

Z okrajových podmínek

$$z = 0 \Rightarrow u = 0 \quad z = H \Rightarrow u = 0 \quad (109)$$

získáme integrační konstanty

$$C_2 = 0 \quad C_1 = -A \frac{H}{2}. \quad (110)$$

Profil rychlosti ve směru x po dosažení získáme ve tvaru

$$u(z) = \frac{p_{out} - p_{in}}{L} \frac{1}{2\mu} (z^2 - zH), \quad (111)$$

ze které lze vyjádřit gradient tlaku G_a .

$$G_{anal} = \frac{p_{out} - p_{in}}{L} = \frac{u(z) 2 \mu}{z^2 - zH} \quad (112)$$

Rychlostní profil proudění mezi dvěma deskami je parabolický (maximální rychlost u_{max} je uprostřed mezi deskami). Za použití podmínek

$$u(0) = 0 \quad u(H) = 0 \quad u\left(\frac{H}{2}\right) = u_{max} \quad (113)$$

lze rychlostní profil zapsat do tvaru

$$u(z) = \frac{-4 u_{max}}{H^2} (z^2 - zH) \quad (114)$$

Dosažením rychlostního profilu z rovnice (114) do rovnice (112) lze vyjádřit gradient tlaku ve tvaru

$$G_a = \frac{-8u_{max}\mu}{H^2}. \quad (115)$$

Pro zvolené základní nastavení, které bylo uvedeno v kapitole 5, lze dosažením

$$u_{max} = u_0 = 1.0 \quad H = lz = 1.0 \quad (116)$$

do odvozené rovnice (115) vyjádřit přesnou hodnotu analytického (pro $Re = 10.0$ dle definice (125 / str. 47)) řešení jako

$$G_a = -1.0400. \quad (117)$$

Vyjádřená hodnota analytického řešení bude v kapitole 6.3 porovnána s numerickým řešením.

6.2 Numerické řešení proudění mezi dvěma deskami

Při numerické simulaci proudění mezi dvěma deskami vycházíme ze základního nastavení, které je uvedeno v kapitole 5.

V případě časové diskretizace volím Eulerovo explicitní schéma. V případě diskretizace prostoru využívám pro konvektivní členy modifikované Lax-Friedrichsovo schéma, centrální schéma a kombinaci dopředné a zpětné diference. Pro difuzní členy používám výhradně centrální diference. Časový krok je volen v souladu s CFL podmínkou zvláště pro každou iteraci. Simulace je ukončena v případě, že součet časových kroků (tzn. celkový iterační čas) překročí hodnotu 100. Pokud do té doby nedojde k ustálení, tak se hodnota navýší.

V příložených výstupech se nachází numerické řešení dvourozměrného tlakového proudění nestlačitelné Newtonovské kapaliny mezi dvěma pevnými deskami pro odlišná Reynoldsova čísla. Vstupní rychlostní profil ve směru x je dle odvozeného numerického řešení parabolický, ve směru z je uvažována nulová rychlost.

Okrajové podmínky jsou rozebrány v kapitole 3.1. Přesná specifikace podmínek pro proudění mezi dvěma deskami je znázorněna na obr. 3 (str. 21). Pro numerickou simulaci proudění mezi dvěma deskami je možné použít dvě varianty předpisů. Jednou z variant je předepsaný tlak na vstupu i na výstupu, kde dojde k vyvinutí proudění. Druhou variantou, která je dále v práci použita, je předepsání rychlosti na vstupu a tlaku na výstupu.

Při numerickém řešení se vychází ze soustavy rovnic z kapitoly 2.2 . Následné rovnice, které zde budou vypsány, jsou použity při výpočtech v Matlabu.

Při výpočtu tlaku se využívá metody umělé stlačitelnosti. Vychází se z rovnice (44 / str. 18) závislé na koeficientu umělé stlačitelnosti \mathcal{B} .

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\mathcal{B}^2(\nabla \cdot \mathbf{u})$$

Při využití explicitního schématu časové diskretizace a modifikovaného Lax-Friedrichsova schématu $[LF]_2$ lze rovnici přepsat pomocí diskretních hodnot tlaku a rychlosti

$$p_{i,j}^{n+1} = (1 - \zeta_p) p_{i,j}^n + \zeta_p \left(\frac{p_{i-1,j}^n + p_{i+1,j}^n + p_{i,j-1}^n + p_{i,j+1}^n}{4} \right) - \Delta t \mathcal{B}^2 (\delta_x u_{i,j}^n + \delta_z w_{i,j}^n), \quad (118)$$

kde ζ_p představuje koeficient tlumení. Jeho nastavením je umožněno přepínat mezi centrálním schématem $[C]$ ($\zeta_p = 0$), Lax-Friedrichsovým schématem $[LF]$ ($\zeta_p = 1$) a jejich kombinací ($\zeta_p \in (0; 1)$). Modifikované Lax-Friedrichsovo schéma bylo využito kvůli eliminaci numerických oscilací v poli tlaku a kvůli snížení počtu nutných iterací k dosažení ustáleného stavu. Obdobně je koeficient ζ využit i u rychlostí (ζ_u, ζ_w) a koncentrace (ζ_C).

Z odvozených Navierových-Stokesových rovnic (24 / str. 15) ve tvaru

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

lze při využití explicitního Eulerova schématu časové diskretizace a využitím modifikovaného Lax-Friedrichsova schématu, resp. Up-wind schémata, 1. a 2. centrální diference při prostorové diskretizaci vyjádřit pomocí diskretních hodnot jako

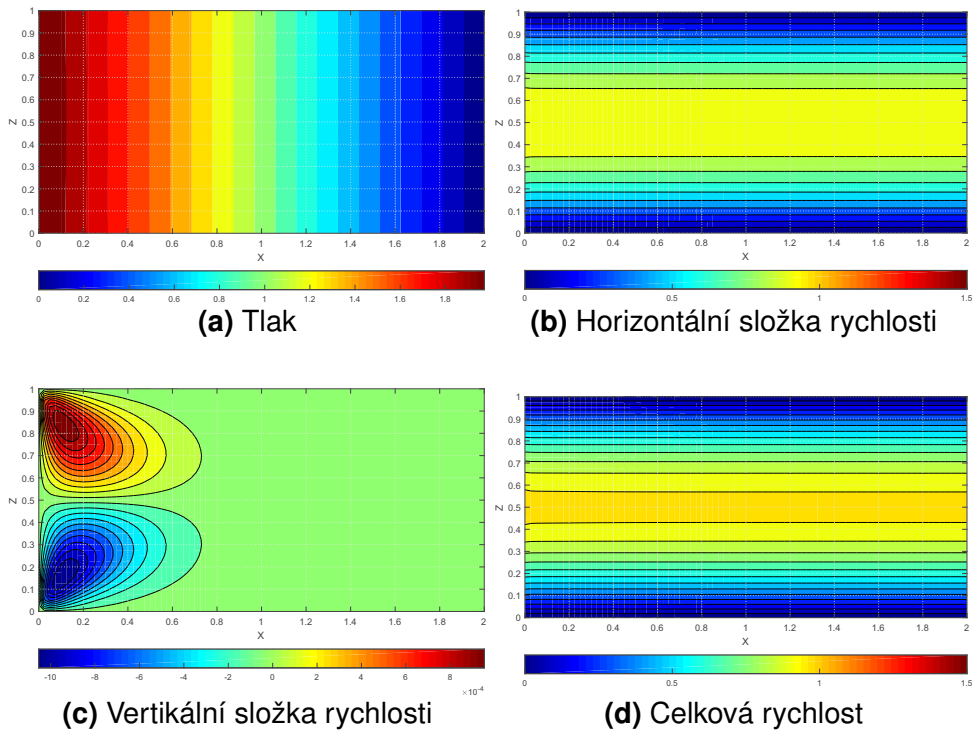
$$\begin{aligned} u_{i,j}^{n+1} = & (1 - \zeta_u) u_{i,j}^n + \zeta_u \left(\frac{u_{i-1,j}^n + u_{i+1,j}^n + u_{i,j-1}^n + u_{i,j+1}^n}{4} \right) \\ & - \Delta t \left[-\frac{1}{\rho} \delta_x p_{i,j}^n + \nu_{i,j}^n \left(\delta_{xx} u_{i,j}^n + \delta_{zz} u_{i,j}^n \right) \right. \\ & + u_{i,j}^n \left(\alpha_{i,j}^n \overrightarrow{\delta}_x u_{i,j}^n + (1 - \alpha_{i,j}^n) \overleftarrow{\delta}_x u_{i,j}^n \right) \\ & \left. + w_{i,j}^n \left(\beta_{i,j}^n \overrightarrow{\delta}_z u_{i,j}^n + (1 - \beta_{i,j}^n) \overleftarrow{\delta}_z u_{i,j}^n \right) \right] \end{aligned} \quad (119)$$

$$\begin{aligned}
 w_{i,j}^{n+1} = & (1 - \zeta_w) w_{i,j}^n + \zeta_w \left(\frac{w_{i-1,j}^n + w_{i+1,j}^n + w_{i,j-1}^n + w_{i,j+1}^n}{4} \right) \\
 & - \Delta t \left[-\frac{1}{\rho} \delta_z p_{i,j}^n + \nu_{i,j}^n \left(\delta_{xx} w_{i,j}^n + \delta_{zz} w_{i,j}^n \right) \right. \\
 & + u_{i,j}^n \left(\alpha_{i,j}^n \overrightarrow{\delta}_x w_{i,j}^n + (1 - \alpha_{i,j}^n) \overleftarrow{\delta}_x w_{i,j}^n \right) \\
 & \left. + w_{i,j}^n \left(\beta_{i,j}^n \overrightarrow{\delta}_z w_{i,j}^n + (1 - \beta_{i,j}^n) \overleftarrow{\delta}_z w_{i,j}^n \right) \right],
 \end{aligned} \tag{120}$$

kde α, β jsou koeficienty (upwindingu) závislé na poloze a lokální rychlosti. Jejich nastavením lze vytvořit jakoukoliv lineární kombinaci dopředných a zpětných diferencí. Specifickým nastavením lze dosáhnout i základních schémat, která v této práci byla zmíněna. Volbou $\alpha = \beta = 0.5$ získáme například schéma centrální [C], $\alpha = \beta = 0.0$ schéma up-wind [U] pro $u, v > 0$ a $\alpha = \beta = 1.0$ schéma down-wind [D].

Výsledky provedené numerické simulace jsou zobrazeny pomocí polí tlaku, složek jednotlivých rychlostí a celkové rychlosti, kde celková rychlost je počítána jako

$$\|q_{i,j}\|_2 = \sqrt{u_{i,j}^2 + w_{i,j}^2}. \tag{121}$$



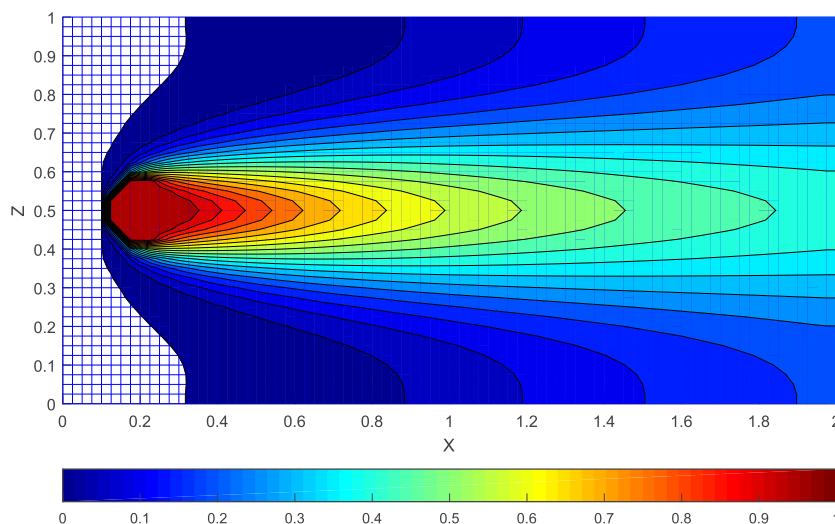
Obr. 9: Pole veličin pro $Re = 10.0$

Transportní rovnici pasivní příměsi, která má konstantní hustotu a nereaguje s okolím, lze při uvažování advekce a molekulární difuze zapsat jako

$$\frac{dC}{dt} = K_C \Delta C + f_c.$$

Zdroj koncentrace je kruh o poloměru 0.09 nacházející se na souřadnicích [0.2; 0.5]. Při využití explicitního schématu časové diskretizace a využitím modifikovaného Lax-Friedrichsova schématu, up-wind schématu a 2. centrální diference při prostorové diskretizaci lze vyjádřit ve tvaru

$$\begin{aligned} C_{i,j}^{n+1} = & (1 - \zeta_C) C_{i,j}^n + \zeta_C \left(\frac{C_{i-1,j}^n + C_{i+1,j}^n + C_{i,j-1}^n + C_{i,j+1}^n}{4} \right) \\ & - \Delta t \left[-K_{i,j}^n \left(\delta_{xx} C_{i,j}^n + \delta_{zz} C_{i,j}^n \right) \right. \\ & + u_{i,j}^n \left(\alpha_{i,j}^n \overrightarrow{\delta}_x C_{i,j}^n + (1 - \alpha_{i,j}^n) \overleftarrow{\delta}_x C_{i,j}^n \right) \\ & \left. + w_{i,j}^n \left(\beta_{i,j}^n \overrightarrow{\delta}_z C_{i,j}^n + (1 - \beta_{i,j}^n) \overleftarrow{\delta}_z C_{i,j}^n \right) \right]. \end{aligned} \quad (122)$$

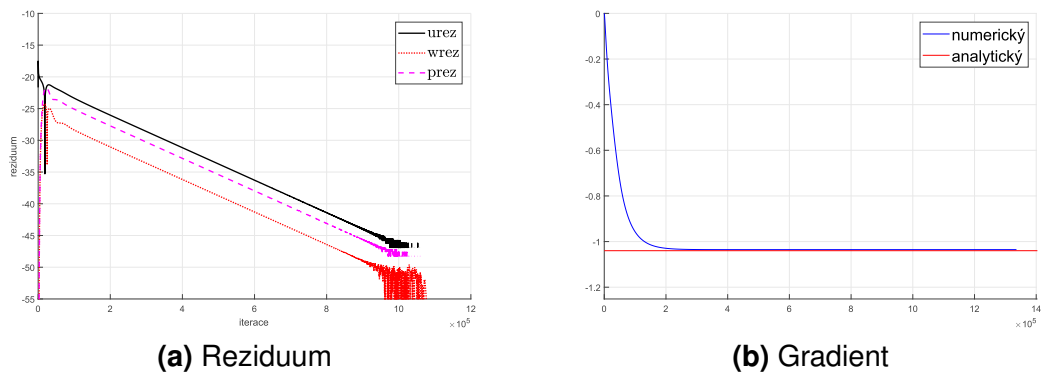


Obr. 10: Koncentrace pasivní příměsi, $Re = 10.0$

V příloženém grafickém výstupu je zaznamenán průběh stacionárních reziduí jednotlivých veličin. Reziduum¹ je v případě této práce počítáno jako Frobeniova (Euklidovská) norma rozdílu veličin vztažená na velikost sítě (počet buněk). Na reziduu lze lehce pozorovat průběh ustalování vypočtených veličin v závislosti na iteraci. K ustálenému stavu dojde, pokud reziduum dosáhne nuly (alespoň numerické).

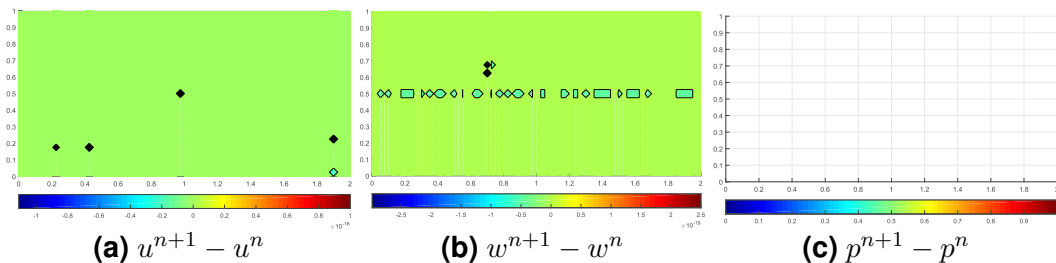
$$rez\phi^n = \frac{\|\phi^{n+1} - \phi^n\|_2}{n \times n z} \quad (123)$$

Na reziduu obr. 11a lze vidět konvergenci k ustálenému stavu. Po prvních iteracích hodnota rezidua pro tlak vzroste, což neodpovídá klasickému průběhu rezidua, které za normálních okolností má klesající tendenci. Je to zde způsobeno tím, že na začátku výpočtu je tlak všude nastaven jako konstantní (nulový). Po první iteraci proto dojde k velkému rozdílu nulté a první iterace. Po dalších iteracích již velikost rezidua klesá s počtem iterací. Hodnota rezidua tlaku klesne na numerickou nulu, u horizontální a vertikální složky rychlosti tomu tak není.



Obr. 11: Průběh veličin v závislosti na počtu iterací pro $Re = 10.0$

Vykreslením reziduí rychlosti, lze zjistit, že v určitých místech se řešení stále mění, tzn. reziduum je nenulové - viz obr. 12. Tyto drobné odchylky jsou nejspíše důsledkem zaokrouhlovací chyby.



Obr. 12: Pole rozdílů dvou iterací veličin pro $Re = 10.0$

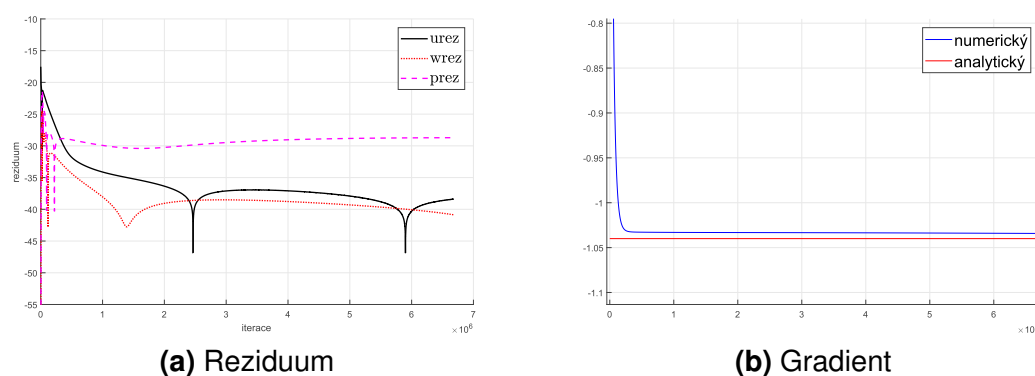
¹Rezidua vynášíme nadále v logaritmickém měřítku (škále)

6.3 Porovnání numerického a analytického řešení

K porovnání numerického a analytického řešení je využito gradientu tlaku, což je jednoduše srovnatelná veličina. Gradient tlaku byl analyticky odvozen v kapitole 6.1 a jeho přesná hodnota pro $Re = 10.0$ byla uvedena v rovnici (117 / str. 38) a teď je možné ho odečíst přímo z numerického řešení. Získaný jednočíselný parametr je posléze porovnán v tabulce pro oba přístupy. Zároveň je v této kapitole rozebrán vliv na numerický výsledek v závislosti na volbě různé prostorové diskretizace a různého nastavení hodnot volitelných veličin.

Reynoldsovo číslo	Řešení		Chyba	
	analytické	numerické	absolutní	relativní ²
10	-1.0400	-1.0342	-0.0058	0.005577

Tab. 3: Výsledek gradientu tlaku pro $Re = 10.0$; $\zeta = 0.0$

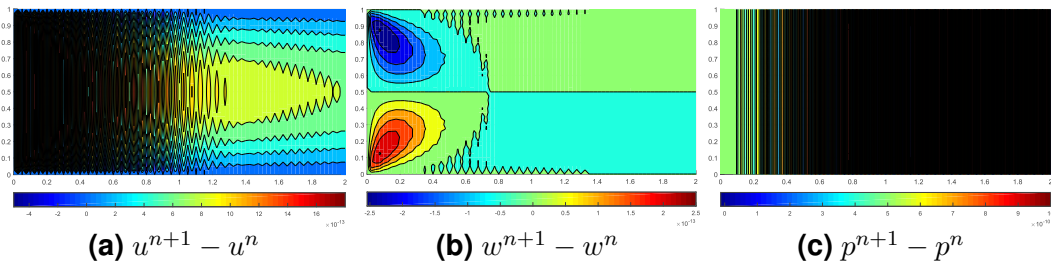


Obr. 13: Průběh veličin v závislosti na počtu iterací pro nastavení: $[C]$, ($\zeta = 0.0$), $Re = 10.0$

V příloženém grafickém výstupu obr. 13 je zaznamenán průběh reziduí a změna velikosti gradientu v závislosti na počtu iterací. Jak již bylo dříve zmíněno, tlak je na začátku výpočtu všude nastaven jako nulový, proto se gradient tlaku nejvýrazněji mění v prvních iteracích a reziduum tlaku ze stejného důvodu zprvu vzroste. S dalšími iteracemi se přibližujeme ustálenému stavu a výsledný gradient tlaku konverguje k přesnému řešení. Reziduum pro horizontální složku rychlosti, vertikální složku rychlosti a tlak má rozdílný vývoj. Velmi odlišný průběh reziduí rychlosti a tlaku je zapříčiněn odlišným charakterem rovnic, z nichž se tyto veličiny vypočítávají. U složek rychlosti, oproti tlaku, v rovnicích přibývá ještě druhá centrální diference (vazký člen), která zapříčiní odlišný průběh rezidua. Na obr. 13 lze zpozorovat, že ani po časovém úseku 100, odpovídající v tomto případě necelým 7 milionům iterací, nebylo dosaženo nulových reziduí. Proto na obr. 17 (str. 46) není dosaženo na výstupní hranici předepsané hodnoty tlaku. Na obr. 14 (str. 45) je vykreslen

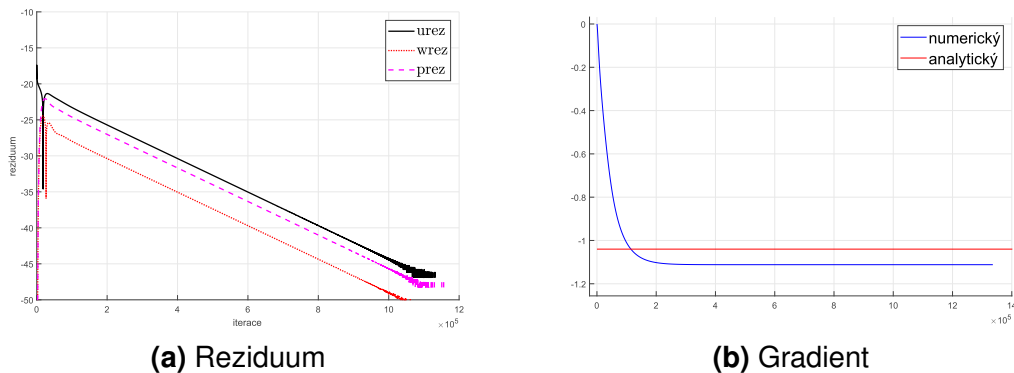
²vzhledem k přesnému řešení

rozdíl 2 po sobě jdoucích iterací. Hodnoty rozdílu se pohybují ve velmi malých hodnotách.

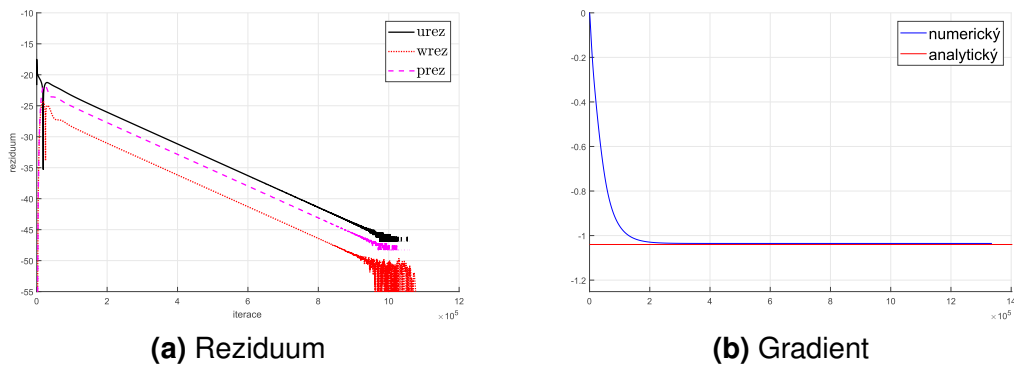


Obr. 14: Pole rozdílů dvou iterací veličin pro $[C]$, $(\zeta = 0.0)$, $Re = 10.0$

Použitím schémat $[U]$ či $[C]$ se vnáší menší chyba než při využití $[LF]$. Nevýhodou schémat $[U]$ či $[C]$ však je, že konvergence k ustálenému stavu je oproti schématu $[LF]$ znatelně pomalejší. Při jejich využívání bude třeba mnohonásobně většího počtu iterací než by tomu bylo v případě schématu $[LF]$. Při použití modifikovaného schématu $[LF]$ bude potřeba menší počet iterací k získání zkonvergovaného řešení - viz obr. 15 a 16 .



Obr. 15: Průběh veličin v závislosti na počtu iterací pro nastavení: $[LF]_2$, $\zeta = 0.01$, $Re = 10.0$

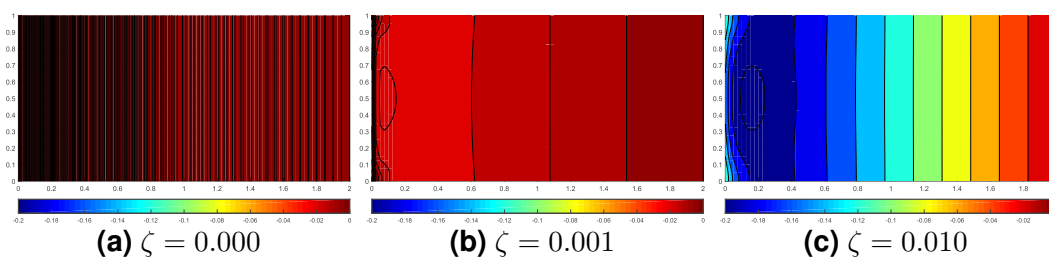


Obr. 16: Průběh veličin v závislosti na počtu iterací pro nastavení: $[LF]_2$, $\zeta = 0.001$, $Re = 10.0$

Pokud pro prostorovou diskretizaci použijeme schéma s tlumením, zvýšíme tím numerickou viskozitu a zvýší se tedy i odpovídající absolutní hodnota gradientu tlaku v numerickém řešení. U schématu $[LF]$ je vhodné volit velmi malé hodnoty ζ , aby nedošlo k vnesení velké numerické viskozity. V tab. 4 je vidět, že opravdu platí, že čím menší je zvolena ζ , tím menší je vnesená numerická viskozita. V tab. 4 je zanesená relativní odchylka.

ζ	Řešení		Chyba	
	analytické	numerické	absolutní	relativní
0.01	-1.0400	-1.1119	0.0719	-0.069130
0.001	-1.0400	-1.0353	-0.0047	0.004519

Tab. 4: Výsledek gradientu tlaku v závislosti na volbě delta pro $Re = 10.0$



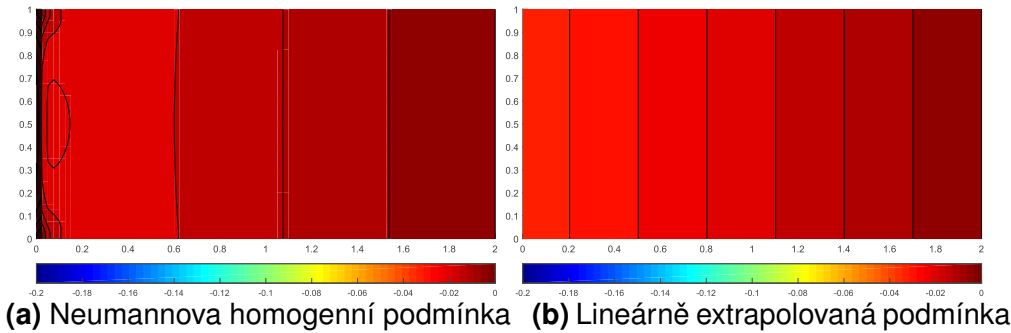
Obr. 17: Rozdíl numerického a analytického řešení v závislosti na poloze, $Re = 10.0$

Na obr. 17 je vidět, že při nižší hodnotě ζ dojde k menšímu rozdílu analytického a numerického řešení. Proto je v základním nastavení úloh zvolena ζ jako $\zeta = 0.001$. Rozdíl numerického a analytické řešení je ve všech vynesných případech téměř lineární a odpovídá tlaku. Přidaným tlumením dojde k přidání numerické viskozity v důsledku které dojde k navýšení absolutní hodnoty gradientu tlaku v řešení. Zásluhou vnesené extra viskozity pak výsledek odpovídá nižšímu Reynoldsově číslu. Proto je nutné volit koeficient ζ opatrně. Vyšším tlumením sice odstraníme oscilace a konvergence bude rychlejší, ale pokud tlumení bude moc vysoké, tak dojde k velice rychlé konvergenci, avšak ke špatnému řešení. Proto není v práci využito schéma $[LF]$, ale je zde použita jeho modifikovaná verze, která umožňuje vytvořit lineární kombinaci centrálního schématu $[C]$ a Lax-Friedrichsova schématu $[LF]$.

Na obr. 18a (str. 47) je vidět, že poblíž vstupní stěny se objevuje větší odchylka od numerického řešení. Je to způsobeno tím, že u analytického odvození se předpokládalo jednorozměrné proudění. Na vykreslení vertikální složky rychlosti je však vidět, že pole nulové není, místy dosahuje vertikální složka rychlosti nenulových hodnot, které jsou sice v řádech 10^{-4} , ale i tak hrají nezanedbatelnou roli. K největšímu rozdílu numerického a analytického řešení tedy dochází na vstupní hranici, kde jsou užitím okrajové podmínky přepisovány hodnotu tlaku po každé iteraci.

Výsledek by bylo možné ovlivnit například přepisem podmínky pro tlak na vstupní stěně užitím lineární extrapolace do tvaru

$$p_{1,j}^n = 2p_{2,j}^n - p_{3,j}^n \quad j = 1 \cdots (nz + 1). \quad (124)$$



Obr. 18: Rozdíl numerického a analytického řešení v závislosti na podmínce pro tlak, $Re = 10.0$

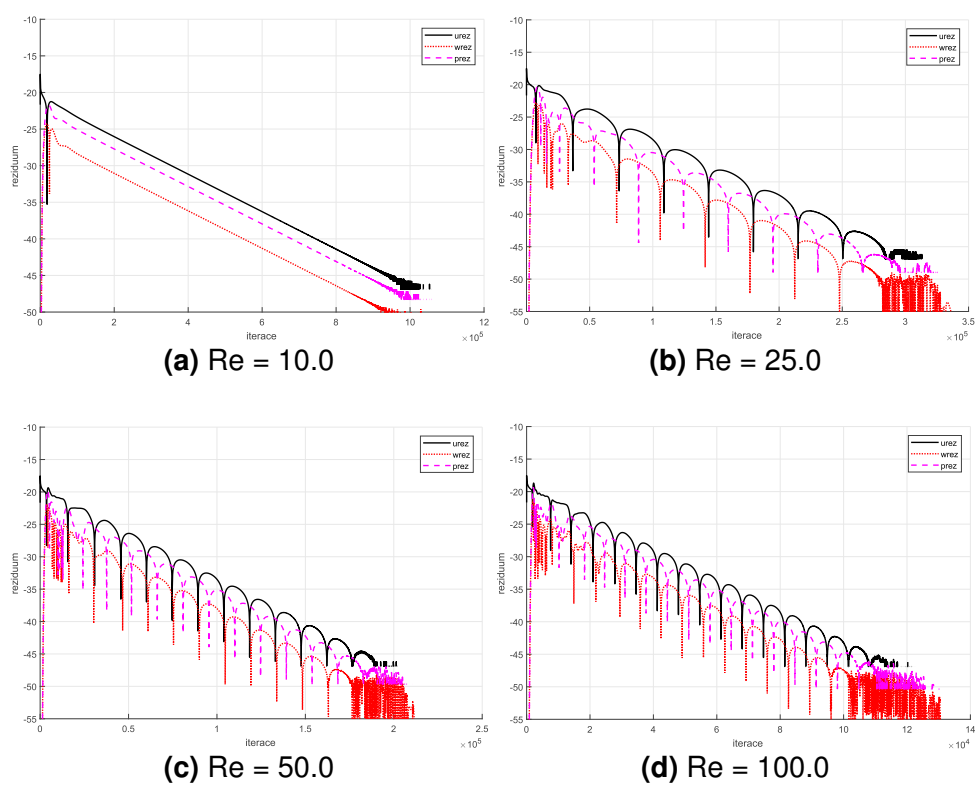
Relativní chyba se bude pro různá Reynoldsova čísla lišit. Reynoldsovo kritérium podobnosti je dáno jako poměr setrvačných a vazkých sil. Čím větší je Reynoldsovo číslo, tím menší roli hraje vnitřní tření. V případě horizontálního proudění mezi dvěma deskami lze Reynoldsovo číslo vyjádřit jako

$$Re = \frac{u_s d_h}{\nu}, \quad d_{h-desky} = 2H \quad (125)$$

kde u_s představuje střední hodnotu rychlosti proudění a d_h hydraulický průměr. Dále je zde ukázáno řešení pro 3 různá Reynoldsova čísla. Na grafickém vyjádření reziduí obr. 19 (str. 48) lze vidět odlišný průběh ustalování, které se s vyšším Reynoldsovým číslem zhoršuje. Dle tab. 5 s vyšším Reynoldsovým číslem roste relativní chyba.

Reynoldsovo číslo	Řešení		Chyba	
	analytické	numerické	absolutní	relativní
10	-1.0400	-1.0353	0.0047	0.004519
25	-0.4160	-0.4179	-0.0019	0.004570
50	-0.2080	-0.2095	-0.0015	0.007210
100	-0.1040	-0.1049	-0.0009	0.00865

Tab. 5: Výsledek gradientu tlaku v závislosti na Reynoldsově čísle



Obr. 19: Reziduum v závislosti na Reynoldsově čísle

Zpřesnění numerického výsledku by bylo možné dosáhnout například vhodnější volbou velikosti volitelných parametrů či vhodnější volbou prostorové diskretizace.

Jedním z volitelných parametrů ovlivňujících přesnost numerického výsledku je součinitel α a β . Na základě jejich volby se mění schéma prostorové diskretizace viz tab. 1, která vnáší numerickou viskozitu jejíž koeficient je vyjádřen v téže tabulce. Volbou centrálního schématu $[C]$ dojde obvykle k vnesení nejmenší chyby. Změnou velikosti parametrů α, β v rozmezí $0 - 1$ dochází k vnesení dodatečné numerické difuze/disperze, která ovlivňuje konvergenci a přesnost numerického řešení v závislosti na volbě α, β . Tato závislost je vyjádřena v tab. 6.

α, β	Řešení		Chyba	
	analytické	numerické	absolutní	relativní
1.00	-1.0400	-1.0357	-0.0043	0.004135
0.75	-1.0400	-1.0355	-0.0045	0.004327
0.50	-1.0400	-1.0353	-0.0047	0.004519
0.25	-1.0400	-1.0352	-0.0048	0.004615
0.00	-1.0400	-1.0350	-0.0050	0.004808

Tab. 6: Výsledek gradientu tlaku v závislosti na volbě α, β pro $Re = 10.0$

Přesnost výsledku je ovlivněna i volbou časového kroku. Časový krok je v této práci dle rovnice (58 / str. 24) automaticky přepočítáván pro každou iteraci dle Courantova čísla. Zmenšením CFL dojde k zmenšení časového kroku a v našem případě i k zpřesnění numerického výsledku. Snížení relativní chyby lze vidět v tab. 7. Touto změnou však také zvýšíme časovou náročnost výpočtu.

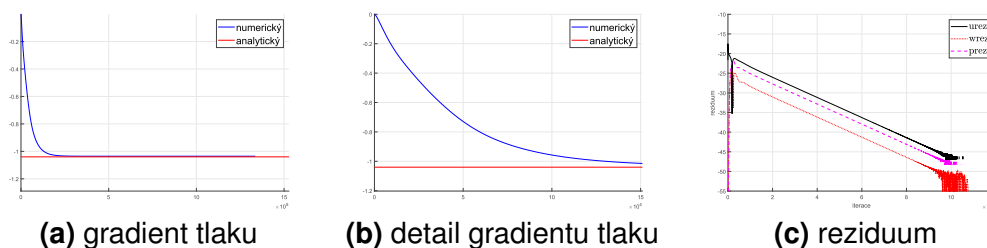
CFL	Řešení		Chyba	
	analytické	numerické	absolutní	relativní
0.9	-1.0400	-1.0353	-0.0047	0.004519
0.8	-1.0400	-1.0362	-0.0038	0.003654
0.7	-1.0400	-1.0374	-0.0026	0.002500

Tab. 7: Výsledek gradientu tlaku v závislosti na volbě CFL pro $Re = 10.0$

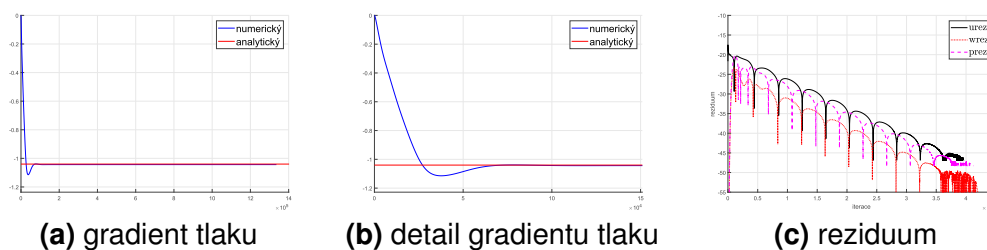
Dalším volitelným parametrem je koeficient umělé stlačitelnosti \mathcal{B} . Jeho zvýšením se zpravidla rychleji přiblížíme k přesnému řešení, zároveň však dojde k ovlivnění velikosti relativní chyby, viz tab. 8. Na obrázcích 20 (str. 50), 21 (str. 50), 22 (str. 50) lze porovnat rychlost konvergence gradientu tlaku. Pro $\mathcal{B} = 3$ je patrná oscilace poblíž přesného řešení, jejíž amplituda se s počtem iterací zmenšuje. Pro $\mathcal{B} = 2$ nelze pozorovat oscilaci, po pár iteracích však dojde k překmitnutí pod konečnou ustálenou hodnotu. Nastavením $\mathcal{B} = 1$ naopak dochází pozvolné konvergenci.

\mathcal{B}	Řešení		Chyba	
	analytické	numerické	absolutní	relativní
1.0	-1.0400	-1.0353	-0.0047	0.004519
2.0	-1.0400	-1.0436	-0.0036	0.003460
3.0	-1.0400	-1.0460	-0.0060	0.005770

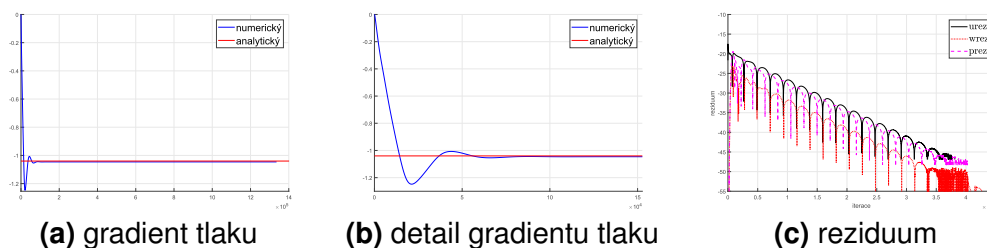
Tab. 8: Výsledek gradientu tlaku v závislosti na volbě \mathcal{B} pro $Re = 10.0$



Obr. 20: Průběh veličin v závislosti na počtu iterací pro případ $\mathcal{B} = 1.0$



Obr. 21: Průběh veličin v závislosti na počtu iterací pro případ $\mathcal{B} = 2.0$



Obr. 22: Průběh veličin v závislosti na počtu iterací pro případ $\mathcal{B} = 3.0$

Volba prostorové diskretizace má zásadní vliv na přesnost výsledku. Jak bylo odvozeno v kapitole 4 prostorové diskretizace vnášejí do řešení např. numerickou viskozitu. V tab. 6 a tab. 9 lze sledovat vliv vnesené numerické viskozity na výsledek.

Schéma	Řešení		Chyba	
	analytické	numerické	absolutní	relativní
[U]	-1.0400	-1.0350	-0.0050	0.004808
[C]	-1.0400	-1.0353	-0.0047	0.004519
[D]	-1.0400	-1.0357	-0.0043	0.004135

Tab. 9: Výsledek gradientu tlaku v závislosti na volbě prostorové diskretizace $Re = 10.0$

Použití nestabilní Down-wind diskretizace pro konvektivní člen bylo umožněno díky základnímu nastavení simulace. To, že schéma dodalo zkonvergované řešení a chovalo se stabilně je způsobeno dostatečně velkou fyzikální viskozitou a dostatečně velkou numerickou viskozitou, pocházející z modifikovaného schématu Laxe-Friedrichse.

Dalšího zpřesnění lze dosáhnout například zjemněním sítě. Tlak mezi dvěma deskami má lineární průběh závislý pouze na poloze x , nestačí však zjemňovat síť pouze v x -ovém směru, jelikož hodnota tlaku je stanovena numerickým výpočtem z rychlostí, které jsou závislé na z , je třeba zjemňovat i v z -tovém směru. V tab. 10 je viditelné, že změna hustoty sítě ve směru x má na přesnější výsledek větší vliv než změna ve směru z .

Sít'	Řešení		Chyba	
	analytické	numerické	absolutní	relativní
40x20	-1.0400	-0.9982	-0.0418	-0.04019
40x40	-1.0400	-1.0136	-0.0264	-0.02538
80x20	-1.0400	-1.0190	-0.0210	-0.02019
80x40	-1.0400	-1.0353	-0.0047	0.00452

Tab. 10: Porovnání výsledků gradientů tlaku v závislosti na jemnosti sítě, $Re = 10.0$

Numerický výsledek je silně závislý na volbě prostorové diskretizace a na nastavení hodnot volitelných veličin. Zjemněním sítě či zmenšením časového kroku lze dosáhnout nezanedbatelného zpřesnění numerického výsledku, zároveň se ale zvýší časová náročnost výpočtu. Proto je při simulacích vhodné využívat nerovnoměrné sítě, které by byly zjemněny v oblasti, kde se hodnoty výrazně mění. Zvýšení rychlosti konvergence lze dosáhnout například pomocí schématu [LF] či zvýšením parametru umělé stlačitelnosti β . Nesmí se však opomenout vliv jednotlivých voleb na konečný výsledek.

7 Obtékání válce

Dalším řešeným případem v této práci bude simulace obtékání válce pro různá Reynoldsova čísla. V případě obtékání válce lze Reynoldsovo číslo vyjádřit jako

$$Re = \frac{u_s d_h}{\nu}, \quad d_{h-valec} = D \quad (126)$$

kde d_h je hydraulický průměr, který se v případě obtékání válce rovná průměru válce D .

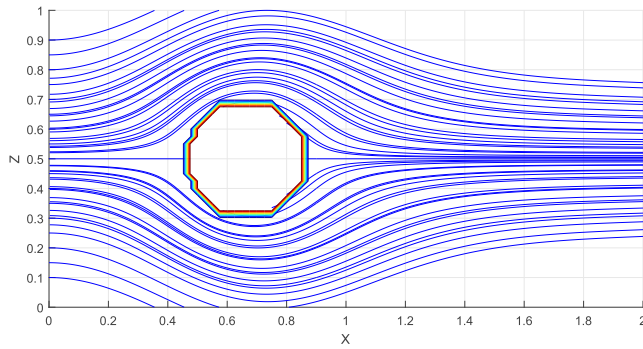
Jedná se o klasický testovací případ ke kterému bylo v případě zjednodušeného nevazkého proudění vypracováno analytické řešení potencionálního proudění. Vypracování analytického řešení je v případě obtékání válce složitější záležitost než u proudění mezi dvěma deskami. Proto je v této části pro ověřovací výpočty zvoleno porovnání simulací s experimentálními daty z [4].

7.1 Výsledky numerických simulací

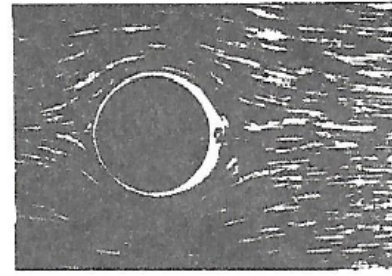
Pro simulaci obtékání válce platí primární nastavení. Časovou a prostorovou diskretizaci volím stejnou jako v kapitole 5 s tím rozdílem, že je volena $\zeta_C = 0.0$. Simulace proběhne pro různá Reynoldsova čísla a výsledky budou porovnány s laboratorními experimenty publikovanými v [4]. Pro každé Reynoldsovo číslo bude vykreslena horizontální složka rychlosti, vertikální složka rychlosti, celková rychlost, tlak a izočáry hodnot koncentrace pasivní příměsi.

Pokud by bylo Reynoldsovo číslo zvoleno výrazně menší než jedna tak by převažoval vliv viskózních sil a proudění kolem válce ve směru proudu by bylo zcela symetrické. Když Reynoldsovo číslo přesáhne hodnotu jedna začne ve směru proudu docházet k asymetrizaci proudění v závislosti na roustoucím Reynoldsově čísle. Za válcem dojde k zpomalení, které se projeví protaženějšími proudnicemi. [4]

Na obr. 24 (str. 53) lze pozorovat, že tekutina není v okolí překážky tolik ubržd'ována vnitřním třením a oblastí vyššího tlaku. Na izočárách tlaku je vidět, že oblast vyššího tlaku není po celé oblasti. Za překážkou je oblast s nižším tlakem, která zpomalené proudění bude lehce urychlovat. Vertikální složka rychlosti je zde nenulová, proto se viditelně projeví na celkové rychlosti.

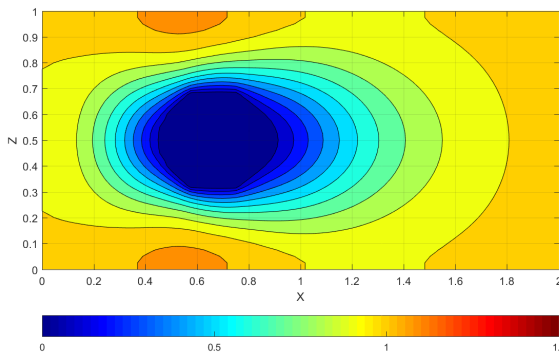


(a) Simulace , $Re = 2.0$

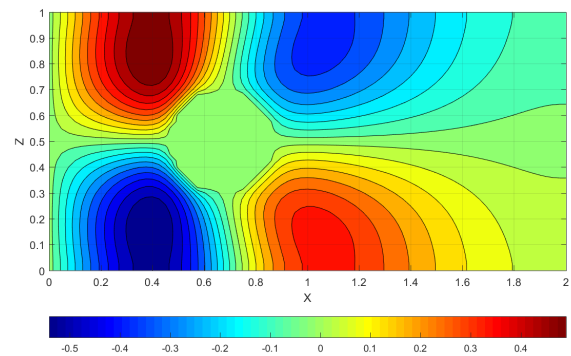


(b) Experiment [4] , $Re > 1$

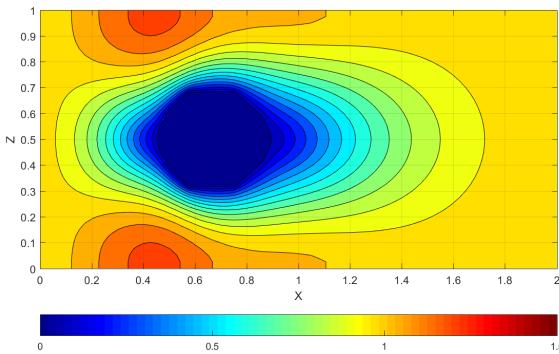
Obr. 23: Proudnice $Re = 2.0$



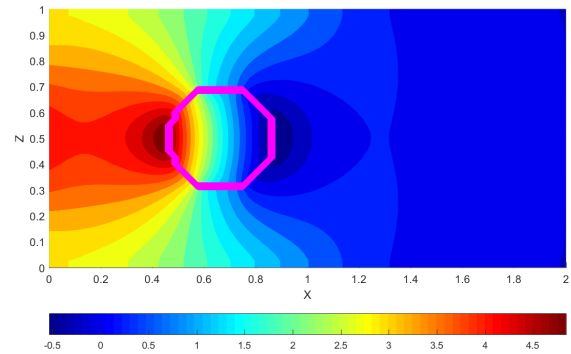
(a) Horizontální složka rychlosti



(b) Vertikální složka rychlosti



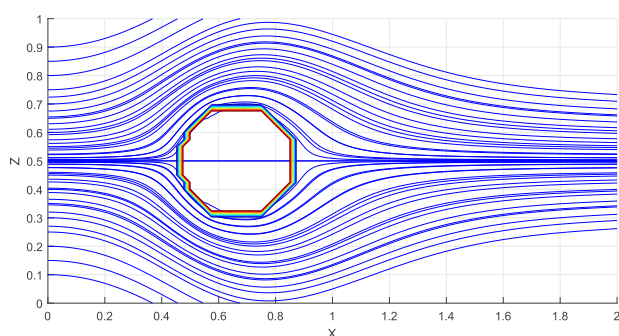
(c) Celková rychlost



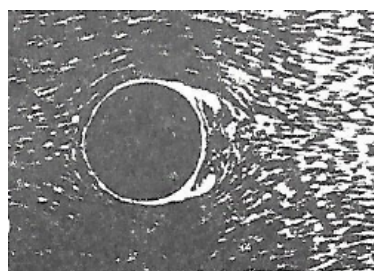
(d) Tlak

Obr. 24: Pole veličin pro $Re = 2.0$

V [4] se uvádí, že bylo experimentálně zjištěno, že přibližně od $Re \sim 6$ se začnou za válcem symetricky k podélné ose vytvářet dvě oblasti s uzavřenými proudnicemi. V mé numerické simulaci však k tvorbě symetrických uzavřených proudnic, projevujících se jako víry, začne docházet až s vyšším Reynoldsovým číslem (viz obr. 25 a 27 (str. 55)). Tato odlišnost může být způsobena nedostatečnou jemností sítě. Vliv hustoty sítě na simulaci bude rozebrán na závěr této kapitoly. Spíše se ale bude jednat o chybu vnesenou díky způsobu jakým je definována překážka během simulací. Pro překážku je předepsána funkce na základě které je vynulována rychlost a koncentrace. Během výpočtů není překážka již více ošetřena. Během výpočtu tak dochází v těsné blízkosti překážky k nepřesnému počítání s nulovými hodnotami.

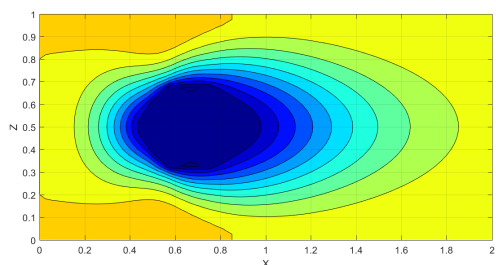


(a) Simulace , $Re = 7.0$

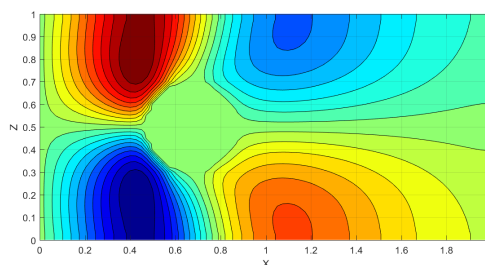


(b) Experiment [4] , $Re > 6$

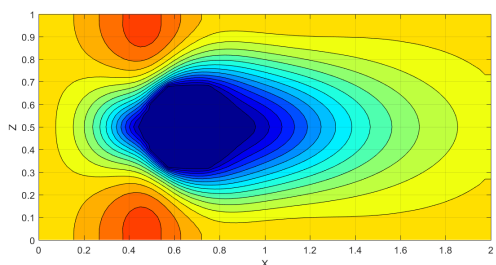
Obr. 25: Proudnice $Re = 7.0$



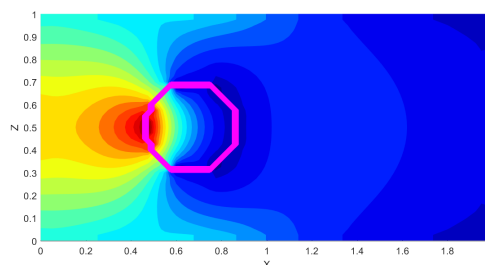
(a) Horizontální složka rychlosti



(b) Vertikální složka rychlosti



(c) Celková rychlost

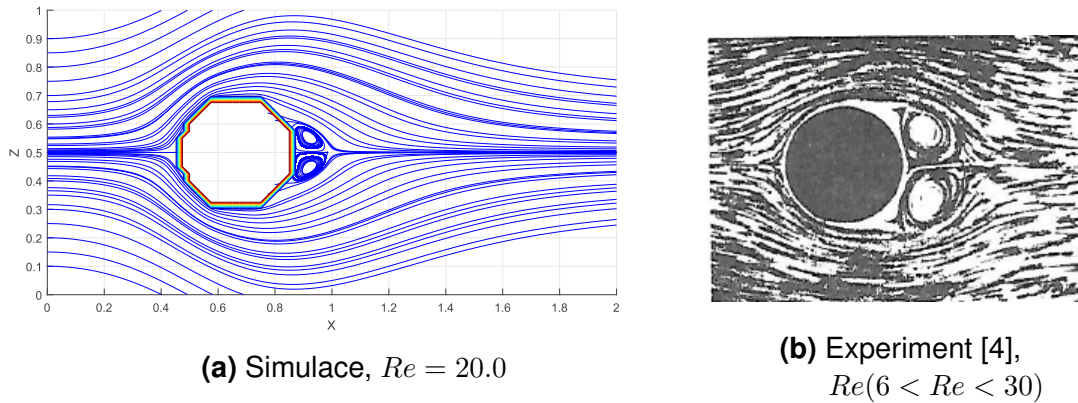


(d) Tlak

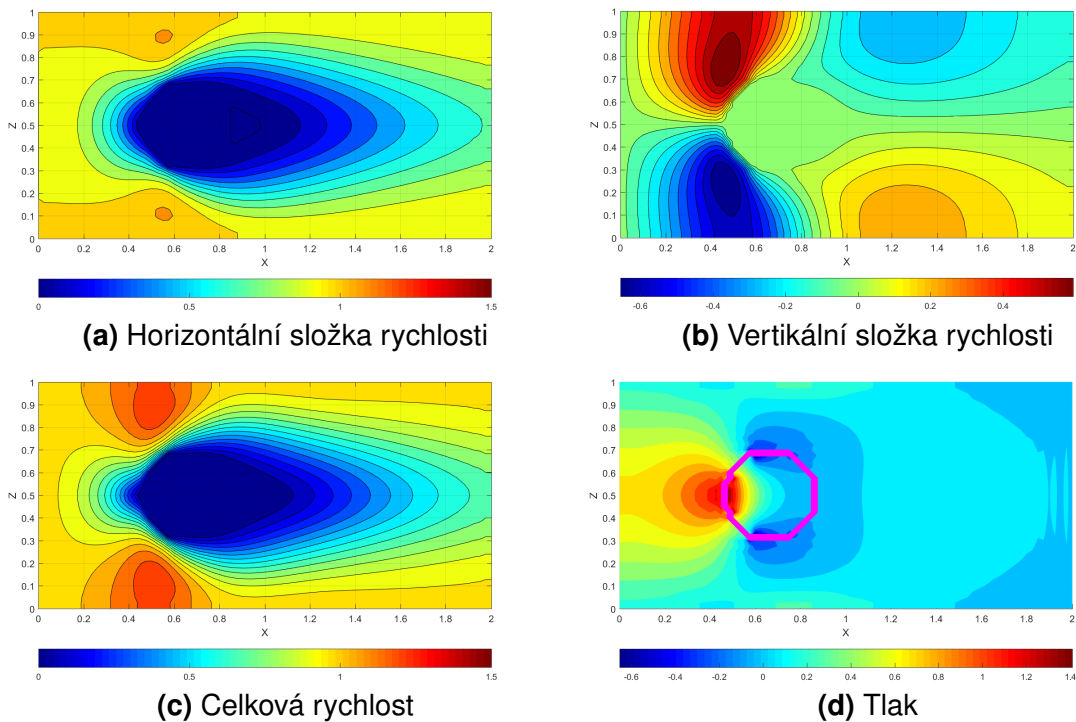
Obr. 26: Pole veličin pro $Re = 7.0$

S vyšším Reynoldsovým číslem dochází k vzniku výraznějších vírů a v [4] je uváděno, že až přibližně do $Re \approx 40$ si drží svou symetrii - viz obr. 27 a 29 (str. 56). V případě obr. 27 je viditelný rozdíl mezi simulací a experimentem. Tato odchylka je pravděpodobně způsobena malým počtem buněk sítě. Tato teorie bude ověřena na závěr této kapitoly.

Na obr. 26 (str. 54) a 28 je možné pozorovat vliv zmenšujícího se vnitřního tření oproti obr. 24 (str. 53). Společně s vyšším tlakem před překážkou stále způsobuje zpomalení částic, v okolí kde je nižší tlak dochází naopak k urychlení částic.

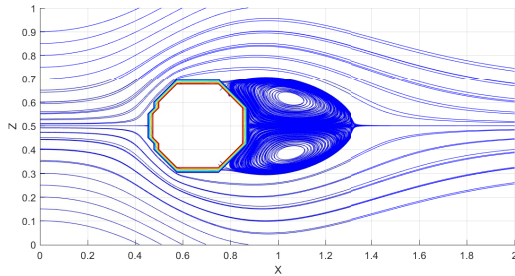


Obr. 27: Proudnice $Re = 20.0$

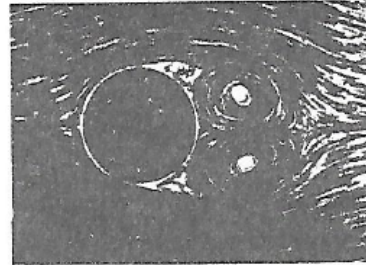


Obr. 28: Pole veličin pro $Re = 20.0$

Pokud se Reynoldsovo číslo dostane do rozmezí $30 < Re < 60$ začne docházet k asymetrii ve vírech za válcem. V [4] se uvádí přibližná hodnota $Re = 40.0$

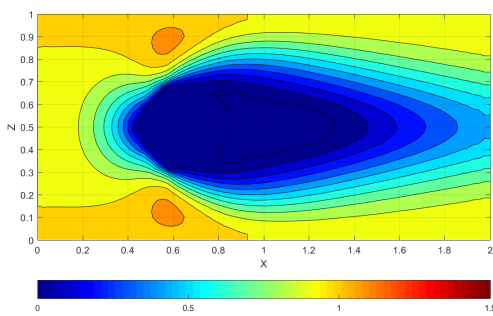


(a) Simulace , $Re = 40$

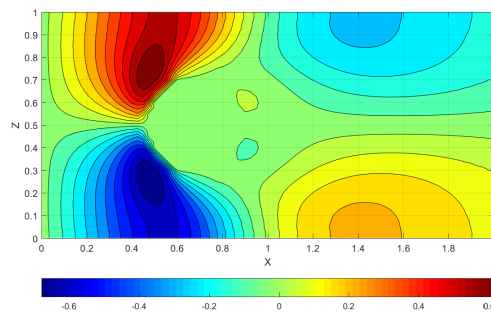


(b) Experiment [4],
 $Re \sim 40$ ($30 < Re < 60$)

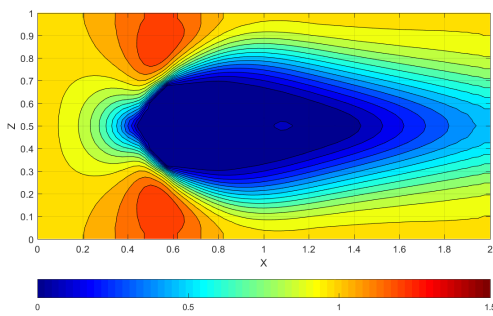
Obr. 29: Proudnice $Re = 40$



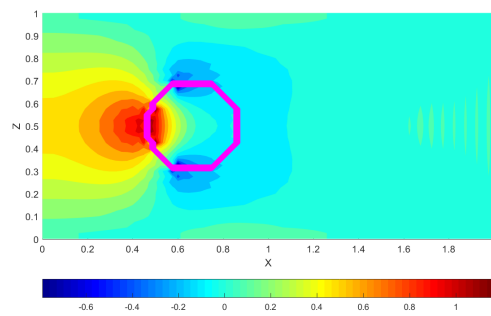
(a) Horizontální složka rychlosti



(b) Vertikální složka rychlosti



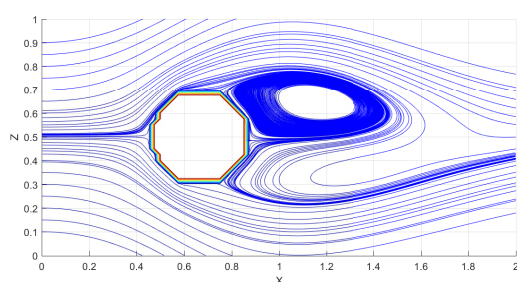
(c) Celková rychlost



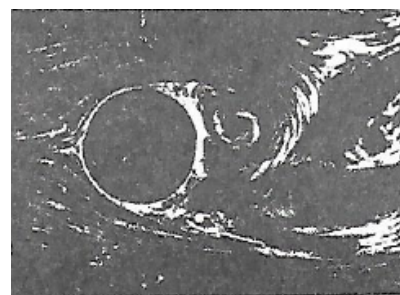
(d) Tlak

Obr. 30: Pole veličin pro $Re = 40.0$

Při dalším zvyšování Reynoldsova čísla ($Re > 60$) dojde ke ztrátě stacionarity a ke vzniku pravidelných (v čase) oscilací v oblasti za válcem, kde se víry střídavě zvětšují a odplouvají. Simulace je provedena i pro případ vyššího Reynoldsova čísla ($Re > 60$). Tyto nestacionární výsledky nelze však brát jako směrodatné jelikož metoda umělé stlačitelnosti je koncipována pouze pro stacionární proudění. Zároveň není v [4] uvedena detailnější specifikace experimentu, takže nelze zaručit, že byla simulace ukončena ve stejný moment jako experiment.

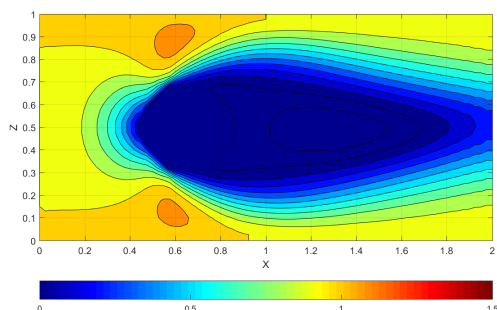


(a) Simulace , $Re = 80$

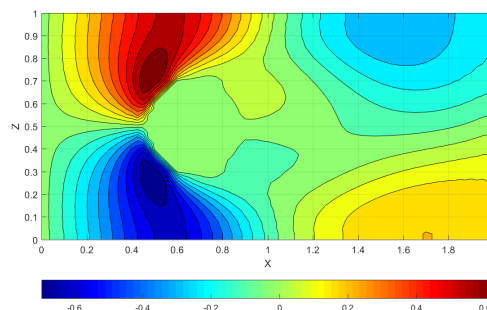


(b) Experiment [4], $Re > 60$

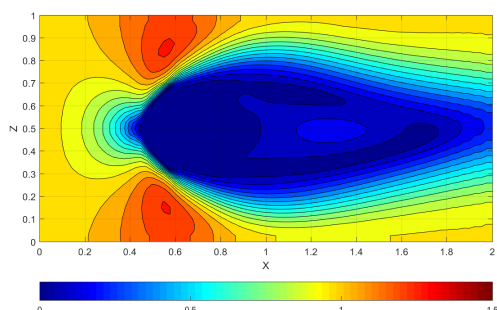
Obr. 31: Proudnice $Re = 80.0$



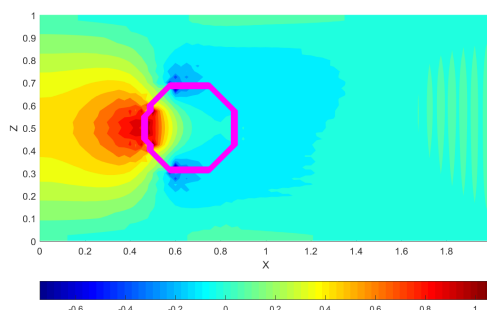
(a) Horizontální složka rychlosti



(b) Vertikální složka rychlosti

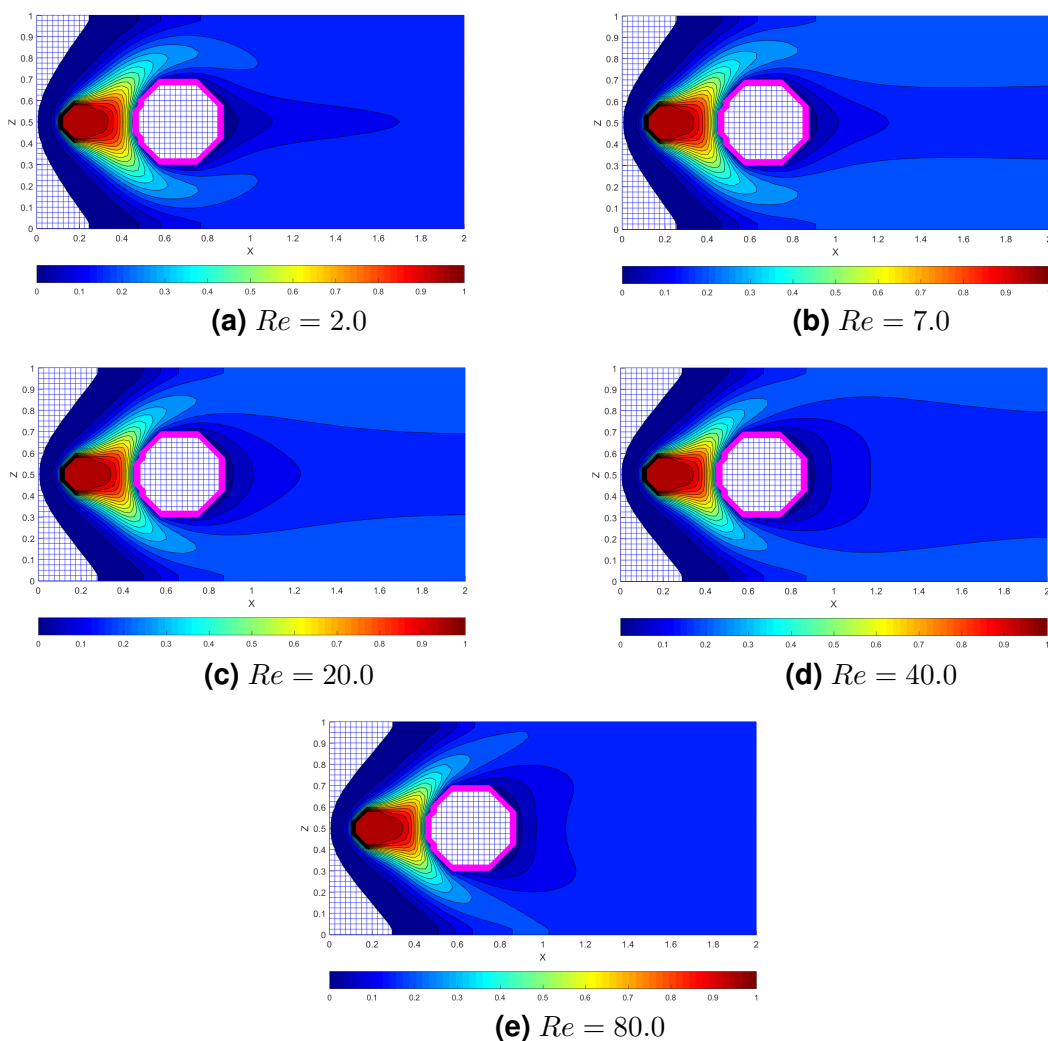


(c) Celková rychlost



(d) Tlak

Obr. 32: Pole veličin pro $Re = 80.0$



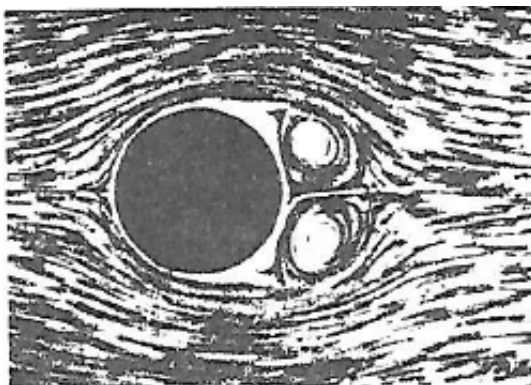
Obr. 33: Koncentrace pasivní příměsi pro různá Reynoldsova čísla

S zvyšujícím Reynoldsovým číslem je možné pozorovat změnu v poli koncentrace. Díky advekcii je koncentrace šířena ve směru proudu, díky difuzi se koncentrace může dostat i proti směru proudu. Z tohoto důvodu je nutné volit vstupní koncentraci (zdroj) v dostatečné vzdálenosti od vstupní hranice nebo zvolit vhodnější (realističtější) okrajovou podmínku. Pokud bychom se dostali moc blízko a měli bychom definováno, že koncentrace je na vstupní hranici nulová, tak by mohlo dojít ke konfliktu s fyzikou. V našem případě k tomu díky čistému Up-wind schématu nedošlo.

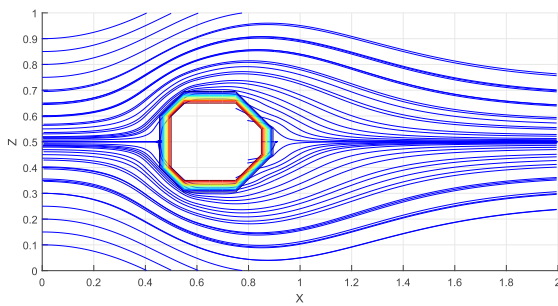
Ve všech polích veličin je viditelné, že charakter izočar v blízkosti hranic odpovídá okrajovým podmínkám. V místě kde je předepsána homogenní Neumannova podmínka vstupují izočary kolmo do hranice, v místě kde je předepsaná hodnota dochází k její udržení - to je viditelné například na tlaku na výstupní hranici, kde je tlak předepsán jako nulový. V blízkosti pevné překážky je obvykle normálová derivace tlaku nulová. Izochary tlaku by měly tedy vstupovat do překážky kolmo. Na jednotlivých vykreslených polích tlaku je viditelné, že izochary opravdu vstupují do překážky kolmo, přestože tato překážka byla definována uměle a na jejím povrchu nejsou předepsány žádné okrajové podmínky.

7.2 Vliv hustoty sítě na proudnici pro obtékání válce

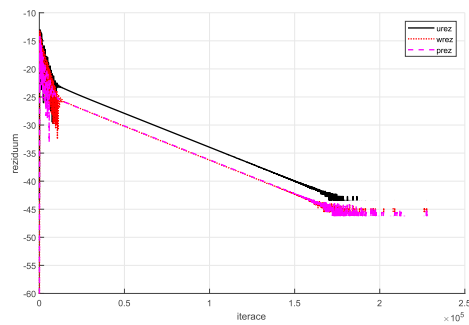
Jemnost sítě má zásadní vliv na výsledek simulace. Čím vyšší je počet buněk, tím přesnější je vymodelovaný válec, jak je možné vidět na obr. 35. Toto zpřesnění má velký vliv na velikost tvořených vírů za válcem. Simulace pro různé hustoty sítě (obr. 35) lze porovnat s experimentem (obr.23b (str. 53) resp. 34) z [4]. Je patrné, že se zvyšujícím se počtem buněk se přibližujeme experimentálnímu výsledku. Síť o počtu buněk 40x20 se jeví jako nedostatečná, tvar válce se silně odchyluje od reality, avšak simulace dosáhne ustáleného stavu velmi brzo (před dosáhnutím 250 000 iterací). Po zvýšení počtu buněk (80x40) dojde k výraznému zpřesnění tvaru válce. Zároveň dojde k razantnímu zvýšení nutného počtu iterací pro dosažení ustáleného stavu (přibližně čtyřnásobku oproti předchozí situaci). Pro síť o počtu buněk 120x60 získáme již výrazně přesnější tvar válce než tomu bylo v předchozích situacích pro síť s počtem buněk 40x20 a 80x40. Zároveň opět dojde k navýšení nutného počtu iterací pro dosažení ustáleného stavu. Oproti síti 80x40 došlo k navýšení o necelou polovinu iterací. Pokud bychom však chtěli porovnat výpočtovou náročnost na dané síti museli bychom počet iterací vynásobit přibližně čtyřikrát při každém zdvojnásobení rozlišení sítě. S dalším zjemňováním sítě se vytrácí vliv zvyšujícího se počtu buněk. Proudnice pro síť 120x60 a 160x80 jsou si velmi podobné, proto by bylo další zjemňování sítě neúčelné. Výpočtová náročnost by dále rostla a ve výsledcích by docházelo již k zanedbatelným změnám.



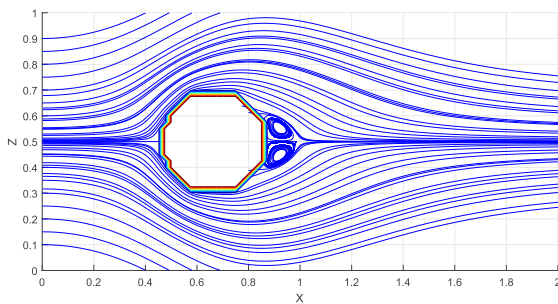
Obr. 34: Proudnice uvedené v experimentu z [4]



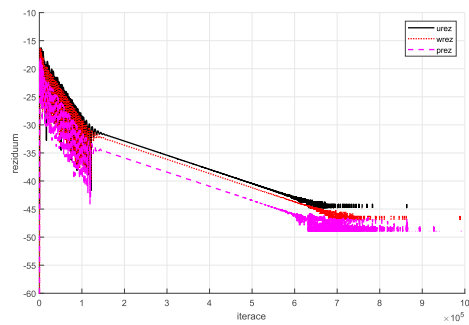
(a) Proudnice pro síť 40x20



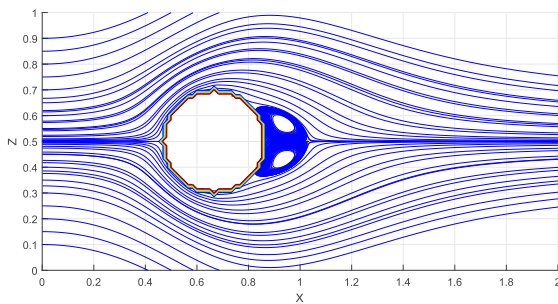
(b) Detail rezidua pro síť 40x20



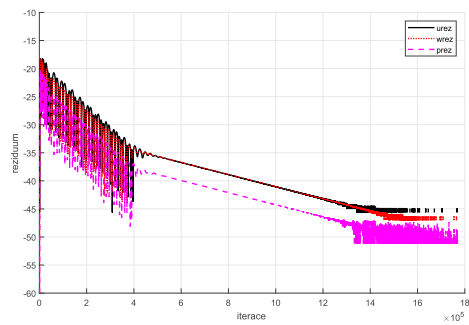
(c) Proudnice pro síť 80x40



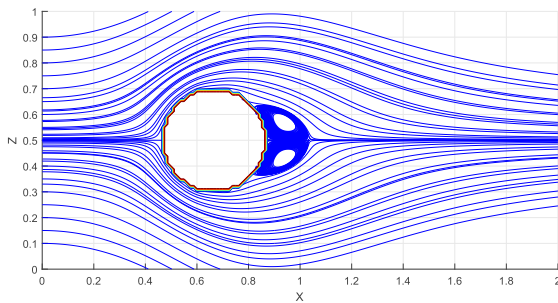
(d) Detail rezidua pro síť 80x40



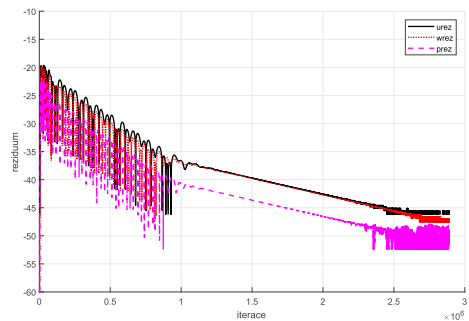
(e) Proudnice pro síť 120x60



(f) Detail rezidua pro síť 120x60



(g) Proudnice pro síť 160x80



(h) Detail rezidua pro síť 160x80

Obř. 35: Vliv oka sítě na proudnice a historii konvergence

8 Závěr

V této práci byla řešena numerická simulace nestlačitelného proudění a transportu pasivních příměsí. Pro přehlednější ověření zda bylo dosaženo hlavních cílů práce je zde následně uvedeno shrnutí všech částí, do kterých byla tato práce rozčleněna.

I Na základě zákonů zachování byly odvozeny Navierovy-Stokesovy rovnice pro nestlačitelnou tekutinu spolu s transportní rovnicí pasivní příměsi. Pro tyto rovnice byly zformulovány dvojrozměrné úlohy s advekcí a difuzí. Kromě uvedení okrajových podmínek byla objasněna používaná metoda vnořené hranice (*immersed boundary method*) a byly definovány dva základní testovací případy, které byly dále řešeny.

II V této části byl vysvětlen princip metody konečných diferencí. Dále byla popsána základní schémata pro rovnici advekce a pro tuto rovnici byla obecně odvozena modifikovaná rovnice, která umožnila vysvětlit některé vlastnosti schémat.

III Ve výpočtové části jsem naprogramovala tato schémata do vlastního kódu v Matlabu. Naprogramování bylo provedeno obecně, aby bylo možné pomocí parametrů přepínat mezi jednotlivými verzemi diskretizace. Což umožňuje využití základních schémat Up-wind [U], Down-wind [D], centrální [C], Lax-Friedrichs [LF] a případně vytvořit jejich libovolnou lineární kombinaci. V rámci této sekce byly provedeny ověřovací výpočty ke kterým bylo využito analytického řešení (pro proudění mezi dvěma deskami) a experimentálních dat (pro obtékání válce). Na případě proudění mezi dvěma deskami byla provedena diskuze různých variant prostorové diskretizace, kde jsem se pokoušela ověřit chování numerického řešení ve vztahu k odvozenému analytickému řešení. K vlastnímu posouzení a zhodnocení výsledků sloužily grafické výstupy z Matlabu.

Z výše uvedeného shrnutí vyplývá, že byly splněny všechny cíle práce. V rámci naprogramovaného kódu bylo provedeno více simulací, které se již v ucelené formě do práce nevešly. Například :

- další verze diskretizace (např. konzervativní diskretizace konvektivních členů)
- další verze překážek s různou variací umístění (hranol, kopeček, obdelníková dutina)
- rotace válce
- různé varianty zdroje v rovnici pro transport příměsi (zdrojový člen)
- nerovnoměrné dělení sítě

Tato práce by se dala dále rozvinout například v rámci těchto bodů :

- vylepšení diskretizace v blízkosti překážky pomocí použití jednostranných diferencí v místě, kde by výpočtové body zasahovaly do definované překážky
- rozšíření do 3D
- rozšíření pro stratifikované proudění, ke kterému by došlo pomocí doplnění systému rovnic o transportní rovnici pro potenciální teplotu, která byla zmíněna v kapitole 2
- přepsat do jiného programovacího jazyka mimo Matlab a zefektivnit výpočet například pomocí paralelního výpočtu

Seznam použitého značení, symbolů a zkratek

Seznam použitého značení

a	rychlost ve směru osy x
b	rychlost ve směru osy z
C	koncentrace pasivní příměsi
C_1, C_2	integrační konstanty
c_p	měrná tepelná kapacita za konstantního tlaku
c_v	měrná tepelná kapacita za konstantního objemu
D	průměr válce
d_h	hydraulický průměr
\mathbf{f}	hustota objemových sil
f_C	zdrojová funkce koncentrace
g	tíhové zrychlení
H	výška
\dot{m}	hustota hmotnostního toku
K_C	koeficient molekulární difuze pasivní příměsi
l	délka
m	hmotnost
m_{pr}	hmotnost produkce
m_{tok}	hmotnost toku
m_p	hmotnost příměsi
n	normálový vektor
n_x, n_z	počet dílů sítě ve směru osy x, z
p	tlak
p_0	referenční tlak
p_1	počáteční tlak
q	celková rychlost
R	měrná plynová konstanta
Re	Reynoldsovo číslo
S	hranice objemu V
T	absolutní teplota
t	čas
T_1	počáteční teplota
$\mathbf{u} = (u, v, w)$	rychlost
u_{max}	maximální rychlost
$\mathbf{u}_0 = (u_0, v_0, w_0)$	počáteční rychlost
u_s	střední rychlost
V	objem

Seznam použitých zkratk

IBM	immersed boundary method
CFL	Courantovo číslo (Courant,Friedrichs,Lewy)
[U]	schéma Up-wind
[D]	schéma Down-wind
[C]	schéma Centrální
[LF]	schéma Lax-Friedrichs
<i>nim</i>	počet vykreslených iterací
<i>nit</i>	počet iterací

Seznam použitých symbolů

F	výslednice všech vnějších sil
F_g	objemové síly
F_p	povrchové síly
ρ	hustota
ρ_p	hustota pasivní příměsi
μ	dynamická viskozita
μ'	druhý koeficient viskozity
μ_n	numerická viskozita
ν	kinematická viskozita
Δ	Laplaceův operátor, v kapitole 5 velikost kroku
∇	Hamiltonův operátor
θ	potenciální teplota
σ	tenzor celkových napětí
\mathcal{O}	chyba diskretizace
\mathcal{B}	koeficient umělé stlačitelnosti
\varkappa	Poissonova konstanta
$\mathbb{1}$	tenzor identity
ϕ	libovolná veličina
ζ	koeficient Lax-Friedrichova schématu
\mathcal{D}	symetrická část gradientu rychlosti
\mathcal{W}	antisymetrická část gradientu rychlosti
\mathcal{L}	gradient rychlosti
δ	diferenční operátor
E_n	Euklidovský prostor dimenze n

Reference

- [1] S. Bartels. *Numerical approximation of partial differential equations*. Springer Berlin Heidelberg, New York, NY, 2016.
- [2] J. Bednář a O. Zikmunda. *Fyzika mezní vrstvy atmosféry*. Academia, Praha, 1985.
- [3] A. J. Chorin. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. *Journal of Computational Physics*, 2(1):12 – 26, 1967.
- [4] R. Dvořák a K. Kozel. *Matematické metody v aerodynamice*. ČVUT, Praha, 1992.
- [5] R. Dvořák a K. Kozel. *Matematické modelování v aerodynamice*. ČVUT, Praha, 1996.
- [6] J. Fořt, K. Kozel, P. Louda a J. Fürst. *Numerické metody řešení problémů proudění III*. ČVUT, Praha, 2004.
- [7] H. (Ed.) Oertel jr. *Prandtl-Essentials of Fluid Mechanics*. Springer, 3rd edition edition, 2010.
- [8] K. Kozel a J. Fürst. *Numerické metody řešení problémů proudění I*. ČVUT, Praha, 2001.
- [9] R. J. Leveque. *Finite difference methods for differential equations*. 2005.
- [10] S. Míka, P. Příkryl a M. Brandner. *Speciální numerické metody*. Vydavatelský servis, Plzeň, 2006.
- [11] J. Nagy. *Elementární metody řešení obyčejných diferenciálních rovnic*. SNTL, Praha, 2. vydání edition, 1978.
- [12] C. S. Peskin. Flow patterns around heart valves: A numerical method. *Journal of Computational Physics*, 10(2):252 – 271, 1972.
- [13] A. Quarteroni a A. Valli. *Numerical approximation of partial differential equations with 17 tables*. Springer, Berlin [u.a.], 2009.
- [14] K. Taira a T. Colonius. The immersed boundary method: A projection approach. *Journal of Computational Physics*, 225(2):2118 – 2137, 2007.
- [15] P.-L. Viollet, J.-P. Chabard a P. Esposito... [et al.]. *Mécanique des fluides appliquée*. Presses de l'École nationale des ponts et chaussées, Paris, [2e éd. rev. et corr.] edition, 2003.
- [16] E. Vitásek. *Základy teorie numerických metod pro řešení diferenciálních rovnic*. Academia, Praha, 1994.

Seznam použitého softwaru

- Texmaker, MiKTeX (L^AT_EX)
- Matlab - verze: R2017a, March 2017