



ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
Fakulta strojní
Ústav mechaniky tekutin a termodynamiky

**Použití metody Smoothed Particle Hydrodynamics k modelování
proudění s volnou hladinou**

**Utilisation of Smoothed Particle Hydrodynamics for Modelling of Free
Surface Flow**

Diplomová práce

Vedoucí práce: Ing. Tomáš Hyhlík, Ph.D.
Studijní program: Strojní inženýrství
Studijní obor: Aplikovaná mechanika

Bc. Petr Jančík

Praha 2017

I. OSOBNÍ A STUDIJNÍ ÚDAJE

Příjmení: **Jančík** Jméno: **Petr** Osobní číslo: **409562**
Fakulta/ústav: **Fakulta strojní**
Zadávající katedra/ústav: **Ústav mechaniky tekutin a termodynamiky**
Studijní program: **Strojní inženýrství**
Studijní obor: **Aplikovaná mechanika**

II. ÚDAJE K DIPLOMOVÉ PRÁCI

Název diplomové práce:

Použití metody Smoothed Particle Hydrodynamics k modelování proudění s volnou hladinou

Název diplomové práce anglicky:

Utilisation of Smoothed Particle Hydrodynamics for Modelling of Free Surface Flow

Pokyny pro vypracování:

V rešeršní části popište metody použitelné k modelování pohybu a interakcí vodních kapek. Podrobně popište metodu Smoothed Particle Hydrodynamics, kde věnujte pozornost především její souvislosti s teoretickým popisem používaným v dynamice tekutin. S pomocí literatury připravte výpočtový program, který validujte za použití několika testovacích úloh. Diskutujte možnosti použití výpočtového programu na problém rozpadu vodních kapek. Definujte vlastní úlohu s cílem identifikovat nedostatky výpočtového programu. Diskutujte dosažené výsledky.
Rozsah průvodní zprávy: cca 60 stran

Seznam doporučené literatury:

dle doporučení vedoucího práce

Jméno a pracoviště vedoucí(ho) diplomové práce:

Ing. Tomáš Hyhlík Ph.D., 12112

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

Datum zadání diplomové práce: **27.04.2017**

Termín odevzdání diplomové práce: **14.08.2017**

Platnost zadání diplomové práce: **26.10.2018**

Podpis vedoucí(ho) práce

Podpis vedoucí(ho) ústavu/katedry

Podpis děkana(ky)

III. PŘEVZETÍ ZADÁNÍ

Diplomant bere na vědomí, že je povinen vypracovat diplomovou práci samostatně, bez cizí pomoci, s výjimkou poskytnutých konzultací. Seznam použité literatury, jiných pramenů a jmen konzultantů je třeba uvést v diplomové práci.

Datum převzetí zadání

Podpis studenta

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci s názvem Použití metody Smoothed Particle Hydrodynamics k modelování proudění s volnou hladinou vypracoval samostatně pod vedením Ing. Tomáše Hyhlíka, Ph.D. s použitím literatury uvedené na konci této diplomové práce v seznamu literatury.

V Praze dne

.....

Anotace

Jméno autora:	Bc. Petr Jančík
Název diplomové práce:	Použití metody Smoothed Particle Hydrodynamics k modelování proudění s volnou hladinou
Title:	Utilisation of Smoothed Particle Hydrodynamics for Modelling of Free Surface Flow
Rok:	2017
Studijní program:	Strojní inženýrství
Obor studia:	Aplikovaná mechanika
Ústav:	Ústav mechaniky tekutin a termodynamiky
Vedoucí práce:	Ing. Tomáš Hyhlík, Ph.D.
Bibliografické údaje:	Počet stran: 64 Počet obrázků: 49
Klíčová slova:	CFD, Smoothed Particle Hydrodynamics, proudění s volnou hladinou, interakce kapek
Keywords:	CFD, Smoothed Particle Hydrodynamics, free surface flow, droplets interactions
Anotace:	Účelem této práce je prozkoumat možnosti užití metody Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) pro řešení úloh s volnou hladinou. V práci jsou uvedeny základní rovnice mechaniky tekutin a teorie popisu kapek a jejich interakcí. Dále je popsána metoda SPH a výpočtový program založený na této metodě. Nakonec jsou definovány úlohy interakce kapek a na jejich řešení demonstrovány možnosti sestaveného programu. Rovněž jsou navrženy kroky k rozšíření těchto možností.
Abstract:	The purpose of this thesis is to investigate possibilities of using Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) for free surface flow problems. In the thesis, fundamental equations of fluid dynamics and the theory of description of droplets and their interactions, are presented. Furthermore, SPH method and computing program, based on this method, are described. Finally, problems of droplets interactions are defined and capabilities of the created program, are demonstrated. Possible future program improvements are suggested as well.

Obsah

Schéma práce	1
1 Teorie mechaniky tekutin	2
1.1 Lagrangeova a Eulerova metoda popisu pohybu tekutin	2
1.2 Základní rovnice mechaniky tekutin	3
1.2.1 Rovnice kontinuity	3
1.2.2 Pohybová rovnice	4
1.2.3 Energetická rovnice	5
1.3 Povrchové napětí	6
1.3.1 Youngova-Laplaceova rovnice	7
1.3.2 Styk tří fází	8
2 Kapky a numerické řešení jejich interakcí	9
2.1 Popis kapek tekutiny	9
2.2 Dopad na kapalinový film	10
2.3 Dopad na pevný povrch	11
2.4 Numerické metody pro řešení úloh interakce vodních kapek	12
2.4.1 Eulerův popis	12
2.4.2 Lagrangeův popis	13
2.4.3 Metoda Lattice-Boltzmann	13
3 Metoda SPH	15
3.1 Základní vlastnosti SPH	15
3.2 Aplikace a modifikace metody SPH	15
3.3 Reprezentace spojitě funkce	16
3.3.1 Integrovní reprezentace funkce	16
3.3.2 Vlastnosti váhové funkce	16
3.3.3 Integrovní reprezentace derivace funkce	18
3.4 Částicová aproximace	19
3.4.1 Konzistence částicové aproximace	19
3.5 Diskretizace rovnic mechaniky tekutin	21
3.5.1 Aproximace hustoty	21
3.5.2 Aproximace bilance hybnosti	22
3.5.3 Aproximace bilance energie	22
3.6 Realizace okrajových podmínek	23
3.7 Implementace povrchového napětí	24
3.8 Numerické aspekty simulace metodou SPH	25
3.8.1 Váhové funkce	25
3.8.2 Umělá viskozita	28
3.8.3 Středování rychlosti	29
3.8.4 Umělá stlačitelnost	29

3.8.5	Proměnná vyhlazovací vzdálenost	30
3.8.6	Vyhledávání interagujících párů částic	30
3.8.7	Časová integrace	32
4	Implementace metody SPH	33
4.1	Základní popis	33
4.2	Struktura programu	33
4.2.1	Hlavní program	33
4.2.2	Podprogram časové integrace	33
4.2.3	Podprogram časového kroku	34
4.2.4	Soubor parametrů	34
4.3	Ověřovací úlohy	36
4.3.1	Rázová trubice	36
4.3.2	Proudění v kavitě	39
4.3.3	Zhroucení sloupce kapaliny	39
4.3.4	Shrnutí výsledků ověřovacích úloh	44
5	Řešení interakce kapek	48
5.1	Dopad na kapalinový film	48
5.2	Dopad na pevný povrch	54
5.3	Hodnocení výsledků a programu	59
	Závěr	60
	Literatura	62

Seznam obrázků

1.1	Zobrazení přírůstku plochy fázového rozhraní.	6
1.2	Znázornění rozhraní dvou fází.	7
1.3	Znázornění styku tří fází a sil působících na společnou křivku rozhraní.	8
2.1	Možné výsledky dopadu kapky na kapalinový film.	10
2.2	Možné výsledky dopadu kapky na pevný povrch.	11
3.1	Váhová funkce W v dostatečné vzdálenosti od hranice oblasti.	17
3.2	Váhová funkce W v blízkosti hranice oblasti	18
3.3	Částicová aproximace funkce.	20
3.4	Realizace okrajových podmínek použitím obou typů virtuálních částic.	24
3.5	Kubická váhová funkce a její derivace v 1D pro $h = 1$ m.	26
3.6	Váhová funkce pátého řádu a její derivace v 1D pro $h = 1$ m.	27
3.7	Gaussovská váhová funkce a její derivace v 1D pro $h = 1$ m.	27
3.8	Vyhledávací algoritmus každý s každým ve 2D prostoru.	31
3.9	Vyhledávací algoritmus linked-list ve 2D prostoru	31
3.10	Vyhledávací algoritmus tree search ve 2D prostoru.	32
4.1	Grafické schéma výpočtového programu.	35
4.2	Rozložení hustoty plynu v trubici v čase $t = 0,2$ s.	37
4.3	Rozložení tlaku plynu v trubici v čase $t = 0,2$ s.	37
4.4	Rozložení vnitřní energie plynu v trubici v čase $t = 0,2$ s.	38
4.5	Rychlostní pole v trubici v čase $t = 0,2$ s.	38
4.6	Počáteční rozložení částic pro úlohu kavity I.	40
4.7	Rychlostní pole v kavitě v čase $t = 0,015$ s I.	41
4.8	Počáteční rozložení částic pro úlohu kavity II.	42
4.9	Rychlostní pole v kavitě v čase $t = 0,015$ s II.	43
4.10	Počáteční rozložení částic pro úlohu kolapsu sloupce kapaliny.	44
4.11	Řešení úlohy kolapsu sloupce kapaliny v čase $t = 0,5$ s.	45
4.12	Řešení úlohy kolapsu sloupce kapaliny v čase $t = 1,0$ s.	45
4.13	Řešení úlohy kolapsu sloupce kapaliny v čase $t = 1,5$ s.	46
4.14	Řešení úlohy kolapsu sloupce kapaliny v čase $t = 1,8$ s.	46
4.15	Řešení úlohy kolapsu sloupce kapaliny v čase $t = 2,3$ s.	47
4.16	Řešení úlohy kolapsu sloupce kapaliny v čase $t = 3,0$ s.	47
5.1	Počáteční konfigurace úlohy dopadu kapky na kapalinový film.	49
5.2	Dopad kapky na kapalinový film, $Re = 100$, $t = 0,2$ ms.	50
5.3	Dopad kapky na kapalinový film, $Re = 100$, $t = 0,5$ ms.	50
5.4	Dopad kapky na kapalinový film, $Re = 100$, $t = 1,0$ ms.	51
5.5	Dopad kapky na kapalinový film, $Re = 100$, $t = 2,0$ ms.	51
5.6	Dopad kapky na kapalinový film, $Re = 10$, $t = 0,2$ ms.	52
5.7	Dopad kapky na kapalinový film, $Re = 10$, $t = 0,5$ ms.	52
5.8	Dopad kapky na kapalinový film, $Re = 10$, $t = 1,0$ ms.	53

5.9	Dopad kapky na kapalinový film, $Re = 10$, $t = 2,0\text{ms}$	53
5.10	Počáteční konfigurace úlohy dopadu kapky na pevný povrch.	55
5.11	Dopad kapky na pevný povrch, $Re = 100$, $t = 0,2\text{ms}$	55
5.12	Dopad kapky na pevný povrch, $Re = 100$, $t = 0,5\text{ms}$	56
5.13	Dopad kapky na pevný povrch, $Re = 100$, $t = 1,0\text{ms}$	56
5.14	Dopad kapky na pevný povrch, $Re = 100$, $t = 1,5\text{ms}$	57
5.15	Dopad kapky na pevný povrch, $Re = 10$, $t = 0,2\text{ms}$	57
5.16	Dopad kapky na pevný povrch, $Re = 10$, $t = 0,5\text{ms}$	58
5.17	Dopad kapky na pevný povrch, $Re = 10$, $t = 1,0\text{ms}$	58
5.18	Dopad kapky na pevný povrch, $Re = 10$, $t = 1,5\text{ms}$	59

Seznam použitých symbolů

Jednotky některých parametrů mohou být závislé na počtu uvažovaných prostorových dimenzí d . Dolní indexy A , B a C slouží pro obecné rozlišení, např. stejné veličiny různých fází. Dolními indexy i a j u symbolu se rozumí, že daná charakteristika přísluší částici i respektive j . Označení oběma indexy současně vyjadřuje vztah charakteristiky k oběma částicím. Podobně dolní indexy r a v u symbolu přiřazují charakteristiky reálným a virtuálním částicím. Dolní index s označuje stěnu a dolní index 0 referenční hodnotu proměnné. Dolními indexy jsou rovněž označeny časové uzly integračního schématu.

Horním indexem T se označuje transpozice tenzoru. Dále horní indexy α , β a γ označují směry os kartézského souřadného systému. Je užíváno Einsteinovo sumační pravidlo, tedy, že v součinu se přes opakující se horní indexy sčítá. Vektorové či tenzorové veličiny jsou sázeny tučně, pokud nejsou vyjádřeny ve složkách.

Symbol	Jednotka	Označení
\mathbf{a}, a^α	(m.s ⁻²)	vektor zrychlení
B	(Pa)	koefficient stavové rovnice pro umělou stlačitelnost
C	(1)	objemový zlomek
c	(m.s ⁻¹)	rychlost zvuku
D	(m ² .s ⁻²)	parametr velikosti odpudivého zrychlení od virtuální částice I. typu
d	(1)	počet uvažovaných prostorových dimenzí
dA	(m ²)	diferenciál plochy
dE_{PN}	(J)	diferenciál povrchové energie
dS	(m ^{d-1})	diferenciál hranice oblasti $\partial\Omega$
dV	(m ^d)	diferenciál oblasti Ω
dx	(m)	diferenciál délky
e	(J.kg ⁻¹)	měrná celková energie
F	(m.s ⁻²)	měřítko vnějšího zrychlení
\mathbf{f}, f^α	(m.s ⁻²)	vektor vnějšího zrychlení
$\mathbf{f}, f^{\alpha\beta}$	(1)	obecná tenzorová funkce prostorových souřadnic
H	(1)	poměrná tloušťka kapalinového filmu
h	(m)	vyhlazovací vzdálenost
L	(m)	délkové měřítko
l	(m)	délka hranice fázového rozhraní
m	(kg)	hmotnost
N	(1)	celkový počet částic
\mathbf{n}, n^α	(1)	vektor jednotkové normály
Oh	(1)	Ohnesorgeho číslo
p	(Pa)	tlak
p_1	(1)	první exponent odpudivého zrychlení od virtuální částice I. typu

Symbol	Jednotka	Označení
p_2	(1)	druhý exponent odpuzivého zrychlení od virtuální částice I. typu
\dot{Q}	(W)	tepelný tok přivedený do oblasti Ω
\mathbf{q}, q^α	(W.m ⁻²)	vektor tepelného toku
R	(1)	relativní vzdálenost bodů v prostoru
r	(m)	vzdálenost bodů v prostoru
Re	(1)	Reynoldsovo číslo
S	(N.m ⁻¹)	membránové napětí
$\mathbf{S}, S^{\alpha\beta}$	(N.m ⁻²)	tenzor povrchového napětí
t	(s)	čas
u	(J.kg ⁻¹)	měrná vnitřní energie
V	(m ³)	objem
V	(m.s ⁻¹)	rychlostní měřítko
\mathbf{v}, v^α	(m.s ⁻¹)	vektor rychlosti
$W(\mathbf{x}' - \mathbf{x}, h)$	(m ^{-d})	váhová funkce se středem v bodě \mathbf{x} a vyhlazovací vzdáleností h
\dot{W}	(W)	mechanický výkon přivedený do oblasti Ω
We	(1)	Weberovo číslo
\mathbf{X}, X^α	(m)	radiusvektor materiálové částice
\mathbf{x}, x^α	(m)	radiusvektor bodu v prostoru
a_d	(m ^{-d})	normalizační funkce váhové funkce
α_Π	(1)	první koeficient umělé viskozity pro stabilizaci řešení
β_Π	(1)	druhý koeficient umělé viskozity pro stabilizaci řešení
γ	(1)	exponent stavové rovnice pro umělou stlačitelnost
Δt	(s)	časový krok
$\delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x})$	(m ^{-d})	Diracova delta funkce se středem v bodě \mathbf{x}
δ_ρ	(1)	relativní změna hustoty
$\boldsymbol{\delta}, \delta^{\alpha\beta}$	(1)	jednotkový tenzor
$\partial\Omega$	(m ^{d-1})	hranice oblasti v prostoru
ε	(1)	koeficient středování rychlosti
ε_Π	(1)	koeficient umělé viskozity zabraňující singularitě
θ	(°)	úhel smáčení
κ	(1)	Poissonova konstanta plynu
κ_w	(1)	parametr velikosti oblasti vlivu váhové funkce
λ	(Pa.s)	objemová viskozita
λ	(W.m ⁻¹ .K ⁻¹)	tepelná vodivost
μ	(Pa.s)	dynamická viskozita
ν	(m ² .s ⁻¹)	kinematická viskozita
ρ	(kg.m ⁻³)	hustota
σ	(N.m ⁻¹)	povrchové napětí
$\boldsymbol{\sigma}, \sigma^{\alpha\beta}$	(N.m ⁻²)	tenzor celkových napětí
$\boldsymbol{\tau}, \tau^{\alpha\beta}$	(N.m ⁻²)	tenzor tečných napětí
ϕ	(m.s ⁻¹)	funkce pro umělou viskozitu
Ω	(m ^d)	oblast v prostoru

Schéma práce

Tato diplomová práce se zabývá možnostmi numerického řešení úloh mechaniky tekutin s volnou hladinou. Příkladem takové úlohy může být dopad kapky na pevný povrch, či povrch pokrytý tenkým tekutinovým filmem. Pro simulaci je použita metoda Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH). Jedná se metodu využívající Lagrangeův popis kontinua a jak název napovídá, kontinuum je v této metodě rozděleno na částice.

Práce je dělena do několika kapitol. První kapitola shrnuje základní poznatky teoretické mechaniky tekutin, jež se uplatňují při numerickém řešení úloh s volnou hladinou.

Druhá kapitola obsahuje shrnutí základních poznatků týkajících se kapek a jejich interakce s pevným povrchem a tenkým filmem tekutiny. Rovněž jsou zde uvedeny numerické metody použitelné pro řešení úloh s volnou hladinou.

Obsahem třetí kapitoly je odvození a popis metody SPH. Kromě diskretizace základních rovnic mechaniky tekutin jsou uvedeny rovněž možnosti řešení okrajových podmínek úlohy, povrchového napětí či numerické stabilizace řešení.

Ve čtvrté kapitole je popsána konkrétní implementace metody SPH a funkčnost výpočetního programu je ověřena na několika úlohách.

V následující páté kapitole jsou definovány úlohy interakce kapek, na kterých jsou demonstrovány možnosti použité metody. Dále jsou diskutovány výsledky simulací a nastíněn možný další vývoj použitého programu.

Kapitola 1

Teorie mechaniky tekutin

V této kapitole je popsána Lagrangeova a Eulerova metoda popisu pohybu v mechanice tekutin. Dále jsou odvozeny základní rovnice mechaniky tekutin, tedy rovnice kontinuity, bilance hybnosti a bilance energie. V úlohách s volnou hladinou je často nutné uvažovat povrchové napětí kapaliny, proto je v této kapitole popsán i tento jev.

1.1 Lagrangeova a Eulerova metoda popisu pohybu tekutin

Na pohyb tekutiny lze nahlížet dvěma způsoby. Pokud je sledována primárně poloha hmotné částice tekutiny v čase, jedná se o tzv. Lagrangeův (materiálový) popis. Je-li primárně sledována rychlost ve zvoleném bodu v prostoru, kterým procházejí různé hmotné částice, jde o tzv. Eulerův (prostorový) popis [1].

V Lagrangeově přístupu je poloha částice popsána svou polohou v referenčním čase X_0 a časem t . V tomto popisu jsou tak přirozeně popsány trajektorie částic. Poloha každé částice tekutiny je funkcí referenční polohy, jež není závislá na čase, tedy

$$\mathbf{X} = \mathbf{X}(X_0, t). \quad (1.1)$$

Rychlost a zrychlení částice tekutiny tak lze formálně jednoduše získat postupným parciálním derivováním polohy podle času. Platí tak

$$\mathbf{v}(X_0, t) = \frac{\partial \mathbf{X}(X_0, t)}{\partial t}, \quad (1.2)$$

resp.

$$\mathbf{a}(X_0, t) = \frac{\partial \mathbf{v}(X_0, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 \mathbf{X}(X_0, t)}{\partial t^2}. \quad (1.3)$$

Eulerův popis sleduje rychlost tekutiny jako funkci bodu v prostoru \mathbf{x} a času t . Přirozeným výstupem tohoto popisu jsou proudnice tekutiny. Formálně zapsáno

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t). \quad (1.4)$$

Pro určení zrychlení částice tekutiny je třeba uvažovat to, že v daném bodě prostoru se nachází konkrétní částice. Tato částice se do tohoto daného bodu prostoru v čase t dostala ze své původní polohy X_0 v referenčním čase. Tuto skutečnost lze zapsat jako

$$\mathbf{x} = \mathbf{X}(X_0, t), \quad (1.5)$$

Argument funkce rychlosti (1.4) tak lze nahradit

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{v}(\mathbf{X}(X_0, t), t). \quad (1.6)$$

Rychlost je tak vyjádřena v závislosti na Lagrangeových souřadnicích X_0 nezávislých na čase t . Zrychlení částice lze nyní získat aplikací vztahů (1.2) a (1.3). V indexovém zápisu

$$a^\alpha(X(X_0, t), t) = \frac{\partial v^\alpha(X(X_0, t), t)}{\partial t} + \frac{\partial v^\alpha(X(X_0, t), t)}{\partial X^\beta(X(X_0, t), t)} v^\beta(X(X_0, t), t). \quad (1.7)$$

Nyní lze užitím (1.6) v opačném směru formálně přejít zpět k Eulerovým souřadnicím \mathbf{x} . Výsledný tvar pro zrychlení částice v Eulerových souřadnicích tak je

$$a^\alpha(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial v^\alpha(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \frac{\partial v^\alpha(\mathbf{x}, t)}{\partial x^\beta} v^\beta(\mathbf{x}, t). \quad (1.8)$$

Obdobný vztah jako (1.8) pro rychlost a zrychlení platí i pro jiné veličiny, které se přenášejí konvekcí společně s tekutinou, a jejich časové derivace. Zavádí se proto tzv. materiálová derivace $\frac{D}{Dt}$. Pro veličinu f platí

$$\frac{Df^{\alpha\beta}}{Dt} = \frac{\partial f^{\alpha\beta}}{\partial t} + \frac{\partial f^{\alpha\beta}}{\partial x^\gamma} v^\gamma. \quad (1.9)$$

Pro zápis se místo indexového zápisu často užívá přímá notace

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)f. \quad (1.10)$$

První člen představuje změnu veličiny f v daném bodě prostoru bez ohledu na pohyb tekutiny. Proto se označuje jako lokální derivace. Druhý člen zřejmě závisí na rychlosti tekutiny v daném bodě a vyjadřuje tak přenos veličiny f do daného bodu v prostoru společně s tekutinou. Označuje se proto jako konvektivní člen.

V mechanice tekutin většinou není třeba znát trajektorie jednotlivých částic, nýbrž spíše pole rychlosti. Proto se v mechanice tekutin častěji uplatňuje Eulerův popis a Lagrangeův popis spíše v mechanice pevných těles.

1.2 Základní rovnice mechaniky tekutin

Řešení úloh mechaniky tekutin spočívá v řešení soustavy PDR s danými okrajovými podmínkami. Těmito rovnicemi jsou rovnice kontinuity, pohybové rovnice a energetická rovnice. Výsledné odvozené rovnice v této části jsou ve tvaru vhodném pro diskretizaci metodou SPH.

1.2.1 Rovnice kontinuity

Rovnice kontinuity je vyjádřením zákona zachování hmotnosti. Při jejím odvození lze užít bilanci hmotnosti ve zvolené kontrolní oblasti Ω . Bilancovanou veličinou je tak hmotnost na jednotku objemu, tedy hustota ρ . V případě hmotnosti se neuvažuje možnost jejího vzniku v prostoru, proto se akumulace hmotnosti v oblasti rovná jejímu konvektivnímu přítoku do oblasti přes hranici této oblasti. Tyto úvahy je možno matematicky zapsat jako

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = - \int_{\partial\Omega} (\rho \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} dS. \quad (1.11)$$

Záporné znaménko u integrálu na pravé straně je proto, že \mathbf{n} je vnější normála hranice oblasti $\partial\Omega$. Užitím Gaussovy věty lze převést plošný integrál na pravé straně na objemový na oblasti Ω . Po této úpravě a převedení na levou stranu je bilance (1.11) upravena na

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \right) dV = 0. \quad (1.12)$$

Oblast Ω je zvolena libovolně. Proto je integrál obecně nulový, pouze pokud je integrovaná funkce nulová v libovolném bodě. Musí tedy platit

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (1.13)$$

Aplikace věty o derivaci součinu dále vede na

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \rho + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (1.14)$$

Užitím (1.10) může být rovnice převedena na konečný tvar s materiálovou derivací

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v}. \quad (1.15)$$

1.2.2 Pohybová rovnice

Pro odvození pohybové rovnice lze vycházet z bilance hybnosti v oblasti Ω . Měrná hybnost na jednotku objemu je vyjádřena součinem $\rho \mathbf{v}$. Platí, že akumulace hybnosti v kontrolní oblasti je dána jejím konvektivním tokem do oblasti a jejím přenosem do oblasti prostřednictvím vnějších objemových a plošných sil. Objemové síly jsou vyjádřeny objemovou intenzitou vnějšího silového pole (vnějším zrychlením) \mathbf{f} a působí na hmotu v celém objemu kontrolní oblasti. Plošné síly jsou reprezentovány plošnou intenzitou síly (napětím), které je závislé na Cauchyho tenzoru napětí $\boldsymbol{\sigma}$ a na směru jednotkové normály hranice oblasti \mathbf{n} . Napětí uvnitř oblasti představuje vnitřní síly, které nemají na celkovou bilanci hybnosti vliv. Tato bilance matematicky zapsána je

$$\int_{\Omega} \frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} dV = - \int_{\partial\Omega} (\rho \mathbf{v}) \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS + \int_{\Omega} \rho \mathbf{f} dV + \int_{\partial\Omega} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} dS. \quad (1.16)$$

Po aplikaci Gaussovy věty na plošné integrály bilance nabývá tvaru

$$\int_{\Omega} \frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} dV = - \int_{\Omega} \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) dV + \int_{\Omega} \rho \mathbf{f} dV + \int_{\Omega} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} dV. \quad (1.17)$$

Libovolnost volby oblasti Ω umožňuje, ze stejných důvodů jako u rovnice kontinuity, přejít do lokálního tvaru bilance. Kromě toho lze ještě aplikovat na první členy na obou stranách rovnice větu o derivaci součinu, čímž je získán tvar

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial t} \mathbf{v} = -\rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} - \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \mathbf{v} + \rho \mathbf{f} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (1.18)$$

Při předpokladu platnosti rovnice kontinuity 1.13 se druhé členy na obou stranách rovnice vzájemně odečtou. Po převedení prvního členu na levé straně na pravou lze též využít vztahu pro materiálovou derivaci 1.10. Konečně vydělení celé rovnice hustotou vede na výslednou rovnici

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \mathbf{f} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (1.19)$$

Tenzor celkových napětí $\boldsymbol{\sigma}$ lze rozložit na část tlaku p a část tečného napětí $\boldsymbol{\tau}$ zapříčiněného rychlostí deformace a viskozitou ve formě

$$\boldsymbol{\sigma} = -p \boldsymbol{\delta} + \boldsymbol{\tau}. \quad (1.20)$$

V případě newtonských tekutin platí pro tečné napětí $\boldsymbol{\tau}$ vztah

$$\boldsymbol{\tau} = \mu (\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T) + \lambda (\nabla \cdot \mathbf{v}) \boldsymbol{\delta}, \quad (1.21)$$

kde μ je dynamická viskozita a λ objemová viskozita. Nejčastěji se volí

$$\lambda = -\frac{2}{3} \mu. \quad (1.22)$$

1.2.3 Energetická rovnice

Při odvození energetické rovnice se opět vychází z bilance v kontrolní oblasti. Tentokrát se bilancuje celková energie vyjádřená v objemu pomocí součinu hustoty a měrné celkové energie ρe . Podle prvního zákona termodynamiky platí, že akumulace celkové energie je rovna součtu jejího konvektivního přítoku přes hranici oblasti, dodaného mechanického výkonu a celkového konduktivního tepelného toku přivedeného přes hranici oblasti. Tedy

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \rho e}{\partial t} dV = - \int_{\partial\Omega} \rho e \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS + \dot{W} + \dot{Q}. \quad (1.23)$$

Mechanický výkon i teplo přiváděné do kontrolní oblasti jsou uvažovány jako kladné.

Měrná celková energie je součtem měrné vnitřní energie a měrné kinetické energie, tedy platí

$$e = u + \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}. \quad (1.24)$$

Celkový mechanický výkon vykonaný tekutinou v kontrolním objemu je součtem výkonů objemových a plošných sil působících v kontrolním objemu resp. na jeho povrchu, z čehož vyplývá

$$\dot{W} = \int_{\Omega} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{f} dV + \int_{\partial\Omega} \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} dS = \int_{\Omega} (\rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{f} + \nabla \cdot (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\sigma})) dV. \quad (1.25)$$

Při konečné úpravě bylo užito Gaussovy věty. Pro vyjádření celkového tepelného toku hranicemi oblasti lze užít Fourierův zákon vedení tepla a k převodu na integrál přes objem opět využít Gaussovy věty. Lze tedy psát

$$\dot{Q} = - \int_{\partial\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dS = - \int_{\partial\Omega} (-\lambda \nabla T) \cdot \mathbf{n} dS = \int_{\Omega} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) dV. \quad (1.26)$$

Dosažením konečných výrazů ze vztahů (1.24), (1.25) a (1.26) do bilance celkové energie (1.23), převedením konvektivního členu na levou stranu a jeho úpravou užitím Gaussovy věty vychází

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} (\rho (u + \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v})) dV + \int_{\Omega} \nabla \cdot (\rho (u + \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}) \mathbf{v}) dV = \\ = \int_{\Omega} (\rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\sigma})) dV + \int_{\Omega} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) dV. \end{aligned} \quad (1.27)$$

Vzhledem k libovolné volbě oblasti Ω lze opět přejít k lokální formě

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho (u + \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v})) + \nabla \cdot (\rho (u + \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}) \mathbf{v}) = (\rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{f} + \nabla \cdot (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\sigma})) + \nabla \cdot (\lambda \nabla T). \quad (1.28)$$

Aplikací věty o derivaci součinu na členy na levé straně rovnice a následným užitím rovnice kontinuity (1.13) a vztahu pro materiálovou derivaci lze rovnici přepsat na

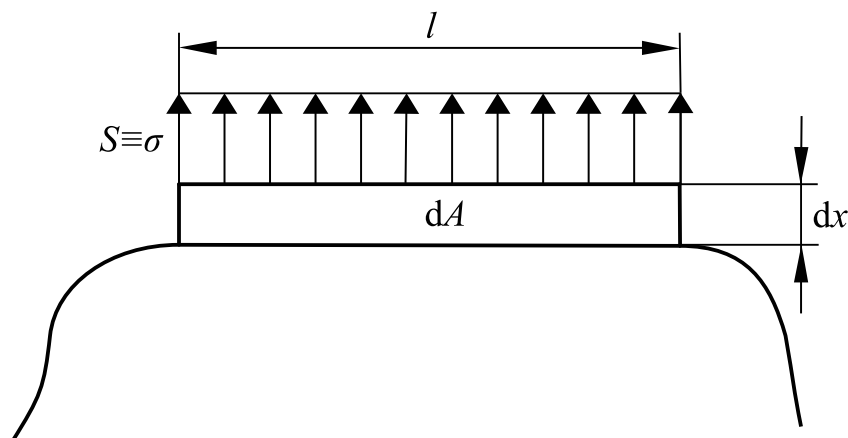
$$\rho \frac{D}{Dt} (u + \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}) = \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{f} + \nabla \cdot (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\sigma} + (\lambda \nabla T)). \quad (1.29)$$

Materiálovou derivaci kinetické energie je možno upravit a následně porovnat s pohybovou rovnicí (1.19). Tímto postupem se ukazuje, že

$$\frac{D}{Dt} (\frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}) = \mathbf{v} \cdot \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \mathbf{v} \cdot (\mathbf{f} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}). \quad (1.30)$$

Dosažením tohoto vztahu do (1.29) a úpravou prvního členu v závorce na pravé straně podle věty o derivaci součinu vede k výsledné rovnici

$$\frac{Du}{Dt} = \frac{1}{\rho} (\nabla \mathbf{v} : \boldsymbol{\sigma} + \nabla \cdot (\lambda \nabla T)). \quad (1.31)$$



Obrázek 1.1: Zobrazení přírůstku plochy fázového rozhraní.

1.3 Povrchové napětí

Kapalina má tendenci zaujmout takovou konfiguraci, aby její celková energie byla minimální. V případě výskytu více fází vzniká mezi těmito fázemi rozhraní a s existencí tohoto rozhraní je spojena povrchová energie. Tato energie je přímo úměrná ploše rozhraní a velikosti povrchového napětí σ , což je vlastnost rozhraní závislá na fázích tvořících rozhraní a jejich stavu.

Povrchové napětí σ může obecně nabývat kladných i záporných hodnot. Pro kladné povrchové napětí energie rozhraní roste s jeho plochou a kapalina má snahu tvořit rozhraní konečné plochy. V tomto případě se jedná o fáze nemísitelné. Pokud je povrchové napětí záporné, minima je dosaženo při nekonečném povrchu rozhraní, což nastane při dokonalém promísení fází. Jde tak o fáze mísitelné.

Povrchové napětí σ lze interpretovat nejen jako energii jednotkové plochy rozhraní. Pro alternativní přístup lze využít obrázku 1.1. Nechť existuje membrána konstantní jednotkové tloušťky předepjatá tahovým napětím. Toto napětí je nezávislé na deformaci membrány. Vzhledem k jednotkové tloušťce membrány lze tahové napětí vyjádřit jako sílu na jednotku délky S . Tato membrána představuje fázové rozhraní a deformační energie membrány odpovídá energii tohoto rozhraní. Dále nechť se část hranice membrány o délce l posune o elementární vzdálenost dx v takovém směru, který je v každém bodě hranice normálový jak vzhledem k hranici tak vzhledem k membráně. Přírůstek deformační energie membrány, který odpovídá přírůstku energie fázového rozhraní, odpovídá práci vnějších sil pracujících na elementárním posunutí dx . Jak již bylo zmíněno energie fázového rozhraní je úměrná ploše, proto pro její přírůstek platí

$$dE_{PN} = \sigma dA. \quad (1.32)$$

Zároveň pro elementární vykonanou práci lze psát

$$dW = S l dx. \quad (1.33)$$

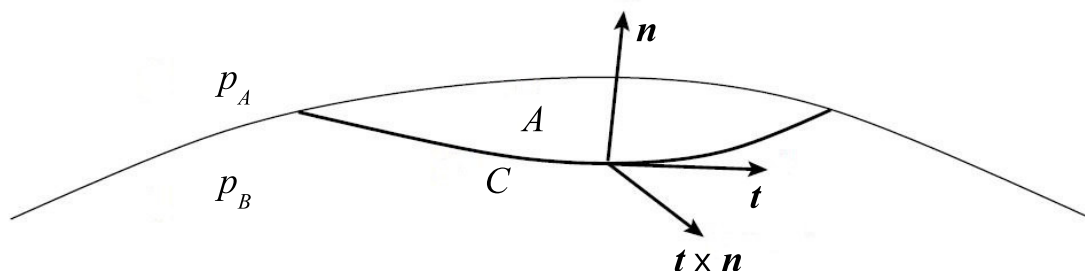
Z porovnání těchto vztahů a uvažování zřejmé rovnosti $dA = l dx$ vyplývá, že $\sigma = S$. Proto lze povrchové napětí σ fyzikálně interpretovat nejen jako plošnou hustotu energie, ale rovněž jako sílu na jednotku délky, která působí ve směru tečném k ploše rozhraní a normálovém k okraji rozhraní [2].

Výše zmíněné vysvětlení se odehrává na úrovni kontinua. Povrchové napětí lze ovšem vysvětlit i na molekulární úrovni. Molekuly tekutiny na sebe navzájem působí přitažlivými silami. Dosah těchto sil je řádově 10^{-9} m. Pokud je molekula ve velké vzdálenosti od rozhraní fází, je obklopena ostatními molekulami rovnoměrně ve všech směrech a výslednice přitažlivých sil je přibližně nulová. Ovšem v případě, kdy se molekula ocitne v blízkosti fázového rozhraní, může být rovnováha narušena. Může

nastat případ, že z přilehlé fáze působí na uvažovanou molekulu menší přitažlivé síly než z fáze ke které molekula náleží. Potom výsledná síla působí směrem dovnitř fáze uvažované molekuly. Molekula tak má tendenci opustit polohu v blízkosti rozhraní. Takto reagují všechny molekuly dané fáze a proto v blízkosti fázového rozhraní zůstává co možná nejmenší počet molekul. Tím se minimalizuje jeho plocha a výsledný efekt je stejný jako v kontinuálním přístupu [2].

Rozhraním ovlivněná oblast molekul je vzhledem k omezenému dosahu mezimolekulárních sil natolik tenká, že v modelu kontinua ji lze uvažovat jako dvourozměrnou plochu, přestože se ve skutečnosti jedná o trojrozměrnou oblast.

1.3.1 Youngova-Laplaceova rovnice



Obrázek 1.2: Znázornění rozhraní dvou fází. Převzato z [3].

Nechť existuje rozhraní dvou fází A a B, které je v rovnováze. Pak pro libovolně zvolenou část tohoto rozhraní o ploše A, jež je ohraničena uzavřenou křivkou C musí platit, že výsledná síla je rovna nulovému vektoru. Tlakové síly působí ve směru normály k ploše. Síly způsobené povrchovým napětím působí ve směru normály ke křivce C a zároveň ve směru tečném k rozhraní. Tento směr je možno vyjádřit jako vektorový součin tečného vektoru křivky C a normálového vektoru plochy rozhraní, jak je znázorněno na obrázku 1.2. Při uvažování konstantní hodnoty povrchového napětí platí rovnice rovnováhy

$$\int_A (p_A - p_B) \mathbf{n} dA + \sigma \int_C (\mathbf{t} \times \mathbf{n}) dx = 0. \quad (1.34)$$

Argument integrálu v druhém členu na levé straně této rovnice skalárně lze vynásobit libovolným konstantním vektorem \mathbf{f} a tento součin dále upravit užitím pravidla cyklické záměny pro smíšený součin. Následně lze takový křivkový integrál převést na plošný užitím Stokesovy věty,

$$\int_C (\mathbf{t} \times \mathbf{n}) \cdot \mathbf{f} dx = \int_C (\mathbf{n} \times \mathbf{f}) \cdot \mathbf{t} dx = \int_A \nabla \times (\mathbf{n} \times \mathbf{f}) \cdot \mathbf{n} dA. \quad (1.35)$$

Protože vektor \mathbf{f} byl volen jako konstantní, platí pro argument posledního integrálu

$$\nabla \times (\mathbf{n} \times \mathbf{f}) \cdot \mathbf{n} = ((\mathbf{f} \cdot \nabla) \mathbf{n} - (\nabla \cdot \mathbf{n}) \mathbf{f}) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{f} \cdot ((\nabla \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n} - (\nabla \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}). \quad (1.36)$$

Zároveň platí

$$(\nabla \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n} = \frac{1}{2} \nabla (\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}) = 0, \quad (1.37)$$

protože jednotkový vektor má konstantní velikost. Dosazením výsledného výrazu z rovnice (1.36) při uvažování vztahu (1.37) do rovnice (1.35) vychází

$$\int_C (\mathbf{t} \times \mathbf{n}) \cdot dx = \int_A -(\nabla \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} dA. \quad (1.38)$$

Silovou rovnováhu podle rovnice (1.34) je tak možno přepsat na

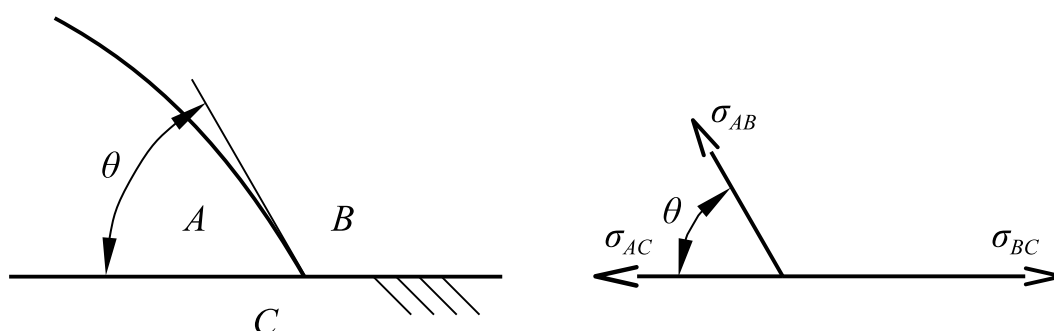
$$\int_A ((p_A - p_B) - \sigma(\nabla \cdot \mathbf{n})) \mathbf{n} dA = 0. \quad (1.39)$$

Vzhledem k libovolnosti volby uvažované části rozhraní je tato rovnice splněna pouze v případě, že je nulový argument integrálu. Musí proto platit

$$(p_A - p_B) = \sigma(\nabla \cdot \mathbf{n}). \quad (1.40)$$

Tento výsledný vztah bývá označován jako Youngova-Laplaceova rovnice [3]. Z této rovnice je patrné, že rozdíl tlaků na obou stranách rozhraní je úměrný povrchovému napětí a výrazu $\nabla \cdot \mathbf{n}$. Tento výraz vyjadřuje lokální křivost rozhraní.

1.3.2 Styk tří fází



Obrázek 1.3: Znázornění styku tří fází a sil působících na společnou křivku rozhraní.

Dvě fáze tvoří mezi sebou rozhraní tvaru obecné plochy. V případě existence tří fází může nastat situace, kdy každá z fází tvoří rozhraní s oběma zbývajících. Vznikají tak tři různá rozhraní, jež se stýkají ve společné křivce. Za předpokladu, že jedna z fází je pevná, je tato situace znázorněna na obrázku 1.3. Na křivku styku tří fází působí síly způsobené povrchovým napětím. Ve směru kolmém k pevné fázi obecně nelze zajistit rovnováhu těchto sil. Pro rovnováhu ve směru rovnoběžném s pevnou fází však platí

$$\sigma_{BC} - \sigma_{AC} - \sigma_{AB} \cos \theta = 0. \quad (1.41)$$

Řešitelnost této rovnice je závislá na hodnotách povrchového napětí mezi jednotlivými fázemi. Pokud platí $\sigma_{BC} > \sigma_{AC} + \sigma_{AB}$, působí výslednice sil na společnou křivku směrem doprava. Ta se tak bude pohybovat tímto směrem a plocha rozhraní AC se bude zvětšovat. Kapalina A dokonale smáčí povrch C. Opačná situace nastane, pokud platí $\sigma_{AC} > \sigma_{BC} + \sigma_{AB}$. Výslednice sil působí směrem doleva a plocha rozhraní AC se zmenšuje. Kapalina A dokonale nesmáčí povrch C. Pokud neplatí žádná z uvedených nerovnic, lze z rovnice (1.41) určit úhel θ pro rovnováhu. Úhel θ může zřejmě nabývat hodnot od 0° do 180° . Nižší hodnoty znamenají vyšší smáčivost a naopak.

Situace v předcházejícím odstavci předpokládá, že fázová rozhraní jsou v klidu. Při pohybu rozhraní se úhel smáčení θ od statické hodnoty liší. Jeho určení je komplexní záležitostí a závisí především na rychlosti pohybu rozhraní. Při uvažování situace podle obrázku 1.3 obecně platí, že při pohybu křivky kontaktu tří fází směrem doprava je úhel smáčení θ větší než statický a při pohybu křivky doleva naopak menší [4].

Kapitola 2

Kapky a numerické řešení jejich interakcí

Kapitola obsahuje stručné shrnutí základních poznatků o kapkách a jejich možném popisu bezrozměrnými parametry. Také jsou popsány jejich možné interakce s pevnými povrchy a povrchy s tenkými tekutinovými filmy. Dále jsou uvedeny některé numerické metody, jež lze pro řešení interakcí kapek použít

2.1 Popis kapek tekutiny

Kapku tekutiny pohybující se prostorem lze charakterizovat několika fyzikálními parametry. Tekutina, která kapku tvoří, má jistou hustotu ρ , dynamickou viskozitu μ , a povrchové napětí vzhledem k médiu kapku obklopujícímu σ . Kapka má dále určitou velikost, danou např. svým průměrem D , a rychlost pohybu V . Těchto pět charakteristik příslušných určité kapce obsahuje celkem tři základní fyzikální rozměry: hmotnost, délku a čas. Podle Buckinghamova teorému tak existují dva nezávislé bezrozměrné parametry, jimiž lze kapku charakterizovat. Pokud budou dvě kapky, tvořené různou kapalinou, o různé velikosti a rozdílné rychlosti, mít stejnou hodnotu těchto bezrozměrných parametrů, lze je pokládat za navzájem podobné a očekávat tak i podobné chování. Použití bezrozměrných parametrů umožňuje např. zobecnění výsledků experimentů a tím redukci jejich počtu.

Pro popis kapek se běžně používají tři bezrozměrné parametry: Reynoldsovo číslo, Weberovo číslo a Ohnesorgeho číslo. Reynoldsovo číslo vyjadřuje poměr setrvačných a vazkých sil, Weberovo číslo vyjadřuje poměr vlivu setrvačnosti a povrchového napětí a Ohnesorgeho číslo vyjadřuje poměr vlivu vazkosti ku setrvačnosti a povrchovému napětí. Hodnoty těchto parametrů lze vyjádřit z parametrů kapky jako

$$Re = \frac{\rho DV}{\mu}, \quad We = \frac{\rho DV^2}{\sigma}, \quad Oh = \frac{\mu}{\sqrt{\rho \sigma D}} = \frac{\sqrt{We}}{Re}. \quad (2.1)$$

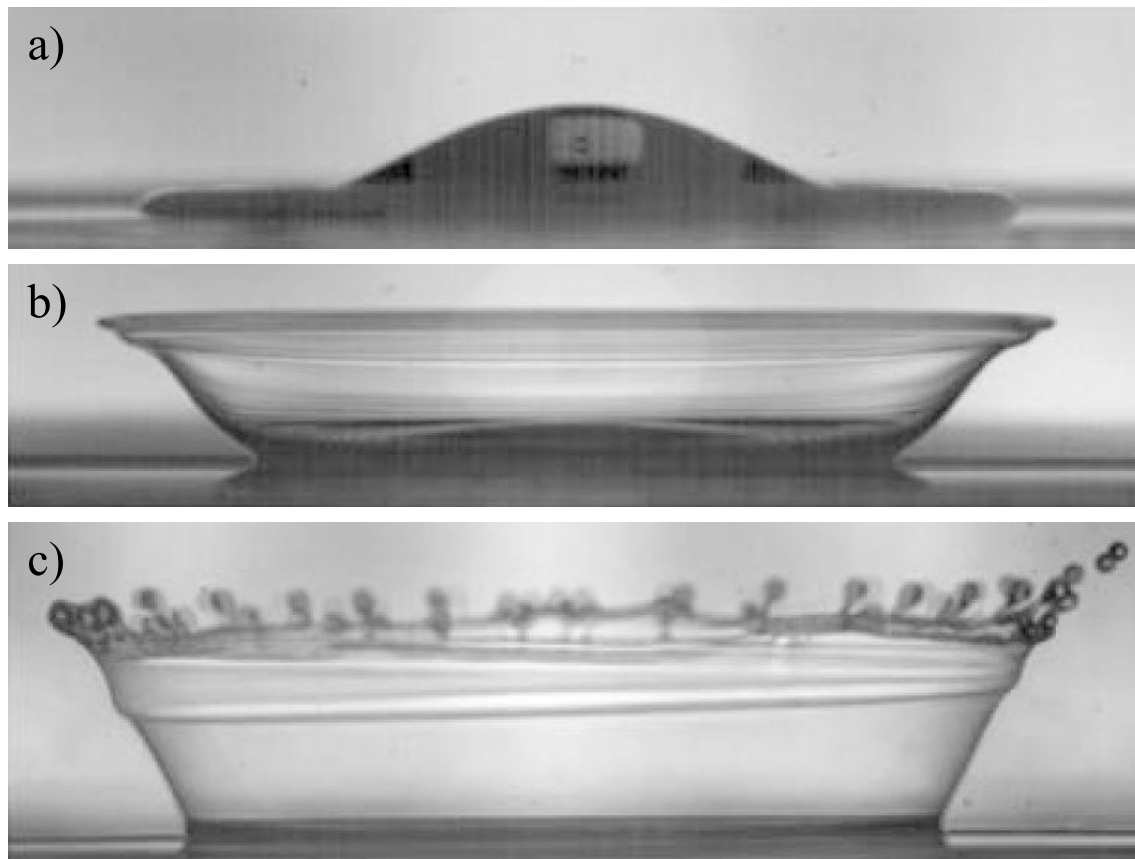
Z uvedené skupiny jsou nezávislé libovolně dva bezrozměrné parametry, hodnota třetího je druhými dvěma jednoznačně určena.

Kapka může dopadat na povrch pod různými úhly, její tvar může být kulový, či tvaru elipsoidu, děj může probíhat za různého tlaku okolního média. Tekutina navíc nemusí být newtonská a popis jejích reologických vlastností je tak komplikovanější. Při vysokých rychlostech hraje roli i stlačitelnost kapaliny [5]. Při dopadu na suchý povrch hraje roli smáčivost, drsnost a teplota povrchu. Tento povrch může být rovinný, nebo zakřivený, dokonale tuhý, či poddajný. V případě dopadu na hladinu tekutiny může být kapka tvořena stejnou tekutinou jako hladina, nebo tekutinou rozdílnou. V druhém případě je třeba rozlišovat mísitelné a nemísitelné kapaliny. Interakce jsou závislé na tloušťce kapalinového filmu. Hladina může být klidná či zvlněná [5].

Z výše uvedeného výčtu je zřejmé, že možných variant interakce kapek je obrovské množství. Proto následný popis se bude zabývat pouze kolmými dopady kapek tvořených newtonskými kapa-

linami. Kapalinový film je uvažován jako tenký, tvořený stejnou kapalinou jako dopadající kapka. Suchý povrch je předpokládán rovinný, dokonale tuhý o stejné teplotě jako kapka.

2.2 Dopad na kapalinový film



Obrázek 2.1: Možné výsledky dopadu kapky na kapalinový film - a) rozprostření, b) zformování koruny, c) rozpad lemu na kapičky. Převzato z [6].

Při dopadu kapky na kapalinový film hraje roli tloušťka tohoto filmu h . Ta je podobně jako předchozí uvažované parametry učiněna bezrozměrnou, a to konkrétně tak, že je dána do poměru s průměrem kapky D . Pro bezrozměrnou tloušťku filmu H tak platí

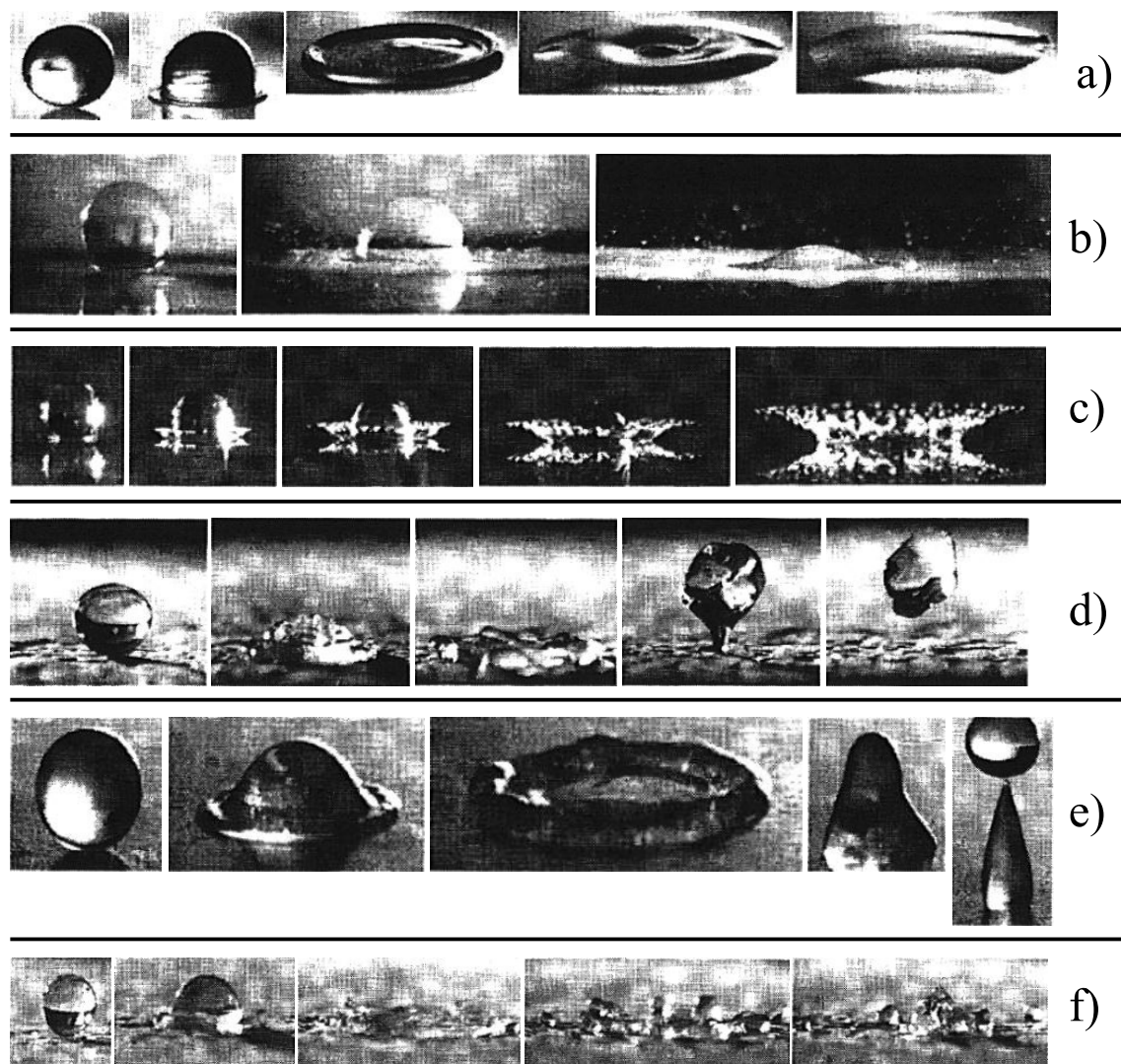
$$H = \frac{h}{D}. \quad (2.2)$$

V případě, kdy kapka a film jsou tvořeny stejnou kapalinou a kapka dopadá na povrch kolmo, může dojít ke třem kvalitativně odlišným výsledkům této interakce [6]. V prvním případě dojde k rozprostření kapky po hladině ve formě tenké lamely, kdy je výsledný efekt podobný jako při dopadu na dokonale smáčivý pevný povrch. V druhém případě se po dopadu zformuje struktura podobná koruně, jež se postupně rozšiřuje od místa dopadu v radiálním směru. Opět vznikne tenká lamela tekutiny, tentokrát ovšem směřuje vzhůru. Na jejím okraji se vytvoří lem. Třetí případ je vlastně pokračováním druhého. Lem na okraji lamely se deformuje a z vrcholů takto deformovaného lemu tryskají tenké proudy tekutiny. Ty se následně především vlivem povrchového napětí rozpadají na jednotlivé kapičky. Jednotlivé případy jsou zobrazeny na obrázku 2.1.

Z experimentu bylo odvozeno, že vhodnými kritérii pro určení, k jaké interakci dojde, je relativní tloušťka filmu H a kombinace Weberova a Ohnesorgeho čísla ve tvaru $WeOh^{-0,4}$. Pro hodnoty

$H \in (0,07; 0,14)$ dochází pro hodnoty $WeOh^{-0,4} < 400$ k rozprostření kapky. Ve stejném rozsahu relativní tloušťky filmu dochází pro hodnoty $WeOh^{-0,4} > 2100$ k rozstříku kapiček. Při hodnotách mezi těmito kritickými hodnotami dochází k tvorbě koruny bez rozstříku. Pro hodnoty $H \in (0,01; 0,07)$ dochází ke vzájemnému přibližování těchto kritických hodnot a setkávají se přibližně na hodnotě $WeOh^{-0,4} = 1200$ [6].

2.3 Dopad na pevný povrch



Obrázek 2.2: Možné výsledky dopadu kapky na pevný povrch - a) usazení, b) okamžitý rozstřík, c) rozstřík koruny, d) úplný odraz, e) částečný odraz, f) rozpad při smršťení. Převzato z [7].

Dopad kapky tekutiny na pevný povrch je ještě komplexnější záležitostí než dopad na hladinu tekutiny. Výrazný vliv na výsledek interakce má smáčivost povrchu a jeho drsnost. V závislosti na parametrech kapky a povrchu bylo pozorováno šest kvalitativně odlišných výsledků [7]. Všechny jsou zobrazeny v několika po sobě následujících okamžicích na obrázku 2.2.

V prvním případě dojde k usazení celé kapky na povrchu, aniž by se rozpadla na menší části. K tomu dochází při dopadu menších kapek za nižších rychlostí tvořených kapalinami s vyšší viskozitou dopadající na povrch o nízké drsnosti.

Druhou možností je tzv. okamžitý rozstřík, kdy jsou sekundární kapičky rozstříkovány přímo

z místa kontaktu kapky s povrchem. Dochází k němu při dopadu na drsný povrch, kdy je kapka poměrně velká, pohybuje se vyšší rychlostí a tvoří ji kapalina o nižší viskozitě a nižším povrchovém napětí.

Dále může nastat jev podobný jako při dopadu na tekutinový film, tedy vznik útvaru podobného koruně a rozstřík kapek z jeho lemu. Objevuje se při dopadu kapky tvořené tekutinou o nízké viskozitě i povrchovém napětí na povrch o nízké drsnosti vyšší rychlostí.

Následující tři možné interakce jsou možné pouze v případě, že tekutina tvořící kapku má relativně vysoké povrchové napětí a nesmáčí povrch, na který dopadá. Ve všech těchto případech dojde nejprve k rozprostření vrstvy tekutiny po povrchu. Vlivem setrvačnosti je maximální rozsah tohoto rozšíření větší, než by odpovídalo rovnovážnému stavu. Proto dochází ke opětovnému smrštění. V celkovém pořadí čtvrtou možností je následný úplný odraz kapky od povrchu. Dále při vyšší dopadové rychlosti kapky dochází k odrazu pouze části kapky, zbytek zůstává na povrchu. Pokud se k vyšší rychlosti přidá i nižší viskozita tekutiny, dojde během fáze opětovného smršťování k rozpadu vrstvy tekutiny na menší kapky.

Vzhledem ke komplexnosti problému je obtížné určit kritéria přechodu mezi jednotlivými možnými jevy při dopadu na pevný povrch [7]. V tomto ohledu zatím nebylo dosaženo uspokojivých výsledků [8].

2.4 Numerické metody pro řešení úloh interakce vodních kapek

Při řešení úloh pohybu a interakce vodních kapek je nutné, aby použitá metoda umožňovala identifikovat fázové rozhraní a umožnit jeho vývoj v čase. Při CFD výpočtech se nejčastěji využívá metody konečných objemů (MKO). To je metoda využívající Eulerův popis pohybu kontinua. A právě při tomto popisu je třeba pro sledování rozhraní užít zvláštních metod. Další možností je využití metod založených na Lagrangeově popisu. Při použití materiálového popisu lze rozhraní fází zpravidla určit přirozeněji. Kromě výše uvedených možností, kdy se úloha řeší na úrovni kontinua, lze použít též metodu Lattice-Boltzmann.

2.4.1 Eulerův popis

Tyto metody lze rozdělit na dvě základní kategorie: metody povrchové a objemové [9]. Povrchové metody explicitně určují polohu rozhraní. Je tak přesně znám tvar tohoto rozhraní, což umožňuje přesně určit síly způsobené povrchovým napětím. Objemové sledují pohyb tekutiny a z něj následně určují tvar rozhraní. Z obou skupiny je vybráno a blíže popsáno po dvou dva metodách.

Povrchové metody

Front Tracking Method určuje polohu fázového rozhraní pomocí bodů umístěných na rozhraní. Tyto body tvoří síť, jež je unášena konvekcí. Při pohybu bodů může docházet k jejich nerovnoměrnému rozdělení. To tak musí být v průběhu řešení korigováno, pokud má být zachována přesnost. Tato metoda navíc není vhodná pro případy, kdy dochází ke spojování nebo rozpadu rozhraní [9]. Nejeví se proto jako správná volba pro řešení dopadů kapek.

Level Set Method využívá k popisu polohy rozhraní tentokrát spojitou skalární funkci. Tato funkce je pro jednu z fází kladná a se vzdáleností od rozhraní roste, pro druhou fází je záporná a se vzdáleností od rozhraní klesá. Funkce je během řešení unášena konvekcí a její nulová hodnota určuje polohu fázového rozhraní v každém časovém okamžiku. Ve své nejjednodušší verzi metoda trpí nesplněním zákona zachování hmotnosti [9]. Bylo však publikováno vylepšení, které tento nedostatek výrazně omezuje a metoda byla použita pro simulaci dopadu kapek [10].

Objemové metody

Metoda Marker and Cell (MAC) využívá k identifikaci fázového rozhraní nehmotné částice jež jsou rozprostřeny v řešené oblasti. Každé je přiřazena hodnota odpovídající tomu, v které fázi se nachází a všechny jsou unášeny společně s tekutinou. Rozhraní je následně rekonstruováno v buňkách oblasti, kde se nachází částice s různou hodnotou. Jedná se o metodu robustní, ovšem pro přesné výsledky je třeba použít velké množství částic, což ji činí neefektivní [9].

Metoda Volume of Fluid (VOF) zavádí pro popis fázového rozhraní funkci objemového zlomku C . Ta je vyčíslena zvlášť pro každou fázi a nabývá hodnoty 1, pokud je celá buňka vyplněna danou fází a hodnoty 0, pokud buňka fázi neobsahuje. Součet objemových zlomků v každé buňce je roven jedné. V případě přítomnosti více fází v jedné buňce se hodnoty proměnných určí jako lineární kombinace hodnot jednotlivých fází, kde jako koeficienty lineární kombinace slouží příslušné objemové zlomky. Např. hustota v buňce obsahující dvě fáze tak je

$$\rho = C_A \rho_A + C_B \rho_B. \quad (2.3)$$

Objemový zlomek je unášen pohybem tekutiny. Proto lze jeho vývoj v čase popsat rovnicí

$$\frac{dC}{dt} + \nabla \cdot (C\mathbf{v}) = 0. \quad (2.4)$$

Při numerickém řešení této rovnice nastávají komplikace. Použitím schémat vyšších řádů dochází k numerické nestabilitě a oscilacím v řešení. Naopak schémata nižších řádů, jež jsou velmi stabilní, způsobují postupnou difuzi původně ostrého rozhraní [9]. Je tedy třeba použít schéma, jež udrží průběh hodnoty objemového zlomku při přechodu fázového rozhraní monotonní a ostrý. Metoda VOF je v současnosti nejčastěji implementována do komerčních CFD softwarů založených na MKO.

2.4.2 Lagrangeův popis

Nejčastěji používanou metodou založenou na Lagrangeově popisu je metoda konečných prvků (MKP). Uzly sítě jsou spojeny s materiálem, a proto je možné rozhraní sledovat přirozeně. Pokud ovšem dochází k velkým deformacím kontinua, deformuje se spolu s ním i výpočtová síť, čímž může trpět přesnost řešení. MKP tak není běžně používaná pro CFD výpočty, protože při pohybu tekutin zpravidla dochází k velkým deformacím.

Částicové metody

Metody založené na materiálovém popisu, jež jsou vhodné pro CFD výpočty, jsou tzv. částicové metody. Kontinuum je v těchto metodách diskretizováno částicemi. Příkladem částicové metody je Particle in Cell (PIC). Částice neinteragují mezi sebou navzájem, nýbrž přes síť buněk Eulerova popisu. Jedná se tak o metodu se smíšeným popisem, kdy se část úlohy řeší na úrovni částic a část na síti pevně umístěné v prostoru [11].

Další skupinou částicových metod jsou tzv. meshfree metody, jež vůbec nevyužívají síť. Algebraické rovnice, jež jsou aproximací parciálních diferenciálních rovnic, jsou odvozovány ze vzájemné polohy a rychlosti částic v daném časovém okamžiku. Příkladem takové metody je Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH), která je detailně popsána v následující kapitole a již jsou v této práci úlohy s volnou hladinou řešeny. Existuje rovněž metoda Moving Particle Semi-Implicit (MPS), jež je v některých ohledech podobná SPH [12].

2.4.3 Metoda Lattice-Boltzmann

Metoda Lattice-Boltzmann popisuje chování látky pomocí Boltzmannovy rovnice. Boltzmannova rovnice vychází z kinetické teorie plynů a při vhodném modelu srážek částic tekutiny z ní lze odvodit

základní rovnice mechaniky tekutin. Pohyb tekutiny tak lze určit i řešením přímo Boltzmannovy rovnice. Řešení této rovnice je diskretizováno tak, že se částice tekutiny mohou pohybovat pouze v předem definovaných uzlech mřížky a v definovaných směrech [13].

Fázové rozhraní je uvažováno jako trojrozměrná oblast, na rozdíl od modelů pracujících s kontínuem. Tento popis je blíže realitě a umožňuje tak přirozenější práci s fázovým rozhraním. Podařilo se překonat obtíže při simulaci rozhraní mezi dvěma fázemi s velmi rozdílnou hustotou, což otvírá možnost použití Lattice-Boltzmann metody pro řešení interakce kapek [14]. Výhodou metody je i výrazná možnost paralelizace výpočtu.

Kapitola 3

Metoda SPH

V následující kapitole je nejprve stručně popsána metoda SPH, její základní filozofie a možné aplikace. Dále jsou ozřejmeny principy, na nichž je založen způsob reprezentace funkce a její derivace na oblasti. Rovněž jsou uvedeny základní vlastnosti váhové funkce, jež se pro tuto reprezentaci využívá. Na základě aproximací spojitých funkcí jsou odvozeny nespojitě částicové aproximace. Rovněž jsou zde uvedeny PDR pro popis úloh mechaniky tekutin včetně možných způsobů jejich diskretizace. Nedílnou součástí simulací je i realizace okrajových podmínek, kterým je v metodě SPH třeba věnovat náležitou pozornost. Ke konci kapitoly jsou uvedeny některé numerické aspekty simulace. Popsány jsou konkrétní příklady používaných váhových funkcí a postupy vedoucí ke zlepšení stability řešení či efektivity výpočtu.

3.1 Základní vlastnosti SPH

SPH je částicová metoda, jež je založená na Lagrangeově popisu. Lze ji použít jak pro simulace v mechanice tekutin, tak pro výpočty pevných těles. Uplatnění nachází především tam, kde konvenční metody výpočtů narážejí na své limity. Ty jsou dány často tím, že pro diskretizaci oblasti používají síť. Pro CFD simulace se jedná například o simulace volné hladiny, nebo pohybující se hranice výpočtové oblasti. V mechanice pevných těles to mohou být výpočty s velkými deformacemi.

V SPH jsou diskretizovány PDR v Lagrangeově popisu, konkrétně jejich tzv. silná forma. Hodnoty proměnných a jejich prostorových derivací v konkrétním bodě prostoru jsou aproximovány integrací v okolí tohoto bodu. V důsledku toho se SPH velmi podobá metodám založených na slabé formě PDR, jejichž hlavním rysem je právě integrování na řešené oblasti [11]. Ze způsobu prostorové aproximace také vyplývá slovo *smoothed* v názvu metody. Operace integrace má totiž tendenci vyhlazovat extrémní hodnoty v řešení [15].

Jak napovídá druhé slovo v názvu metody, SPH pracuje s částicemi. Lze pracovat s látkami, které jsou přirozeně ve formě částic, nebo kontinuum na částice rozdělit. Částice mají neměnnou hmotnost a každá z nich nese i hodnoty dalších proměnných. Mohou také libovolně měnit vzájemnou polohu. Aproximace hodnot proměnných vychází z aktuální polohy částic, není tedy třeba před zahájením výpočtu tvořit síť. Vzhledem k částicovému vyjádření přechází integrace použitá pro vyjádření aproximace na sumaci.

Zmíněná diskretizace PDR se týká pouze derivací v prostoru, PDR jsou tak převedeny na obyčejné diferenciální rovnice (ODR). Pro časovou integraci těchto rovnic se zpravidla používají explicitní schémata. Ta jsou sice podmíněně stabilní, ale jednotlivé časové kroky jsou výpočetně relativně nenáročné [11].

3.2 Aplikace a modifikace metody SPH

Metoda SPH byla poprvé publikována roku 1977, původně pro simulace úloh astrofyziky. Vzhledem k podobnosti takovýchto jevů, jako např. formování hvězd či galaxií, s pohybem kapalin a plynů

byly tyto jevy popsány rovnicemi klasické mechaniky tekutin [16]. Výhodou SPH pro výše zmíněné úlohy je částicový popis. Díky němu není diskretizován prostor, ve kterém se v daném čase nevykytuje hmota. SPH rovněž umožňuje měnit velikost částic a tím i přesnost a náročnost řešení jak v prostoru tak v čase [17].

Dalšími CFD úlohami, kde se dobře uplatní výhody SPH, jsou například simulace explozí, či přenos tepla a hmoty. Metodou SPH lze řešit i úlohy mechaniky pevných těles mající v jistém ohledu charakter úloh mechaniky tekutin. Příkladem mohou být simulace křehkých lomů, procesů tváření kovů či dopady těles vysokými rychlostmi [11].

Nevýhodou metody SPH je, že v oblasti namáhané tahovým napětím dochází k numerické nestabilitě řešení. Tento problém se tak týká materiálových modelů, které umožňují přenášet tahová napětí. Existují postupy jak této nestabilitě zabránit, nicméně v uvedených příkladech mechaniky pevných těles se tato nestabilita neprojevuje. Důvodem je to, že vzhledem k vysokým rychlostem deformací se numerická nestabilita nestačí projevit [11].

Byly představeny i modifikace základní metody SPH. Jednou z nich je Adaptive Smoothed Particle Hydrodynamics (ASPH), jež dosahuje lepších výsledků například v úlohách dopadu za vysoké rychlosti. Další z těchto modifikací, Corrective Smoothed Particle Method (CSPM), zvyšuje řád konzistence metody a tím vylepšuje přesnost řešení jak uvnitř řešené oblasti, tak v okolí její hranice. CSPM byla dále upravena a výsledkem je Discontinuous SPH (DSPH), která umožňuje dosáhnout přesnějšího řešení v úlohách s nespojitostmi, jako jsou např. rázové vlny [11].

3.3 Re prezentace spojitě funkce

3.3.1 Integrální reprezentace funkce

Základním východiskem integrální reprezentace funkce používané v metodě SPH je identita

$$f(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) dV, \quad (3.1)$$

kde Ω je oblast, v níž je libovolná funkce f definovaná a spojitá a \mathbf{x} je radiusvektor konkrétního bodu v prostoru, ve kterém má být hodnota funkce f vyjádřena. Radiusvektor \mathbf{x}' je obecná proměnná, přes níž se integruje. Dále $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ je Diracova delta funkce, jež má vlastnosti

$$\delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) = \begin{cases} +\infty & \text{pro } \mathbf{x} = \mathbf{x}' \\ 0 & \text{pro } \mathbf{x} \neq \mathbf{x}' \end{cases}, \quad (3.2)$$

$$\int_{\Omega} \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) dV = 1.$$

Rovnice (3.1) je přesně splněna pokud je $f(\mathbf{x})$ definovaná a spojitá na oblasti Ω . Vlastnosti Diracovy delta funkce neumožňují její použití v numerických výpočtech. Proto je nahrazena váhovou funkcí (smoothing function, kernel function) $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)$ a rovnice (3.1) přechází na přibližný vztah

$$f(\mathbf{x}) \doteq \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x}' - \mathbf{x}, h) dV. \quad (3.3)$$

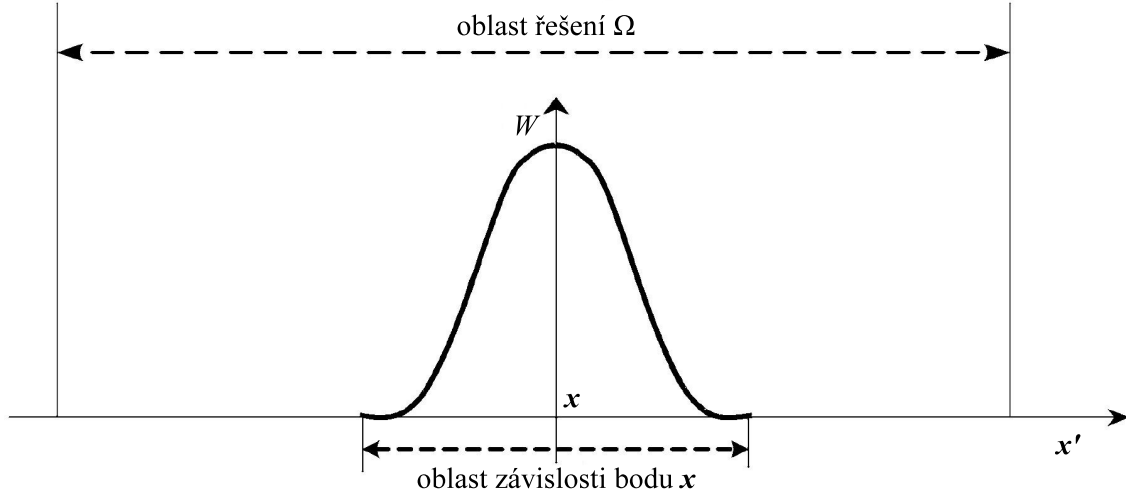
Funkce $W(\mathbf{x}' - \mathbf{x}, h)$ tak zřejmě musí mít některé společné vlastnosti s Diracovou funkcí $\delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x})$.

3.3.2 Vlastnosti váhové funkce

V následujících odstavcích jsou uvedeny vlastnosti, které by měla mít váhová funkce $W(\mathbf{x}' - \mathbf{x}, h)$, aby byla vhodná pro integrální aproximaci funkce.

Z vlastností 3.2 lze přímo využít druhou vlastnost, takzvanou jednotkovost váhové funkce, tedy

$$\int_{\Omega} W(\mathbf{x}' - \mathbf{x}, h) dV = 1. \quad (3.4)$$



Obrázek 3.1: Váhové funkce W v dostatečné vzdálenosti od hranice oblasti. Konzistence aproximace funkce podle (3.3) zajištěna, stejně tak platnost aproximace derivace podle (3.11). Převzato z [18].

Lze ukázat, že tato vlastnost zajišťuje aproximaci spojité funkce konzistenci nultého řádu, tedy konstantní funkce je aproximována přesně [11]. Pokud je podmínka (3.4) splněna v dostatečné vzdálenosti od hranice oblasti řešení (obr. 3.1), nemůže být zároveň splněna v blízkosti hranice, neboť část plochy je mimo oblast Ω (obr. 3.2).

Argument h je tzv. vyhlazovací vzdálenost (smoothing length). Ta určuje velikost oblasti, na které funkce $W(x' - x, h)$ nabývá nenulových hodnot. Matematicky vyjádřeno

$$W(x' - x, h) = 0 \text{ pokud } |x' - x| > \kappa_w h, \quad (3.5)$$

kde κ_w je reálná konstanta, jejíž hodnota závisí na konkrétním typu váhové funkce. Tato vlastnost redukuje integraci přes celou oblast Ω na integraci přes oblast závislosti bodu x (obr. 3.1). Tím se zvyšuje efektivita výpočtu.

Z předešlých dvou vlastností vyplývá vlastnost třetí, že pokud se bude h limitně blížit nule, přejde váhová funkce v Diracovu funkci, tedy

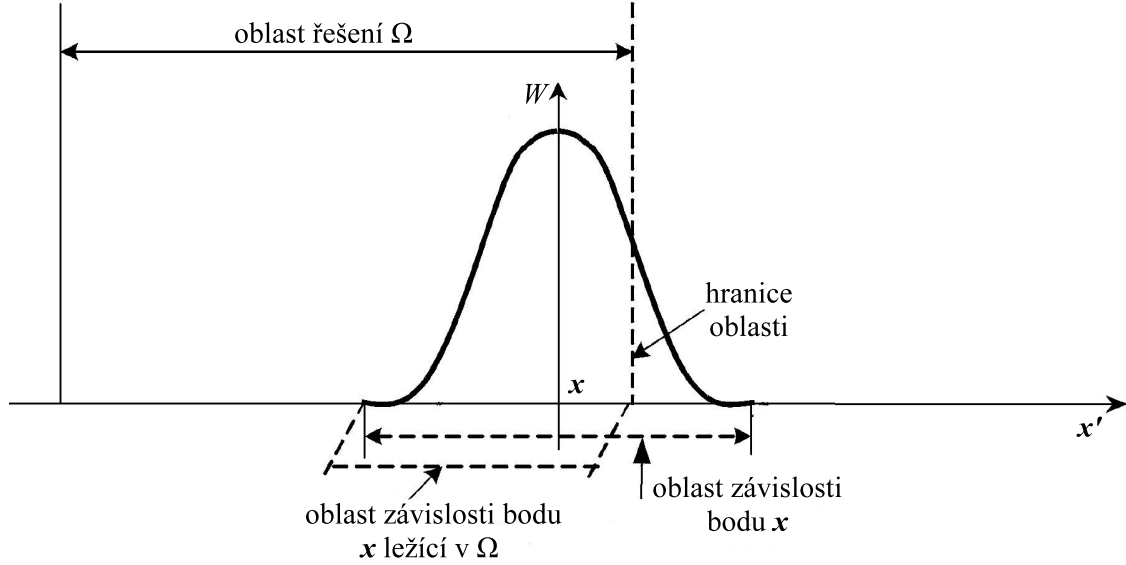
$$\lim_{h \rightarrow 0} W(x' - x, h) = \delta(x' - x). \quad (3.6)$$

Pro nulové h tak aproximace (3.3) konverguje k přesnému vyjádření (3.1). Pro jednotkovou vyhlazovací vzdálenost h mají různé váhové funkce různé hodnoty maxima. Platí, že čím je toto maximum vyšší, tím je i aproximace funkce přesnější [11].

Další vlastností je nezápornost váhové funkce. Z matematického hlediska není tato podmínka nutná, ovšem její nedodržení by mohlo vést k fyzikálně nesmyslným výsledkům, jako je záporná hustota či energie. Přesto existují metody odvozené z SPH, jejichž váhové funkce tuto vlastnost nemají. Důvodem je to, že pokud má být dosaženo vyššího řádu přesnosti aproximace, musí funkce $W(x' - x, h)$ nabývat i záporných hodnot [11].

I další podmínka vychází z fyzikální podstaty. V souladu s principem, že hodnota funkce v blízkosti vyšetřovaného bodu má větší váhu, než hodnota funkce v místě vzdálenějším, by měla váhová funkce monotónně klesat s rostoucí vzdáleností $|x' - x|$. Pokud váhová funkce nesplňuje podmínku nezápornosti, pak nemůže být ani monotónně klesající.

Pokud je váhová funkce volena jako sudá vzhledem k x , závisí její hodnota pouze na velikosti vektoru $|x' - x|$, nikoli na jeho směru. Je tedy možno psát váhovou funkci s úpravou v argumentu jako $W(|x' - x|, h)$. Součin sudé a liché funkce je lichá funkce a integrál přes symetrickou oblast vzhledem



Obrázek 3.2: Váhová funkce W v blízkosti hranice oblasti. Není zajištěna konzistence aproximace funkce podle (3.3) ani neplatí aproximace derivace podle (3.11). Převzato z [18].

k x z liché funkce je nulový. V důsledku toho lze sudost váhové funkce vyjádřit i jako

$$\int_{\Omega} (x' - x) W(x' - x, h) dV = 0. \quad (3.7)$$

Užitím Taylorova rozvoje lze ukázat, že pro sudou funkci splňující podmínku (3.4) je aproximace (3.3) druhého řádu přesnosti. Rovněž platí, že tato aproximace dosahuje konzistence prvního řádu, tedy lineární funkce je aproximována přesně [11]. Tato vlastnost opět nemusí být vždy splněna, některé metody využívají nesymetrické váhové funkce.

Váhová funkce by rovněž měla být dostatečně hladká. Při přechodu od spojité funkce k částicím tak dochází k menšímu ovlivnění řešení nepravidelností rozmístění částic. Také stabilita řešení je silně závislá na hladkosti váhové funkce [11].

3.3.3 Integrovní reprezentace derivace funkce

Aproximaci prostorové derivace funkce lze jednoduše vyjádřit užitím vztahu (3.3) pouhým nahrazením funkce $f(x)$ její derivací $\nabla \cdot f(x)$. Tedy

$$\nabla \cdot f(x) \doteq \int_{\Omega} (\nabla \cdot f(x')) W(x' - x, h) dV. \quad (3.8)$$

Využitím pravidla o derivování součinu lze upravit pravou stranu rovnice a integrál rozdílou dvou členů přepsat na rozdíl integrálů

$$\nabla \cdot f(x) \doteq \int_{\Omega} \nabla \cdot (f(x') W(x' - x, h)) dV - \int_{\Omega} f(x') \cdot \nabla W(x' - x, h) dV. \quad (3.9)$$

Na první integrál na pravé straně lze aplikovat Gaussovu větu, čímž je objemový integrál přes oblast převeden na plošný integrál přes hranici této oblasti. Tato úprava vede na výraz

$$\nabla \cdot f(x) \doteq \int_{\partial\Omega} (f(x') W(x' - x, h)) \cdot n dS - \int_{\Omega} f(x') \cdot \nabla W(x' - x, h) dV, \quad (3.10)$$

kde n je vektor vnější normály hranice oblasti. Pokud má funkce $W(x' - x, h)$ vlastnost omezené oblasti závislosti podle rovnice (3.5) a zároveň vzdálenost bodu x od hranice oblasti Ω je větší než

$\kappa_w h$ (obrázek 3.1), plošný integrál bude nulový a tak výsledný vztah pro aproximaci derivace funkce bude

$$\nabla \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) \doteq - \int_{\Omega} \mathbf{f}(\mathbf{x}') \cdot \nabla W(\mathbf{x}' - \mathbf{x}, h) dV. \quad (3.11)$$

Operace derivace funkce je tak převedena na derivaci váhové funkce. Vztah (3.11) platí pouze v dostatečné vzdálenosti od hranice, protože pokud je vzdálenost bodu \mathbf{x} od hranice menší než $\kappa_w h$, plošný integrál v (3.10) není obecně nulový. Tuto situaci ilustruje obrázek 3.2. To má důsledek pro realizaci okrajových podmínek. Pokud je váhová funkce jednotková a sudá, dosahuje aproximace (3.11) konzistence prvního řádu [11].

3.4 Částicová aproximace

Funkce $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ není v metodě SPH vyjádřena jako spojitá funkce, nýbrž svými funkčními hodnotami v diskrétních bodech. Hodnota funkce v bodě i je závislá na hodnotách funkce v bodech j , které jsou v oblasti závislosti bodu i (obr. 3.3). Všechny body j jsou hmotnými body, mají tedy danou hmotnost m_j . Za předpokladu, že každému bodu j je přiřazena i hustota ρ_j , lze určit i objem částice j jako

$$V_j = \frac{m_j}{\rho_j}. \quad (3.12)$$

Spojitou aproximaci funkce (3.3) tak lze záměnou sumace za integraci převést na diskrétní tvar. Sčítají se všechny částice v oblasti závislosti bodu i a infinitezimální objem dV je nahrazen objemem částice V_j . Po úpravě vychází výsledný vztah

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \doteq \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \mathbf{f}(\mathbf{x}_j) W_{ij}, \quad (3.13)$$

kde

$$W_{ij} = W(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|, h). \quad (3.14)$$

Analogicky lze výše uvedený postup uplatnit při odvození částicové aproximace derivace funkce. Východiskem je rovnice (3.11) a po úpravách vyjde

$$\nabla \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \doteq \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \mathbf{f}(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla_i W_{ij}. \quad (3.15)$$

kde

$$\nabla_i W_{ij} = \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|} \frac{\partial W_{ij}}{\partial |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|}. \quad (3.16)$$

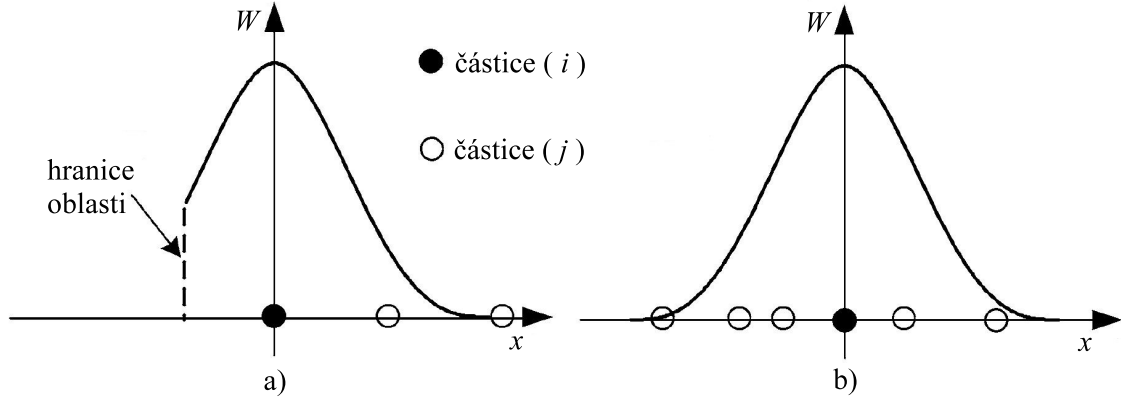
Obrácené znaménko vyplývá z toho, že operace $\nabla_i W_{ij}$ se vztahuje k částici i a nikoli k j , jak by odpovídalo spojitě aproximaci.

Částicovou aproximaci funkce a derivace funkce lze chápat jako vážený průměr funkčních hodnot, kde váhovými kritérii jsou objem částice a váhová funkce resp. gradient váhové funkce. V obou vztazích se vyskytuje hmotnost částic a jejich hustota, proto je možno metodu SPH přirozeně aplikovat na CFD úlohy, kde je hustota přímo jednou z řešených proměnných.

3.4.1 Konzistence částicové aproximace

Pokud jsou splněny podmínky jednotkovosti a sudosti váhové funkce podle rovnic (3.4) a (3.7), je v dostatečné vzdálenosti od hranice oblasti pro spojitou aproximaci zajištěna konzistence prvního řádu. Při přechodu k částicovému popisu lze tyto podmínky převést na diskrétní vyjádření

$$\sum_{j=1}^N W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) V_j = 1, \quad (3.17)$$



Obrázek 3.3: Částicová aproximace funkce. Nekonzistence způsobena a) blízkostí hranice oblasti b) nerovnoměrným rozmístěním částic. Převzato z [18].

$$\sum_{j=1}^N (\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) V_j = 0. \quad (3.18)$$

Ovšem v důsledku toho, že částice se může nacházet v blízkosti hranice (obr. 3.3a) nebo částice mohou být rozmístěny nepravidelně (obr. 3.3b), není ani jedna z podmínek obecně splněna. Navíc i pro pravidelně rozmístěné částice může dojít k nesplnění rovnice (3.17) vlivem nevhodné volby vyhlazovací vzdálenosti h [18]. Není tak zaručena ani konzistence nultého řádu, což má negativní vliv na přesnost řešení. Existuje několik způsobů jak konzistenci metody alespoň částečně vylepšit.

Jednou z možností je přímo využít diskrétní tvar podmínek konzistence, tedy rovnice (3.17) a (3.18), a z nich určit váhovou funkci. Kvůli nerovnoměrnosti rozmístění částic musí být váhová funkce pro každou částici určena zvlášť, a to v každém časovém kroku. Proto tento způsob zvyšuje nároky na výpočet. Navíc takto vytvořená funkce obecně není nezáporná, klesající ani sudá, což může vést k nefyzikálním výsledkům výpočtu. Přesto, že tato metoda vede ke zvýšení řádu konzistence, nelze ji pro CFD výpočty snadno aplikovat bez dalších úprav metody [11].

Jiným způsobem jak zvýšit řád konzistence metody je tzv. Corrective Smoothed Particle Method (CSPM). Tu lze odvodit z Taylorova rozvoje funkce $f(\mathbf{x})$ se středem v bodě \mathbf{x}_i . Výsledný vztah pro diskrétní aproximaci funkce v bodě \mathbf{x}_i je

$$f(\mathbf{x}_i) \doteq \frac{\sum_{j=1}^N f(\mathbf{x}_j) W_{ij} V_j}{\sum_{j=1}^N W_{ij} V_j}. \quad (3.19)$$

Díky normalizaci jmenovatelem je dosaženo konzistence nultého řádu pro částice uvnitř oblasti i v blízkosti její hranice pro libovolně rozmístěné částice. Při pravidelném rozmístění částic je pro částice v dostatečné vzdálenosti od hranice dosaženo konzistence prvního řádu [18].

Pro zvýšení přesnosti aproximace derivace funkce lze využít toho, že derivace váhové funkce je funkce lichá, z čehož vyplývá

$$\sum_{j=1}^N \nabla_i W_{ij} V_j \doteq 0. \quad (3.20)$$

Tento výraz je přesně nulový pouze v případě pravidelného rozmístění částic a v dostatečné vzdálenosti od hranice oblasti. Přičtením $f(\mathbf{x}_i)$ násobku tohoto výrazu k rovnici (3.15), resp. odečtením téhož

vznikne vztah

$$\nabla \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \doteq \sum_{j=1}^N (\mathbf{f}(\mathbf{x}_j) \pm \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)) \cdot \nabla_i W_{ij} V_j. \quad (3.21)$$

Takováto formulace, ve které se vyskytuje součet či rozdíl funkčních hodnot pro částice i a j , má pozitivní vliv na dodržení zákonů zachování a tedy i na přesnost [16].

Stejně jako při aproximaci funkce lze i při aproximaci derivace využít CSPM. Výsledný vztah při použití této metody je

$$\nabla \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \doteq \frac{\sum_{j=1}^N (\mathbf{f}(\mathbf{x}_j) - \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)) \cdot \nabla_i W_{ij} V_j}{\sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) \cdot \nabla_i W_{ij} V_j}. \quad (3.22)$$

Takto vyjádřená aproximace dosahuje konzistence nultého řádu pro náhodně rozmístěné částice jak uvnitř řešené oblasti, tak v blízkosti její hranice [18]. V důsledku toho, že CSPM byla odvozena z Taylorova rozvoje, není možné ji použít při simulaci jevů, které provází nespojitosti, např. rázové vlny.

3.5 Diskretizace rovnic mechaniky tekutin

V následující části jsou uvedeny možné způsoby diskretizace rovnice kontinuity, pohybové rovnice a energetické bilance odvozené v části 1.2. V rovnici bilance energie není uvažován člen zohledňující vedení tepla. V indexové notaci lze rovnice zapsat

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \frac{\partial v^\alpha}{\partial x^\alpha}, \quad (3.23)$$

$$\frac{Dv^\alpha}{Dt} = f^\alpha + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma^{\alpha\beta}}{\partial x^\beta}, \quad (3.24)$$

$$\frac{Du}{Dt} = \frac{\sigma^{\alpha\beta}}{\rho} \frac{\partial v^\alpha}{\partial x^\beta}. \quad (3.25)$$

3.5.1 Aproximace hustoty

První způsob aproximace hustoty v řešené oblasti vyplývá přímo z rovnice aproximace funkce (3.13), kde se za obecnou funkci $f(\mathbf{x})$ dosadí hustota $\rho(\mathbf{x})$. Výsledný vztah je pak jednoduše

$$\rho_i \doteq \sum_{j=1}^N m_j W_{ij}. \quad (3.26)$$

Přesnost této aproximace lze zvýšit využitím CSPM. V takovém případě je východiskem rovnice (3.19), dosadí se stejně jako v předchozím postupu a vychází

$$\rho_i \doteq \frac{\sum_{j=1}^N m_j W_{ij}}{\sum_{j=1}^N \left(\frac{m_j}{\rho_j}\right) W_{ij}}. \quad (3.27)$$

Druhou možností je využít rovnici kontinuity. Výsledkem aplikace vztahu pro aproximaci derivaci funkce (3.15) na rovnici kontinuity (1.15) je vztah

$$\frac{D\rho_i}{Dt} \doteq -\rho_i \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} v_j^\beta \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta}. \quad (3.28)$$

Lze aplikovat i vztah (3.21) a výsledkem pak je

$$\frac{D\rho_i}{Dt} \doteq \rho_i \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} (v_i^\beta - v_j^\beta) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta}. \quad (3.29)$$

Další alternativou je upravit pravou stranu rovnice kontinuity (1.15) použitím vztahu pro derivaci součinu funkcí a opět aplikovat aproximaci (3.15). Takovýto postup vede k výsledku

$$\frac{D\rho_i}{Dt} \doteq \sum_{j=1}^N m_j (v_i^\beta - v_j^\beta) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta}. \quad (3.30)$$

Vztahy (3.29) a (3.30) pracují s relativní rychlostí částic, což vede ke zmenšení chyb vznikajících v důsledku nízkého řádu konzistence částicové aproximace [11].

Výhodou prvního přístupu je přesné dodržení zákona zachování hmotnosti. V blízkosti materiálových rozhraní dochází při použití vztahu (3.26) ke snižování hustoty. Použitím vztahu (3.27) lze tento nedostatek potlačit. Při použití vztahů vycházejících z rovnice kontinuity nedochází ke zkreslení hodnoty v blízkosti rozhraní. Rovnici kontinuity lze rovněž řešit paralelně s ostatními rovnicemi a tak snížit časovou náročnost výpočtu. V úlohách s výraznými nespojitostmi se zpravidla upřednostňuje postup přes řešení rovnice kontinuity [11].

3.5.2 Aproximace bilance hybnosti

Stejně jako v případě hustoty lze i aproximaci bilance hybnosti vyjádřit v různých tvarech. První často užívaný vztah vznikne aplikací vztahu (3.21) na pravou stranu pohybové rovnice (3.24). Výsledný vztah tak je

$$\frac{Dv_i^\alpha}{Dt} \doteq \sum_{j=1}^N m_j \frac{\sigma_i^{\alpha\beta} + \sigma_j^{\alpha\beta}}{\rho_i \rho_j} \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta}. \quad (3.31)$$

Druhého obvykle užívaného tvaru lze dosáhnout úpravou pravé strany rovnice bilance hybnosti užitím vzorce pro derivování součinu funkcí a na takto přepsaný výraz použít vztah (3.15). Při tomto postupu je výsledkem výraz

$$\frac{Dv_i^\alpha}{Dt} \doteq \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{\sigma_i^{\alpha\beta}}{\rho_i^2} + \frac{\sigma_j^{\alpha\beta}}{\rho_j^2} \right) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta}. \quad (3.32)$$

Obě tato vyjádření jsou symetrická vzhledem k indexům i a j , což omezuje chyby zapříčiněné nízkým řádem částicové aproximace [11].

V případě uvažování viskozity je třeba ještě doplnit vztah pro napětí od deformace tekutiny. Rovnice (1.21) se diskretizuje užitím vztahu (3.21) a výsledkem je

$$\tau_i^{\alpha\beta} \doteq \sum_{j=1}^N \mu_i \frac{m_j}{\rho_j} \left((v_j^\alpha - v_i^\alpha) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta} + (v_j^\beta - v_i^\beta) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\alpha} \right) + \lambda_i \frac{m_j}{\rho_j} (v_j^\gamma - v_i^\gamma) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\gamma} \delta^{\alpha\beta}. \quad (3.33)$$

3.5.3 Aproximace bilance energie

Při aproximaci časové změny vnitřní energie podle rovnice (1.31) je vhodné rozdělit tenzor celkových napětí σ na tlakovou a deformační část podle (1.20). Úpravami vztahů pro tlakovou práci, podobnými jako při odvozování aproximací rovnice kontinuity a bilance hybnost, lze dosáhnout dvou vztahů aproximujících bilanci energie

$$\frac{Du_i}{Dt} \doteq \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N m_j \frac{p_i + p_j}{\rho_i \rho_j} (v_i^\beta - v_j^\beta) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta} + \frac{1}{2\rho_i \mu_i} \tau_i^{\alpha\beta} \tau_i^{\alpha\beta}, \quad (3.34)$$

$$\frac{Du_i}{Dt} \doteq \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} \right) (v_i^\beta - v_j^\beta) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta} + \frac{1}{2\rho_i \mu_i} \tau_i^{\alpha\beta} \tau_i^{\alpha\beta}. \quad (3.35)$$

Přírůstek vnitřní energie od disipace vlivem vazkosti je zřejmě v obou případech aproximován stejným způsobem.

3.6 Realizace okrajových podmínek

Zvláštní pozornost je třeba věnovat vynucení okrajových podmínek. V případě pevné hranice, tedy stěny, je realizace okrajových podmínek o něco méně přímočará než u metod využívajících sítě. Důvodem je nekonzistentnost metody v blízkosti hranice, kde v blízkosti částice i nejsou okolní interagující částice j rozmístěny ve všech směrech přibližně stejně.

Prvním přirozeným požadavkem je, aby částice pevnou stěnou neprocházely. Toho lze dosáhnout umístěním speciálního typu částic přímo na hranici. Tyto částice se neúčastní aproximace hustoty či ostatních veličin, pouze působí odpudivým zrychlením na částice tekutiny. Jeho velikost je

$$f_{ij} = \begin{cases} D \left[\left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{p_1} - \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{p_2} \right] \frac{x_{ij}}{r_{ij}^2} & \text{pro } \frac{r_0}{r_{ij}} \leq 1 \\ 0 & \text{pro } \frac{r_0}{r_{ij}} > 1 \end{cases}, \quad (3.36)$$

kde D , p_1 , p_2 , a r_0 jsou volené parametry. Velikost D by měla být úměrná kvadrátu charakteristické rychlosti úlohy [19]. Pro exponenty p_1 a p_2 musí platit podmínka $p_1 > p_2$. Hodnoty je tak možno volit například $p_1 = 4$, $p_2 = 2$, nebo $p_1 = 12$, $p_2 = 6$ [19]. Vzdálenost r_0 se volí stejná jako vzájemná vzdálenost hraničních částic. Tato vzdálenost je nejčastěji poloviční v porovnání s počáteční vzdáleností částic tekutiny. Výhodou tohoto přístupu je jeho jednoduchost. Nedostatkem naopak to, že neřeší nekonzistentnost metody v blízkosti hranice. Dále jím nelze vynutit nulovou rychlost v tečném směru, proto je nevhodná pro úlohy s uvažováním viskozity.

Nejjednodušším způsobem vynucení nulové tečné rychlosti na hranici je přiřazením hmotnosti, hustoty a rychlosti částicím na hranici. Ty se tak účastní aproximace těchto veličin a při předepsání nulové rychlosti těchto částic bude rychlost na stěně nulová. Tato drobná úprava však stále nezlepšuje konzistenci, a proto nedosahuje velké přesnosti. Výše zmíněné částice se označují jako virtuální částice prvního typu (virtual particles of type I) [11].

Jednou z cest jak omezit chyby vznikající v blízkosti hranice je umístění částic i vně řešené oblasti. Tyto částice se označují jako virtuální částice druhého typu (virtual particles of type II) [11]. Existují v zásadě dva přístupy.

Prvním je zrcadlení částic podle hranice. Zrcadlená částice má stejnou hustotu i další veličiny stejně jako původní částice, kromě rychlosti. Ta má stejnou velikost, ale opačný směr. Tím virtuální částice generují odpor proti pronikání a při uvažování viskozity vynucují i podmínku nulové tečné rychlosti na stěně. Vytvářený odpor vůči pronikání nebývá zpravidla dostatečně silný, aby plně zabránil pronikání částic tekutiny stěnou. Proto je tento přístup kombinován s odpuzujícími částicemi umístěnými na hranici (obr. 3.4) [11]. Zrcadlené částice musí být generovány v každém časovém kroku a jejich počet se tak mění. Proces může být problematický při použití na hranicích s velkou křivostí či ostrými hranami, obzvláště v trojrozměrném případě [20].

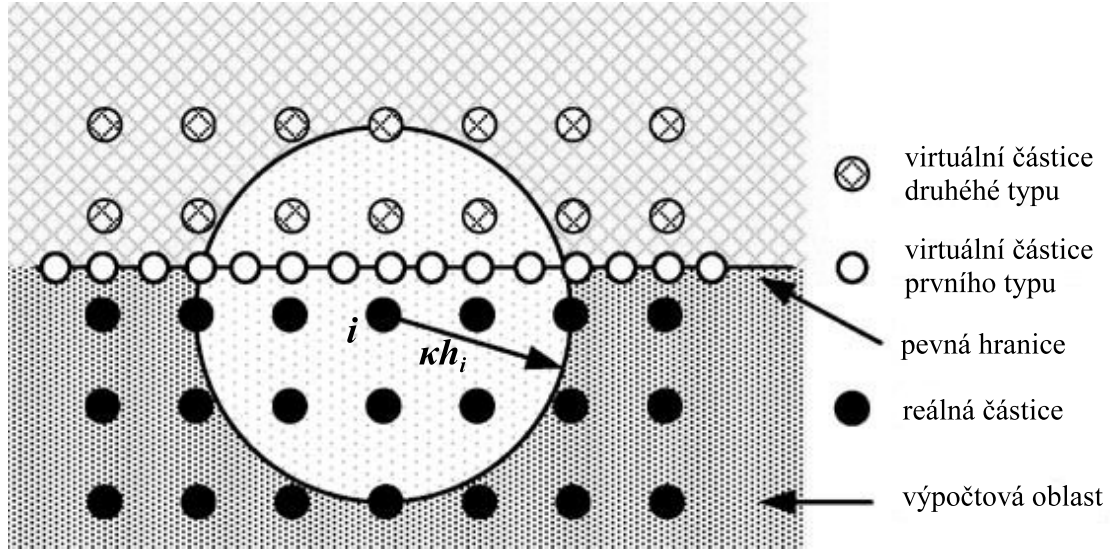
Druhou možností je umístění částic na hranici do několika vrstev, většinou alespoň tří. Jejich počet a poloha je tak pevně dána. Nevýhodou tohoto postupu je to, že úloha může obsahovat větší počet částic, než by bylo nutné. Může se tak zvyšovat náročnost výpočtu, aniž by se toto projevilo na kvalitě řešení.

K přenosu rychlosti z částic tekutiny na virtuální částice lze užít vztah

$$v_v = - \frac{\sum_r v_r W_{rv}}{\sum_r W_{rv}}, \quad (3.37)$$

kde indexy v a r označují částice virtuální resp. reálné a W_{rv} hodnotu vzájemné váhové funkce těchto částic [21]. Ze záporného znaménka je patrné, že výsledná rychlost virtuální částice bude opačná vzhledem k rychlosti blízkých částic tekutiny. Je tak docíleno podobného efektu jako při zrcadlení částic. Pokud dochází k pohybu stěny, musí být v souladu s tím upraveny i rychlosti virtuálních částic. V takovém případě platí

$$\tilde{v}_v = v_v + 2v_s, \quad (3.38)$$



Obrázek 3.4: Realizace okrajových podmínek použitím obou typů virtuálních částic. Částice i v blízkosti hranice interaguje se všemi druhy částic. Převzato z [18].

kde \tilde{v}_v je upravená rychlost a v_s je rychlost stěny [21].

Tlak virtuálních částic je určen vztahem

$$p_v = \frac{\sum_r p_r W_{rv} - \sum_r \mathbf{a}_s \cdot \mathbf{r}_{rv} \rho_r W_{rv}}{\sum_r W_{rv}}, \quad (3.39)$$

kde \mathbf{a}_s je zrychlení stěny a \mathbf{r}_{rv} je vektor spojující reálnou a virtuální částici [21]. Do zrychlení stěny se započítává i tíhové zrychlení. Hustota virtuálních částic se dopočítá z tlaků použitím stavové rovnice. Výše popsaný způsob je robustní a nevyžaduje žádnou dodatečnou informaci o hranici, pouze polohy virtuálních částic.

Alternativou k výše uvedenému způsobu určení rychlosti pro pevně rozmístěné virtuální částice je její zrcadlení podle tečny k povrchu [22]. Tento postup však vyžaduje analytické vyjádření hranice. Byla publikována i metoda využívající dvě vrstvy částic, které jsou ovšem uvnitř řešené oblasti. Tím je snížen celkový počet částic, a tedy náročnost výpočtu [20].

3.7 Implementace povrchového napětí

První způsob modelování povrchového napětí vychází z Youngovy-Laplaceovy rovnice 1.40. Pro její řešení je zřejmě nutno určit směr normály k fázovému rozhraní. K tomu slouží funkce objemového zlomku C , podobně jako v metodě VOF. Tato funkce nabývá jednotkové hodnoty, pokud částice náleží dané fázi a nuly v opačném případě. Jednotková normála dané částice i je určena vztahem

$$\mathbf{n}_i = \frac{\nabla C_i}{|\nabla C_i|}. \quad (3.40)$$

Gradient funkce objemového zlomku lze aproximovat užitím vztahu (3.21) jako

$$\nabla C_i \doteq \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} (C_j - \tilde{C}_i) \nabla_i W_{ij}, \quad (3.41)$$

kde \tilde{C}_i je hodnota získaná ze vztahu

$$\tilde{C}_i = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} C_j W_{ij}. \quad (3.42)$$

Nutnost použití funkce \tilde{C}_i , jež vyhlazuje skok objemového zlomku na rozhraní, je zřejmá především při uvažování pouze jedné kapalně fáze a nahrazení plynné fáze prázdným prostorem. V tomto případě mají všechny částice stejnou hodnotu objemového zlomku a nahrazením C_i za \tilde{C}_i v rovnici (3.41) by gradient vycházel za všech okolností nulový. Aby nebyla přiřazena normála k fázovému rozhraní částici, jež není v blízkosti tohoto rozhraní, např. vlivem neuspořádanosti částic, musí velikost gradientu $|\nabla C_i|$ překročit jistou hodnotu. Tuto prahovou hodnotu je vhodné volit na v závislosti na vyhlazovací vzdálenosti h [23].

Youngova-Laplaceova rovnice předpokládá vznik skokové změny tlaku na rozhraní. To by odpovídalo zavedení síly na jednotku plochy fázového rozhraní, která by tento skok vyvolala, do pohybové rovnice. Pro numerické výpočty je ovšem výhodnější pracovat se silami na jednotku objemu. Možným řešením je přiřadit fázovému rozhraní konečnou tloušťku. Tím se oblast na kterou působí síly od povrchového napětí stane třírozměrnou. Pro definici této oblasti lze přirozeně použít gradient funkce objemového zlomku. Nenulovost tohoto gradientu indikuje přítomnost fázového rozhraní. Na základě těchto úvah lze Youngovu-Laplaceovu rovnici převést do tvaru

$$\mathbf{f} = \frac{1}{\rho} \sigma (\nabla \cdot \mathbf{n}) \nabla C. \quad (3.43)$$

Rovnice 3.43 má zřejmě rozměr síly na jednotku objemu, bylo by tedy možné ji do bilance hybnosti zavést jako objemovou sílu \mathbf{f} . Jako výhodnější se ovšem ukazuje zavést tenzor povrchového napětí \mathbf{S} a sílu způsobenou povrchovým napětím určovat z jeho divergence [24]. Platí

$$\sigma (\nabla \cdot \mathbf{n}) \nabla C = \nabla \cdot \mathbf{S} = \nabla \cdot (\sigma |\nabla C| (\boldsymbol{\delta} - \mathbf{nn})). \quad (3.44)$$

Aproximaci tohoto vztahu pak lze provést podobně jako v případě aproximace divergence tenzoru celkových napětí v bilanci hybnosti [23]. Výsledek tak je

$$\frac{Dv_i^\alpha}{Dt} \doteq \sum_{j=1}^N m_j \left(\frac{S_i^{\alpha\beta}}{\rho_i^2} + \frac{S_j^{\alpha\beta}}{\rho_j^2} \right) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta}. \quad (3.45)$$

Výhodou tohoto přístupu je to, že pracuje s hodnotou povrchového napětí σ , což je fyzikální vlastnost fázového rozhraní. Nevýhodou je relativně obtížnější implementace oproti modelům uvedeným dále.

Druhou možností je uvažovat to, že povrchové napětí je výsledkem působení sil, jimiž na sebe působí jednotlivé molekuly. Efektu povrchového napětí tak lze dosáhnout uvažováním vzájemného silového působení částic. Tyto síly působí mezi částicemi a jsou přitažlivé při větší vzdálenosti a odpuzivé, pokud se částice přiblíží. Velikost síly je dána i tím, jaké fázi částice náleží. Pokud je částice daleko od rozhraní, je obklopena částicemi stejné fáze přibližně rovnoměrně a výsledná síla na ni je tak blízká nule. Jeden takovýto model byl publikován např. v [25].

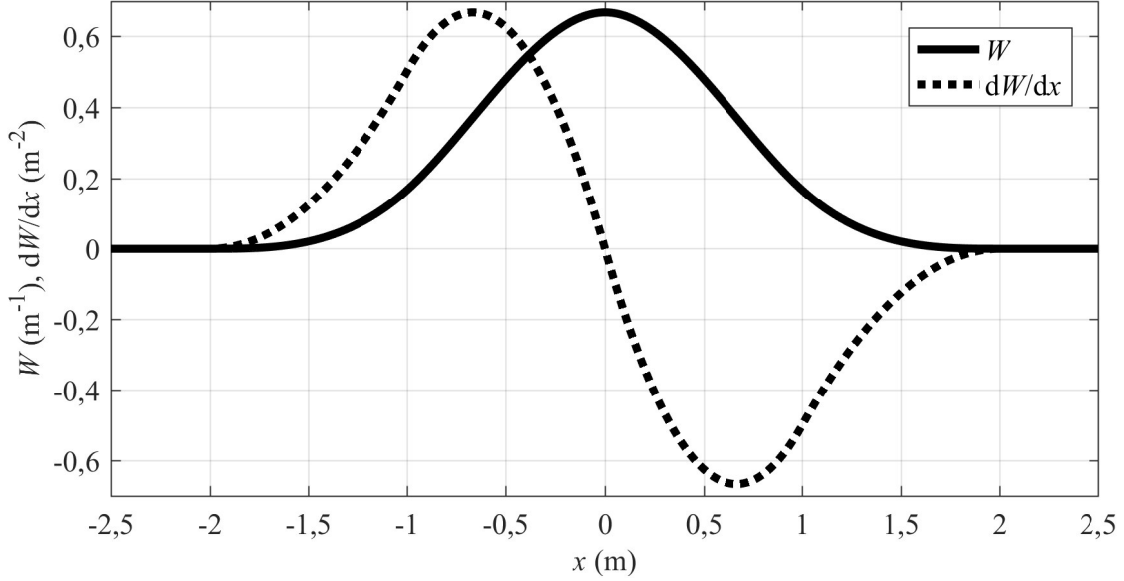
Takového modely jsou poměrně snadno implementovatelné. Cenou za to je ovšem to, že konstanty modelů nemají fyzikální význam, a proto je nutná jejich kalibrace za použití numerických experimentů. Byl ovšem publikován i model tohoto typu, ve kterém vystupuje jako konstanta přímo povrchové napětí σ [26].

3.8 Numerické aspekty simulace metodou SPH

3.8.1 Váhové funkce

Váhová funkce použitá pro aproximaci může mít podstatný vliv na řešení úlohy. Existuje velké množství váhových funkcí. V této části jsou uvedeny pouze ty, které jsou implementovány ve výpočetním programu publikovaném v [11]. Další váhové funkce a jejich vlastnosti i postupy při konstrukci váhových funkcí lze nalézt např. v [11].

Všechny popisované funkce jsou sudé, proto je lze vyjádřit jako funkce vyhlazovací vzdálenosti h a relativní vzdálenosti od počátku $R = r/h$, kde r je skutečná vzdálenost od počátku. Aby byla splněna



Obrázek 3.5: Kubická váhová funkce a její derivace v 1D pro $h = 1$ m.

podmínka jednotkovosti váhové funkce podle rovnice (3.4), musí být váhová funkce násobena funkcí α_d , která je různá pro 1D, 2D a 3D případ.

Hojně používanou funkcí je tzv. kubická váhová funkce (cubic spline kernel). Její grafické znázornění je na obrázku 3.5. Je vyjádřena po jednotlivých intervalech

$$W(R, h) = \alpha_d \begin{cases} \frac{2}{3} - R^2 + \frac{1}{2}R^3 & \text{pro } 0 \leq R < 1 \\ \frac{1}{6}(2 - R)^3 & \text{pro } 1 \leq R < 2 \\ 0 & \text{pro } R \geq 2 \end{cases}, \quad (3.46)$$

kde α_d je $1/h$ pro 1D, $15/7\pi h^2$ pro 2D a $3/2\pi h^3$ pro 3D případ. Již druhá derivace této funkce není spojitá, proto funkce vykazuje horší stabilitu než funkce spojitě do vyšších řádů derivace [11].

Váhová funkce pátého řádu (quintic spline function), znázorněná na obrázku 3.6, je spojitá do vyššího řádu derivace než předešlá funkce. Její matematické vyjádření je

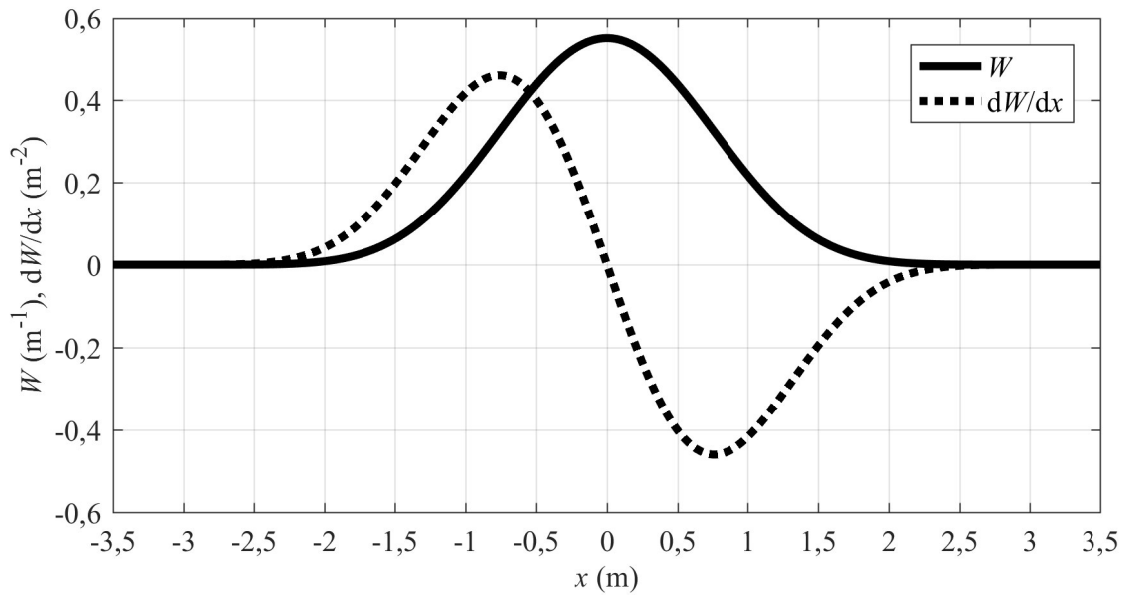
$$W(R, h) = \alpha_d \begin{cases} (3 - R)^5 - 6(2 - R)^5 + 15(1 - R)^5 & \text{pro } 0 \leq R < 1 \\ (3 - R)^5 - 6(2 - R)^5 & \text{pro } 1 \leq R < 2 \\ (3 - R)^5 & \text{pro } 2 \leq R < 3 \\ 0 & \text{pro } R \geq 3 \end{cases}. \quad (3.47)$$

Funkce α_d je $1/120h$, $7/478\pi h^2$, nebo $3/359\pi h^3$ pro 1D, 2D respektive 3D případ.

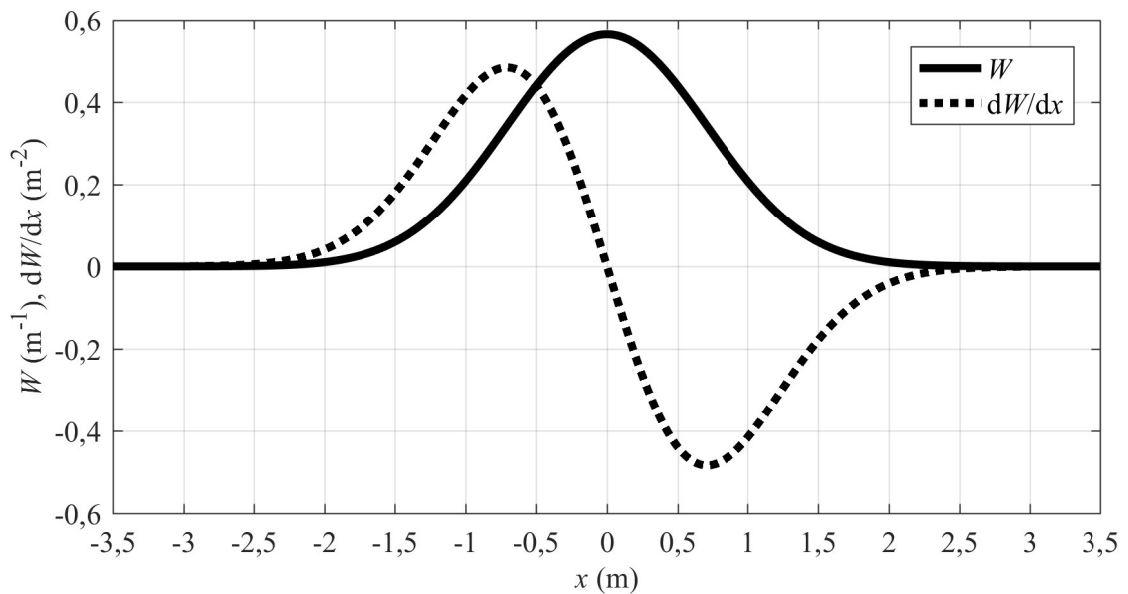
Další používanou funkcí je gaussovská váhová funkce (Gaussian kernel). Její grafické znázornění představuje obrázek 3.7. Na rozdíl od předchozí je vyjádřena jedinou rovnicí

$$W(R, h) = \alpha_d e^{-R^2}. \quad (3.48)$$

Funkci α_d lze tentokrát vyjádřit jako $1/\pi^{d/2} h^d$, kde d je počet dimenzí uvažovaného prostoru. Tato funkce je zřejmě spojitá do libovolného stupně derivace. Sice teoreticky nesplňuje vlastnost 3.5, protože k nule konverguje v nekonečnu, nicméně z praktického hlediska je podmínka splněna. Pro $R = 3$ je hodnota funkce již na úrovni 10^{-4} násobku maxima funkce. Pro vyšší hodnoty R tedy již lze přímo psát $W(R, h) = 0$.



Obrázek 3.6: Váhová funkce pátého řádu a její derivace v 1D pro $h = 1$ m.



Obrázek 3.7: Gaussovská váhová funkce a její derivace v 1D pro $h = 1$ m.

3.8.2 Umělá viskozita

V okolí nespojitosti v řešené oblasti dochází k numerickým nestabilitám. K jejich potlačení lze použít umělou viskozitu, která umožňuje přeměnu kinetické energie částic na energii tepelnou. Autorem nejčastěji používané umělé viskozity je Monaghan a vyjadřuje se jako

$$\Pi_{ij} = \begin{cases} \frac{-\alpha_{\Pi} c_{ij} \phi_{ij} + \beta_{\Pi} \phi_{ij}^2}{\rho_{ij}} & \text{pro } v_{ij}^{\alpha} x_{ij}^{\alpha} < 0 \\ 0 & \text{pro } v_{ij}^{\alpha} x_{ij}^{\alpha} \geq 0 \end{cases}, \quad (3.49)$$

kde

$$\phi_{ij} = \frac{h_{ij} v_{ij}^{\alpha} x_{ij}^{\alpha}}{x_{ij}^{\beta} x_{ij}^{\beta} + (\varepsilon_{\Pi} h_{ij})^2}, \quad (3.50)$$

$$c_{ij} = \frac{1}{2}(c_i + c_j), \quad (3.51)$$

$$\rho_{ij} = \frac{1}{2}(\rho_i + \rho_j), \quad (3.52)$$

$$h_{ij} = \frac{1}{2}(h_i + h_j), \quad (3.53)$$

$$v_{ij}^{\alpha} = v_i^{\alpha} - v_j^{\alpha}, \quad (3.54)$$

$$x_{ij}^{\alpha} = x_i^{\alpha} - x_j^{\alpha}. \quad (3.55)$$

Proměnná c označuje rychlost zvuku v médiu. Může se jednat o fyzikální konstantu, nebo o numerickou rychlost zvuku související s umělou stlačitelností. Z rovnice (3.49) je zřejmé, že umělá viskozita se projeví pouze pokud se částice vzájemně přibližují. Člen obsahující α_{Π} způsobuje disipaci podobně jako dynamická a objemová viskozita a člen s β_{Π} zabraňuje vzájemnému pronikání částic při rázových dějích za vysokých Machových čísel [27]. Konstanty α_{Π} a β_{Π} se obvykle volí přibližně jednotka [11]. Pro simulace s vazkými tekutinami je možné ponechat pouze člen zabraňující vzájemnému pronikání částic, tedy volit $\alpha_{\Pi} = 0$. Za ε_{Π} se nejčastěji volí hodnota 0,1. Tato konstanta odstraňuje singularitu pro případ $x_{ij}^{\beta} x_{ij}^{\beta} \doteq 0$. Takto formulovaná umělá viskozita zachovává celkovou hybnost a celkový moment hybnosti soustavy [27].

Efektivní kinematickou viskozitu, která je způsobena použitím umělé viskozity, lze určit ze vztahu

$$\nu = \frac{\alpha_{\Pi} h_{ij} c_{ij}}{2(d+2)}, \quad (3.56)$$

kde d je počet prostorových dimenzí úlohy [21].

Změna hybnosti a energie od umělé viskozity je vyjádřena

$$\frac{Dv_i^{\alpha}}{Dt} \doteq - \sum_{j=1}^N m_j \Pi_{ij} \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^{\alpha}}, \quad (3.57)$$

respektive

$$\frac{De_i}{Dt} \doteq \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N m_j \Pi_{ij} v_{ij}^{\beta} \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^{\beta}}. \quad (3.58)$$

3.8.3 Středování rychlosti

Stabilizace pohybu částic je možná i jinak. Použitím předpisu

$$\frac{dx_i^\alpha}{dt} = v_i^\alpha - \varepsilon \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} v_{ij}^\alpha W_{ij}, \quad (3.59)$$

kde ε je volená konstanta. Rychlosti blízkých částic vzájemně přiblíží a částice se tak pohybují uspořádaněji [27]. Pro běžné úlohy se volí $\varepsilon = 0,3$, pro simulace explozí je vhodné použít vyšší hodnoty ($\varepsilon \geq 0,5$) [11].

3.8.4 Umělá stlačitelnost

Při výpočtu stlačitelné tekutiny metodou SPH je stavová rovnice použita pro výpočet tlaku ze známé hustoty a vnitřní energie. Použití stavové rovnice tekutiny pro úlohy velmi malým Machovým číslem vede k nutnosti velmi malých časových kroků, aby byly splněny podmínky stability schématu. Proto se používají stavové rovnice, jejichž parametry se nastavují podle konfigurace úlohy tak, aby se hodnota Machova čísla úlohy zvýšila. Nestlačitelná tekutina se tak řeší jako mírně stlačitelná, což umožňuje použití delších časových kroků. Tlak v tekutině se v takovém případě uvažuje jako závislý pouze na hustotě, nikoli na vnitřní energii.

Často používanou rovnicí je

$$p = B \left(\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right) + p_0, \quad (3.60)$$

kde ρ_0 je referenční hustota, p_0 referenční tlak a B a γ jsou volené parametry. Obvykle se volí $\gamma = 7$. Pro tuto hodnotu zřejmě i malé změny hustoty vyvolají velké změny tlaku. Hodnota parametru B je možno volit např.

$$B = \frac{c^2 \rho}{\gamma}, \quad (3.61)$$

kde c je numerická rychlost zvuku v médiu [19]. Pro odhad její velikosti lze použít vztah

$$c^2 \approx \max \left(\frac{V^2}{\delta_\rho}, \frac{\nu V}{\delta_\rho L}, \frac{FL}{\delta_\rho} \right), \quad (3.62)$$

kde V a L je rychlostní resp. délkové měřítko úlohy, ν kinematická viskozita, F měrná objemová síla a δ_ρ relativní změna hustoty [22]. Tedy

$$\delta_\rho = \frac{|\rho - \rho_0|}{\rho_0}. \quad (3.63)$$

Aby byla přibližně splněna nestlačitelnost tekutiny volí se $\delta_\rho = 0,01$. Stavová rovnice (3.60) je vhodná pro úlohy s volným povrchem, pokud se zvolí p_0 nulový. Tato volba ovšem umožňuje dosáhnout i záporných hodnot tlaku, což je z fyzikálního hlediska nemožné. Navíc to může vést k numerické nestabilitě [22]. Při dosažení skutečné rychlosti zvuku je tuto rovnici možné použít pro simulaci stlačitelných kapalin, např. vody.

Pro úlohy bez volné hladiny lze použít stavovou rovnici

$$p = c^2 \rho. \quad (3.64)$$

Hodnota numerické rychlosti zvuku se volí stejně jako v předchozím případě [22]. Lze použít i modifikaci

$$p = c^2(\rho - \rho_0). \quad (3.65)$$

Tato rovnice je použitelná pro úlohy s volným povrchem [26].

3.8.5 Proměnná vyhlazovací vzdálenost

Přesnost řešení úlohy je významně ovlivněna volbou vyhlazovací vzdálenosti h . Pokud se v oblasti v okolí částice o poloměru $\kappa_w h$ nachází příliš málo částic, přesnost aproximace je nízká. V případě příliš velkého počtu částic ve stejném okolí dochází k přílišnému vyhlazování aproximovaných funkcí. Obě tyto situace tak vedou k nepřesným výsledkům. V nestlačitelné tekutině se vzdálenosti částic mění jen nepatrně, a proto počet částic v okolí dané částice zůstává prakticky konstantní. U stlačitelných tekutin se však tento počet může značně měnit, proto je v takovém případě vhodné zavést proměnnou vyhlazovací vzdálenost.

Hustota částic v prostoru a hustota tekutiny spolu zřejmě úzce souvisí. Vyhlazovací vzdálenost tak lze určit algebraickým vztahem

$$h = h_0 \left(\frac{\rho_0}{\rho} \right)^{\frac{1}{d}}, \quad (3.66)$$

kde h_0 je vyhlazovací vzdálenost odpovídající referenční hustotě ρ_0 a d je počet prostorových dimenzí úlohy [11]. Vyhlazovací vzdálenost lze rovněž získat integrací diferenciální rovnice

$$\frac{dh}{dt} = -\frac{1}{d} \frac{h}{\rho} \frac{d\rho}{dt}. \quad (3.67)$$

Časovou derivaci hustoty je možno vyjádřit z rovnice kontinuity a aproximovat např. podle vztahu (3.29) [11].

Pokud mají dvě blízké částice různou vyhlazovací vzdálenost, může nastat situace, kdy první částice ovlivňuje druhou, ale ne naopak. To by vedlo k porušení zákona akce a reakce, proto je vhodné vyhlazovací vzdálenost symetrizovat. Váhová funkce pro danou dvojici se vypočítá se symetrizovanou vyhlazovací vzdáleností. Nejčastěji používaným způsobem je aritmetický průměr. Lze použít i geometrický průměr nebo větší, či menší z obou hodnot. Rovněž je možné průměrovat až vypočtené váhové funkce [11].

3.8.6 Vyhledávání interagujících párů částic

Váhová funkce je nenulová pouze do vzdálenosti $\kappa_w h$ od dané částice. S danou částicí tak interagují pouze částice do této vzdálenosti. Proto je vhodné nalézt páry vzájemně blízkých částic, se kterými se dále při výpočtu pracuje. Částice mohou během výpočtu měnit vzájemnou polohu, tudíž je třeba toto vyhledávání provádět v každém časovém kroku znovu. Z toho vyplývá požadavek na efektivní vyhledávací algoritmus, protože právě vyhledávání vzájemně interagujících částic má významný podíl na celkové výpočtové náročnosti. Existují různé způsoby, jak toto vyhledávání provádět, existují i další kromě dále uvedených.

Algoritmus každý s každým

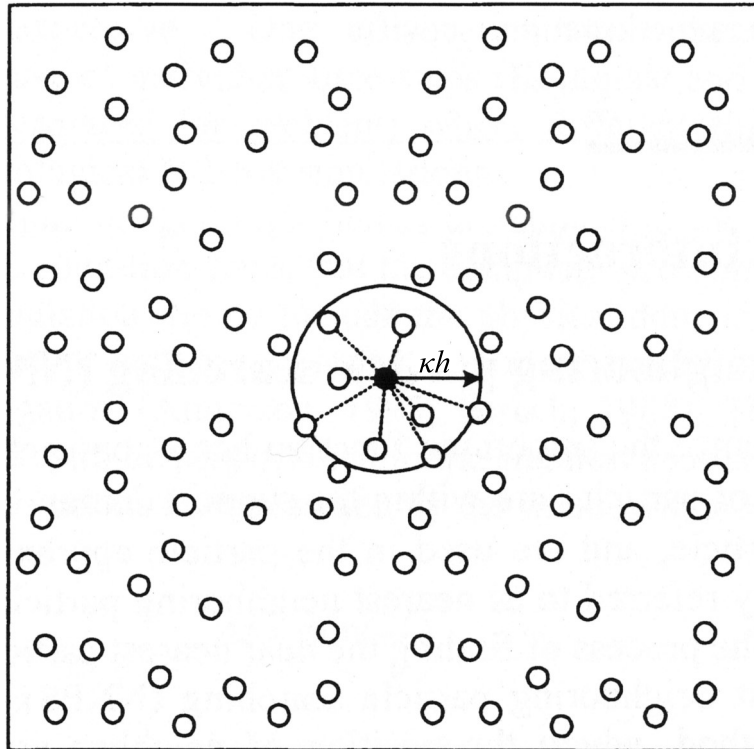
Nejpřímočařejším způsobem je pro každou částici i spočítat vzdálenost od všech ostatních částic j . Pokud je tato vzdálenost menší než hodnota $\kappa_w h_i$, částice j ovlivňuje částici i (obr. 3.8). V případě symetrie vyhlazovacích vzdáleností platí rovněž, že částice i ovlivňuje částici j .

Časová náročnost takového algoritmu je úměrná N^2 , kde N je celkový počet částic v úloze. Tento přístup je tak vhodný pouze pro úlohy s malým počtem částic [11].

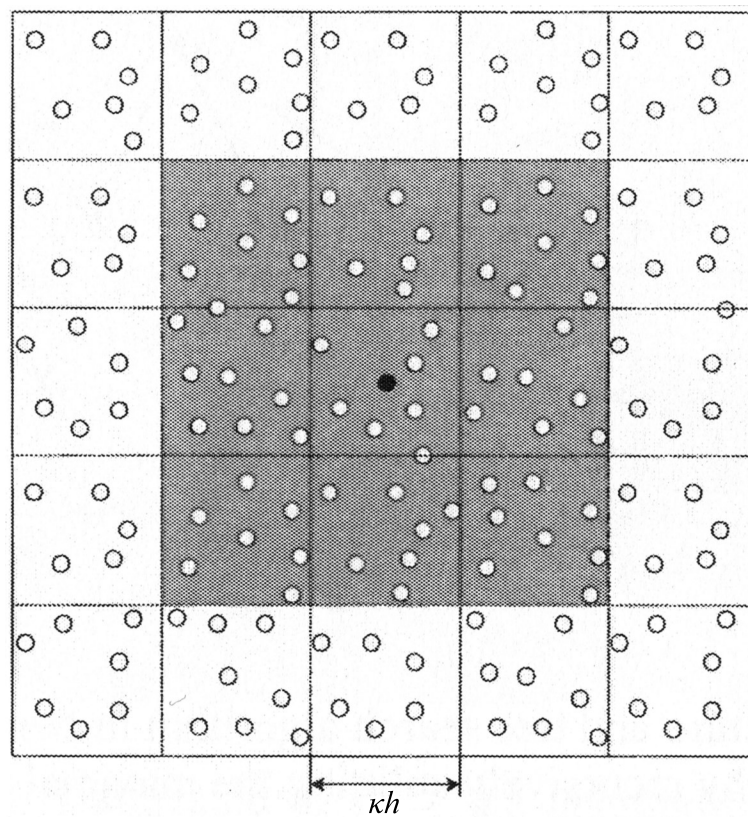
Algoritmus linked-list

Tento algoritmus probíhá ve dvou po sobě následujících krocích. V prvním se na oblasti vytvoří kartézská síť buněk o velikosti hrany $\kappa_w h$. Částice se následně roztrídí podle své polohy do jednotlivých buněk. V druhém kroku se pak počítá vzdálenost vybrané částice i od částic j a rozhodne se o vzájemné interakci. Částice j se ovšem vybírají pouze ze stejné buňky, do které náleží částice i , nebo z buněk sousedních. Např. ve dvourozměrné úloze se tedy prohledává pouze devět buněk (obr. 3.9).

Tento algoritmus je efektivní, pokud mají všechny částice stejnou vyhlazovací vzdálenost h . Časová náročnost je pak úměrná počtu částic úlohy N [11].



Obrázek 3.8: Vyhledávací algoritmus každý s každým ve 2D prostoru. Převzato z [11].



Obrázek 3.9: Vyhledávací algoritmus linked-list ve 2D prostoru. Převzato z [11].

Kapitola 4

Implementace metody SPH

Tato kapitola obsahuje popis programu pro výpočty metodou SPH. Je popsána základní struktura programu. Je zde uvedeno, které části z předchozí kapitoly jsou naprogramovány a jaké typy úloh lze s použitím programu řešit. Možnosti programu jsou demonstrovány na jednoduchých úlohách.

4.1 Základní popis

Značná část programu pro výpočty metodou SPH je převzata z knihy [11]. Výpočty lze provádět pro 1D, 2D i 3D úlohy. Vstupní a výstupní soubory jsou ve formě datových souborů. Jejich přípravu a vyhodnocení je možné provádět např. v prostředí MATLAB.

Celý program se skládá z hlavního programu a několika podprogramů. Většina podprogramů včetně hlavního programu je psána v jazyce FORTRAN 77. Některé části jsou psány v novější verzi jazyka Fortran 90. Grafické schéma programu zachycuje obrázek 4.1. Celý výpočtový program včetně souborů pro přípravu a vyhodnocení dat je umístěn na příloženém CD.

4.2 Struktura programu

4.2.1 Hlavní program

V tomto programu je zvolen časový krok a užitím podprogramu se načtou data ze vstupních souborů. Dále uživatel zvolí počet provedených časových kroků. Nato je zavolán podprogram pro časovou integraci PDR a výstupy pomocí podprogramu zapsány do výstupních souborů. Po vykonání zvoleného počtu kroků je zobrazena délka trvání celého výpočtu.

4.2.2 Podprogram časové integrace

K integraci rovnic mechaniky tekutin uvedených v části 1.2 je použit tzv. Leapfrog algoritmus [11]. Jedná se o metodu druhého řádu přesnosti. Metoda spočívá ve vzájemném posunutí časových uzlů, ve kterých je určována hodnota proměnné a její derivace. Například rychlost v a poloha x se ze zrychlení a vyjádří

$$v_{k+1/2} = v_{k-1/2} + a_k \Delta t, \quad (4.1)$$

$$x_{k+1} = x_k + v_{k+1/2} \Delta t, \quad (4.2)$$

kde Δt je časový krok a index k popisuje pořadí časových uzlů. V prvním kroku, tedy při $k = 0$, nelze použít rovnici (4.1), proto se počítá

$$v_{1/2} = v_0 + a_0 \frac{\Delta t}{2}. \quad (4.3)$$

Protože platí $\mathbf{a}_k = \mathbf{a}_k(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k)$ je třeba dopočítat rychlost ve \mathbf{v}_k . Tu lze vyjádřit

$$\mathbf{v}_k = \mathbf{v}_{k-1/2} + \mathbf{a}_{k-1} \frac{\Delta t}{2}. \quad (4.4)$$

Analogické vztahy platí pro integraci hustoty ρ a vnitřní energie u . Pravé strany integrovaných rovnic se určují v podprogramu časového kroku.

4.2.3 Podprogram časového kroku

Během tohoto podprogramu je spouštěno poměrně velké množství dalších podprogramů. Nejprve načteny virtuální částice. V úloze je možno definovat virtuální částice prvního typu i virtuální částice druhého typu. Odpudivá síla virtuálních částic prvního typu je definována vztahem (3.36) a parametry virtuálních částic druhého typu se určují ze vztahů (3.37) a (3.38). Ve chvíli, kdy jsou známy polohy všech částic, je možno přistoupit k vyhledávání interagujících párů částic. K dispozici jsou dva algoritmy. Podle rozdělení v části 3.8.6 se jedná o algoritmus každý s každým a algoritmus linked-list. První je beze změny převzat z knihy [11], druhý byl nově vytvořen. Vyhledávání je závislé na vyhlazovací vzdálenosti h_{ij} a zvolené vyhlazovací funkci. Vybírat je možno ze tří funkcí uvedených v části 3.8.1. Kromě vyhledání interagujících párů jsou každému páru přiřazeny i hodnoty váhové funkce W_{ij} a její derivace podle prostorových souřadnic.

Nyní se již přistupuje k výpočtu pravých stran rovnic. Jsou k tomu využity aproximace rovnic mechaniky tekutin uvedené v části 3.5 a některé vztahy z části 3.8

Rovnice kontinuity (1.15) je v programu aproximována vztahem (3.30). Pro přímý výpočet hustoty jednotlivých částic je využíván vztah (3.26). Je implementován i CSPM přístup, tedy rovnice (3.27).

Pro pohybovou rovnici (1.19) je možno volit obě uvedené varianty aproximace, tedy jak (3.31), tak (3.32). Tlak a rychlost zvuku jednotlivých částic jsou určovány ze stavové rovnice. Pro stlačitelné tekutiny je k dispozici model ideálního plynu ve tvaru

$$p = (\kappa - 1) \rho u, \quad (4.5)$$

kde κ je Poissonova konstanta. Pro nestlačitelné pak rovnice (3.60), (3.64) a (3.65). Tím je vyřešena vzájemná fyzikální interakce mezi částicemi tekutiny. Dále může být hybnost ovlivněna vnějším zrychlením. Kromě implementovaného tíhového zrychlení se do této kategorie řadí i interakce s virtuálními částicemi prvního typu podle rovnice (3.36). V případě zavedení umělé viskozity se na pravou stranu navíc přičítá člen (3.57).

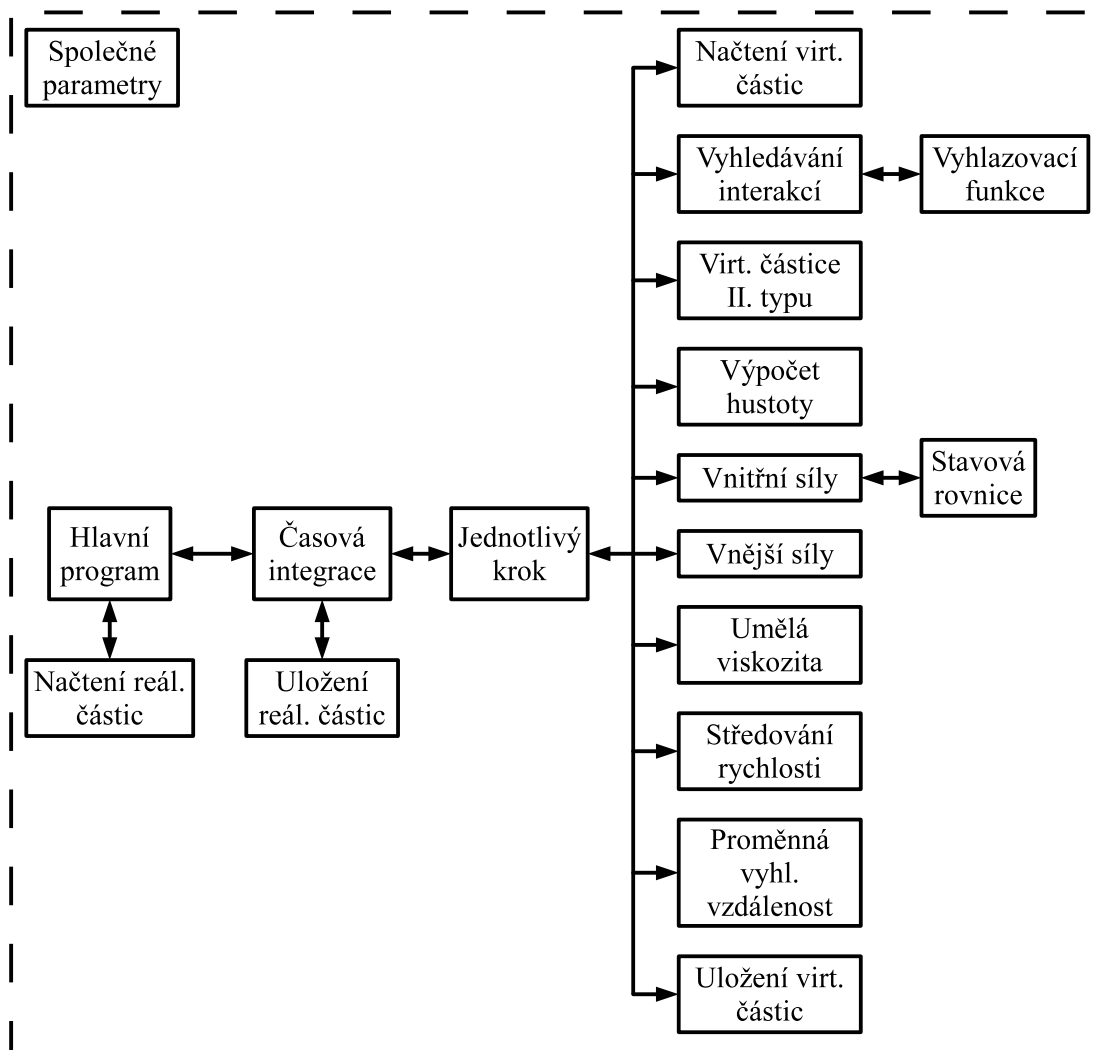
Bilance energie (1.31) se v programu počítá společně s bilancí hybnosti. Proto při volbě aproximace hybnosti podle (3.31) je energie určována z rovnice (3.34) a při aproximaci hybnosti použitím (3.32) se energie počítá podle (3.35). Umělá viskozita rovněž ovlivňuje bilanci energie tekutiny, a sice podle vztahu (3.58).

Vyhlazovací vzdálenost je udržovat po celou dobu výpočtu konstantní, či ji měnit tak, aby byl udržován počet vzájemných interakcí částic přibližně stejný. K docílení toho jsou v programu implementovány vztahy (3.66) a (3.67).

Z tohoto podprogramu je voláno i středování rychlosti podle rovnice (3.59).

4.2.4 Soubor parametrů

Soubor parametrů obsahuje globální parametry společně všem podprogramům. Velká část v možných volbách uvedených v části 4.2.3 se provádí v tomto souboru. Volí se zde především dimenze úlohy, váhová funkce, algoritmus vyhledávání interakcí, přístup k výpočtu hustoty, aproximační vztah pro bilanci hybnosti a energie a použitý vztah pro vyhlazovací vzdálenost. Další nastavitelné možnosti pak jsou např. uvažování tíhy, viskozity (skutečné i umělé) a virtuálních částic. Soustředění podstatné části voleb do jednoho souboru usnadňuje práci s programem.



Obrázek 4.1: Grafické schéma výpočtového programu.

4.3 Ověřovací úlohy

Součástí originálního programu jsou dvě testovací úlohy sloužící především k odhalení chyb, které mohly při přenosu programu z knihy vzniknout. Řešení obou těchto úloh je v knize prezentováno, proto lze některé z chyb odhalit poměrně snadno. Třetí testovací úloha slouží k ověření, že sestavený program lze použít pro řešení úloh s volnou hladinou.

4.3.1 Rázová trubice

V této úloze jsou simulovány děje probíhající v trubici naplněné ideálním plynem. Trubice je na počátku rozdělena membránou na dvě části. V obou částech je plyn v rovnovážném stavu, ovšem v obou částech se hustota, tlak a vnitřní energie liší. V tomto konkrétním případě je uvažován dvouatomový plyn, proto $\kappa = 1,4$. Stav plynu je následující:

	ρ (kg.m ⁻³)	p (Pa)	u (J.kg ⁻¹)
$x \leq 0$	1	1	2,5
$x > 0$	0,25	0,1795	1,795

V čase $t = 0$ s je membrána náhle odstraněna, což způsobí vznik rázové vlny šířící se do oblasti o nižší hustotě. Za rázovou vlnou postupuje kontaktní nespojitost a v opačném směru se šíří oblast zředěného plynu.

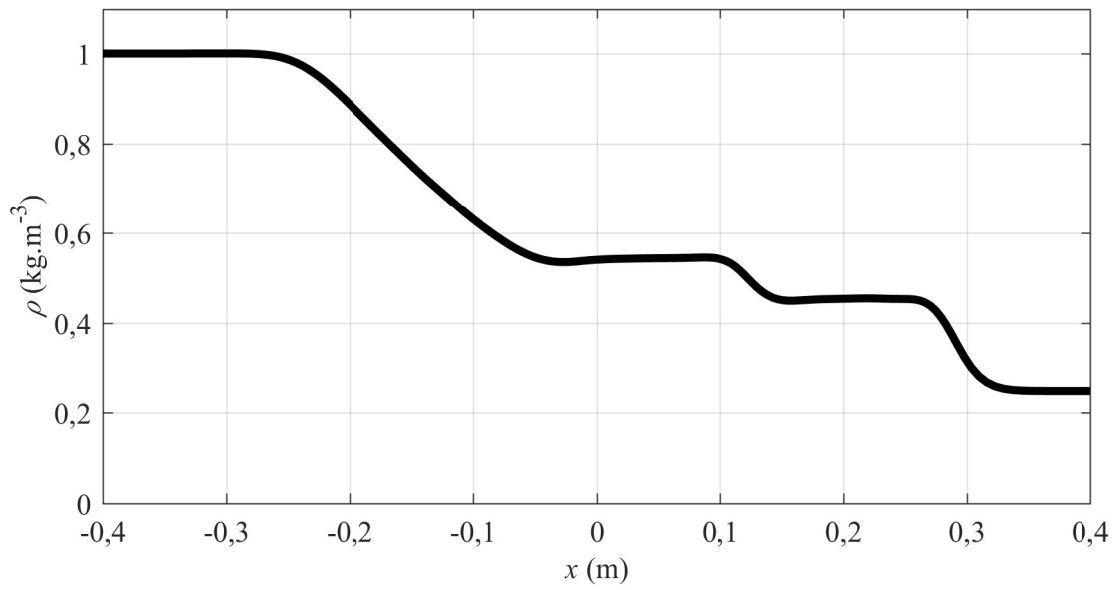
Je provedena jednorozměrná simulace procesu v rázové trubici. Plyn je v oblasti od $-0,9$ m do $0,9$ m diskretizován 600 částicemi stejné hmotnosti. 480 částic leží v oblasti vyššího tlaku a zbývajících 120 částic v oblasti tlaku nižšího. Pro průřez trubice 1 m^2 vychází hmotnost částic $1,875 \cdot 10^{-3}$ kg. Je volen časový krok $0,005$ s. Hustota je určována podle rovnice (3.26), použita je kubická vyhlazovací funkce a vyhlazovací vzdálenost je volena konstantní $h = 0,015$ m. Derivace hybnosti a vnitřní energie jsou aproximovány vztahy (3.32) resp. (3.35). Pro stabilizaci řešení je použita umělá viskozita podle rovnice (3.49) s parametry $\alpha = 1$ a $\beta = 1$. Na obou koncích trubice jsou pevně umístěny virtuální částice druhého typu, které brání expanzi plynu do volného prostoru. Protože sledovaný rázový děj se za dobu simulace nepřiblíží k hranici oblasti, je v okrajových částech výpočtové oblasti plyn stále ve stavu rovnováhy a stav virtuálních částic se tak rovněž nemění. Výsledky simulace při výše uvedených parametrech jsou prezentovány na obrázcích 4.2, 4.3, 4.4 a 4.5. Tyto výsledky jsou v dobré shodě s výsledky prezentovanými v [11].

Na též úloze byla ověřena možnost použití gaussovské váhové funkce a váhové funkce pátého řádu při ponechání konstantní vyhlazovací vzdálenosti $h = 0,015$ m. Při použití obou těchto funkcí dochází k výraznějším oscilacím hodnot řešení než u kubické váhové funkce.

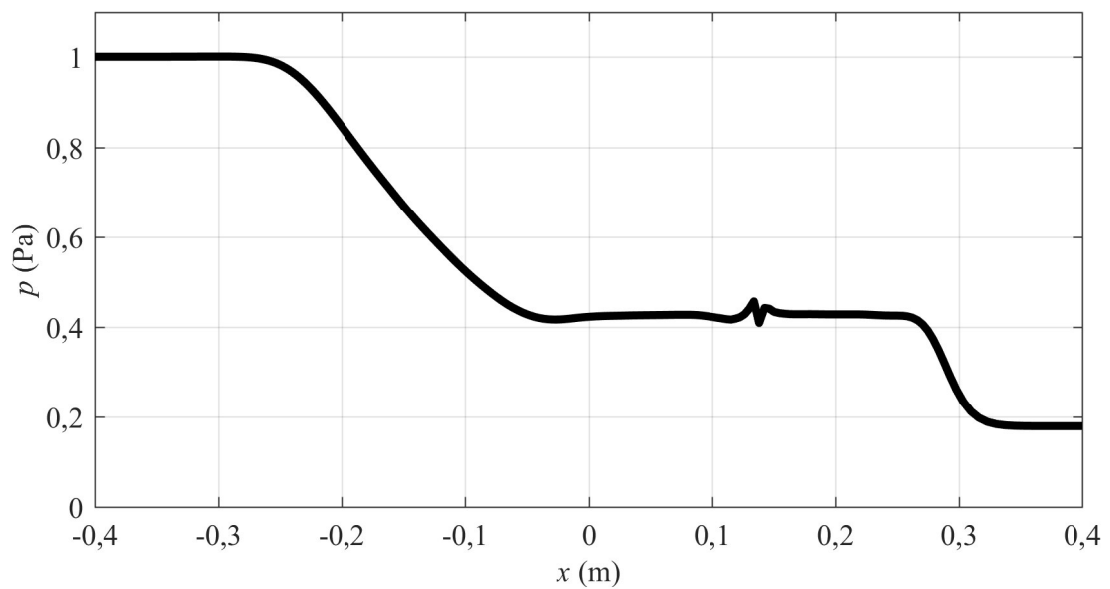
Dále byl vyšetřován vliv volby parametrů umělé viskozity. V této úloze má dominantní vliv parametr α . Zvyšování jeho hodnoty vede k potlačení oscilací a pozvolnějším přechodům na nespojitostech v řešení, jeho snižování má opačný efekt. Jak příliš vysoká, tak příliš nízká hodnota vedou k nestabilitě řešení. Volba parametru β má na řešení této úlohy výrazně menší vliv. Pouze velmi vysoké hodnoty způsobují nestabilitu.

Otestovány byly i algoritmy pro změnu vyhlazovací vzdálenosti h podle vztahů (3.66) a (3.67). Výsledky obou postupů jsou si velmi blízké. U algoritmu podle rovnice (3.66) bylo voleno $h_0 = 0,015$ m a $\rho_0 = 0,25 \text{ kg.m}^{-3}$. Vzhledem ke čtyřnásobnému zmenšení vyhlazovací vzdálenosti u částic v oblasti s vyšší hustotou, bylo třeba pro zachování numerické stability rovněž zmenšit časový krok. Rozdíl oproti řešení s konstantní vyhlazovací vzdáleností je ve vzniku výrazného maxima vnitřní energie u pro $x \doteq 0,14$ m.

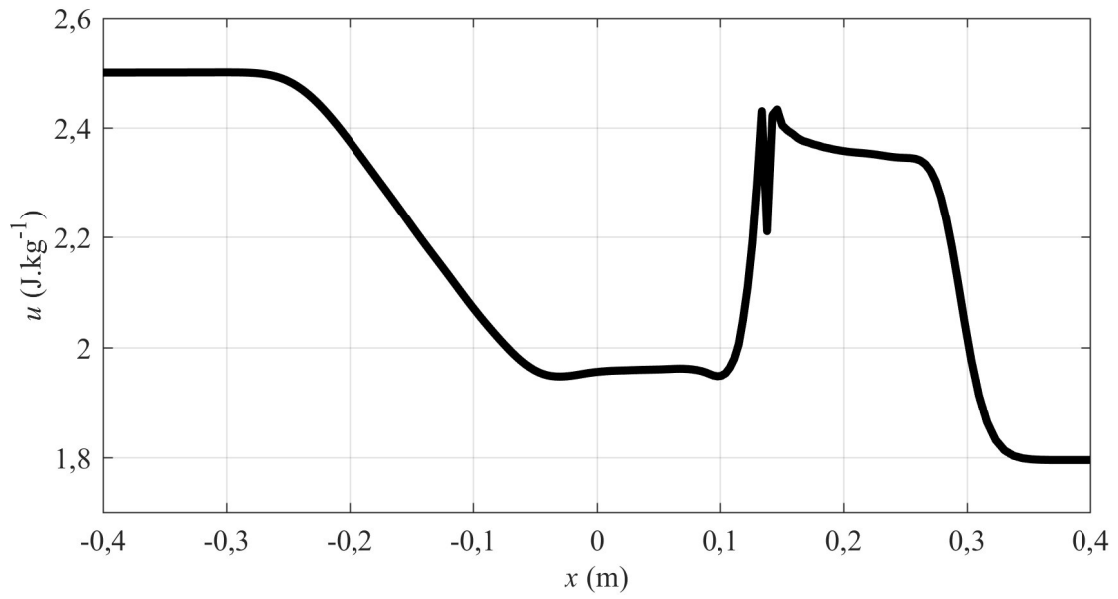
Řešení je prakticky nezávislé na volbě aproximace časové změny hybnosti a vnitřní energie. Naproti tomu se potvrdilo, že aproximace hustoty podle (3.27) je pro úlohy s nespojitostmi nepoužitelná. Výpočet hustoty z rovnice kontinuity podle (3.30) způsobuje výrazná maxima ρ , p a u pro $x \doteq 0,14$ m.



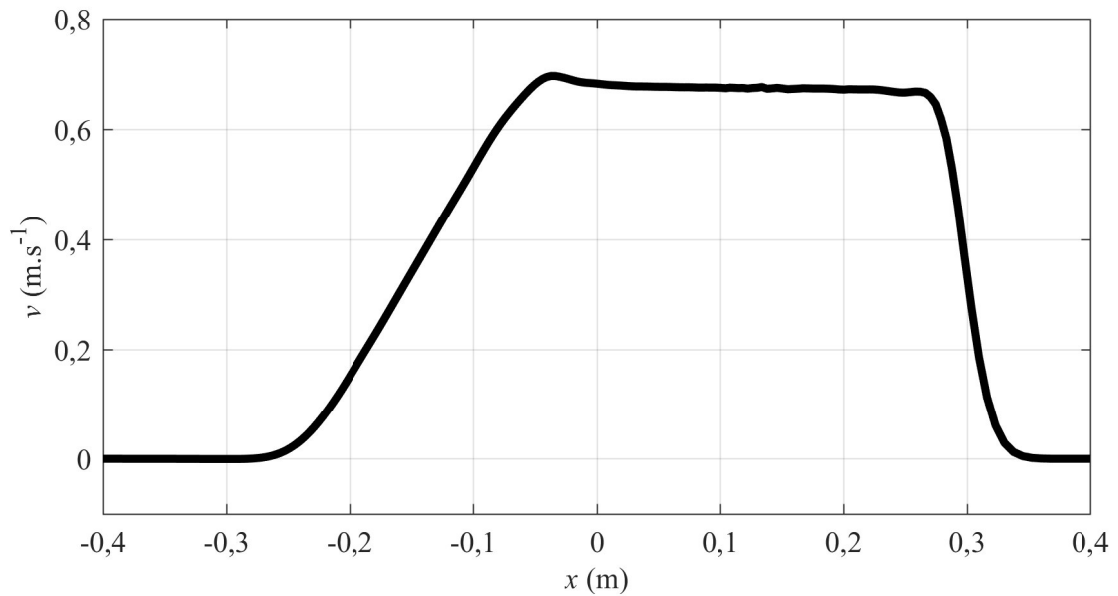
Obrázek 4.2: Rozložení hustoty plynu v trubici v čase $t = 0,2$ s.



Obrázek 4.3: Rozložení tlaku plynu v trubici v čase $t = 0,2$ s.



Obrázek 4.4: Rozložení vnitřní energie plynu v trubici v čase $t = 0,2$ s.



Obrázek 4.5: Rychlostní pole v trubici v čase $t = 0,2$ s.

4.3.2 Proudění v kavitě

V této úloze je simulováno chování vazké nestlačitelné tekutiny ve dvojrozměrné oblasti tvaru čtverce. Na všech hranicích oblasti s výjimkou horní je předepsána podmínka nulové tečné rychlosti. Na horní hranici je zadána nenulová tečná rychlost. Touto nenulovou rychlostí vlivem vazkosti je tekutina z klidu uvedena do pohybu. Po určitém čase je dosaženo ustáleného stavu, při kterém tekutina v oblasti cirkuluje.

Konkrétně je volena délka stěny kavity 1 mm, rychlost horní hranice $1 \text{ mm}\cdot\text{s}^{-1}$, hustota tekutiny $\rho = 1000 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ a dynamická viskozita $\mu = 10^{-3} \text{ Pa}\cdot\text{s}$. Tomuto zadání odpovídá $Re = 1$.

Počáteční konfiguraci diskretizované úlohy znázorňuje obrázek 4.6. Tekutina je diskretizována celkovým počtem 1600 (40x40) totožných částic uspořádaných do čtvercové mřížky. Na hranici je umístěno celkem 320 virtuálních částic prvního typu. Jejich rozteč je poloviční oproti částicím tekutiny. Reálné i virtuální částice mají stejnou hmotnost. Při uvažované hloubce kavity 1 m je hmotnost jednotlivých částic $6,25\cdot 10^{-7} \text{ kg}$. Časový krok je volen $5\cdot 10^{-5} \text{ s}$ a ustáleného stavu je s dostatečnou přesností dosaženo po 3000 krocích, tedy po 0,15 s. Oscilacím v řešení je zamezeno středováním rychlosti podle (3.59) s $\varepsilon = 0,3$. Pro určení tlaku je použita stavová rovnice (3.64) s numerickou rychlostí zvuku $c = 0,01 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Vyhlažovací vzdálenost je ponechána konstantní a je rovna počáteční rozteči částic. Užita je kubická váhová funkce. Hustota je aproximována vztahem (3.27) a bilanci hybnosti určuje vztah (3.32).

Výsledné pole rychlosti představuje obrázek 4.7. V počáteční fázi simulace jsou částice tekutiny v blízkosti hranic vypuzeny virtuálními částicemi do více než dvojnásobné vzdálenosti od stěny, než je jejich počáteční poloha. V těsné blízkosti hranice tak nejsou přítomny žádné reálné částice a v těchto místech tak nelze stanovit řešení. Výsledné rychlostní pole je ve shodě s rychlostním polem stejně řešené úlohy prezentované v [11].

Stejná úloha s totožným počtem reálných částic byla řešena s použitím obou druhů virtuálních částic. Počáteční konfigurace úlohy je znázorněna na obrázku 4.8. Virtuální částice II. typu jsou umístěny na hranici řešené oblasti ve třech vrstvách v celkovém počtu 516. V pravé horní části hranice je použito 12 virtuálních částic I. typu, které zabraňují průniku reálných částic mimo řešenou oblast. Parametry výpočtu byly ponechány stejné jako při předchozím řešení úlohy, s výjimkou váhové funkce. Byla použita gaussovská váhová funkce, která má větší oblast závislosti částice. Dochází tak k většímu využití virtuálních částic, než při použití kubické vyhlažovací funkce.

Oproti předchozímu způsobu zadání okrajových podmínek za použití virtuálních částic I. typu, nyní nedochází k počátečnímu vypuzení částic tekutiny od hranice oblasti. Hodnoty řešení jsou tak dostupné blíže hranici.

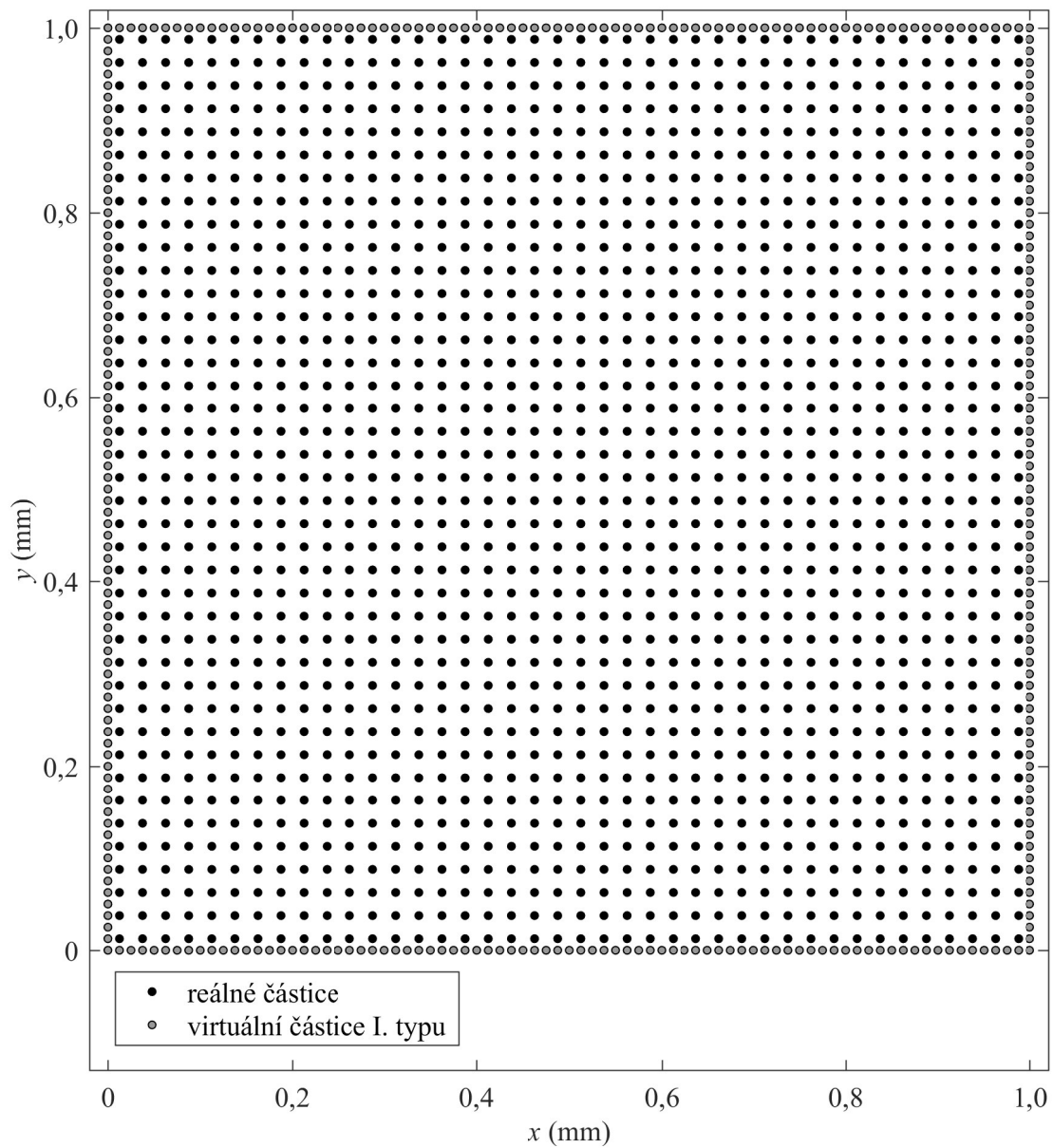
Získané rychlostní pole je opět ve shodě s výsledky z [11] a je o něco blíže výsledkům získaným metodou konečných diferencí prezentovaných tamtéž.

4.3.3 Zhroucení sloupce kapaliny

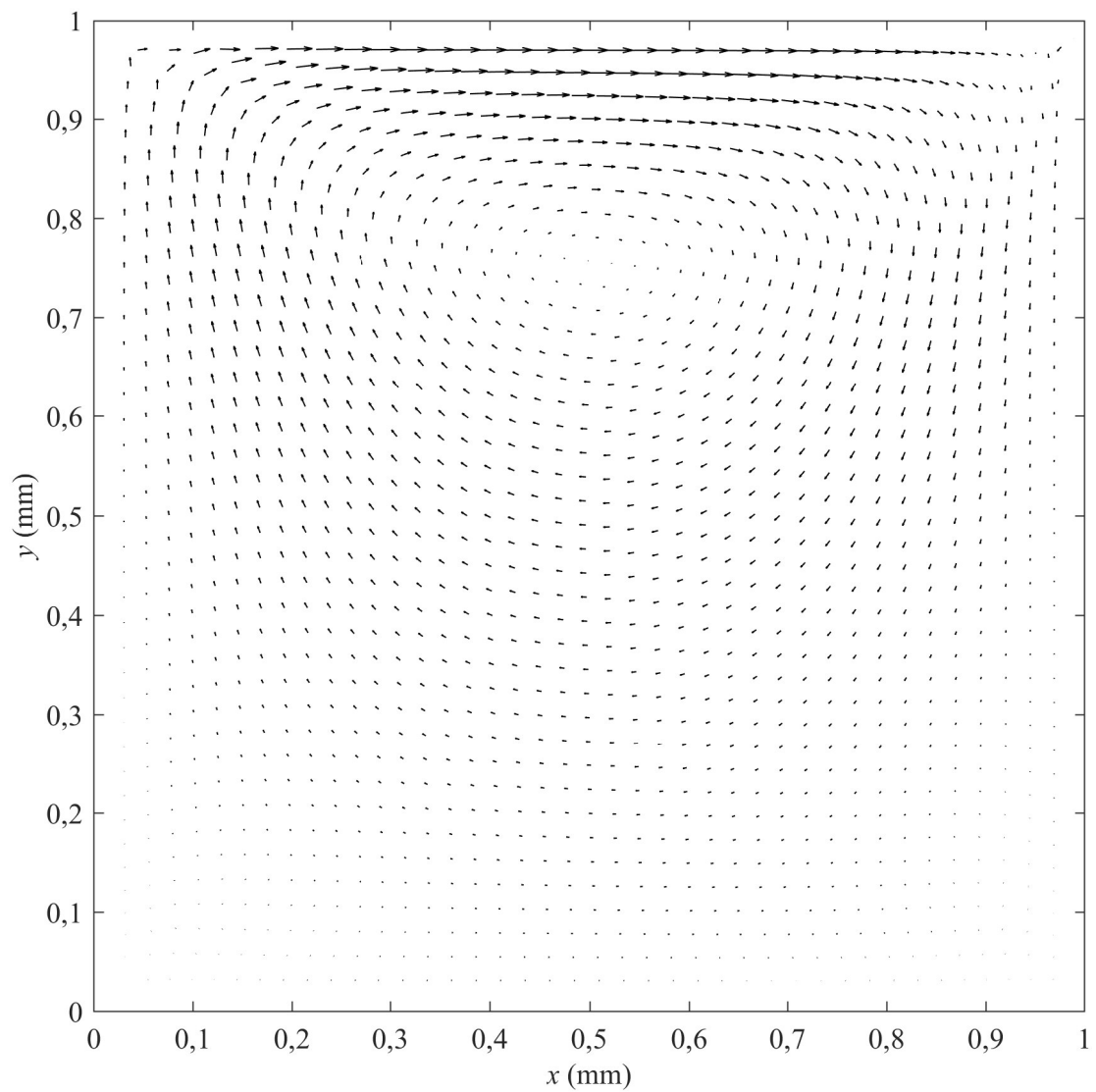
V této úloze je simulováno zhroucení sloupce kapaliny vlivem tíže. Úloha je řešena ve dvou rozměrech. Na počátku je oblast kapaliny tvaru obdélníka umístěna v nádrži s pevnými stěnami tak, že její pravá hranice je volná, bez kontaktu se stěnou nádrže. Vlivem tíže dojde k pohybu tekutiny v prostoru nádrže. Pohyb se postupně utlumí a kapalina zaujme polohu s minimální potenciální energií, tedy takovou, že je jí vyplněna spodní část nádrže.

Výška sloupce kapaliny je volena 2 m a jeho šířka 1 m. Nádrž je široká 4 m a její boční stěny dosahují výšky 3 m. Hustota kapaliny je $1000 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ a tíhové zrychlení $9,81 \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$.

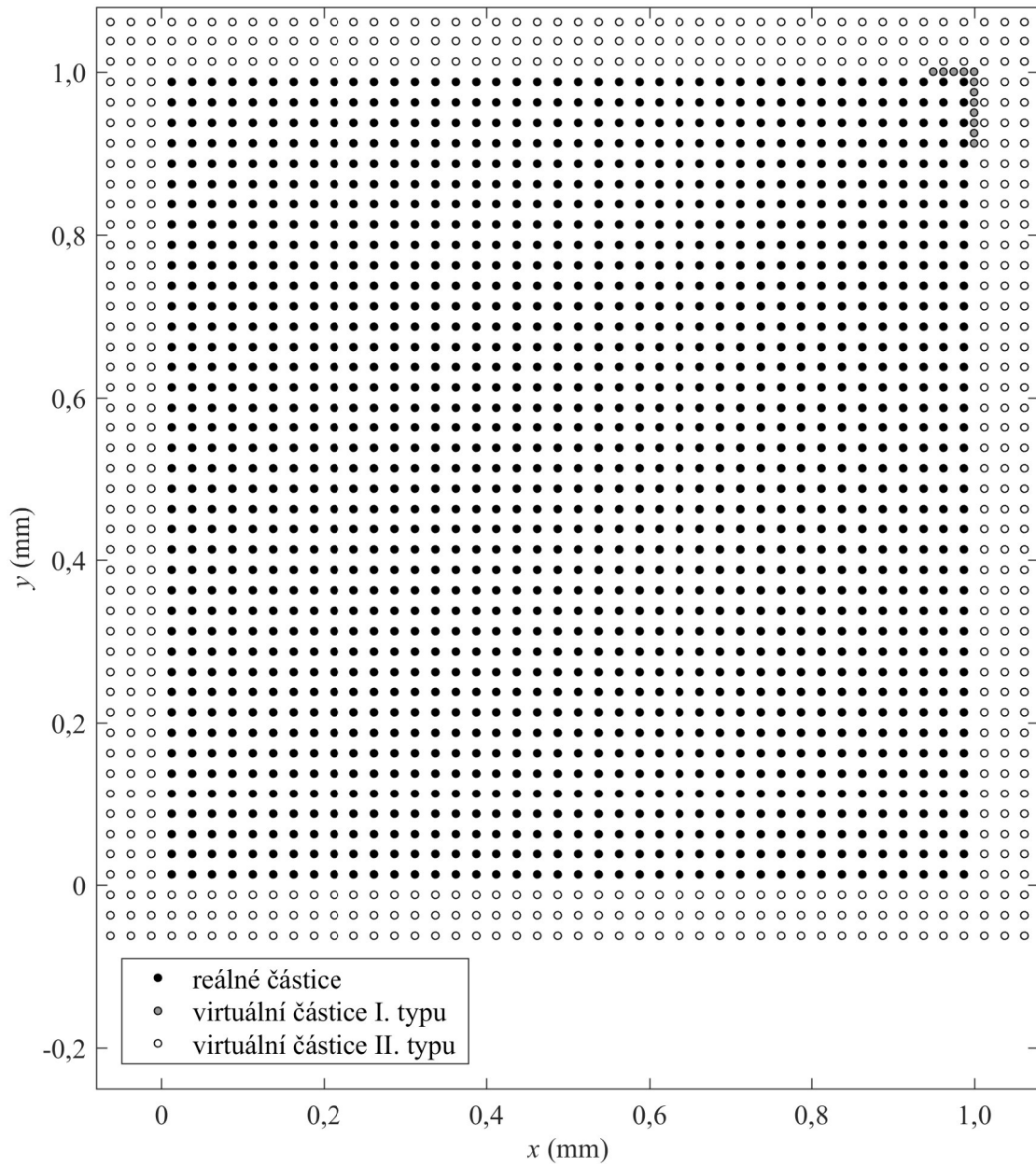
Počáteční konfigurace diskretizované úlohy je na obrázku 4.10. Částice kapaliny jsou uspořádány do pravidelné kartézské mřížky v celkovém počtu 3200 (80x40). Hloubka uvažované nádrže je 1 m a hmotnost jedné částice tak vychází 0,625 kg. Stěny nádrže jsou modelovány použitím virtuálních částic prvního typu s poloviční vzájemnou vzdáleností oproti částicím kapaliny. Celkem jich je použito 799 a jejich uvažovaná hmotnost je nulová. Kapalina je modelována jako nevazká a řešení je stabilizováno umělou viskozitou s parametry $\alpha = 0,2$ a $\beta = 1,0$. Numerická rychlost zvuku je volena $60 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.



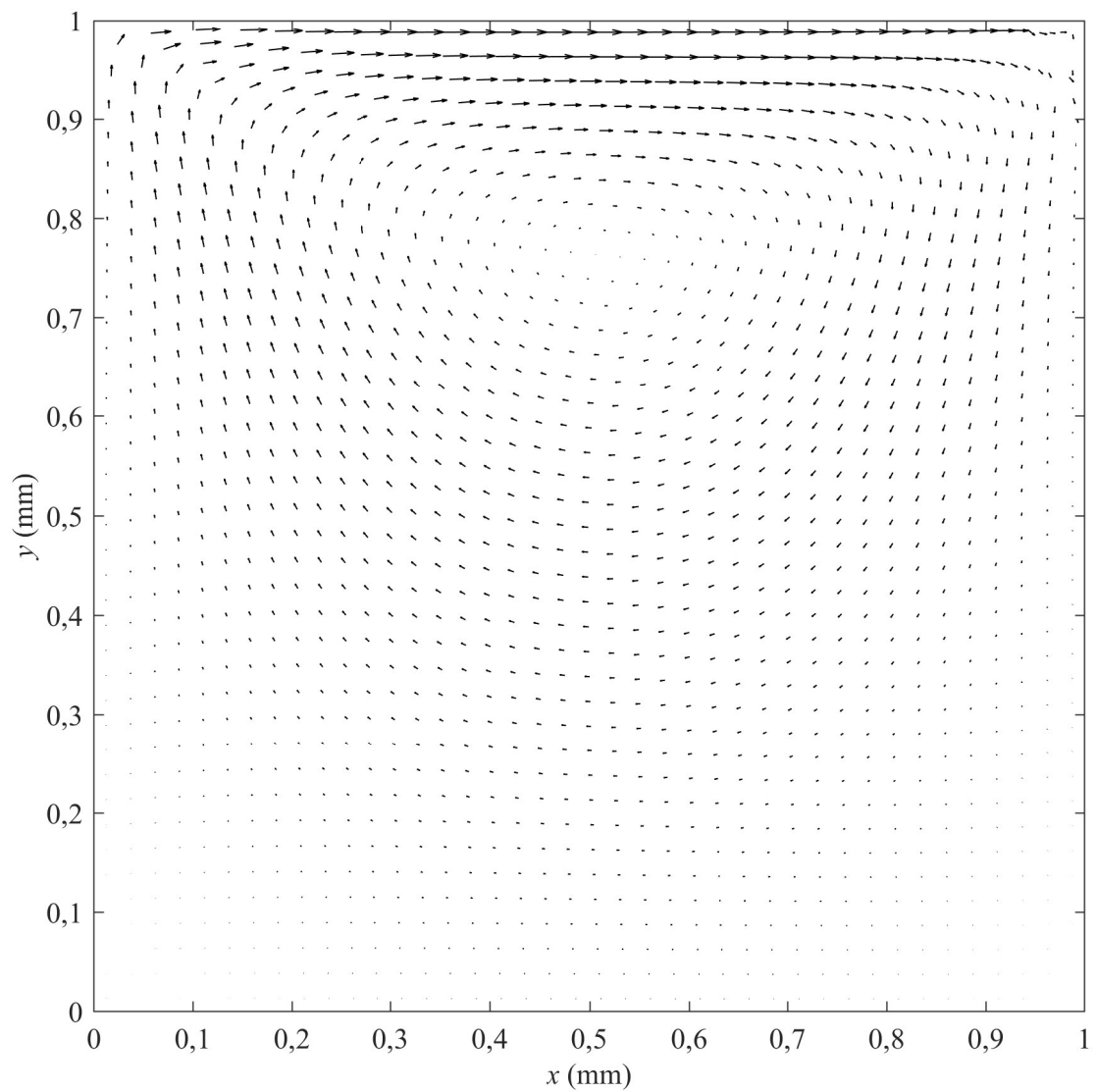
Obrázek 4.6: Počáteční rozložení částic pro úlohu kvity. Užity jsou pouze virtuální částice prvního typu.



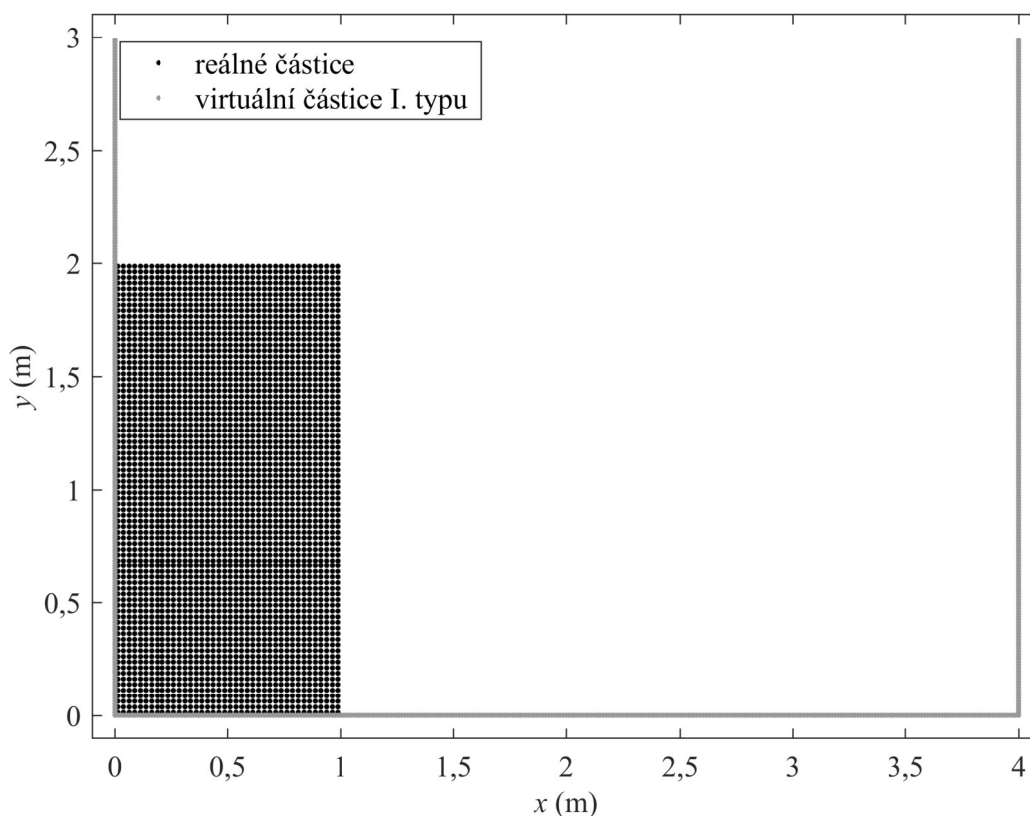
Obrázek 4.7: Rychlostní pole v kavitě v čase $t = 0,015$ s. Užity pouze virtuální částice I. typu podle obr.4.6 a zobrazeny pouze rychlosti reálných částic.



Obrázek 4.8: Počáteční rozložení částic pro úlohu kavity. Užity jsou virtuální částice I. a II. typu.



Obrázek 4.9: Rychlostní pole v kavitě v čase $t = 0,015$ s. Užity virtuální částice I. i II. typu podle obr.4.8 a zobrazeny pouze rychlosti reálných částic.



Obrázek 4.10: Počáteční rozložení částic pro úlohu kolapsu sloupce kapaliny.

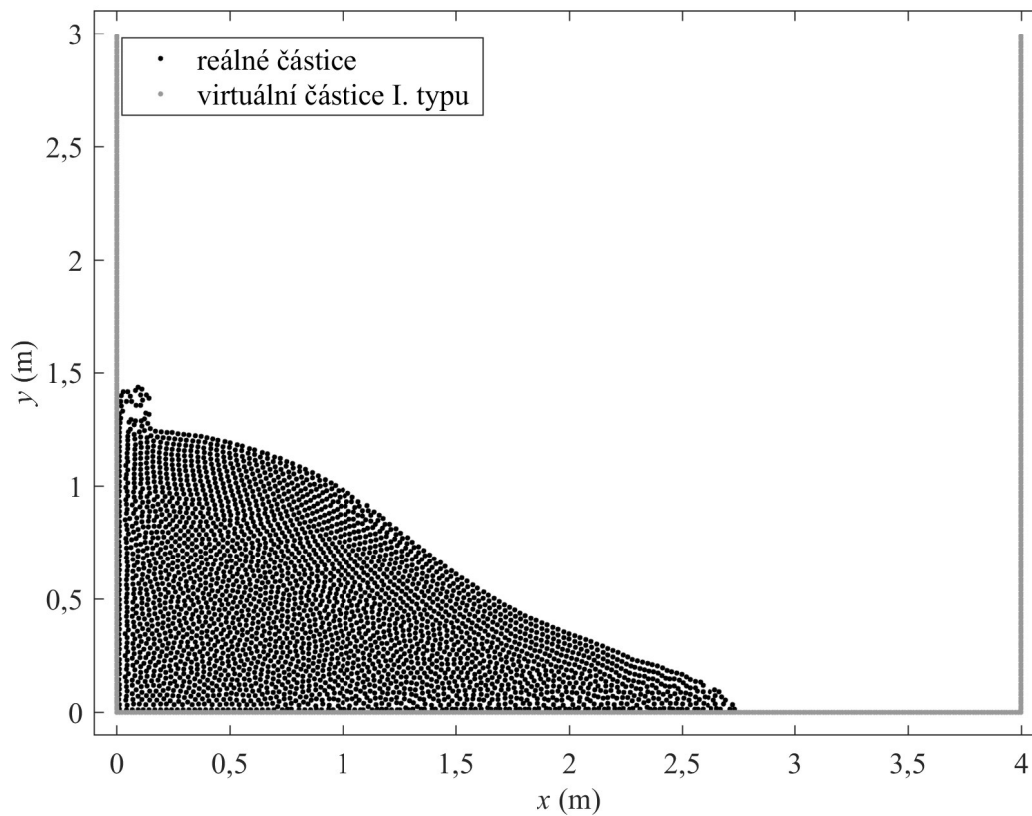
Pro výpočet tlaku je použita stavová rovnice (3.60) s parametry $B = 550000$ Pa, $\rho_0 = 1000$ kg.m⁻³, $\gamma = 7$ a $p_0 = 0$ Pa. V souladu s doporučeními uvedenými v části 3.8.7 byl volen časový krok $5 \cdot 10^{-5}$ s. Vyhlažovací vzdálenost je v průběhu výpočtu konstantní a odpovídá počáteční rozteči částic. Užitá je kubická váhová funkce. Hustota je aproximována vztahem (3.30) a bilanci hybnosti určuje vztah (3.32).

U této úlohy byly rovněž testovány algoritmy pro vyhledávání interakcí. Ty sice nemají vliv na řešení, ovšem výrazně ovlivňují výpočetní náročnost. Čas výpočtu úlohy při použití algoritmu linked-list byl přibližně desetinový oproti času výpočtu při použití algoritmu každý s každým. Je tak zřejmé, že již při relativně nízkém počtu částic je algoritmus linked-list výrazně efektivnější. S narůstajícím počtem částic lze očekávat prohlubování tohoto rozdílu.

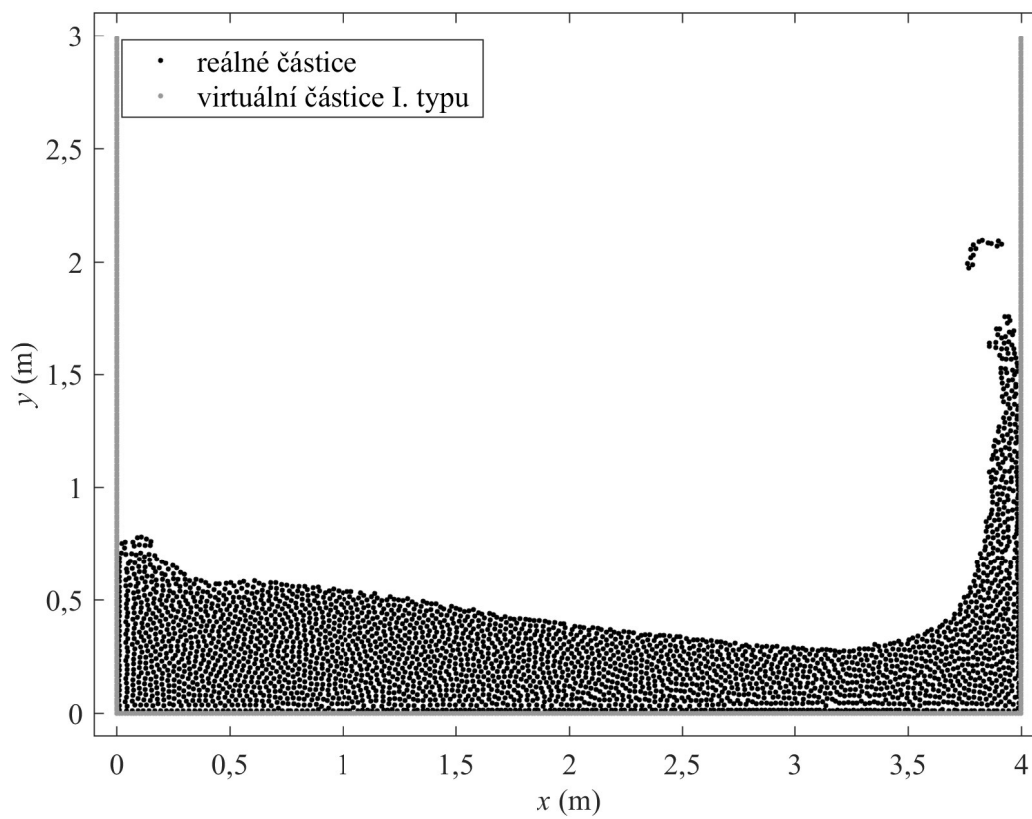
Několik časových okamžiků řešení je zobrazeno na obrázcích 4.11 až 4.16. Soubor s animací časového průběhu simulace lze nalézt na příloženém CD. Toto řešení je ve velmi dobré shodě s numerickými a experimentálními výsledky uvedenými v [12] a s numerickými výsledky uvedenými v [21].

4.3.4 Shrnutí výsledků ověřovacích úloh

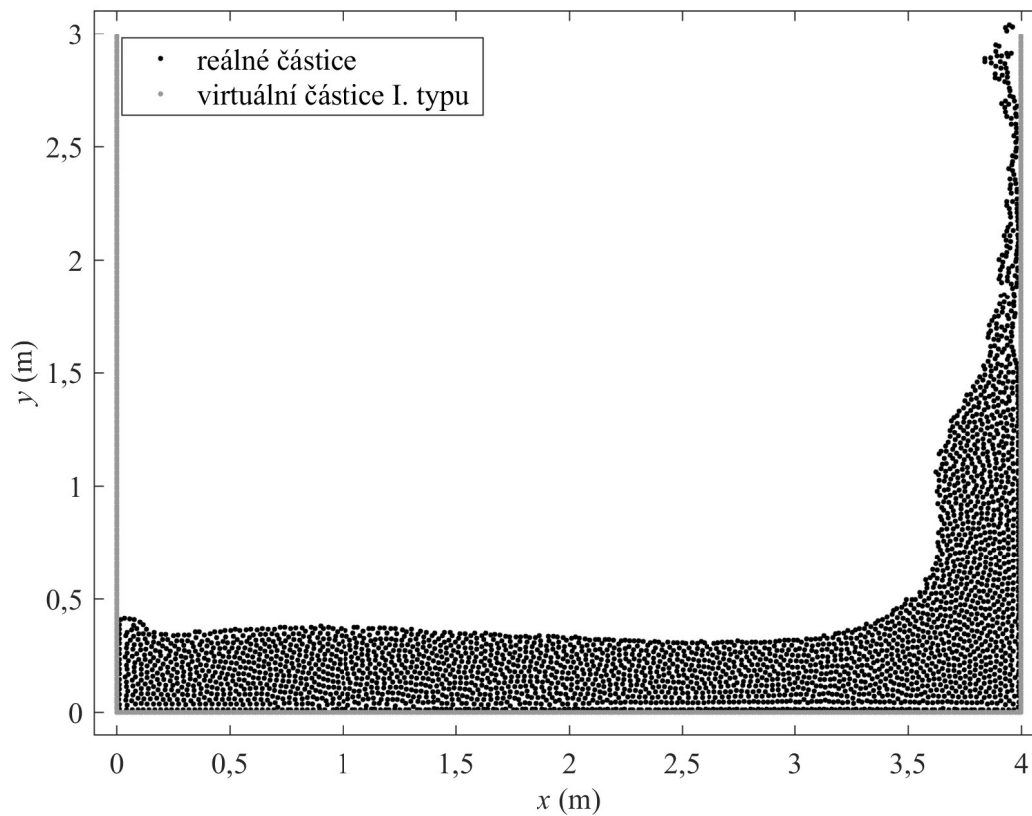
První dvě ověřovací úlohy potvrdily, že sestavený program neobsahuje zásadní chybu, která by znemožňovala jeho užití. Na těchto úlohách byla rovněž vyzkoušena některá nastavení. Konkrétně se jednalo o vyzkoušení implementovaných stavových rovnic, okrajových podmínek a dalších parametrů, jež souvisí především s numerickou stabilitou. Úspěšným řešením třetí úlohy byla ověřena schopnost programu řešit úlohy s volnou hladinou. Program tak lze rovněž aplikovat na úlohy interakce kapek.



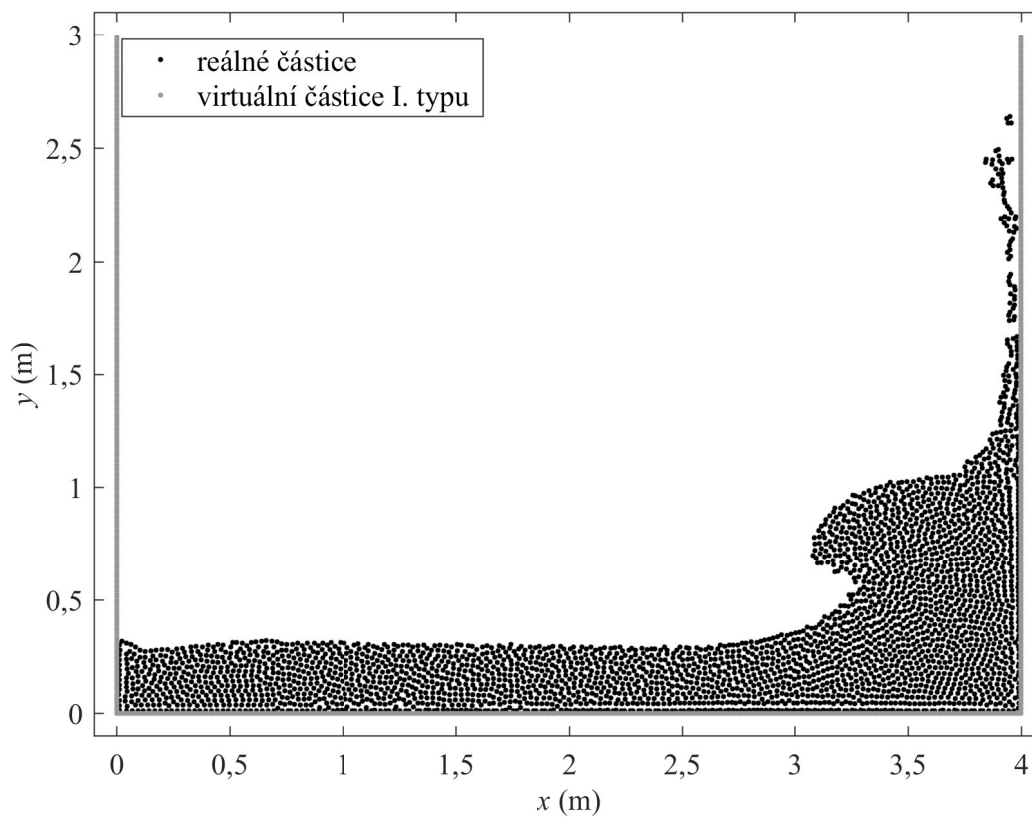
Obrázek 4.11: Řešení úlohy kolapsu sloupce kapaliny v čase $t = 0,5$ s.



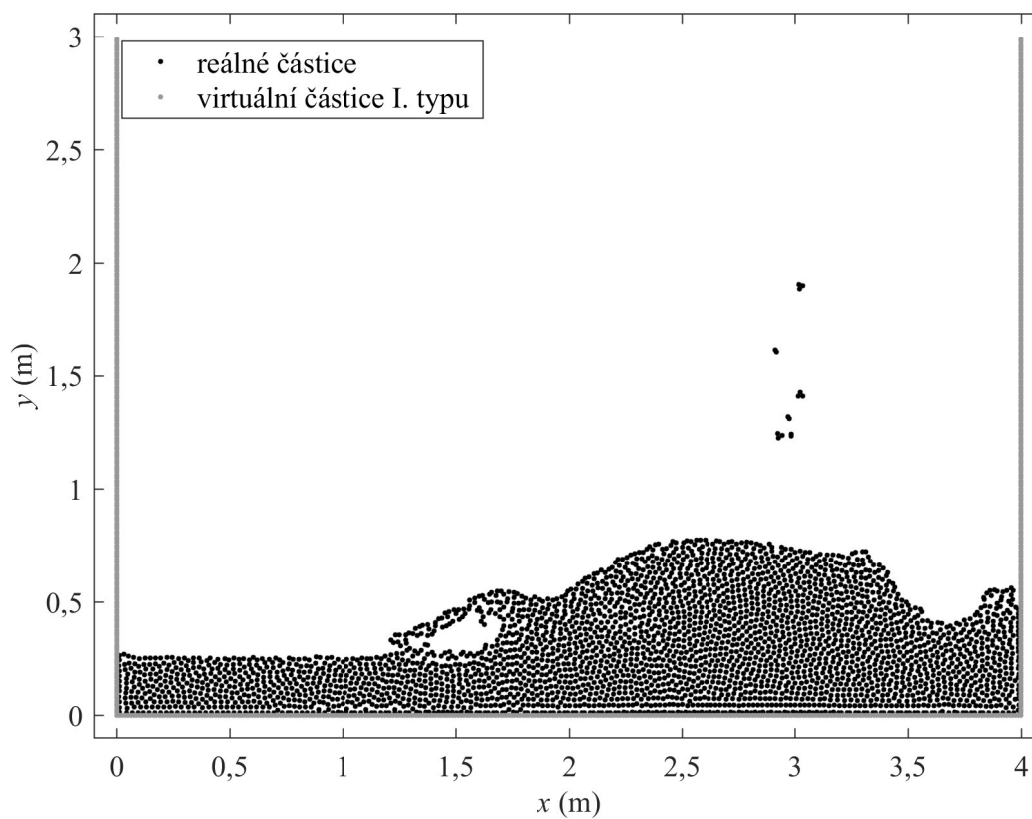
Obrázek 4.12: Řešení úlohy kolapsu sloupce kapaliny v čase $t = 1,0$ s.



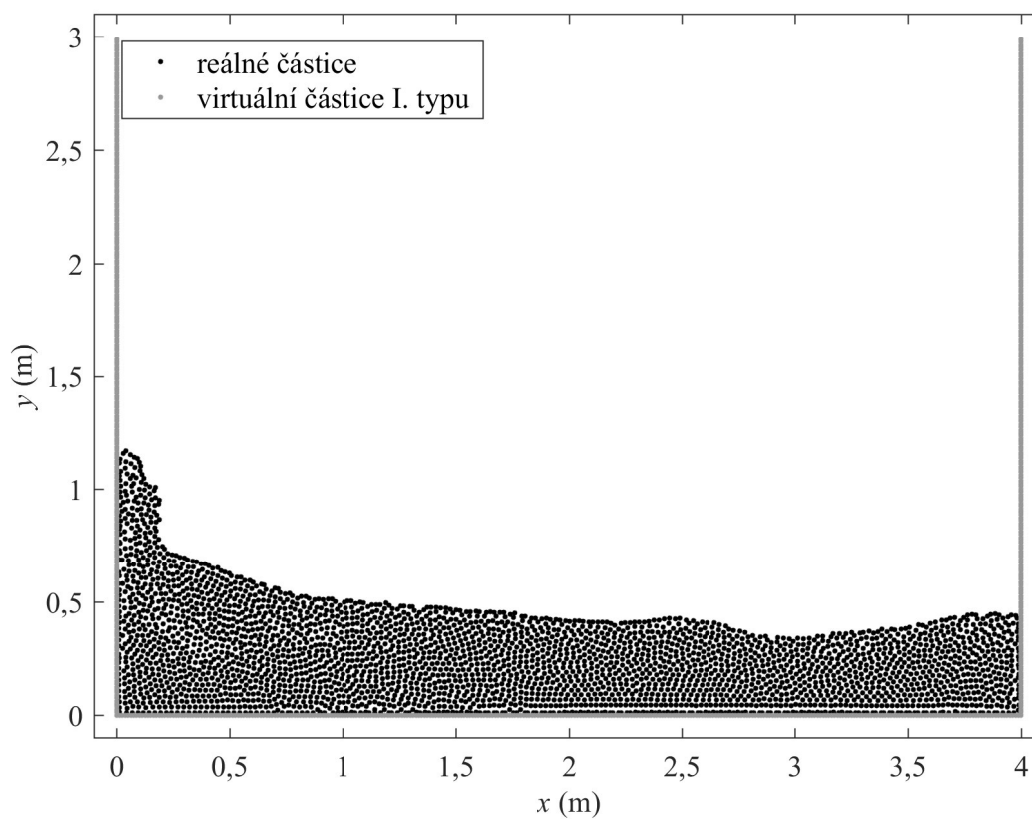
Obrázek 4.13: Řešení úlohy kolapsu sloupce kapaliny v čase $t = 1,5$ s.



Obrázek 4.14: Řešení úlohy kolapsu sloupce kapaliny v čase $t = 1,8$ s.



Obrázek 4.15: Řešení úlohy kolapsu sloupce kapaliny v čase $t = 2,3$ s.



Obrázek 4.16: Řešení úlohy kolapsu sloupce kapaliny v čase $t = 3,0$ s.

Kapitola 5

Řešení interakce kapek

V této kapitole jsou uvedena numerická řešení interakcí kapek metodou SPH. Řešeny jsou dva případy. Prvním je dopad kapky na tenký kapalinový film a druhým dopad kapky na pevný povrch. Jsou uvedeny konfigurace obou uvažovaných případů a prezentovány dosažené výsledky. Dále je uvedeno zhodnocení dosažených výsledků a jejich porovnání s případy pozorovanými v experimentech. Závěrem jsou diskutovány nedostatky použitého výpočtového programu a možnosti jejich odstranění v budoucnu. Animace zachycující průběhy řešených interakcí jsou umístěny na příloženém CD.

5.1 Dopad na kapalinový film

V této úloze je simulován dopad kapky na tenký kapalinový film konstantní tloušťky. Film je nanesen na pevném povrchu. Kapka dopadá kolmo k povrchu danou rychlostí.

Jsou řešeny dva případy. V obou případech má kapka průměr $D = 1$ mm a dopadá na film tloušťky $h = 0,25$ mm. Rychlost kapky je $V = 1$ m.s⁻¹. Hustota kapaliny je $\rho = 1000$ kg.m⁻³. Není uvažováno povrchové napětí. Případy se liší dynamickou viskozitou kapaliny. V prvním případě je uvažovaná viskozita $\mu = 10^{-2}$ Pa.s, ve druhém $\mu = 10^{-1}$ Pa.s.

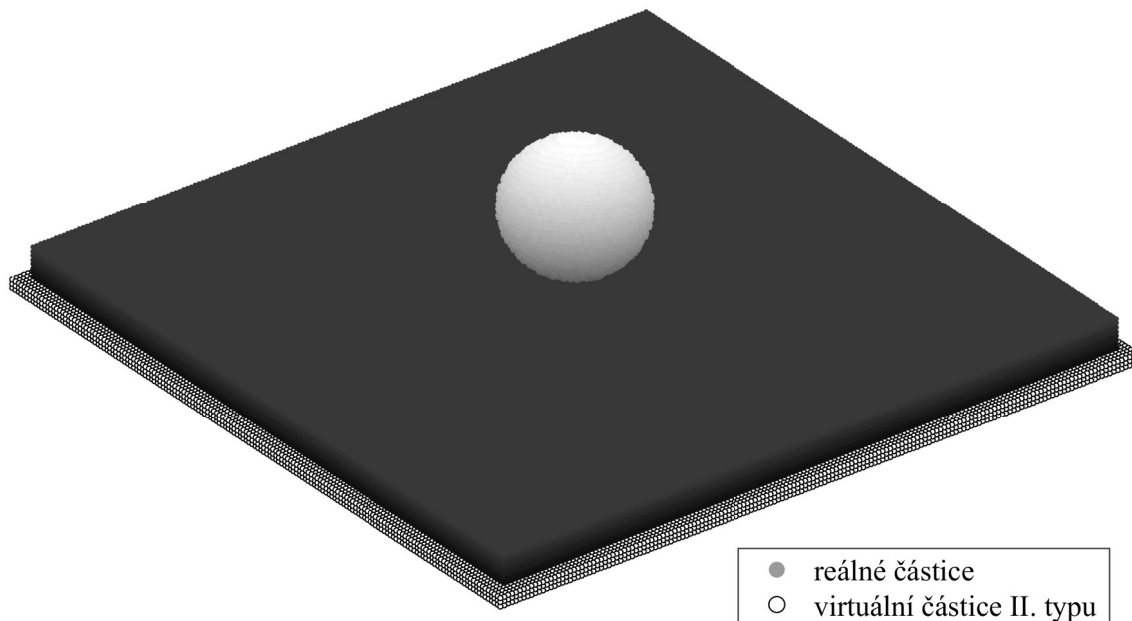
Bezrozměrná tloušťka filmu je v obou případech $H = 0,25$. Reynoldsovo číslo vychází pro první případ $Re = 100$ a pro druhý případ $Re = 10$. Protože je uvažována nulová hodnota povrchového napětí σ , jsou hodnoty Weberova a Ohnesorgeho čísla nekonečné.

Kapku tvoří celkem 17256 částic. Ty jsou uspořádány do pravidelné kartézské mřížky a vzdálenost mezi sousedními částicemi je $3,125 \cdot 10^{-5}$ m. Kapka jako celek je natočena kolem své osy rovnoběžné s osou x globálního systému o 10° a následně o stejnou hodnotu kolem osy rovnoběžné s osou y globálního systému. Je tak učiněno pro porušení symetrie úlohy. Na počátku je kapka 0,05 mm nad kapalinovým filmem. Tento film je tvořen částicemi stejných parametrů jako kapka. Má čtvercový půdorys o délce strany 5 mm a kapka dopadá do jeho středu. Celkem jej tak tvoří 204800 (160x160x8) částic. Film je umístěn na stěně tvořené třemi vrstvami virtuálních částic II. typu. Jejich celkový počet je 82668 (166x166x3). Počáteční konfiguraci úlohy ukazuje obrázek 5.1.

Řešení je stabilizováno umělou viskozitou s parametry $\alpha = 0,1$ a $\beta = 0$. Numerická rychlost zvuku je volena 10 m.s⁻¹. Pro výpočet tlaku je užitá stavová rovnice (3.60) s parametry $B = 14000$ Pa, $\rho_0 = 1000$ kg.m⁻³, $\gamma = 7$ a $p_0 = 0$ Pa. V souladu s doporučeními uvedenými v části 3.8.7 byl volen časový krok $5 \cdot 10^{-7}$ s. Vyhlažovací vzdálenost se v průběhu výpočtu nemění a odpovídá počáteční rozteči částic. Použita je kubická váhová funkce. Hustota je počítána podle vztahu (3.30) a bilance hybnosti podle vztahu (3.32).

Průběh simulace prvního případu je zachycen na obrázcích 5.2 až 5.5. Po dopadu kapky se začíná tvořit koruna. Postupně se zvětšuje její průměr a její horní okraj stoupá. Některé částice opouštějí vrchol koruny, většinou ve skupinách po několika částicích. Tloušťka filmu je uvnitř koruny snížena.

Výsledek je kvalitativně podobný experimentům publikovaným v [6]. V této práci je uveden na obrázku 2.1c a dochází k němu při vysokých hodnotách $WeOh^{-0,4}$. V simulaci ovšem nedochází k formování lemu na okraji koruny a v návaznosti na to ani k rozpadu tohoto lemu na drobné kapičky. To

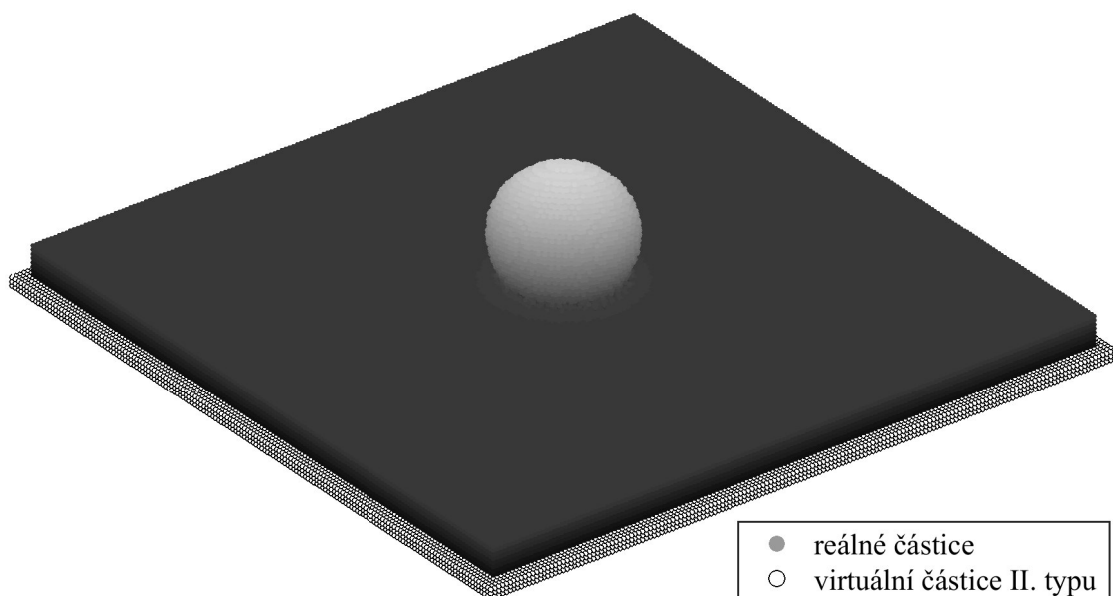


Obrázek 5.1: Počáteční konfigurace úlohy dopadu kapky na kapalinový film.

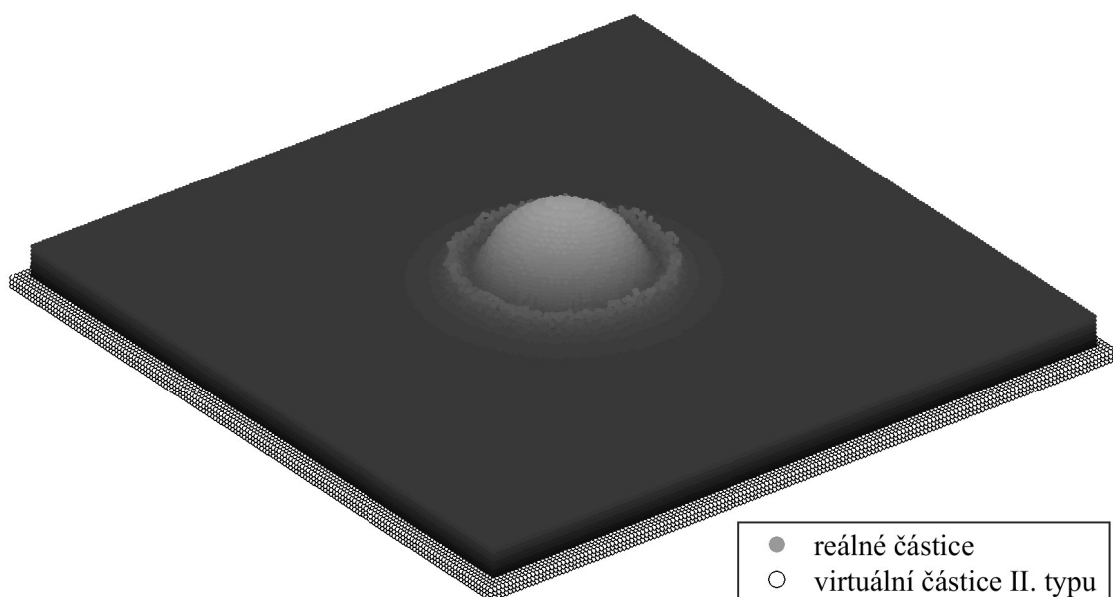
lze vysvětlit absencí povrchového napětí v numerickém modelu.

Druhý případ zachycují obrázky 5.6 až 5.9. Tentokrát nedochází k tvorbě koruny. Kapka se při dopadu pouze částečně rozprostře po hladině.

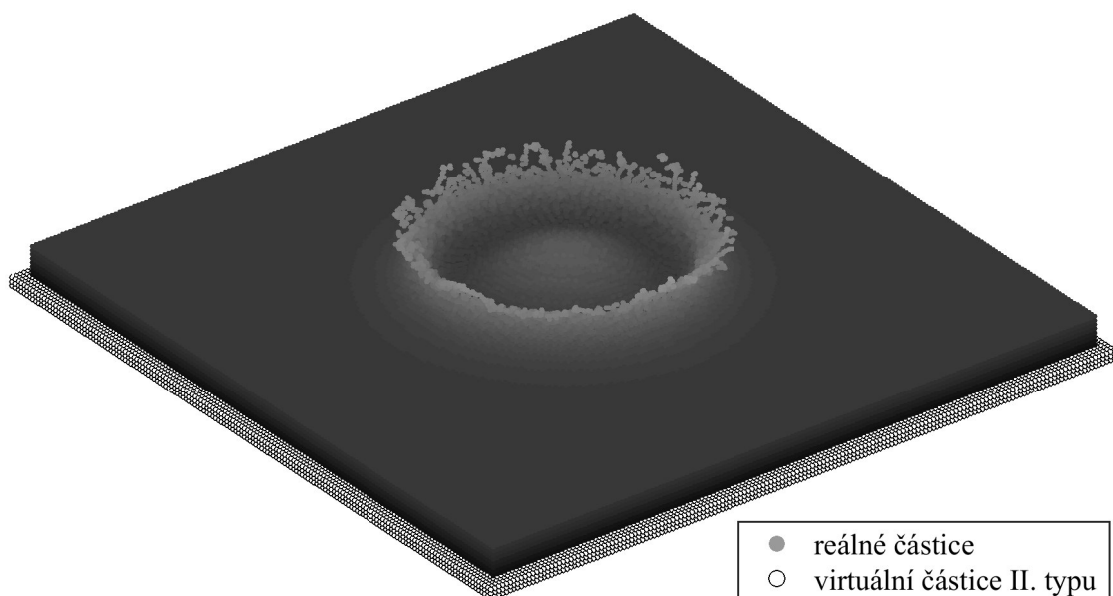
Podle [6] by k takovému výsledku nemělo dojít, protože k rozprostření na hladině dochází při nižších hodnotách $WeOh^{-0,4}$. Těch lze ovšem dosáhnout pouze při uvažování povrchového napětí. K rozprostření kapky tak došlo z jiného důvodu. To naznačuje i to, že tvar rozprostření kapky v simulaci se liší od tvaru pozorovaného při experimentech [6]. Vysvětlením může být velmi nízké Reynoldsovo číslo, v důsledku čehož dochází k rychlému utlumení pohybu kapaliny po dopadu kapky vlivem viskozity.



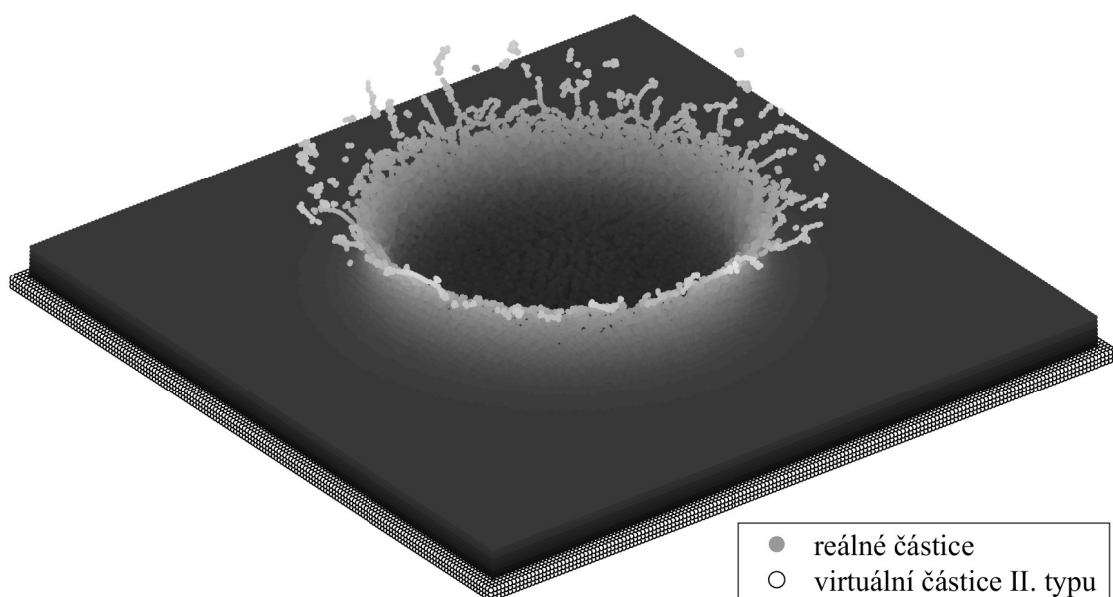
Obrázek 5.2: Dopad kapky na kapalinový film, $Re = 100$, $t = 0,2$ ms.



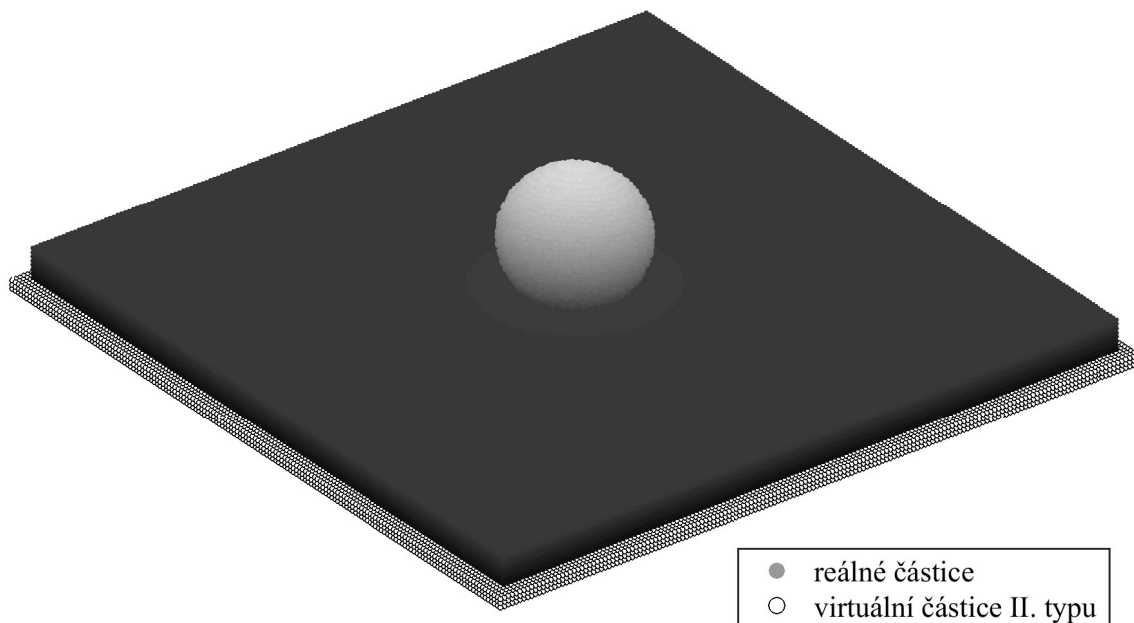
Obrázek 5.3: Dopad kapky na kapalinový film, $Re = 100$, $t = 0,5$ ms.



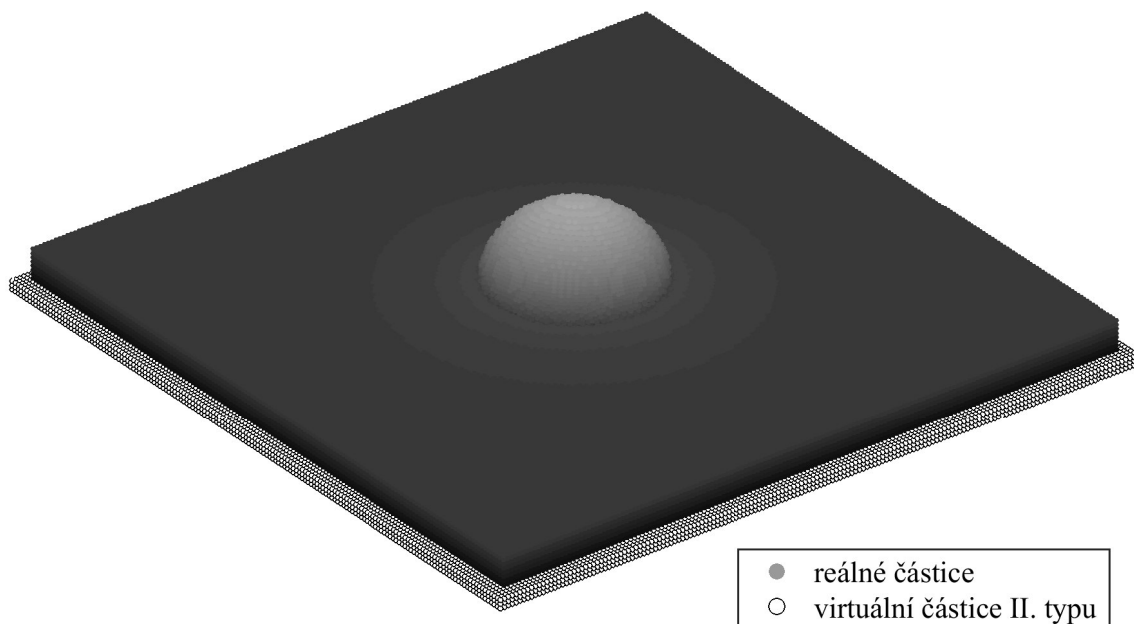
Obrázek 5.4: Dopad kapky na kapalinový film, $Re = 100$, $t = 1,0\text{ms}$.



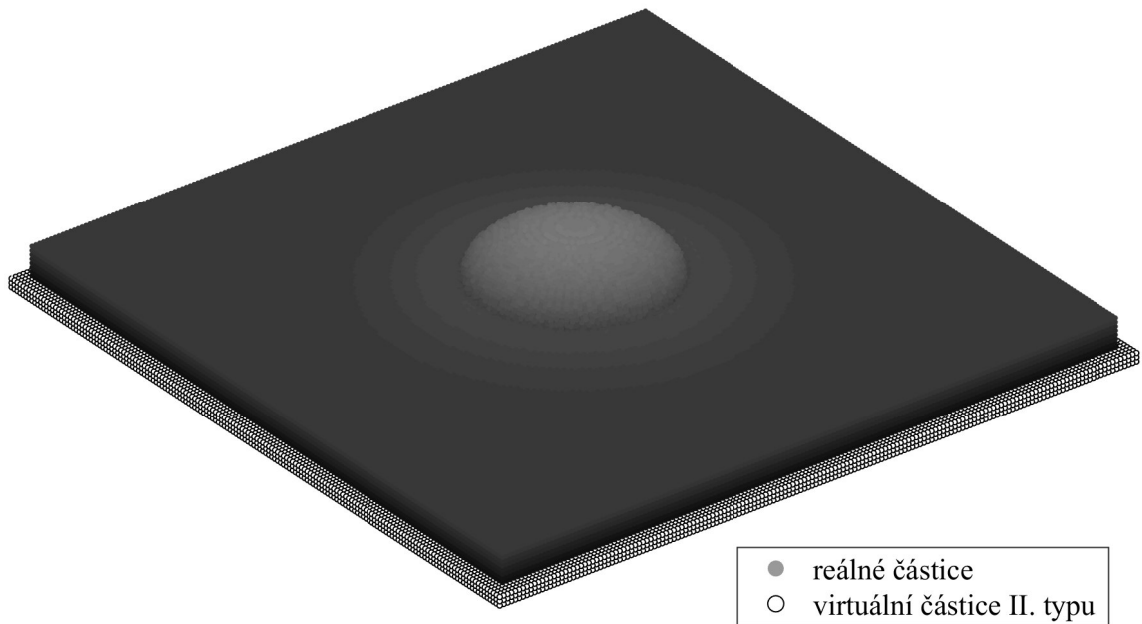
Obrázek 5.5: Dopad kapky na kapalinový film, $Re = 100$, $t = 2,0\text{ms}$.



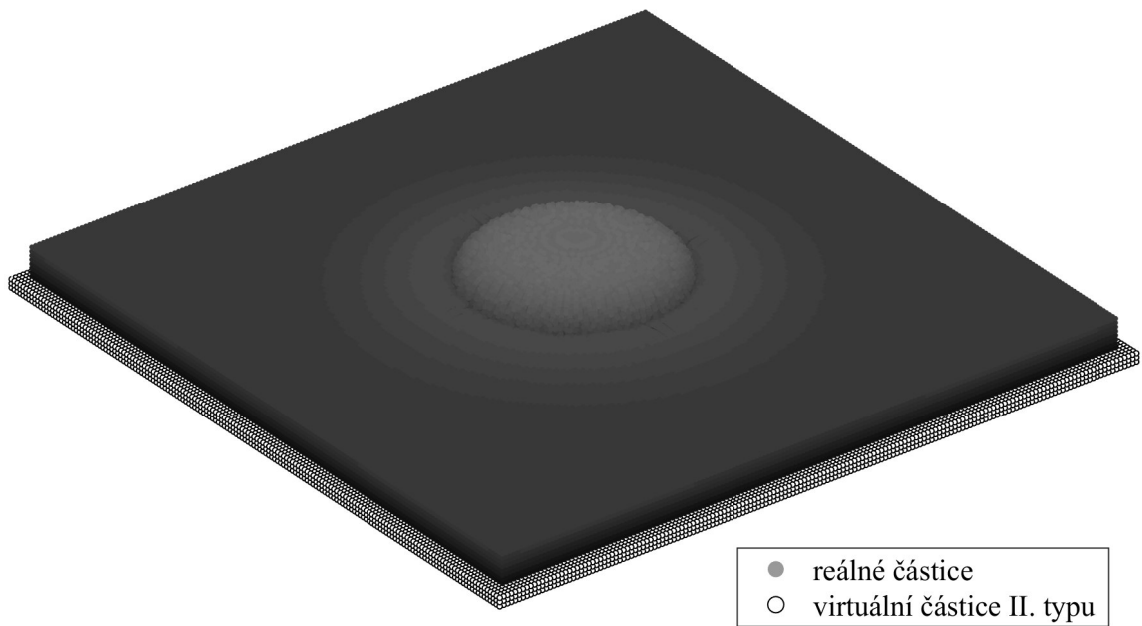
Obrázek 5.6: Dopad kapky na kapalinový film, $Re = 10$, $t = 0,2\text{ms}$.



Obrázek 5.7: Dopad kapky na kapalinový film, $Re = 10$, $t = 0,5\text{ms}$.



Obrázek 5.8: Dopad kapky na kapalinový film, $Re = 10$, $t = 1,0\text{ms}$.



Obrázek 5.9: Dopad kapky na kapalinový film, $Re = 10$, $t = 2,0\text{ms}$.

5.2 Dopad na pevný povrch

V této úloze je simulován dopad kapky na pevný povrch. Kapka dopadá danou rychlostí kolmo k povrchu.

Stejně jako v předchozí úloze jsou řešeny dva případy, jež se liší pouze dynamickou viskozitou kapaliny. V prvním případě je uvažovaná viskozita $\mu = 10^{-2}$ Pa.s, ve druhém $\mu = 10^{-1}$ Pa.s. Parametry kapky jsou ponechány stejné, tedy průměr kapky $D = 1$ mm, rychlost kapky $V = 1$ m.s⁻¹ a hustota kapaliny $\rho = 1000$ kg.m⁻³. Povrchové napětí není uvažováno.

První případ tak odpovídá $Re = 100$ a druhý $Re = 10$. Weberova a Ohnegorgeho čísla jsou z důvodu absence povrchového napětí nekonečná.

Kapka je totožná jako v předchozí úloze, tvoří ji tedy 17256 částic. Na počátku je kapka 0,05 mm nad středem pevného povrchu tvaru čtverce o straně délky 5 mm. Ten je tvořen třemi vrstvami virtuálních částic II. typu a jejich celkový počet tak je 76800 (160x160x3). Počáteční konfiguraci úlohy znázorňuje obrázek 5.10.

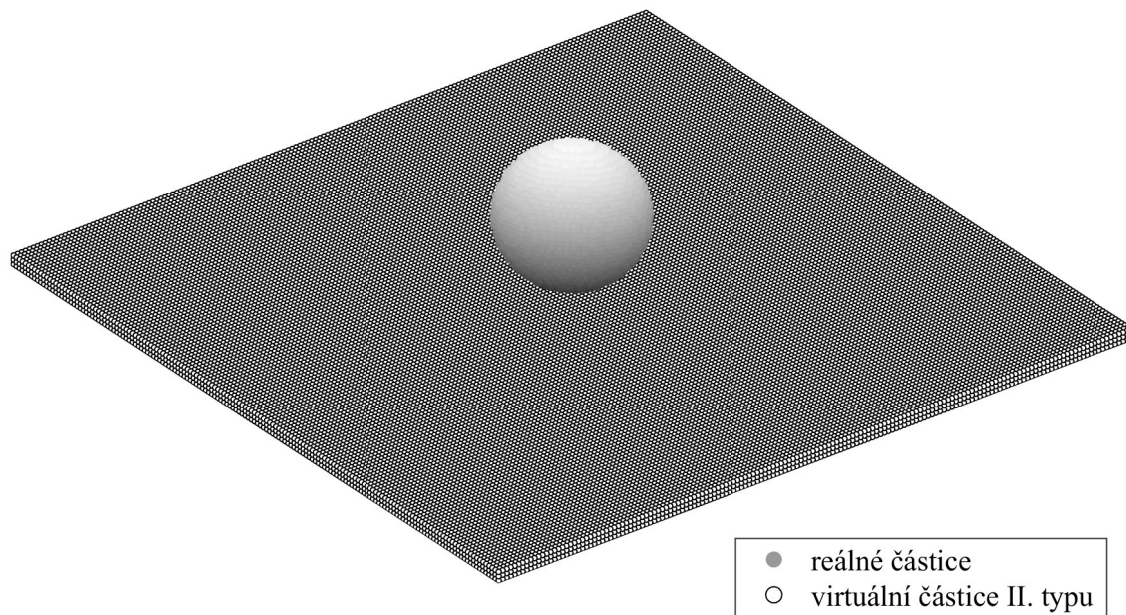
Ke stabilizaci řešení je užitá umělá viskozita s parametry $\alpha = 0,1$ a $\beta = 0$. Numerická rychlost zvuku je volena 10 m.s⁻¹. Tlak je počítán ze stavové rovnice (3.60) s parametry $B = 14000$ Pa, $\rho_0 = 1000$ kg.m⁻³, $\gamma = 7$ a $p_0 = 0$ Pa. Časový krok byl volen 5.10^{-7} s v souladu s doporučeními uvedenými v části 3.8.7. Vyhlazovací vzdálenost se v průběhu výpočtu nemění a odpovídá počáteční rozteči částic. Použita je kubická váhová funkce. Hustota je počítána podle vztahu (3.30) a bilance hybnosti podle vztahu (3.32).

Výsledky prvního případu jsou zaznamenány na obrázcích 5.11 až 5.14. Z místa kontaktu kapky a povrchu je vyvrhováno velké množství malých skupin částic. Kapka se postupně rozprostírá po povrchu a z vytvořeného filmu se oddělují další skupiny částic.

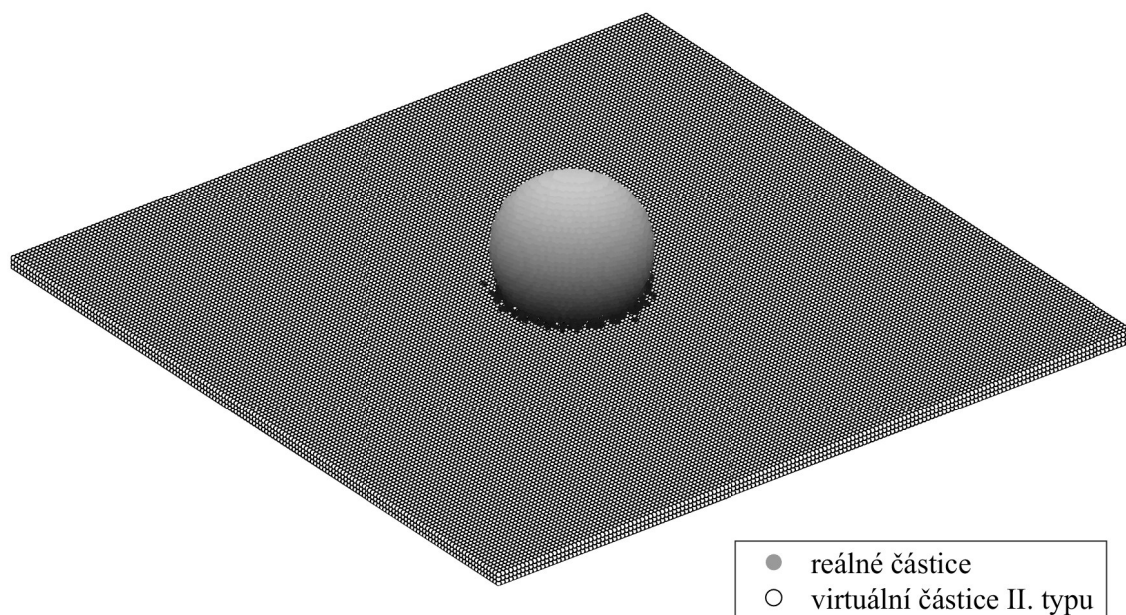
Tento případ se podobá případu okamžitého rozstříku, jak je uveden v [7] a v této práci na obrázku 2.2b. Podle experimentu k tomuto typu interakce dochází u kapek z kapalin s nízkým povrchovým napětím a použitý numerický model představuje limitní případ takové kapaliny.

Druhý případ zachycují obrázky 5.15 až 5.18. Po dopadu dochází k usazení na povrchu. Z kapky se v průběhu simulace neoddělují žádné částice.

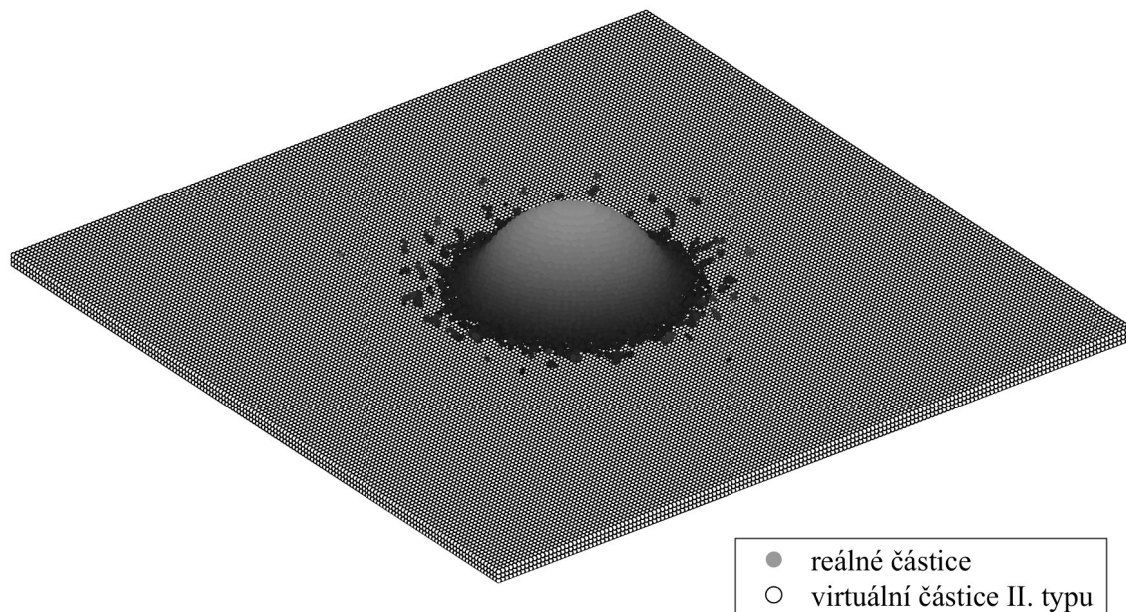
Podobně jako v případě dopadu na kapalinový film, rovněž v tomto případě se výsledek numerického výpočtu liší od experimentu. Při něm byl pozorován lem na okraji šířící se lamely [7]. Jeho existence je spojena s povrchovým napětím, proto takováto struktura nemohla simulací v použitém programu vzniknout. V experimentu docházelo k usazení kapky při dopadu malé kapky tvořené viskózní kapalinou malou rychlostí, tedy za nízkých Reynoldsových čísel. V tomto ohledu se simulace shoduje s experimentálními výsledky.



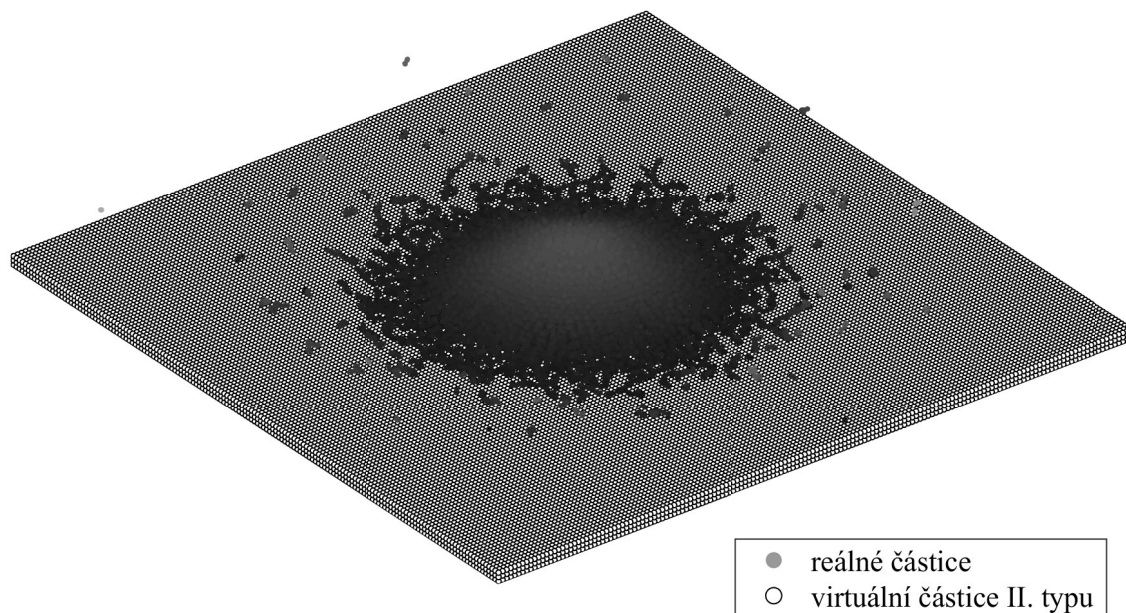
Obrázek 5.10: Počáteční konfigurace úlohy dopadu kapky na pevný povrch.



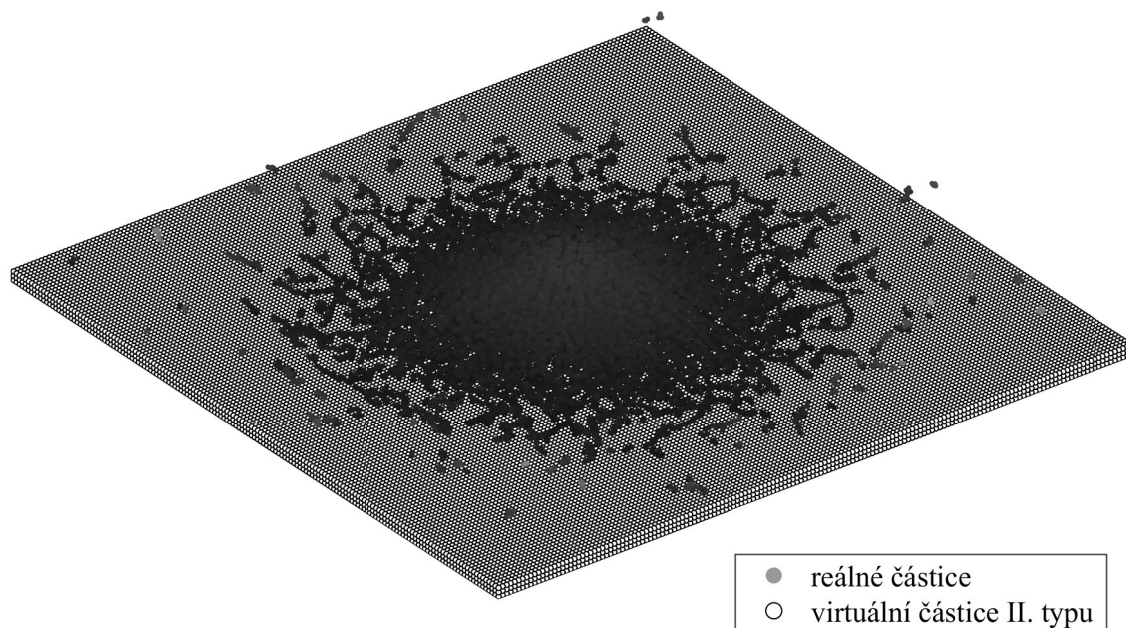
Obrázek 5.11: Dopad kapky na pevný povrch, $Re = 100$, $t = 0,2ms$.



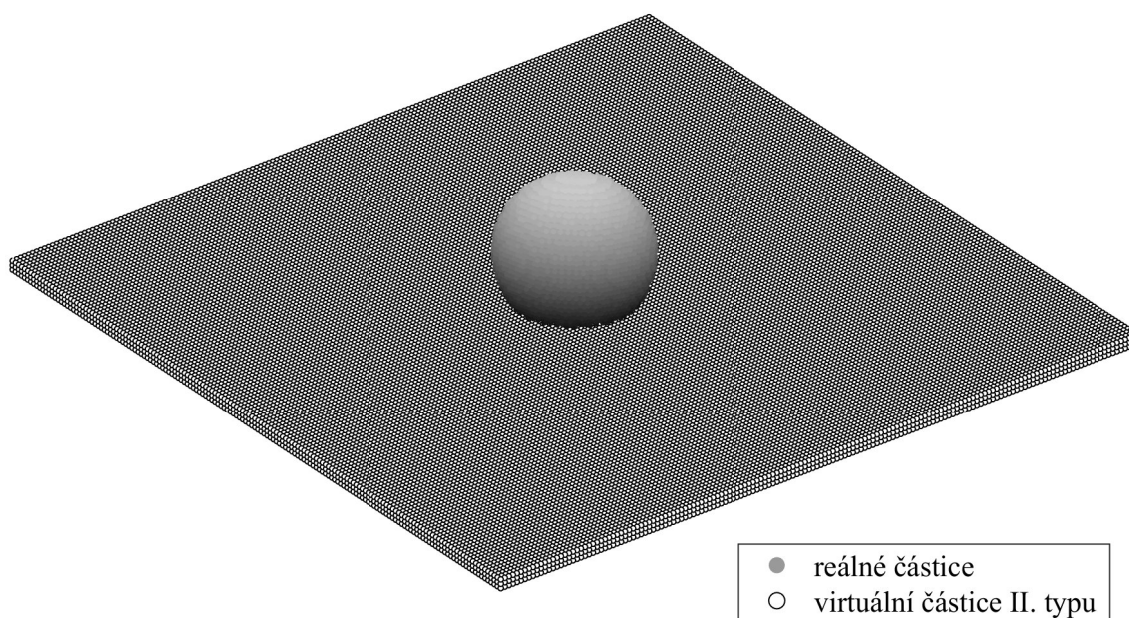
Obrázek 5.12: Dopad kapky na pevný povrch, $Re = 100$, $t = 0,5\text{ms}$.



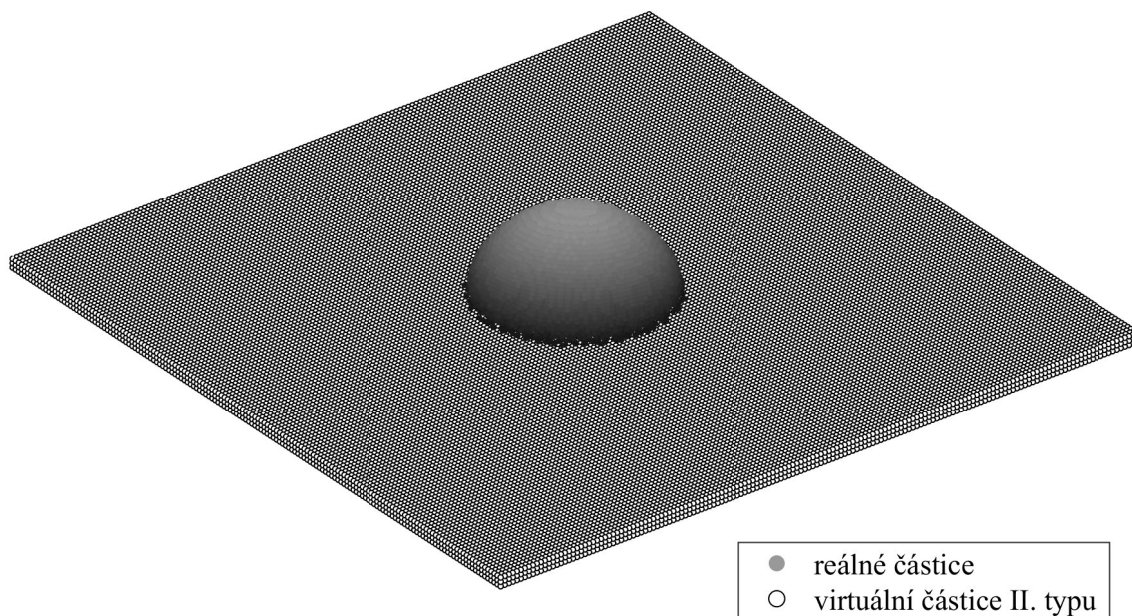
Obrázek 5.13: Dopad kapky na pevný povrch, $Re = 100$, $t = 1,0\text{ms}$.



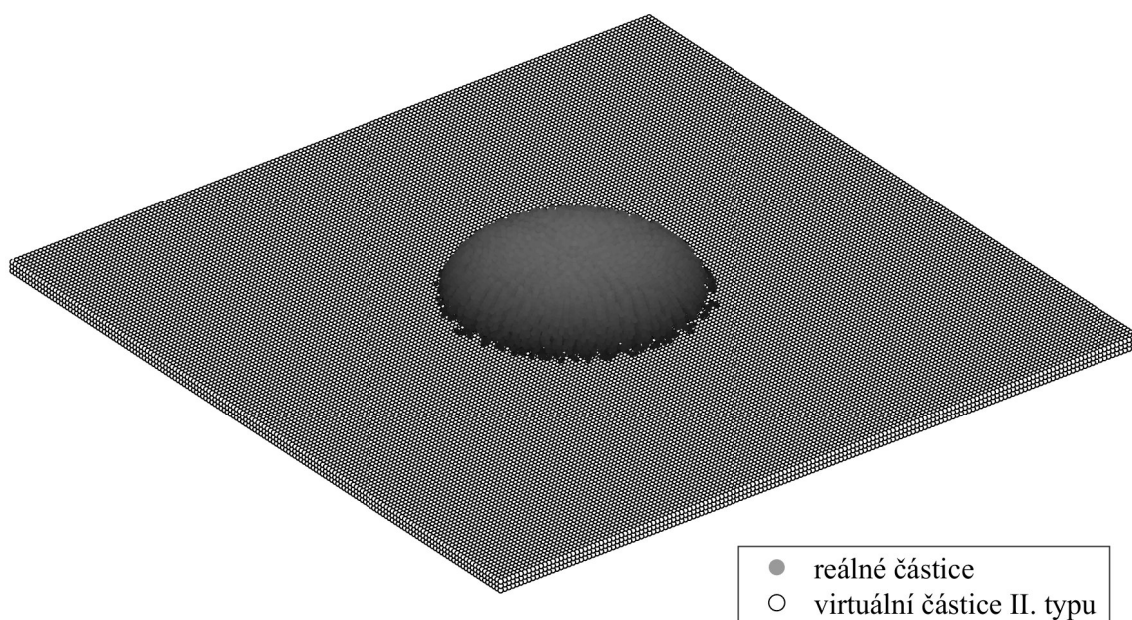
Obrázek 5.14: Dopad kapky na pevný povrch, $Re = 100$, $t = 1,5\text{ms}$.



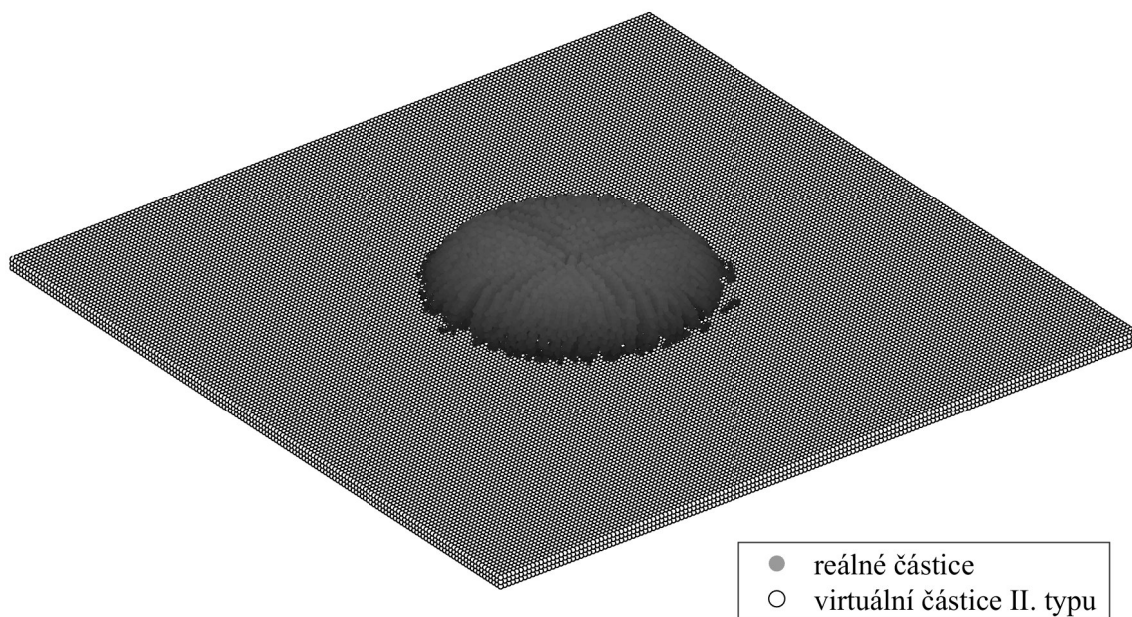
Obrázek 5.15: Dopad kapky na pevný povrch, $Re = 10$, $t = 0,2\text{ms}$.



Obrázek 5.16: Dopad kapky na pevný povrch, $Re = 10$, $t = 0,5\text{ms}$.



Obrázek 5.17: Dopad kapky na pevný povrch, $Re = 10$, $t = 1,0\text{ms}$.



Obrázek 5.18: Dopad kapky na pevný povrch, $Re = 10$, $t = 1,5\text{ms}$.

5.3 Hodnocení výsledků a programu

Byly definovány dvě úlohy interakce kapky. V první úloze dopadala kolmo na tenký kapalinový film, ve druhé na pevný povrch. V důsledku absence povrchového napětí není možné ovlivnit hodnotu Weberova čísla. Definice úlohy tak má pouze jeden volitelný bezrozměrný parametr, jímž je Reynoldsovo číslo. V každé úloze byly řešeny dva případy lišící se tak právě hodnotou Reynoldsova čísla.

V případech s vyšším Reynoldsovým číslem je dobrá shoda s experimentem. Obzvláště v počátečních fázích interakce, kdy jsou dominantní setrvačné síly. V pozdějších fázích, kdy získává na důležitosti povrchové napětí, se výsledky začínají lišit. Nedochozí k formování struktur ovlivněných povrchovým napětím, např. lemu na vrcholu koruny a drobných kapiček.

V případě s nižším Reynoldsovým číslem je shoda s experimentem nižší. V případě dopadu na kapalinový film může být příčinou to, že při experimentech, se kterými byly výsledky simulace srovnávány, dosahovala nejnižší Reynoldsova čísla řádu stovek. To je řádově větší hodnota než odpovídá simulaci. Numerický výpočet tak neodpovídal podmínkám experimentu a došlo ke kvalitativně odlišné interakci, v níž hrála dominantní úlohu vazkost.

V případě dopadu na pevný povrch není jasné, jakých hodnot Reynoldsových a Weberových čísel bylo při experimentech dosahováno. Shoda je v tom, že k rozprostření kapky dochází za nízkých hodnot Reynoldsových čísel. Tvar rozprostřené kapky se však liší, příčinou může být relativně nízké Weberovo číslo a s tím spojený větší vliv povrchového napětí.

K tomu, aby se numerická simulace přiblížila výsledkům experimentů, je zřejmě třeba zahrnout do výpočtového programu vliv povrchového napětí, případně drsnosti povrchu. To by bylo v budoucnu možné implementací některého z modelů uvedených v části 3.7. V případě dopadu na pevný povrch je třeba zahrnout i smáčivost povrchu kapalinou. V současném programu je uvažována pouze kapalná a pevná fáze. Plynná fáze je reprezentována prázdným prostorem bez částic. Další přiblížení realitě by tak mohlo být uvažování okolního plynu. To by ovšem vedlo k výraznému zvýšení počtu částic a tím i výpočetní náročnosti. Pro praktické výpočty je důležitá i efektivita užitých algoritmů. Relativně největší podíl na výpočetním čase zaujímá vyhledávání interagujících párů částic. Bez použití algoritmu linked-list by nebylo možné provést výpočty uvedené v poslední kapitole. Sestavený linked-list algoritmus je výrazně efektivnější než původní algoritmus každý s každým.

Závěr

Tato diplomová práce se zabývá možností užití metody Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) pro numerické simulace úloh mechaniky tekutin s volnou hladinou, konkrétně simulace interakcí kapek tekutiny. Přestože interakce kapek tekutiny jsou studovány již přinejmenším mnoho desetiletí, stále nejsou všechny jevy, jež tyto interakce provází, plně popsány. Důvodem je mimo jiné i to, že výsledky těchto interakcí ovlivňuje velké množství proměnných. I přes zavedení bezrozměrných parametrů, jež snižuje počet proměnných, je experimentální vyšetřování interakcí kapek často velmi obtížné. Proto na tomto poli hrají významnou roli rovněž numerické simulace, ve kterých je změna některých parametrů snadnější.

V mechanice tekutin jsou nejrozšířenější numerické metody založené na Eulerově popisu kontinua. V tomto popisu je třeba užít speciální metody pro detekci fázového rozhraní. V současnosti nejrozšířenější z těchto metod je metoda Volume of Fluid (VOF), existují ovšem i další. Simulace úloh v mechanice tekutin jsou většinou založené na řešení základních rovnic mechaniky tekutin. Odlišný přístup představuje metoda Lattice-Boltzmann, jež vychází z kinetické teorie plynů a je rovněž použitelná pro simulace úloh s volnou hladinou.

Existují však i numerické metody, které jsou založené na Lagrangeově popisu. Z těchto je v praxi nejpoužívanější metoda konečných prvků, která se však pro úlohy mechaniky tekutin nehodí. Důvodem je to, že s deformací tekutiny se deformuje i síť, což výpočet znesnadňuje. Vhodnější tak jsou metody nevyužívající výpočtové sítě. V takových metodách je kontinuum často diskretizováno pomocí částic, jež se pohybují v řešené oblasti a navzájem se ovlivňují. Výhodou těchto metod je, že fázové rozhraní je tvořeno přirozeně, na základě příslušnosti částic k určité fázi. Nevýhoda oproti metodám založeným na Eulerově popisu může nastat v případě řešení stacionárních úloh. Pro simulaci interakce kapek je tak tato skupina metod vhodná.

Metoda Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) je jedna z částicových metod založených na Lagrangeově popisu. Touto metodou lze diskretizovat parciální diferenciální rovnice v prostoru a výsledné obyčejné diferenciální rovnice dále řešit jejich integrací. V práci jsou uvedeny některé způsoby prostorové diskretizace v obecné formě. Tyto obecné postupy jsou následně aplikovány na základní rovnice mechaniky tekutin. Nedílnou součástí každé úlohy je definice okrajových podmínek. V metodě SPH existují různé způsoby jejich realizace a liší se svým dopadem na přesnost metody. Kromě vhodné diskretizace řešených rovnic je pro praktický výpočet třeba zajistit numerickou stabilitu. K tomu nejčastěji slouží umělá viskozita a středování rychlostí částic. Pro zaručení stability použitého integračního schématu je třeba vhodně volit časový krok. K tomu mohou sloužit vztahy rovněž uvedené v této práci.

Na základě popsané teorie byl sestaven výpočtový program pro řešení úloh mechaniky tekutin metodou SPH. Jeho správnost byla ověřována na několika jednoduchých úlohách. Byly ověřeny možnosti aplikace implementovaných stavových rovnic, způsobů diskretizace rovnic, okrajových podmínek a nastavení dalších parametrů ovlivňujících především stabilitu a efektivitu výpočtu. Shoda výsledků provedených výpočtů s výsledky uváděnými v literatuře potvrzuje možnost použití sestaveného programu pro simulace úloh mechaniky tekutin. Poslední ověřovací úloha navíc potvrdila i možnost aplikace programu na úlohy s volnou hladinou.

Na základě tohoto zjištění byly definovány úlohy interakce kapek tekutiny. Tyto úlohy byly definovány tak, aby bylo možné výsledky simulací porovnat s experimentálně pozorovanými interakcemi. Ve výpočtech není zahrnut vliv povrchového napětí. To znemožňuje vznik určitých struktur při inter-

akcích, jejichž existence je vyvolána právě povrchovým napětím.

Úloha dopadu kapky na tenký film je řešena pro dvě hodnoty Reynoldsova čísla. Pro vyšší Reynoldsovo číslo je simulace v poměrně dobré shodě s experimentem, obzvláště v počáteční fázi interakce. To je dáno tím, že v této fázi převládají setrvačné síly nad silami způsobenými povrchovým napětím. Později vznikají struktury s velkou křivostí povrchu, na něž má dominantní vliv povrchové napětí. Ty v simulaci bez povrchového napětí nemohou vzniknout. Druhá z uvažovaných hodnot Reynoldsova čísla je výrazně nižší, než jakých bylo dosahováno v experimentu. Vzniká tak kvalitativně odlišná interakce od jakékoli experimentálně pozorované. V simulaci se dominantním způsobem projeví vazkost, která pohyb kapaliny utlumí.

Dopad kapky na pevný povrch je opět řešen pro dvě hodnoty Reynoldsova čísla. Počáteční fázi dopadu s vyšším Reynoldsovým číslem dominují setrvačné síly, kdy je výpočet ve shodě s experimentem. Následně je probíhající interakce opět silně ovlivněna povrchovým napětím a navíc smáčivostí povrchu. Výsledky simulace se tak v pozdějších fázích opět liší. Při nižší hodnotě Reynoldsova čísla dojde k podobnému jevu jako při interakci s tenkým filmem. Dojde k velmi rychlému utlumení pohybu vlivem vazkosti.

V obou úlohách dochází alespoň k částečné shodě s experimenty pro vyšší Reynoldsova čísla. Experimentálních výsledků podobných těm ze simulací bylo dosaženo při vysokých hodnotách Weberova čísla, tedy při relativně malém vlivu povrchového napětí. Takový výsledek je v souladu s očekáváním.

Otázkou zůstává, zda lze experimentálně dosáhnout podobných výsledků, jaké byly získány simulací pro nízká Reynoldsova čísla. V experimentech, se kterými byly simulace srovnávány, pravděpodobně nebyly přítomny případy s vysokým Weberovým a zároveň nízkým Reynoldsovým číslem. Je možné, že výsledky právě takových experimentů by byly ve shodě s výsledky simulace.

Případů, kdy v experimentech dosahuje povrchové napětí velkého vlivu, tedy pro nízká Weberova čísla, nelze v simulaci užitím současného programu dosáhnout. V budoucnu by tento nedostatek mohla napravit implementace povrchového napětí. Možné způsoby provedení této modifikace programu jsou v práci uvedeny. Pro korektní simulaci úlohy dopadu kapky na pevný povrch je navíc nutné do výpočtu zavést přinejmenším smáčivost tohoto povrchu kapalinou, případně i jeho drsnost. Uvedenými doplněními programu by bylo s největší pravděpodobností možné přiblížit výsledky výpočtů experimentům. Možnost volit hodnoty dvou bezrozměrných parametrů namísto současného jednoho by vedla k rozšíření možností vzniku kvalitativně rozdílných interakcí v souladu s experimenty.

Kromě míry shody výsledků simulací s realitou je třeba věnovat pozornost i efektivitě výpočtu. Nejkritičtějším místem z tohoto pohledu je algoritmus pro vyhledávání interagujících částic. S narůstajícím počtem částic se důležitost efektivního způsobu vyhledávání interakcí zvyšuje. Algoritmus linked-list je výrazně efektivnější, než původní algoritmus každý s každým, bez jeho implementace by výpočet rozsáhlejších úloh nebyl možný.

Struktura programu dovoluje poměrně snadno přidávat další části, jež rozšíří možnosti numerických simulací. V budoucnu by tak mohl sloužit i při řešení dalších úloh, i značně odlišných od těch, jaké byly řešeny v této práci.

Literatura

- [1] BRDIČKA, M., L. SAMEK a B. SOPKO. *Mechanika kontinua*. Vyd. 3., rev. Praha: Academia, 2005. Česká matice technická (Academia). ISBN 80-200-1344-X.
- [2] BATCHELOR, G. K. *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2000. Cambridge mathematical library. ISBN 0-521-66396-2.
- [3] FITZPATRICK, R. *Fluid Mechanics* [online]. Austin (Texas): The University of Texas, 2016 [vid. 11.4.2017]. Dostupné z: <http://farside.ph.utexas.edu/teaching/336L/>
- [4] ŠIKALO, Š., C. TROPEA a E.N. GANIĆ. Dynamic wetting angle of a spreading droplet. *Experimental Thermal and Fluid Science* [online]. 2005, 29(7), 795-802 [vid. 15.7.2017]. DOI: 10.1016/j.expthermflusci.2005.03.006. ISSN 08941777. Dostupné z: databáze ScienceDirect
- [5] REIN, M. Phenomena of liquid drop impact on solid and liquid surfaces. *Fluid Dynamics Research* [online]. 1993, 12(2), 61-93 [vid. 20.12.2016]. DOI: 10.1016/0169-5983(93)90106-K. ISSN 0169-5983. Dostupné z: databáze ScienceDirect
- [6] RIOBOO, R., C. BAUTHIER, J. CONTI, M. VOUE a J. DE CONINCK. Experimental investigation of splash and crown formation during single drop impact on wetted surfaces. *Experiments in Fluids* [online]. 2003, 35(6), 648-652 [vid. 24.6.2017]. DOI: 10.1007/s00348-003-0719-5. ISSN 0723-4864. Dostupné z: databáze SpringerLink
- [7] RIOBOO, R., C. TROPEA, M. MARENGO, M. VOUE a J. DE CONINCK. Outcome from a drop impact on solid surfaces. *Atomization and Sprays* [online]. 2001, 11(2), 155-166 [vid. 24.6.2017]. DOI: 10.1615/AtomizSpr.v11.i2.40. ISSN 1044-5110. Dostupné z: databáze Begell House
- [8] YARIN, A.L. Drop Impact Dynamics: Splashing, Spreading, Receding, Bouncing *Annual Review of Fluid Mechanics* [online]. 2006, 38(1), 159-192 [vid. 22.6.2017]. DOI: 10.1146/annurev.fluid.38.050304.092144. ISSN 0066-4189. Dostupné z: databáze Annual Reviews
- [9] GOPALA, V. R. a B. VAN WACHEM. Volume of fluid methods for immiscible-fluid and free-surface flows. *Chemical Engineering Journal* [online]. 2008, 141(1-3), 204-221 [vid. 27.6.2017]. DOI: 10.1016/j.cej.2007.12.035. ISSN 13858947. Dostupné z: databáze ScienceDirect
- [10] CHAI, M., K. LUO, C. SHAO, S. CHEN a J. FAN. DNS analysis of incipient drop impact dynamics using an accurate level set method. *Chinese Journal of Chemical Engineering* [online]. 2017, 25(1), 1-10 [vid. 5.6.2017]. DOI: 10.1016/j.cjche.2016.05.018. ISSN 10049541. Dostupné z: databáze ScienceDirect
- [11] LIU, G. R. a M. B. LIU. *Smoothed particle hydrodynamics: a meshfree particle method*. New Jersey: World Scientific, 2003. ISBN 981-238-456-1.
- [12] KOSHIZUKA, S. a Y. OKA. Moving Particle Semi-Implicit Method for Fragmentation of Incompressible Fluid. *Nuclear Science and Engineering*. 1996, 123(3), 421-434. ISSN 0029-5639.

- [13] BAO, Y. a J. MESKAS. *Lattice Boltzmann Method for Fluid Simulations* [online]. New York (New York): Courant Institute of Mathematical Sciences, 2014 [vid. 4.6.2017]. Dostupné z: <http://www.cims.nyu.edu/billbao/report930.pdf>
- [14] LEE, T. a C-L. LIN. A stable discretization of the lattice Boltzmann equation for simulation of incompressible two-phase flows at high density ratio. *Journal of Computational Physics* [online]. 2005, 206(1), 16-47 [vid. 4.6.2017]. DOI: 10.1016/j.jcp.2004.12.001. ISSN 00219991. Dostupné z: databáze ScienceDirect
- [15] LIU, G. R. *Meshfree methods: moving beyond the finite element method*. 2nd ed. Boca Raton: CRC Press, 2010. ISBN 978-1-4200-8209-8.
- [16] LI, S. a W. K. LIU. *Meshfree particle methods*. New York: Springer, 2004. ISBN 3-540-22256-1.
- [17] MONAGHAN, J. J. Smoothed particle hydrodynamics. *Reports on Progress in Physics* [online]. 2005, 68(8), 1703-1759 [vid. 1.11.2016]. DOI: 10.1088/0034-4885/68/8/R01. ISSN 0034-4885. Dostupné z: databáze IOPscience
- [18] LIU M. B. a G. R. LIU. Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH): an Overview and Recent Developments. *Archives of Computational Methods in Engineering*. 2010, 17(1), 25-76, [vid. 22.11.2016]. DOI:10.1007/s11831-010-9040-7. ISSN 1134-3060. Dostupné z: databáze SpringerLink
- [19] MONAGHAN, J.J. Simulating Free Surface Flows with SPH. *Journal of Computational Physics* [online]. 1994, 110(2), 399-406 [vid. 29.12.2016]. DOI: 10.1006/jcph.1994.1034. ISSN 00219991. Dostupné z: databáze ScienceDirect
- [20] ESLAMIAN, A. a M. KHAYAT. Numerical studies to propose a ghost particle removed SPH (GR-SPH) method. *Applied Mathematical Modelling* [online]. 2017, 42, 71-99 [vid. 14.2.2017]. DOI: 10.1016/j.apm.2016.09.026. ISSN 0307904x. Dostupné z: databáze ScienceDirect
- [21] ADAMI, S., X.Y. HU a N.A. ADAMS. A generalized wall boundary condition for smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Computational Physics* [online]. 2012, 231(21), 7057-7075 [vid. 14.2.2017]. DOI: 10.1016/j.jcp.2012.05.005. ISSN 00219991. Dostupné z: databáze ScienceDirect
- [22] MORRIS, J. P., P. J. FOX a Y. ZHU. Modeling Low Reynolds Number Incompressible Flows Using SPH. *Journal of Computational Physics* [online]. 1997, 136(1), 214-226 [vid. 29.12.2016]. DOI: 10.1006/jcph.1997.5776. ISSN 00219991. Dostupné z: databáze ScienceDirect
- [23] XU, X., J. OUYANG, T. JIANG a Q. LI. Numerical analysis of the impact of two droplets with a liquid film using an incompressible SPH method. *Journal of Engineering Mathematics* [online]. 2014, 85(1), 35-53 [vid. 14.7.2017]. DOI: 10.1007/s10665-013-9634-9. ISSN 0022-0833. Dostupné z: databáze SpringerLink
- [24] LAFAURIE, B., C. NARDONE, R. SCARDOVELLI, S. ZALESKI a G. ZANETTI. Modeling Merging and Fragmentation in Multiphase Flows with SURFER. *Journal of Computational Physics* [online]. 1994, 113(1), 134-147 [vid. 14.7.2017]. DOI: 10.1006/jcph.1994.1123. ISSN 00219991. Dostupné z: databáze ScienceDirect
- [25] TARTAKOVSKY, A. a P. MEAKIN. Modeling of surface tension and contact angles with smoothed particle hydrodynamics. *Physical Review E* [online]. 2005, 72(2), - [vid. 14.7.2017]. DOI: 10.1103/PhysRevE.72.026301. ISSN 1539-3755. Dostupné z: databáze APS
- [26] YANG, X., L. DAI a S. KONG. Simulation of liquid drop impact on dry and wet surfaces using SPH method. *Proceedings of the Combustion Institute* [online]. 2016, , - [vid. 30.12.2016]. DOI: 10.1016/j.proci.2016.07.031. ISSN 15407489. Dostupné z: databáze ScienceDirect

[27] MONAGHAN, J. J. Smoothed Particle Hydrodynamics. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* [online]. 1992, 30(1), 543-574 [vid. 25.12.2016]. DOI: 10.1146/annurev.aa.30.090192.002551. ISSN 0066-4146. Dostupné z: databáze Web of Science