VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ
BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ
ÚSTAV MATEMATIKY

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING
INSTITUTE OF MATHEMATICS

BEZSÍŤOVÉ MODELOVÁNÍ PROUDĚNÍ TEKUTIN

MESHLESS MODELLING OF FLUID FLOW

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE
BACHELOR'S THESIS

AUTOR PRÁCE — ZDEŇKA PROCHAZKOVÁ
AUTHOR

VEDOUCÍ PRÁCE — doc. RNDr. LIBOR ČERMÁK, CSc.
SUPERVISOR

BRNO 2012

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství

Ústav matematiky
Akademický rok: 2011/2012

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

student(ka): Zdeňka Prochazková

který/která studuje v **bakalářském studijním programu**

obor: **Matematické inženýrství (3901R021)**

Ředitel ústavu Vám v souladu se zákonem č.111/1998 o vysokých školách a se Studijním a zkušebním řádem VUT v Brně určuje následující téma bakalářské práce:

Bezsíťové modelování proudění tekutin

v anglickém jazyce:

Meshless modelling of fluid flow

Stručná charakteristika problematiky úkolu:

Studium bezsíťových metod, zejména tzv. SPH metody (smoothed particle hydrodynamic). Aplikace SPH metody na řešení jednodimenzionálních Eulerových rovnic. Vyřešit několik modelových příkladů.

Cíle bakalářské práce:

Cílem práce je
a) seznámit se s bezsíťovými metodami řešení diferenciálních rovnic, zejména s tzv. SPH metodou.
b) Pomocí freeware programů "SPH Source Code" vyřešit několik Riemannových úloh pro jednodimenzionální Eulerovy rovnice.

Seznam odborné literatury:

1) G.R.Liu: Mesh Free Methods: Moving beyond the Finite Element Method. CRC Press, Boca Raton, 2003.

2) G.R.Liu, M.B.Liu: Smoothed Particle Hydrodynamics: a meshfree particle method. World Scientific Publishing, New Jersey, 2003.

3) SPH Source Code, SPH program připojený ke knize "Smoothed Particle Hydrodynamics: a meshfree particle method" autorů Liu & Liu, [online zdroj]. ACES: Centre for Advanced Computations in Engineering Science, National University of Singapore, [cit. 2011-04-15], dostupný na WWW : <http://www.nus.edu.sg/ACES/software/developments.htm>

Vedoucí bakalářské práce: doc. RNDr. Libor Čermák, CSc.

Termín odevzdání bakalářské práce je stanoven časovým plánem akademického roku 2011/2012.

V Brně, dne 26.10.2010

L.S.

prof. RNDr. Josef Šlapal, CSc. Ředitel ústavu	prof. RNDr. Miroslav Doupovec, CSc., dr. h. c. Děkan fakulty

Abstrakt

Práce pojednává o bezsíťové metodě Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH). V práci jsou odvozené základní rovnice pro řešení úloh proudění - rovnice kontinuity, pohybová rovnice a rovnice energie. V textu jsou uvedeny základní principy metody, volba vyhlazovací funkce, prostorová diskretizace a vhodná metoda pro časovou integraci. Jako příklad použití je v práci namodelovaná úloha - rázová trubice. Na této úloze v jedné dimenzi můžeme porovnat řešení metodou SPH s přesným řešením.

Klíčová slova: Smoothed particle hydrodynamics, jádrová aproximace, vyhlazovací funkce, rázová trubice, metoda leapfrog, umělá viskozita

Abstract

The thesis focuses on the Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) meshfree method. In the thesis, basic equations needed for solving fluid flow problems are derived - continuity equation, momentum equation and energy equation. The text presents the basic principles of the method, selection of a smoothing function, spacial discretization and a suitable time integration method. As an example of usage, the thesis models the shock tube problem. On this problem, we can compare the solution using the SPH method with the accurate solution.

Keywords: Smoothed particle hydrodynamics, kernel approximation, smoothing function, shock tube, leapfrog method, artificial viscosity

PROCHAZKOVÁ, Z. Bezsíťové modelování proudění tekutin. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2012. 26 s. Vedoucí bakalářské práce doc. RNDr. Libor Čermák, CSc.

Prohlašuji, že jsem bakalářskou práci s názvem "Bezsíťové modelování proudění tekutin" vypracovala samostatně pod vedením doc. RNDr. Libora Čermáka, CSc. s použitím literatury uvedené na konci mé bakalářské práce v seznamu použité literatury.

V Brně 24.5.2012 Zdeňka Prochazková

Ráda bych poděkovala svému vedoucímu doc. RNDr. Liboru Čermákovi, CSc. za podporu a trpělivost při vedení bakalářské práce a za čas, který mi věnoval. Dále bych chtěla poděkovat rodičům za morální i finanční podporu během celého studia.

Obsah

1. Úvod

Široce užívané síťové metody mohou mít při řešení některých úloh jisté problémy a omezení. Nejdříve musíme vygenerovat síť, což často bývá nejnáročnější část celého řešení vzhledem k času a počtu operací. Při eulerovském přístupu, kdy je síť spojena s prostorem (například řešení metodou konečných diferencí), může být obtížné sestrojit pravidelnou síť pro nepravidelné těleso nebo stanovit přesnou polohu nehomogenit nebo zdeformované hranice vně sítě. Při lagrangeovském přístupu, kdy je síť spojena s tělesem (například řešení metodou konečných prvků), je zase největším problémem řešení úloh, kdy dochází k velkým deformacím. Tato omezení zvlášť vynikají, když chceme řešit úlohy hydrodynamiky nebo modelovat exploze, kde se vyskytují jak nehomogenity materiálu, tak velké deformace nebo odtržení části materiálu. Pro takovéto úlohy nejsou síťové metody vhodné a je výhodnější použít některou z metod bezsíťových.

Bezsíťové metody byly vyvinuty právě pro řešení úloh, kde je použití síťových metod obtížné. Je to třeba analýza velkých deformací pevných těles, kmitání tenkých vrstev, simulace explozí a další.

Při řešení úloh je také možné kombinovat různé bezsíťové metody nebo některou bezsíťovou metodu se síťovou.

Bezsíťové metody se vyvíjejí přibližně od 70. let minulého století a jednou z prvních byla právě metoda SPH (Smoothed particle hydrodynamics), kterou se budu ve své bakalářské práci zabývat.

2. Shock tube problem - Modelová úloha

Rázová trubice (shock tube) je uzavřená dlouhá trubice naplněná plynem a rozdělená přepážkou. V obou oddělených částech je plyn v ustáleném stavu, ale s různou hustotou a tlakem. Po odstranění přepážky sledujeme postup rázové vlny, počítáme průběh změny hustoty, tlaku, vnitřní energie a rychlosti v trubici.

Pro řešení úlohy použijeme základní principy zachování, a to zákon zachování hmotnosti, zákon zachování energie a zákon zachování hybnosti.

2.1. Formulace Navier-Stokesových rovnic

V následujících výpočtech budeme používat tzv. materiálovou derivaci

$$\frac{Da}{Dt} = \frac{\partial a}{\partial t} + \frac{\partial a}{\partial x} v_x + \frac{\partial a}{\partial y} v_y + \frac{\partial a}{\partial z} v_z. \tag{1}$$

Uvažujme neustálené proudění obecně stlačitelné kapaliny a v něm kontrolní objem V o povrchu S. V lagrangeovském popisu se objem pohybuje s kapalinou. Hmotnost tohoto objemu je konstantní, ale při proudění se může měnit objem a povrch. Celková změna objemu je

$$\Delta V = \int_S v \Delta t \cdot n \, \mathrm{d}S, \tag{2}$$

kde n je vektor vnější normály plochy S. Po úpravě a použití Gauss-Ostrogradského věty [1] máme

$$\frac{\Delta V}{\Delta t} = \int_V (\nabla \cdot v)\,\mathrm{d}V \tag{3}$$

a pro infinitezimální objem δV máme rovnici

$$\frac{\Delta(\delta V)}{\Delta t} = (\nabla \cdot v)\int_V \mathrm{d}(\delta V) = (\nabla \cdot v)(\delta V). \tag{4}$$

Pro derivaci dostáváme

$$\frac{D(\delta V)}{Dt} = (\nabla \cdot v)\delta V \tag{5}$$

a odtud

$$(\nabla \cdot v) = \frac{1}{\delta V}\frac{D(\delta V)}{Dt}. \tag{6}$$

2.1.1. Rovnice kontinuity

Rovnice kontinuity vychází ze zákona zachování hmotnosti, tzn. že pro kontrolní objem o hmotnosti $\delta m = \rho\delta V$ platí

$$\frac{D(\delta m)}{Dt} = \frac{D(\rho\delta V)}{Dt} = \delta V\frac{D\rho}{Dt} + \rho\frac{D(\delta V)}{Dt} = 0 \tag{7}$$

a po dosazení (5) do (7) dostaneme

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho(\nabla \cdot v). \tag{8}$$

2.1.2. Zákon zachování hybnosti

Nyní vyjádříme výslednici sil na objem δV. Působí zde síla od tlaku p a objemová síla vztažená na jednotku hmotnosti $F = (F_x, F_y, F_z)$. Když budeme uvažovat obecně viskózní kapalinu, budou zde vystupovat navíc třecí síly od viskozity $\tau_{ij}\,\mathrm{d}S$, kde τ_{ij} je složka tenzoru napětí, která působí ve směru j na rovinu kolmou k ose i. Pro osu x máme výslednici sil

$$\begin{aligned}
&[p - (p + \frac{\partial p}{\partial x}\,\mathrm{d}x)]\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z \\
+&[(\tau_{xx} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x}\,\mathrm{d}x) - \tau_{xx}]\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z \\
+&[(\tau_{yx} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y}\,\mathrm{d}y) - \tau_{yx}]\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}z \\
+&[(\tau_{zx} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z}\,\mathrm{d}z) - \tau_{zx}]\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y \\
&+F_x\rho\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z.
\end{aligned} \tag{9}$$

[1] Gauss-Ostrogradského věta: Tok vektoru A uzavřenou plochou S je roven integrálu z divergence vektoru A, $\int_S n \cdot A\,\mathrm{d}S = \int_V \nabla \cdot A\,\mathrm{d}V$, kde S je hranice kompaktní množiny V, která je orientována vektorem vnější normály n.

Pak můžeme druhý Newtonův zákon napsat jako

$$\begin{aligned} m\frac{\partial v_x}{\partial t} = \frac{\partial v_x}{\partial t}\rho \, \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y \, \mathrm{d}z = \\ -\frac{\partial p}{\partial x} \, \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y \, \mathrm{d}z \\ +\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} \, \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y \, \mathrm{d}z + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \, \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y \, \mathrm{d}z + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \, \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y \, \mathrm{d}z \\ +F_x\rho \, \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y \, \mathrm{d}z, \end{aligned} \tag{10}$$

kde $m\frac{\partial v_x}{\partial t}$ je setrvačná síla působící v ose x. Po vydělení objemem $\delta V = \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y \, \mathrm{d}z$ dostáváme

$$\rho\frac{\partial v_x}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho F_x \tag{11}$$

a podobně pro osy y a z

$$\rho\frac{\partial v_y}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + \rho F_y \tag{12}$$

$$\rho\frac{\partial v_z}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + \rho F_z. \tag{13}$$

2.1.3. Rovnice energie

Definice celkové vnitřní energie e je

$$e = \rho(u + \frac{1}{2}\left|v\right|^2), \tag{14}$$

kde u je měrná vnitřní energie, v je rychlost částic a $|v| = \left(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2\right)^{1/2}$. Rovnice energie vychází z prvního zákona termodynamiky, odvodí se obdobným způsobem jako předchozí rovnice. Obdržíme

$$\begin{aligned} \rho\frac{De}{Dt} = -p\left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z}\right) \\ +\tau_{xx}\frac{\partial v_x}{\partial x} + \tau_{yx}\frac{\partial v_x}{\partial y} + \tau_{zx}\frac{\partial v_x}{\partial z} \\ +\tau_{xy}\frac{\partial v_y}{\partial x} + \tau_{yy}\frac{\partial v_y}{\partial y} + \tau_{zy}\frac{\partial v_y}{\partial z} \\ +\tau_{xz}\frac{\partial v_z}{\partial x} + \tau_{yz}\frac{\partial v_z}{\partial y} + \tau_{zz}\frac{\partial v_z}{\partial z}. \end{aligned} \tag{15}$$

2.2. Tvar Navier-Stokesových rovnic

Pro naši modelovou úlohu přepíšeme rovnice pro proudění neviskózní kapaliny v jedné dimenzi. Potom máme rovnici kontinuity ve tvaru

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho\frac{\partial v}{\partial x}, \tag{16}$$

pohybovou rovnici ve tvaru

$$\frac{Dv}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x} \tag{17}$$

a rovnici energie ve tvaru

$$\frac{De}{Dt} = -\frac{p}{\rho}\frac{\partial v}{\partial x}. \tag{18}$$

Abychom mohli úlohu řešit, potřebujeme ještě stavovou rovnici

$$p = (\gamma - 1)\rho e, \tag{19}$$

kde γ je Poissonova konstana. Pro vzduch je $\gamma = 1{,}4$.

3. Smoothed Particle Hydrodynamic

Při řešení metodou SPH potřebujeme diskretizovat oblast, kde jsou tyto rovnice definované. Oblast budeme reprezentovat soustavou částic, které nejsou spojeny sítí. Dále potřebujeme metodu pro integrální reprezentaci, která aproximuje hodnoty funkcí a jejich derivací v nějakém bodě. Protože oblast reprezentují diskrétní částice, použijeme jádrovou aproximaci (*kernel aproximation*) a integrál nahradíme sumou přes všechny částice v jistém h-okolí. Aproximaci použijeme na parciální diferenciální rovnice(16), (17), (18) a dostaneme soustavu obyčejných diferenciálních rovnic (SODR) závislých na čase. Prostorovou aproximaci provádíme opakovaně v každém časovém kroku.

3.1. Integrální aproximace

3.1.1. Odvození a vlastnosti vyhlazovací funkce

Při integrální reprezentaci budeme vycházet z identity

$$f(x) = \int_\Omega f(x')\delta(x - x')\,\mathrm{d}x', \tag{20}$$

kde $f(x)$ je aproximovaná funkce a $\delta(x)$ je Diracova δ-funkce, tj.

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty, & x = 0 \\ 0, & x \neq 0 \end{cases}$$

s vlastností

$$\int_{R^d} \delta(x)\,\mathrm{d}x = 1,$$

kde d je dimenze prostoru. Diracovu funkci si lze v jedné dimenzi představit jako limitu posloupností funkcí

$$f_k = \begin{cases} \frac{1}{2}k, & |x| \leq \frac{1}{k} \\ 0, & |x| > \frac{1}{k} \end{cases}$$

Vyjádření pomocí integrálu (20) je přesné, pokud je funkce $f(x)$ definovaná a spojitá na oblasti Ω.

Diracovu funkci nahradíme jádrovou vyhlazovací funkcí $W(x - x', h)$ a dostaneme aproximaci funkce $f(x)$ ve tvaru

$$< f(x) >= \int_{\Omega} f(x')W(x - x', h)\,\mathrm{d}x', \tag{21}$$

kde h je vyhlazovací délka. Ta definuje oblast Ω_x, kde je hodnota funkce $W(x - x', h)$ nenulová, takže pouze hodnoty funkce $f(x)$ z této oblasti mají vliv na aproximaci $< f(x) >$ v bodu x.

Pro aproximaci první derivace funkce $f(x)$ platí

$$< \nabla f(x) >= \int_{\Omega_x} [\nabla f(x')]\, W(x - x', h)\,\mathrm{d}x'. \tag{22}$$

Užijeme identitu

$$[\nabla f(x')]\, W(x - x', h) = \nabla_{x'} [f(x')W(x - x', h)] - f(x')\nabla_{x'} W(x - x', h), \tag{23}$$

kde $\nabla_{x'}$ je operátor divergence vzhledem k proměnné x', tj.

$$< \nabla_{x'} >= \left(\frac{\partial}{\partial x'_1}, \ldots, \frac{\partial}{\partial x'_d} \right)^T.$$

Po dosazení do (22) a užitím Gaussovy-Ostrogradského věty na první člen dostaneme

$$< \nabla f(x) >= \int_{\partial\Omega_x} f(x')W(x - x', h) n\,\mathrm{d}S - \int_{\Omega_x} f(x')\nabla_{x'} W(x - x', h)\,\mathrm{d}x', \tag{24}$$

kde n je jednotkový vektor vnější normály oblasti Ω_x.
Protože na hranici $\partial\Omega_x$ je $W(x - x', h) = 0$, dostáváme pro aproximaci derivace

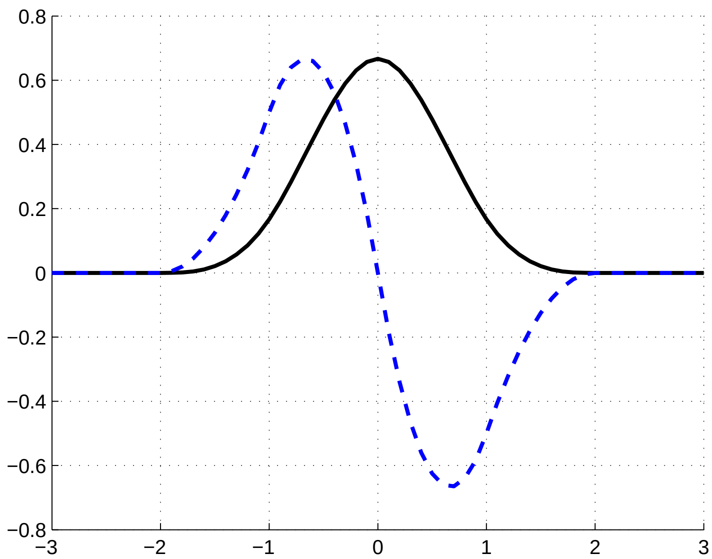
$$< \nabla f(x) >= -\int_{\Omega_x} f(x')\nabla W(x - x', h)\,\mathrm{d}x'. \tag{25}$$

Jádrová vyhlazovací funkce má obvykle následující vlastnosti:

1. je normalizovaná, $\int_\Omega W(x-x',h)\,\mathrm{d}x' = 1$,
2. konverguje k δ-funkci, tj. $\lim_{h\to 0} W(x-x',h) = \delta(x-x')$,
3. má kompaktní nosič, tj. $W(x-x',h) = 0$ pro $|x-x'| \geq \kappa h$, kde κ je měřítko, které závisí na W a na x (určuje oblast $\Omega_x = \{x' : |x-x'| \leq \kappa h\}$),
4. je pozitivní, $W(x-x',h) \geq 0$ pro $\forall x' \in \Omega_x$,
5. je monotonní, $W(x-x',h)$ je klesající vzhledem k $|x-x'|$ - s rostoucí hodnotou $|x-x'|$ klesá $W(|x-x'|,h)$,
6. je symetrická, $W(z_1,h) = W(z_2,h)$ pro $|z_1| = |z_2|$,
7. je dostatečně hladká.

3.1.2. Kubický splajn

Za vyhlazovací funkci lze použít libovolnou funkci, která splňuje uvedené podmínky. Na její volbě ale závisí přesnost řešení.
Při výpočtech jsme použili kubický splajn. Další je možné nalézt např. v [1].



Obrázek 1: Kubický splajn s první derivací. Kubický splajn je vykreslený plnou čarou, derivace čárkovaně. $\kappa = 2$

Od vzniku SPH je vyhlazovací funkce ve tvaru kubické křivky nejužívanější. Pro úlohy v jedné dimenzi se používá ve tvaru

$$W(x-x',h) = \hat{W}(R,h) = \begin{cases} \frac{1}{h}(\frac{2}{3} - R^2 + \frac{1}{2}R^3), & 0 \leq |R| < 1, \\ \frac{1}{6}\frac{1}{h}(2-R)^3, & 1 \leq |R| < 2, \\ 0, & |R| \geq 2 \end{cases} \tag{26}$$

kde R je relativní vzdálenost

$$R = \frac{|x-x'|}{h} \tag{27}$$

Parametr κ určující oblast Ω_x je roven dvěma.

3.1.3. Vyhlazovací délka

Ve vyhlazovací funkci $W(x-x',h)$ hraje velkou roli vyhlazovací délka h. Při volbě příliš malé délky h nemáme v oblasti vlivu dostatečný počet částic, které na částici působí, čímž se snižuje přesnost výpočtu. Při volbě příliš velké délky h naopak počítáme s velkým množstvím částic a vyhlazovací funkce smaže detaily. Podle [1] by se měl počet částic v h-okolí pohybovat okolo 5, 21, resp. 57 pro úlohu v R^1, R^2, resp. R^3. V úlohách proudění tekutin, jimž se budeme věnovat, se setkáme se stlačováním nebo rozpínáním tekutiny vlivem okolních sil. Při tom se ale mění počet částic v h-okolí. Aby byl počet částic v h-okolí v čase přibližně konstantní, je potřeba měnit vyhlazovací délku h. To lze provádět různými způsoby. V SPH se užívá

$$\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{N}\frac{h}{\rho}\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t}, \tag{28}$$

kde N je dimenze prostoru. Při proměnné vyhlazovací délce může nastat problém, kdy vyhlazovací délka h_i částice i bude menší než vyhlazovací délka h_j částice j a po vyhlazení bude částice i působit na částici j, ale ne obráceně, což je v rozporu s třetím Newtonovým zákonem. Tomu předejdeme, jestliže zavedeme symetrickou vyhlazovací délku, například pomocí aritmetického průměru vyhlazovacích délek, tj. $h_{ij} = (h_i + h_j)/2$, nebo maxima $h_{ij} = \max\ \{h_i, h_j\}$.

3.2. Částicová aproximace

Pokud oblast reprezentujeme konečným počtem částic, nahradíme integrál v rovnici (21) sumou a infinitezimální objem $\mathrm{d}x'$ konečným objemem $\Delta V_j = m_j/\rho_j$, kde m_j je hmotnost a ρ_j je hustota částice j.Když označíme $W_{ij} = W(x_i - x_j, h)$, dostáváme jádrovou aproximaci funkce

$$< f(x_i) >= \sum_{j=1}^{N_i} \frac{m_j}{\rho_j} f(x_j) W_{ij}, \tag{29}$$

kde sumace probíhá přes všechny částice v oblasti Ω_x, jejich počet je N_i. Pro derivaci funkce dostaneme

$$< \nabla f(x_i) >= -\sum_{j=1}^{N_i} \frac{m_j}{\rho_j} f(x_j) \nabla_{x'} W_{ij}. \tag{30}$$

Pro aproximaci hustoty podle (29), tj. když $f = \rho$, dostaneme

$$\rho_i = \sum_{j=1}^{N_i} \frac{m_j}{\rho_j} \rho_j W_{ij} = \sum_{j=1}^{N_i} m_j W_{ij}. \tag{31}$$

Tedy místo $< \rho(x_i) >$ píšeme ρ_i a rovněž místo $\rho(x_j)$ píšeme ρ_j. Pro aproximaci rychlosti rychlosti a energie uvedeme jen výsledné vztahy. Podrobnosti lze najít v [1]. Pro aproximaci rychlosti dostaneme

$$\frac{Dv_i}{Dt} = -\sum_{j=1}^{N_i} m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} + \Pi_{ij} \right) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i}, \tag{32}$$

kde Π_{ij} je umělá viskozita popsaná v kapitole 3.4.1.

Pro aproxiamci energie máme

$$\frac{De_i}{Dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N_i} m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} \right) v_{ij} \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i}. \tag{33}$$

Pro kubický splajn a úlohu v jedné dimenzi přitom je

$$\frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i} = \frac{1}{h_{ij}^2} \operatorname{sign}(x_i - x_j) \hat{W}'(R). \tag{34}$$

3.3. Integrace v čase

Pro integraci v čase použijeme tzv. leapfrog metodu. Tato metoda vyhodnocuje polohu x_i a zrychlení a_i částice v čase t_i, ale rychlost částice $v_{i+1/2}$ vyhodnocuje v čase $t_i + 1/2\Delta t$, takže rychlost "přeskakuje"polohu a zrychlení, odtud zřejmě vznikl název metody. Délka kroku je Δt. Při řešení diferenciálních rovnic

$$\dot{v}(t) = a(t) \tag{35}$$

$$\dot{x}(t) = v(t) \tag{36}$$

s počátečními podmínkami $x(0) = x_0, v(0) = v_0$ vypočítáme rychlost v polovičním kroku

$$v_{1/2} = v_0 + \frac{1}{2} a(t_i) \Delta t \tag{37}$$

a dále postupujeme podle algoritmu

$$\begin{aligned} x_i &= x_{i-1} + v_{i-1/2} \Delta t \\ v_{i+1/2} &= v_{i-1/2} + a(t_i) \Delta t \end{aligned} \tag{38}$$

až do požadovaného času t.

Leapfrog metoda je explicitní metoda druhého řádu.

Touto metodou řešíme rovnice (32) a (33).

3.4. Veličiny SPH

Pro řešení problémů hydrodynamiky někdy dochází k oscilacím numerického řešení. Byly proto vyvinuto několik nefyzikálních veličin, které tomuto mají zabránit. Jsou to například umělé teplo a umělá stlačitelnost. V modelové úloze budeme používat jen umělou viskozitu.

3.4.1. Umělá viskozita

Umělá viskozita nahrazuje fyzikální veličinu disipace energie, přeměnu kinetické energie na teplo. V minulosti se umělá viskozita vyvinula pro jiné numerické metody. Používá se ke stejným účelům například i při řešení problému metodou konečných objemů nebo metodou konečných prvků. V těchto metodách se používají dva typy umělé viskozity. Robert D. Richtmyer a John von Neumann vyvinuli tvar, ve kterém se vyskytuje pouze první mocnina gradientu rychlosti, druhý typ obsahuje druhou mocninu. V SPH se běžně používá umělá viskozita, kterou vyvinuli Monaghan a Gingold. Ta nejenže nahrazuje disipaci energie, ale současně zabraňuje vzájemnému pronikání částic. Má tvar

$$\Pi_{ij} = \begin{cases} \dfrac{-\alpha_\Pi \bar{c}_{ij}\Phi_{ij} + \beta_\Pi \Phi_{ij}^2}{\bar{\rho}_{ij}} & v_{ij}x_{ij} < 0 \\ 0 & v_{ij}x_{ij} \geq 0 \end{cases} \tag{39}$$

kde α_Π a β_Π jsou konstanty, jejichž hodnota se většinou pohybuje kolem 1 a

$$\Phi_{ij} = \frac{h_{ij} v_{ij} \cdot x_{ij}}{|x_{ij}|^2 + \varphi^2}$$

$$\bar{c}_{ij} = \frac{1}{2}(c_i + c_j), \quad \bar{\rho}_{ij} = \frac{1}{2}(\rho_i + \rho_j), \quad h_{ij} = \frac{1}{2}(h_i + h_j)$$
$$v_{ij} = v_i - v_j, \quad x_{ij} = x_i - x_j,$$

kde c je rychlost zvuku. Ta není konstantní, závisí na prostředí. Její hodnotu spočítáme podle vztahu

$$c = \sqrt{\frac{p}{\rho}}. \tag{40}$$

Číslo $\varphi = 0{,}1 h_{ij}$ brání dělení nulou při střetu dvou částic.

4. Postup řešení

Vstupními informacemi pro řešení úlohy jsou délka trubice, poloha přepážky, hustota, rychlost a tlak plynu na obou stranách přepážky rázové trubice a počet částic v ní. Úlohu řešíme v jedné dimenzi. Přepážku umístíme do $x = 0$. Spočítáme, kolik částic má být v oddělených částech trubice. Všechny částice mají stejnou hmotnost a součet jejich hmotností dává celkovou hmotnost plynu. Počet částic rozdělíme v poměru k hustotě na dvě části. Částice pak rovnoměrně rozmístíme v dané části rázové trubice. Každé částici podle jejího umístění (nalevo nebo napravo od přepážky) přidělíme vstupní parametry - rychlost, hustotu, tlak a vnitřní energii, kterou jsme spočítali z rovnice (31).

V prvním kroku časové integrace spočítáme pro každou částici hodnotu vnitřní energie a rychlosti podle prvního kroku metody leapfrog. Pro každý další krok uděláme následující:

1. Pro každou částici najdeme všechny částice, které jsou od ní vzdálené nejvýše κh, pro každou dvojici takových částic spočítáme hodnotu vyhlazovací funkce a její derivace.

2. Sumační metodou podle (31) spočítáme hustotu $\rho_{t-1/2\Delta t}$ v čase $t - \frac{1}{2}\Delta t$.

3. Spočítáme rychlost v_t a energii e_t v čase t podle vzorců

$$v_t = v_{t-1/2\Delta t} + \frac{1}{2}\Delta t \frac{Dv}{Dt}\Big|_{t-\Delta t} \tag{41}$$

$$e_t = e_{t-1/2\Delta t} + \frac{1}{2}\Delta t \frac{De}{Dt}\Big|_{t-\Delta t}. \tag{42}$$

4. Vyhodnotíme $\frac{Dv}{Dt}\Big|_t$ podle rovnice (32) a $\frac{De}{Dt}\Big|_t$ podle (33) v čase t pomocí $\rho_{t-1/2\Delta t}$, v_t a e_t.

5. Metodou leapfrog vypočítáme rychlost $v_{t+1/2\Delta t}$, energii $e_{t+1/2\Delta t}$ a novou polohu $x_{t+\Delta t}$

6. Posuneme se v čase, $t = t + \Delta t$.

Pozn. Částice ani její parametry nejsou podrobeny žádným okrajovým podmínkám.

5. Příklady

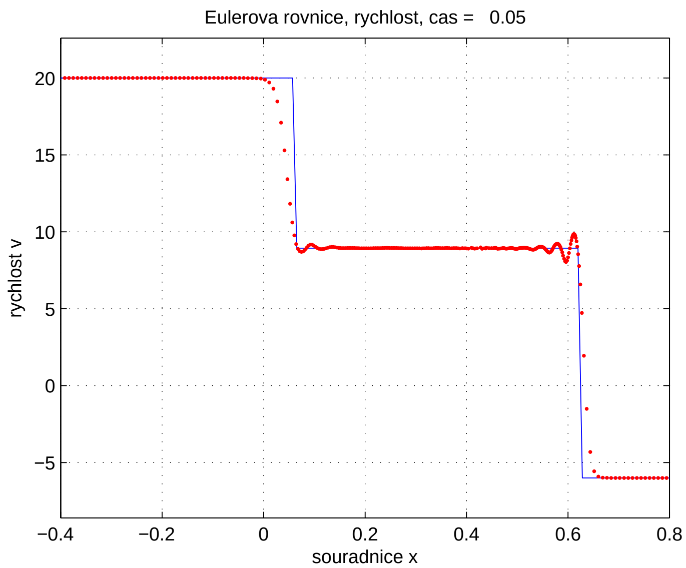
V této kapitole spočítáme několik příkladů pomocí programu ve Fortranu zveřejněného v [1]. Výpočet byl realizován v prostředí Microsoft Visual Studio 2008 a Intel(R) Visual Fortran Compiler Professional Edition 11.1 for Windows. Program počítá podle výše uvedeného postupu průběh tlaku, hustoty, vnitřní energie a rychlosti částic po délce rázové trubice. Zobrazení výsledků bylo realizováno ve vývojovém a programovacím prostředí Matlab R2008b. Přesné řešení úlohy je spočítané programem z [2], program je použitý se souhlasem autora. Přesné řešení je vykreslené modrou souvislou čarou, červené body jsou řešení metodou SPH. V grafech můžeme vidět buď rázovou vlnu nebo vlnu zředění. Kontaktní nespojitost můžeme pozorovat pouze v průběhu hustoty a vnitřní energie. Vzhledem k tomu, že jsme nespecifikovali žádné okrajové podmínky, řešení v blízkosti okrajů trubice je deformované. V obrázcích 2 až 13 jsou zobrazeny úseky grafů, které jsou okrajům tak vzdálené, že nedošlo k ovlivnění výsledků.

5.1. Příklad 1

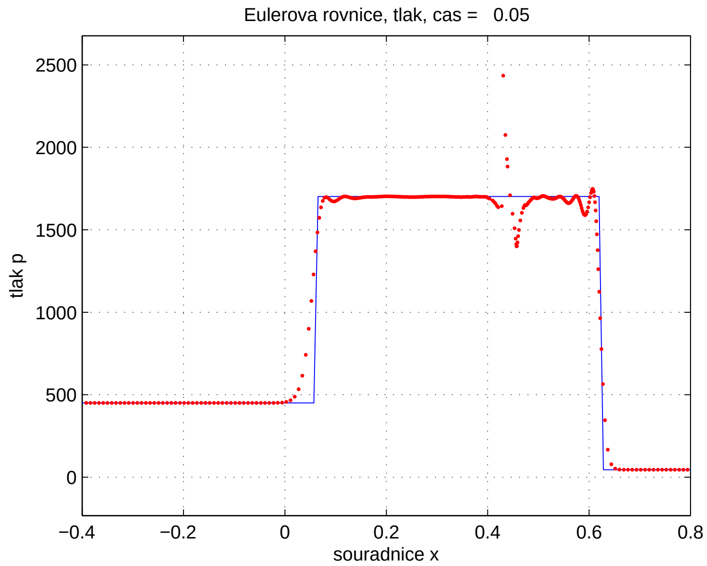
V prvním příkladu je rázová trubice dlouhá l=8,4m. Časový krok je Δt=0,00005s, výsledky dostaneme pro čas t=0,05s. Grafy jsou vykreslené pro část trubice od -0,4 do 0,8. Přepážka umístěná v x=2,4m odděluje prostor na dvě části, jejich počáteční parametry jsou v tabulce.

	tlak	hustota	rychlost
$x < 0$	450	6,0	20
$x \geq 0$	45	6,0	-6

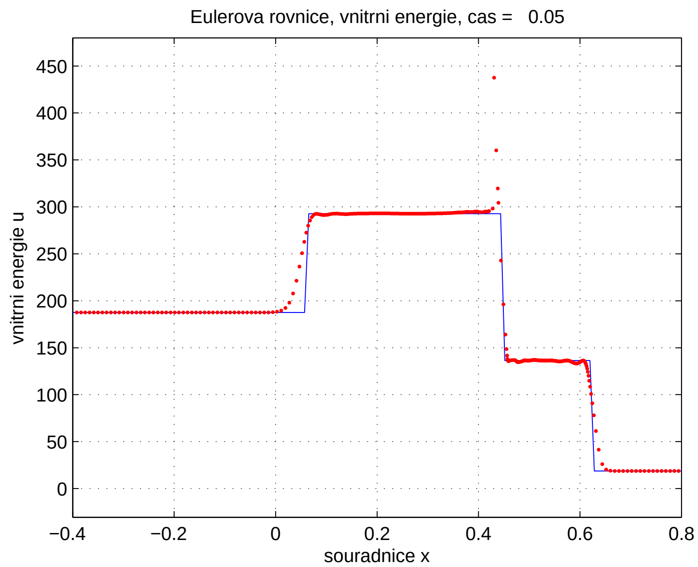
Vidíme, že vlevo i vpravo vznikla rázová vlna. Vlevo ji můžeme pozorovat mezi x=0 a x=0,1, vpravo kolem x=0,6. Mezi x=0,4 a x=0,5 je kontaktní nespojitost.



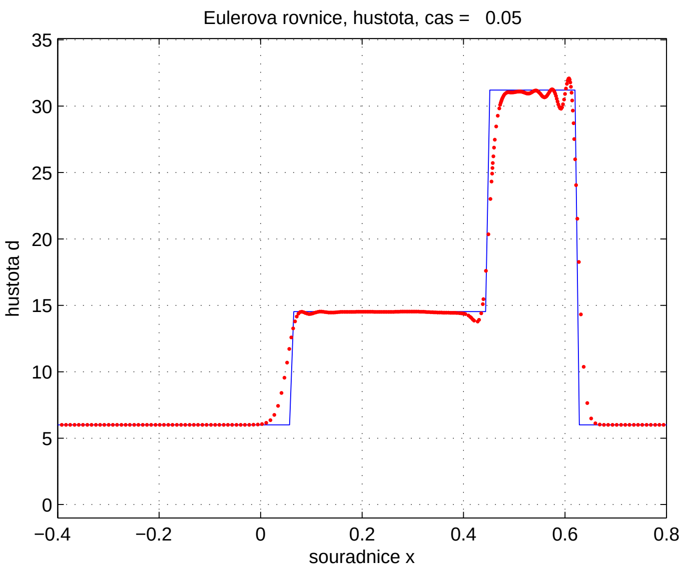
Obrázek 2: Příklad 1. Rychlost v t=0.05s



Obrázek 3: Příklad 1. Tlak pro t=0.05s



Obrázek 4: Příklad 1. Vnitřní energie v t=0.05s



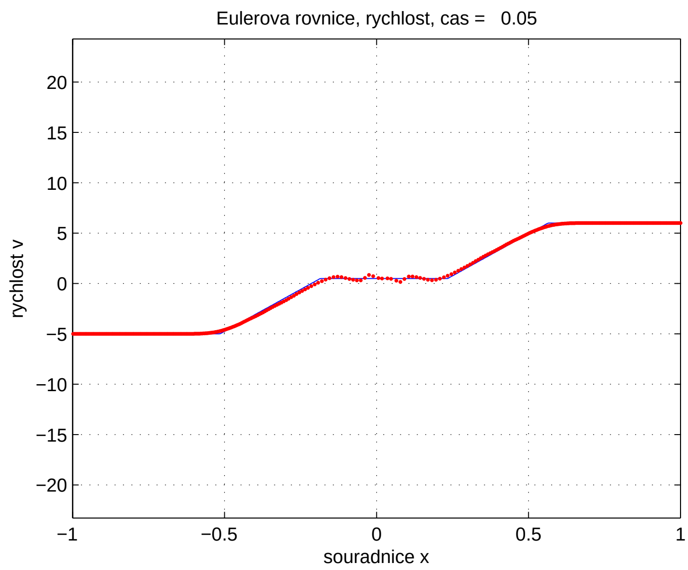
Obrázek 5: Příklad 1. Průběh hustoty v t=0.05s

5.2. Příklad 2

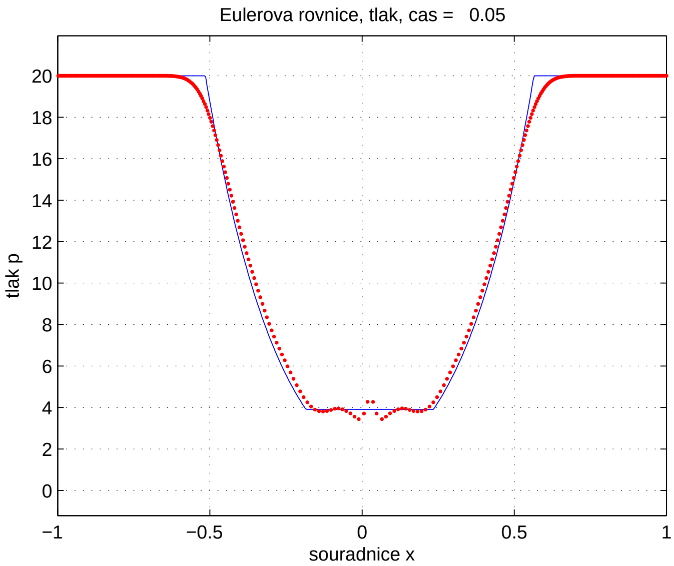
Délka trubice je l=4m, přepážka je uprostřed. Časový krok je Δt=0,0005s. Výpočet probíhá do t=0,05s.

	tlak	hustota	rychlost
$x < 0$	20,0	1,0	-5,0
$x \geq 0$	20,0	1,0	6,0

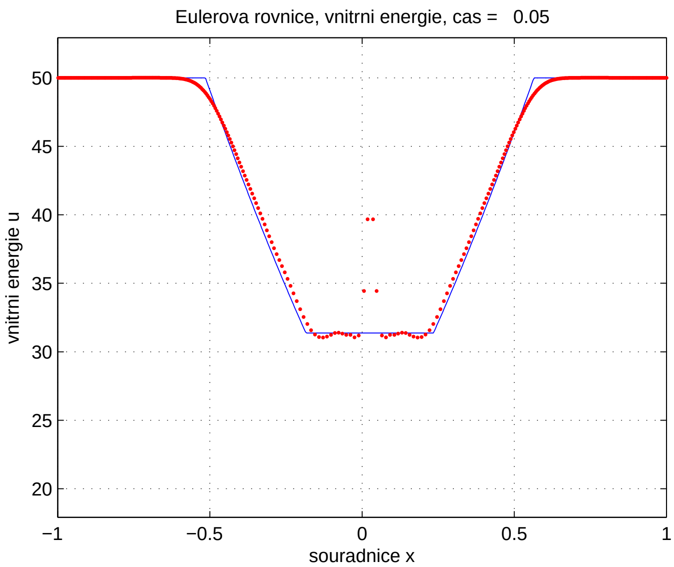
Tlak a hustota jsou na obou stranách přepážky stejné, ale počáteční rychlost je různá a nenulová. V tomto případě vznikla na obou stranách vlna zředění.



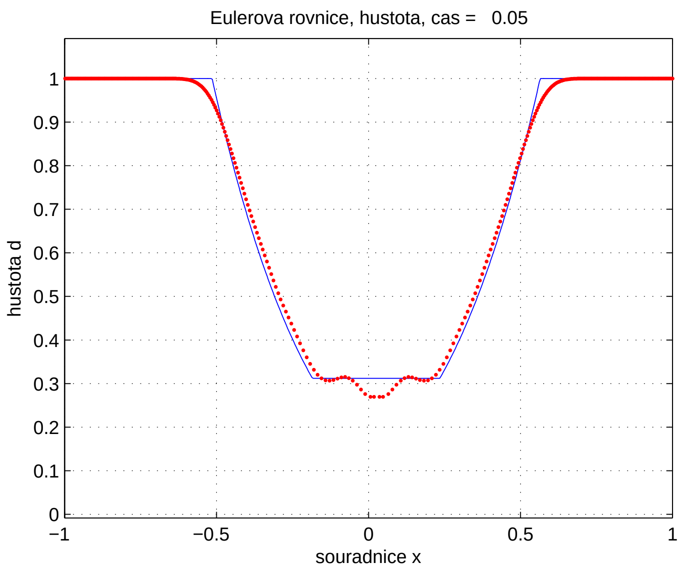
Obrázek 6: Příklad 2. Rychlost v t=0.05s



Obrázek 7: Příklad 2. Tlak pro t=0.05s



Obrázek 8: Příklad 2. Vnitřní energie v t=0.05s

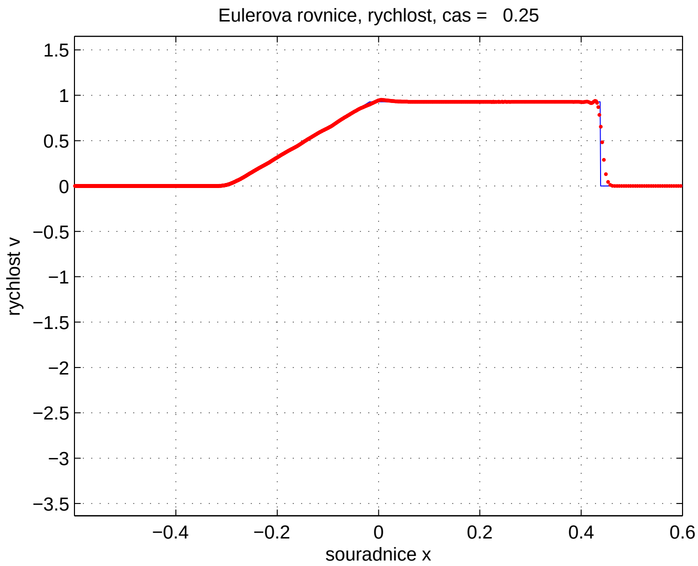


Obrázek 9: Příklad 2. Průběh hustoty v t=0.05s

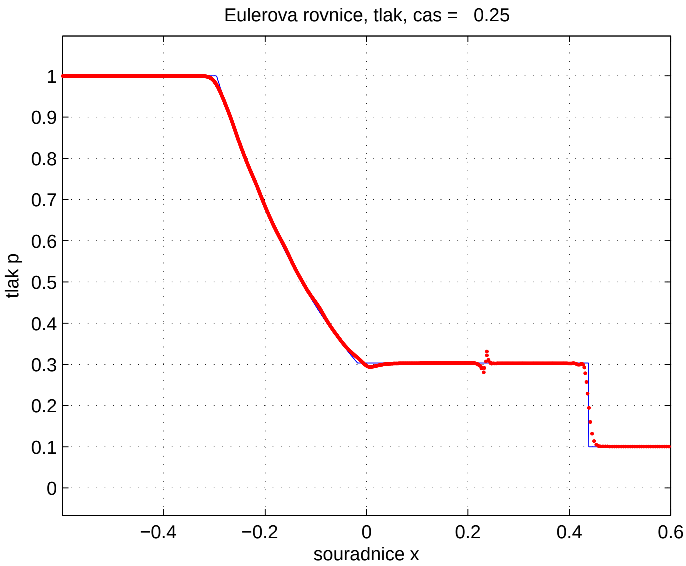
5.3. Příklad 3

Ve třetím příkladu máme rázovou trubici dlouhou l=2m, přepážka je umístěna opět uprostřed. Výsledek vykreslíme v čase t=0,25s po 250 krocích. V této úloze vznikla vlna zředění na levé straně rázové trubice a rázová vlna na pravé straně.

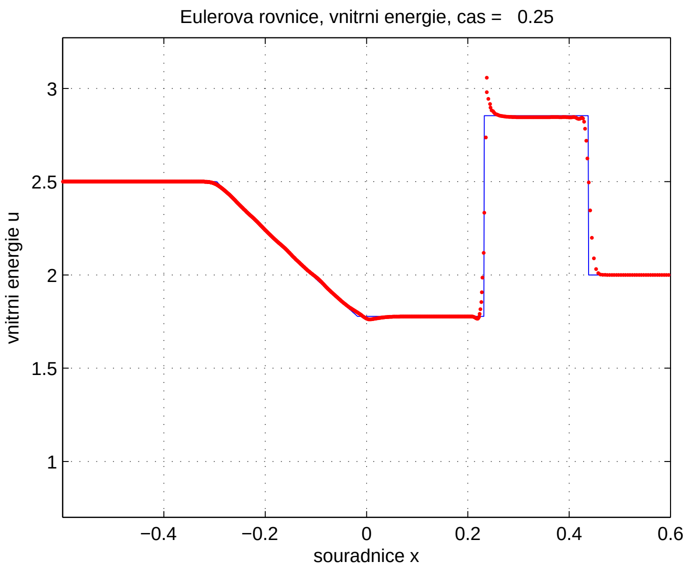
	tlak	hustota	rychlost
$x < 0$	1,0	1,0	0,0
$x \geq 0$	0,1	0,125	0,0



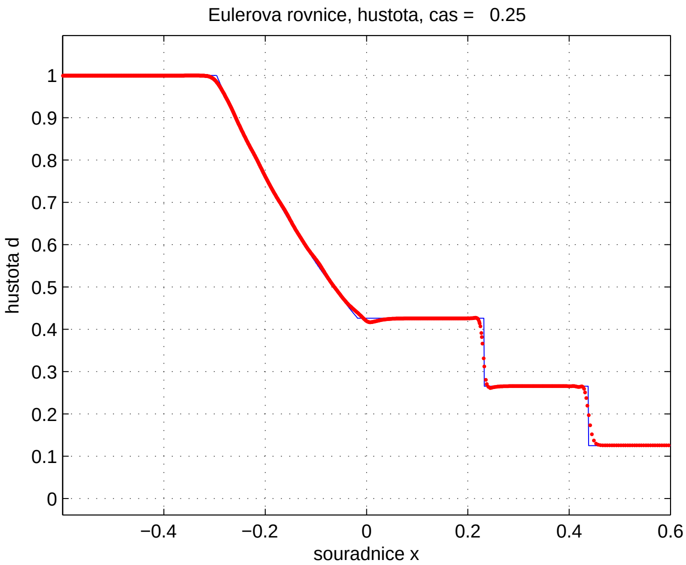
Obrázek 10: Příklad 3. Rychlost v t=0.25s



Obrázek 11: Příklad 3. Tlak pro t=0.25s



Obrázek 12: Příklad 3. Vnitřní energie v t=0.25s



Obrázek 13: Příklad 3. Průběh hustoty v t=0.25s

6. Závěr

V práci je popsaná metoda SPH. Tato metoda má široké možnosti použití, lze ji použít například v astrofyzice nebo v balistice. Nejčastěji se ale používá pro modelování proudění tekutin. Hlavní výhodou je to, že je bezsíťová, tedy že nemusíme generovat síť, pouze rozmístíme částice do modelované oblasti, vyhneme se tím velké deformaci sítě.

Modelovanou látku reprezentují částice. Při řešení úlohy nejdříve určíme jejich hmotnost - součet hmotností všech částic musí dát celkovou hmotnost tekutiny v modelované oblasti. Každá částice nese informaci o hustotě, tlaku, rychlosti a vnitřní energii v daném místě. Pro výpočet dané veličiny se využívá jádrová vyhlazovací funkce a hodnoty veličiny v sousedních částicích.

Jako příklad použití je v práci namodelován průběh fyzikálních veličin v rázové trubici. To je trubice s přepážkou, která je naplněna plynem o různých parametrech v jejích oddělených částech. Proudění v rázové trubici je popsáno rovnicí kontinuity, pohybovou rovnicí a rovnicí energie. Z těchto rovnic počítáme vnitřní energii a rychlost pomocí částicové aproximace a integrační metody leapfrog. Hustotu počítáme tzv. sumační metodou.

Průběh hustoty, vnitřní energie, tlaku a rychlosti a jejich přesná řešení jsou vykreslené do grafů, abychom mohli porovnat kvalitu výsledků. Zjistili jsme, že metoda SPH dává vcelku uspokojivé výsledky, srovnatelné s přesným řešením.

Literatura

[1] Liu, G. R. - Liu, M. B.: *Smoothed particle hydrodynamic a meshfree particle method,* World Scientific Publishing, Singapore (2003).

[2] Toro, E. F.: *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics,* Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin(1999).

[3] Li, S. - Liu, W. K.: *Meshfree particle methods,* Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1st edition, Berlin (2004).

[4] Oran, E. S., Boris, J. P.: *Numerical Simulation of reactive Flow,* Cambridge University press, 2nd edition, Cambridge (2001).

[5] Šob, F.: *Hydromechanika,* Akademické nakladatelství CERM, Brno (2008).

[6] Lukáčová, M.: *Computational Fluid Dynamics,* Akademické nakladatelství CERM, Brno (2003).

[7] Liu, G. R.: *Mesh Free Methods: Moving beyond the Finite Element Method,* CRC Press, Boca Raton (2003).

Seznam použitých zkratek a symbolů

$x = (x, y, z)$	...	souřadnice bodu
$v = (v_x, v_y, v_z)$	...	vektor rychlosti
p	...	tlak
V	...	objem
S	...	plocha
d	...	dimenze prostoru
l	...	délka trubice
ρ	...	hustota
m	...	hmotnost
$\tau = (\tau_{ij})$	...	tenzor napětí
t	...	čas
n	...	jednotkový vektor vnější normály
$F = (F_x, F_y, F_z)$	...	objemová síla
u	...	měrná vnitřní energie
e	...	celková vnitřní energie
h	...	vyhlazovací délka
κ	...	měřítko vyhlazovací funkce
Ω	...	oblast v prostoru
Ω_x	...	oblast, kde leží všechna x' vzdálené od x nejvýše κh
γ	...	Poissonova konstanta
c	...	rychlost zvuku
φ	...	konstanta