

**UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE  
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY**

**NUMERICKÉ SIMULÁCIE TOKU  
VYSOKOVIKÓZNEJ KVAPALINY**

Diplomová práca

Študijný program:  
Študijný odbor:  
Školiace pracovisko:  
Školiteľ:

Fyzika Zeme a planét  
4.1.1. Fyzika  
Katedra astronómie fyziky Zeme a meteorológie  
Doc. Jozef Kristek PhD.

Bratislava 2013

Bc. Mojmír Moravský



## **Pod'akovanie**

Autor by rád poďakoval svojmu školiteľovi Doc. Jozefovi Kristekovi PhD. za odhodlanie čítať predbežné verzie diplomovej práce a svojej snúbenici Márii Kerekrétyovej za morálnu a gramatickú podporu.

## **Abstrakt**

V práci sme sa venovali numerickým simuláciám toku vysokoviskózne kvapaliny použitím metódy konečných diferencií. Najskôr sme popísali súčasný stav problematiky a komerčné softvéry používané na simulácie tokov v priemysle na základe čoho sme formulovali ciele práce.

Vo výsledkovej časti práce sme odvodili algoritmus a konečno-diferenčnú schému riešenia Navier-Stokesovej rovnice pre kvapalinu pri konštantnej teplote a viskozite. Tiež sme odvodili algoritmus a konečno-diferenčnú schému riešenia energetickej rovnice a Navier-Stokesovej rovnice kvapaliny s nekonštantnou viskozitou. Na základe nájdených schém pre numerické riešenie Navier-Stokesovej rovnice kvapaliny s nekonštantnou viskozitou sme zostrojili výpočtový program. Program sme verifikovali pomocou výsledkov získaných komerčným softvérom ANSYS.

### **Kľúčové slová:**

metóda konečných diferencií, numerické simulácie toku kvapalín, sklo

## **Abstract**

In the Thesis we focused on numerical simulation of high-viscosity fluid flow using finite-difference method. In first part we described the state-of-the-art of the computational fluid dynamics and commercial software used for numerical simulations in the industry. Based on this we formulated goals of the thesis.

In the result part we derived the algorithm and finite-difference scheme for solution of the Navier-Stokes equation for a fluid at constant temperature and viscosity. We also derived algorithm and finite-difference scheme for solution of energy equation and Navier-Stokes equation for a fluid with variable viscosity. We coded computational program based on derived schemes for numerical solution of Navier-Stokes equation for a fluid with variable viscosity. We verified our program using the results obtained by commercial software ANSYS.

### **Keywords:**

finite difference method, computational fluid dynamics, glass

## Predhovor

V súčasnosti sa mnoho spoločností rôznych zameraní spolieha na výsledky výpočtov komerčných softvérov. Komerčné softvéry v posledných rokoch predstavujú dobrú voľbu pre výpočet tokov, ohýbaní, tavení a mnohých ďalších procesov vo výrobe a sú používané aj pri navrhovaní animácií alebo statiky budov. Poskytujú zákaznícku podporu, sú schopné riešiť široké spektrum problémov a je možné ich optimalizovať voľbou doplnkových balíkov. Ponúkajú užívateľsky priateľské prostredie, ktoré sa môže naučiť ovládať aj laik a nie len odborník na problematiku. Kvôli svojej variabilite, podpore a možnostiam sú pomerne drahé.

Zákazník často plne nevyužije univerzálnosť kúpeného softvéru (napr. spoločnosť ktorá potrebuje poznať rýchlosť tuhnutia kovového odliatku vo forme v závislosti od tvaru a teploty okolia nepotrebuje poznať proces toku s voľnou hladinou toho istého kovu). Softvér stále napreduje a jeho zdrojový kód stále narastá a ponúka stále širšie spektrum možností nastavení a zobrazení výsledkov. Napriek tomu, že kvalita výpočtovej techniky je stále vyššia, rýchlosť výpočtov nestúpa priamo s ňou je obmedzená práve univerzálnosťou riešení.

Základné výpočtové postupy a numerické metódy sú dobre zdokumentované pre mnoho fyzikálnych procesov. Alternatívou k použitiu komerčného softvéru môže byť naprogramovanie vlastného programu simulujúceho proces, ktorý nás zaujíma. Program vytvorený špecificky na simulovanie jedného problému by mohol byť rýchlejší a presnejší než univerzálnejší program a najmä menej finančne náročný.

Simulovanie toku skla v priemysle je jedným z komplikovaných procesov, na výpočet ktorých kupuje mnoho sklársky zameraných spoločností komerčné softvéry a balíky doplnkov, umožňujúce čo najpresnejšie riešenie konkrétneho problému. Alternatívou k tomu môže byť upravená verzia programu riešiaceho základné rovnice toku nestlačiteľnej kvapaliny.

To, čo môže vytvárať zdanie pokroku vo vývoji numerických simulácií, môže byť zároveň ich nedostatkom a nevýhodou pri riešení konkrétnych zjednodušených problémov.

# Obsah

<b>1. Úvod</b> .....	<b>1</b>
1.1. Súčasný stav problematiky.....	1
1.2. Používané metódy.....	2
1.2.1. Pre-processor.....	2
1.2.2. Solver.....	3
1.2.3. Post-processor.....	4
1.3. Vlastnosti numerických simulácií toku kvapalín.....	4
1.4. Motivácia.....	5
<b>2. Ciele práce</b> .....	<b>7</b>
<b>3. Viskózna kvapalina</b> .....	<b>8</b>
3.1. Navier-Stokesova rovnica.....	8
3.1.1. Nekonštantná viskozita.....	11
3.2. Energetická rovnica.....	11
3.3. Sklo.....	14
<b>4. Numerické metódy</b> .....	<b>17</b>
4.1. Diskretizácia riešenia v jednom rozmere.....	17
4.2. Riešenie Navier-Stokesovej rovnice.....	19
4.2.1. Striedavo usporiadaná sieť .....	20
4.2.2. Podmienky na hranici .....	21
4.2.3. Výpočet v čase .....	23
4.2.4. Riešenie Poissonovej rovnice .....	24
4.2.5. Podmienka stability výpočtu .....	27
4.2.6. Algoritmus výpočtu .....	28
4.3. Vírivosť a prúdová funkcia .....	28
4.3.1. Výpočet prúdovej funkcie a vírivosti v čase.....	29
4.3.2. Algoritmus výpočtu pomocou vírivosti a prúdovej funkcie.....	31
4.4. Riešenie energetickej rovnice.....	31
4.4.1. Hraničné podmienky.....	32
4.4.2. Numerické riešenie energetickej rovnice.....	33
4.4.3. Podmienka stability výpočtu.....	34
4.4.4. Vztlakové členy.....	34

4.4.5. Rozšírenie algoritmu o vztlakové členy.....	35
4.5. Nekonštantná viskozita.....	35
4.5.1. Algoritmus výpočtu toku s nekonštantnou viskozitou.....	37
<b>5. Výpočet.....</b>	<b>38</b>
5.1. Tok generovaný posunom hranice.....	38
5.1.1. Tok s vysokým Reynoldsovým číslom.....	41
5.2. Tok s nekonštantnou teplotou.....	44
5.3. Výpočet pomocou vírivosti a prúdovej funkcie.....	46
5.4. Tok skla.....	46
5.4.1. Porovnanie výsledkov s výsledkami ANSYSu.....	47
<b>6. Záver.....</b>	<b>51</b>
<b>Zoznam použitej literatúry.....</b>	<b>52</b>
<b>Príloha – CD ROM s výpočtovým programom v jazyku C++.....</b>	<b>54</b>





# 1. Úvod

## 1.1 Súčasný stav problematiky

Numerické simulácie toku kvapalín (NSTK) sú metódy na výpočet a analýzu toku, prenosu tepla a ďalších fyzikálnych procesov v kvapalinách. Riešia pohybové a energetické rovnice toku kvapalín. Majú použitie vo veľkom množstve technických a vedeckých odborov.

NSTK kvôli svojej výpočtovej náročnosti a zložitosti dlho zaostávali oproti ostatným výpočtovým metódam, aplikovaným na iné fyzikálne javy a technické problémy. Mnoho rokov bolo ekonomicky výhodnejšie ostať pri experimentálnych metódach. Postupne však jednoduchšie ovládateľný softvér a výkonnejšie počítače ponúkli širšiemu okruhu ľudí možnosť podieľať sa na vývoji NSTK. Prvé numerické simulácie toku tekutín boli použité v priemysle okolo roku 1960 pre letecký priemysel. Overovali dizajn lietadiel a prvých prúdových motorov. S prvými komerčnými programami na NSTK, okolo roku 1990, sa ich vývoj ešte urýchlil.

Numerické simulácie tokov sa používajú v rozličných oblastiach vedy a priemyslu:

- Aerodynamika vozidiel a lietadiel.
- Hydrodynamika lodí.
- Spaľovacie motory a tlakové turbíny.
- Navrhovanie turbomotorov, tok vzduchu.
- Chemické procesy, premiešavanie pri rôznych tokoch.
- Námorné inžinierstvo, stavba ropných plošín.
- Meteorológia.
- Biomedicína: tok krvi v cievach.
- Hydrológia a oceánografia.
- Konvekcia v Zemskom plášti a jadre.

Vývoj NSTK si vyžaduje porozumenie fyzikálnym procesom, numerickým metódam a dostatok času. Menšie a stredné podniky sa preto často spoliehajú na komerčné programy na NSTK.

Cena licencie na komerčný softvér je 10 000 – 300 000 Eur, záleží od voľby softvéru a doplnkov. Väčšina spoločností využívajúcich komerčný softvér platí poplatok za ročný prenájom licencie. Celkové náklady na prevádzku NSTK sú pre spoločnosti často menšie než priame experimenty a poskytujú navyše aj tieto možnosti:

- Možnosť skúmať systémy, ktoré je experimentálne náročné alebo nemožné skúmať.
- Testovať omnoho rýchlejšie viacero navzájom podobných procesov.
- Skúmať nebezpečné pokusy v rizikových podmienkach.
- Takmer dokonalý popis všetkých veličín skúmaných simuláciou.

*Napr. NSTK umožňuje skúmať tok zohriateho skla v navrhnutej súčasti platinovej výrobnéj linky a optimalizovať ju. Zostrojenie súčasti linky pre experimentálne skúmanie by vyžadovalo odstavenie výrobného procesu a výrobu súčasti. Experiment by v tomto prípade bol finančne a časovo nevýhodný.*

## 1.2 Používané metódy

Všetky v súčasnosti používané komerčné programy sa skladajú z troch častí:

- pre-processor
- solver
- post-processor

NSTK musia okrem výpočtu ponúkať aj prepracované a užívateľsky priateľské rozhranie umožňujúce jednoduché zadanie problému a prehľad výsledkov. Nasledujúce podkapitoly venujeme jednotlivým častiam programu a prehľadu ich funkcií a využitia.

### 1.2.1 Pre-processor

Úlohou pre-processora je načítať zadanie a podmienky konkrétneho tečenia a spracovať ich do podoby dátového výstupu, s ktorým pracuje Solver. Tečenie definuje operátor pomocou užívateľského rozhrania. Úloha pre-processora spočíva v nasledovných činnostiach:

- Definícia geometrie a určenie výpočtovej oblasti.
- Určenie veľkosti sieťového kroku a vytvorenie siete odpovedajúcej výpočtovej oblasti.
- Výber javu, ktorý chceme pozorovať.
- Definícia vlastností kvapaliny a počiatočných podmienok.
- Určenie hraničných podmienok tečenia.

Na získanie dostatočne presného riešenia je nutné správne určenie veľkosti sieťového kroku. Vo všeobecnosti platí: čím je viac bodov siete a čím je hustejšia sieť, tým je riešenie presnejšie a trvá dlhší výpočtový čas. Jednou z úloh pre-processoru je určiť optimálnu

veľkosť sieťového kroku tak, aby bolo riešenie dostatočne presné a výpočtový čas čo najkratší. Niektoré programy ponúkajú nerovnomerné rozdelenie bodov výpočtovej siete v závislosti od sledovaných vlastností procesu. Vyvíjajú sa programy, ktoré by mali byť schopné adaptívne meniť veľkosť sieťového kroku v procese výpočtu a tak umožniť dostatočne presne sledovať aj rýchlo sa meniace tečenia bez zbytočného zahustenia siete v oblastiach, kde to nie je nevyhnutné. V súčasnosti sa začína používať adaptívna metóda v niektorých komerčných softvéroch napr. AUTODESK SIMULATION 2013. Je časovo náročnejšia, ale vo všeobecnosti ponúka presnejšie riešenie komplikovaných tokov.

V spoločnostiach zaoberajúcich sa vývojom je veľa času venovaného práve pre-processoru, najmä správne definovaniu výpočtovej oblasti, počiatočných a okrajových podmienok.

### 1.2.2 Solver

V numerických simuláciách sa používajú tri metódy: metóda konečných objemov, metóda konečných prvkov a metóda konečných diferencií. Najčastejšie používanou metódou v komerčných programoch je metóda konečných objemov. Používajú ju najznámejšie programy ako napr.: CFX, ANSYS, FLUENT, AUTODESK, PHOENIX a STAR-CD. Solver sa skladá s troch častí:

- Zahrnutie rovníc toku pre všetky konečné objemy výpočtovej oblasti.
- Diskretizácia, prepis zahrnutých rovníc do systému algebrických rovníc.
- Riešenie algebrických rovníc.

Prvá časť odlišuje metódu konečných objemov od zvyšných metód. V princípe sa požaduje aby každý kontrolný objem dodržiaval v pre- procesore určené podmienky zákonov zachovania. Táto vlastnosť vytvára, na rozdiel od metódy konečných elementov, priestor pre jednoduchšie porozumenie základom metódy. Podstata najpoužívanejšej metódy sa dá vyjadriť vzt'ahom

$$\begin{bmatrix} \text{Zmena } \phi \text{ s časom} \\ \text{v kontrolnom} \\ \text{objeme} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{Zmena nárastu} \\ \phi \text{ cez stenu} \\ \text{spôsobená konvekciou} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \text{Zmena nárastu} \\ \phi \text{ cez stenu} \\ \text{spôsobená difúziou} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \text{Zmena } \phi \\ \text{spôsobená} \\ \text{vznikom} \end{bmatrix} .$$

$\phi$  je prúdová funkcia predstavujúca smer toku v bode.

Každý komerčný softvér obsahuje vlastnú sadu metód riešiacich vyššie uvedený výraz. Riešenie konvekcie, difúzie a zdrojových členov tak, aby simulácia bola rozumne presná a časovo nenáročná, je komplikovaný problém. Preto sa často jednotlivé členy riešia iteratívnymi metódami. Spôsoby riešenia okrem známych metód sú často firemnými tajomstvami a nie sú verejnosti dostupné.

### **1.2.3 Post-processor**

Keďže v súčasnosti komerčné softvéry nevyužívajú len odborníci na NSTK zohráva rozumný a prehľadný výstup s kvalitným užívateľským rozhraním dôležitú úlohu. Mnoho firiem preto venuje veľa času tvorbe grafických rozhraní a rozličných vizualizačných rozhraní, ako napr.:

- Zobrazenie výpočtovej oblasti.
- Vektorové grafy.
- Dvoj a trojrozmerné povrchové grafy.
- Sledovanie pohybu častíc kvapaliny.
- Rozhranie umožňujúce prehliadanie modelu (zoom, otáčanie).

Niektoré novšie softvéry ponúkajú aj možnosť animácie neustálených tokov a vytvárajú priestor pre lepšie celkové porozumenie toku.

Dôležitou súčasťou je aj prehľadné zálohovanie simulovaného problému v závislosti od požiadaviek užívateľa.

## **1.3 Vlastnosti NSTK**

Pri práci s NSTK si treba uvedomovať, že simulácia môže nanajvýš odpovedať realite v rámci medzí fyzikálnych zákonov, ktoré zahŕňa. Napr. nemôžeme očakávať presné riešenie simulácie toku zmesi kvapalín rozličných hustôt, pokiaľ do výpočtu nezahrnieme okrem prenosu koncentrácie aj výpočet vztlakových síl. Správny výber fenomenologických vlastností kvapalín, ktoré chceme zahrnúť vo výpočte je kľúčový pre rýchlosť a jednoduchosť výpočtu. Medzi časté otázky spadá, či je model nevyhnutné simulovať v troch rozmeroch, alebo dvoch rozmeroch, či je nevyhnutné zahrnúť efekty šírenia teploty. Kvalitný program ponúka užívateľovi odhad sieťového kroku, ktorý však nemusí odpovedať nárokom na výpočet javu, ktorý sa pokúša užívateľ numericky simulovať. Správna voľba veľkosti sieťového kroku vyžaduje základnú znalosť algoritmu a skúseného užívateľa. Spolu

s veľkosťou kroku je dôležitá podmienka veľkosti rezíduí. Počas výpočtu veličín iteratívnymi metódami predpokladá program konvergenciu. Rezídua popisujú relatívny rozdiel voči hodnotám v predchádzajúcej iterácii. Je na užívateľovi, či sa uspokojí s prednastavenou podmienkou na ukončenie iteratívnej metódy alebo ju sám upraví. Vhodné nastavenie podmienok konvergenzie iteratívnych metód je náročná úloha. Základné nastavenia často kladú podmienku veľkého počtu iterácií a podmienku na malé rezíduá. Správne nastavenie podmienok konvergenzie, však závisí od mnohých faktorov a vyžaduje skúsenosti operátora a priebežné kontrolovanie výpočtu.

Každý algoritmus má svoje charakteristické vlastnosti a šírenie chýb. Úlohou operátora je orientovať sa v nich a v závislosti od metódy vyhodnotiť správny postup. Medzi najčastejšie chyby NSTK patria: numerická difúzia, falošná difúzia a numerický tok. Mnohé z týchto chýb sa dajú rozpoznať podľa rozdielov od očakávaného výsledku alebo nefyzikálneho správania kvapaliny, avšak jedná sa však o stratu výpočtového času a je najvhodnejšie im predísť už v pre-procesore. Pri zložitejších procesoch sa operátor často nemôže spoliehať na porovnanie výsledku s odhadom, relevantné je len porovnanie výsledku NSTK s experimentálnymi výsledkami.

Je nutné zdôrazniť, že NSTK nie je náhradou experimentu, ale len pomocným nástrojom. Softvéry prechádzajú rozsiahlymi testovaniami, pri ktorých sa porovnávajú ich výsledky s výsledkami odpovedajúcich experimentov. Najčastejšie sú to experimenty, pri ktorých sa využíva laserová Dopplerovská anemometria alebo zobrazovanie prúdočiar kontrastnou látkou. V prípadoch, keď nie je možné porovnať výsledok s experimentom, (napr. extrémne vysoké teploty) sa musia vývojári uspokojiť s jednou z troch možností:

- Predchádzajúce skúsenosti a odhad.
- Porovnanie s analytickým riešením zjednodušeného problému.
- Porovnanie s podobným, dobre zaznamenaným, spracovaným problémom.

Najdôležitejšou súčasťou práce s NSTK je stále úroveň porozumenia fyzikálnym procesom riadiacich simulovaný proces a numerickým metódam.

## **1.4 Motivácia**

Napriek množstvu literatúry pojednávajúcej o rozličných metódach simulácií toku rôznych kvapalín je veľmi náročné nájsť text popisujúci fyzikálne procesy aj numerické metódy.

Prácou sme chceli ponúknuť čitateľovi text, ktorý poskytuje stručný, ale úplný prehľad priebehu numerickej simulácie.

V súčasnosti stredné a menšie podniky, ktoré potrebujú numerické simulácie toku kvapalín, často využívajú kúpu licencií komerčných softvérov. Licencie sú relatívne drahé a softvér je komplikovaný. Niektoré súčasti kódu a využité numerické metódy sú pre užívateľov neprístupné a sú výrobným tajomstvom. Operátor nemá možnosť úplne porozumieť výpočtovému procesu a úplne ho optimalizovať správnym rozčlenením siete alebo reziduálnych podmienok.

Jedným z takýchto prípadov je simulácia toku skla a vysoko-viskózných materiálov. Sklo je materiál s komplikovanými materiálovými vlastnosťami a mnoho automatizovaných výrobných procesov vyžaduje predbežné odhady toku skla pomocou numerických simulácií. Pre možnosti komerčného softvéru je nevyhnutné tok skla a jeho materiálové vlastnosti zjednodušiť. Komerčné softvéry sú vytvárané tak, aby mohli riešiť čo najväčšie množstvo rozličných typov tokov a boli použiteľné v čo najširšom spektre technických odborov. Komerčný softvér je tým pri riešení špecifických problémov často obmedzený. Navrhnutie vlastného programu na riešenie špecifického problému nám dovoľí plne využiť všetky zjednodušenia daného problému. Metóda konečných diferencií je jednoduchšia a teda je možné jednoduchšie upravovať výpočet v závislosti od problému. Takéto riešenie by mohlo ušetriť financie, ktoré by boli investované do komerčného softvéru a spresniť výpočet vysoko viskózných tokov

## 2.Ciele práce

- Popísať matematicko-fyzikálny model toku vysoko-viskózneho kvapaliny v prostredí s nehomogénnou teplotou.
- Odvodiť konečno-diferenčnú schému pre dvojrozmerný model.
- Vytvoriť výpočtový program v jazyku C++.
- Porovnať výsledky numerických simulácií s výsledkami získanými komerčným softvérom. Porovnať ich na relevantnom modeli používanom v praxi a zhodnotiť ďalšiu možnosť využitia.

Práca by mala umožniť čitateľovi plne porozumieť spôsobu odvodenia algoritmu, vytvorenia výpočtového programu a vykonania numerickej simulácie toku kvapalín a oboznámiť ho s jej výhodami a nevýhodami.



### 3. Viskózna kvapalina

Pri reálnych tokoch kvapalín (neuvažujeme super-ochladené kvapaliny) sa pozdĺž prúdočiar toku mení (disipuje) mechanická energia. Zmenu spôsobujú rozličné rýchlosti jednotlivých častí kvapaliny, ktoré sa vzájomne ovplyvňujú. Hybnosť alebo energia v rámci jednotlivých častí kvapaliny je prenášaná molekulárnym pôsobením – procesom podobným treniu.

Keďže sa jedná o prenos hybnosti plochou, môžeme sily, ktoré spôsobujú disipáciu hybnosti pozdĺž prúdočiar, považovať za plošné a môžeme hovoriť o viskózných napätiach. Kvapalinu, v ktorej dochádza k zmene mechanickej energie pozdĺž prúdočiar budeme teda nazývať viskóznou.

#### 3.1 Navier-Stokesova rovnica

Pri odvodení pohybovej rovnice viskózne kvapaliny budeme vychádzať z pohybovej rovnice kontinua v zložkovom tvare

$$\rho \frac{du_i}{dt} = f_i + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} . \quad (3.1)$$

$u_i$  sú zložky vektora posunutia,  $f_i$  sú zložky pôsobiacich síl a  $\tau_{ij}$  sú zložky tenzora napätí. Pre jednoduchosť nasledujúceho odvodu budeme pracovať so zápisom pre objemové sily  $g_i$ , vzťahujúce sa na hmotnosť. Rovnicu (2.1) prepíšeme do tvaru

$$\frac{du_i}{dt} = g_i + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} . \quad (3.2)$$

Keby sme vychádzali z rovnice (3.2) a kládli podmienku  $\tau_{ij} = -\delta_{ij}p$ , pre tlak  $p$ , dostali by sme Eulerovu rovnicu – základnú rovnicu hydrostatiky.

Okrem už spomínaných členov pohybovej rovnice kontinua musíme uvažovať aj ďalšie členy spojené s viskóznym tečením. Ak prerozdělíme tok do rovnobežných rovinných vrstiev, v ktorých sú zložky rýchlosti toku závislé len od súradnice kolmej na roviny toku (laminárny tok), potom platí, že sily pôsobiace v smere kolmom na roviny toku sú úmerné rozdielu rýchlostí v daných rovinách. Ak budeme uvažovať pôsobenie na jednotku plochy, tak platí

$$\tau'_{ij} = \mu \frac{\partial u_j}{\partial x_i} . \quad (3.3)$$

$\mu$  je koeficient dynamickej viskozity a  $\tau'_{ij}$  sú zložky tenzora viskózných napätí.

Predpokladajme, že tenzor viskózných napätí je lineárnou kombináciou derivácií zložiek rýchlosti. Potom prichádzajú do úvahy zložky rýchlosti deformácie  $\varepsilon_{ij}$

$$\tau'_{ij} \sim \dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (3.4)$$

Tento predpoklad je správny pokiaľ sa nejedná o príliš veľké rýchlosti.

Viskóznou kvapalinu budeme uvažovať izotropnú. Môžeme teda použiť Hookeov zákon pre izotropné kontinuum a zložky tenzora viskózných napätí zapisovať v podobe

$$\tau'_{ij} = \lambda \delta_{ij} \dot{\mathcal{G}} + 2\mu \dot{\varepsilon}_{ij}. \quad (3.5)$$

$\dot{\mathcal{G}}$  je definované

$$\dot{\mathcal{G}} := \frac{\partial u_l}{\partial x_l} = \text{div} \vec{u}. \quad (3.6)$$

V rovnici (3.5) sme zaviedli koeficienty  $\lambda$ , ktoré sa zvyknú nazývať aj druhou viskozitou.

Oba koeficienty  $\lambda$  aj  $\mu$  sú v reálnych kvapalinách závislé na tlaku a teplote.

Na základe rovníc popisujúcich zložky tenzora viskózných napätí a tenzora napätí pre hydrostatické kvapaliny môžeme zložky celkového tenzora napätí vo viskóznej kvapaline zapísať ako ich súčet

$$\tau_{ij} = -\delta_{ij} p + \tau'_{ij} = -\delta_{ij} p + \lambda \delta_{ij} \dot{\mathcal{G}} + 2\mu \dot{\varepsilon}_{ij}. \quad (3.7)$$

Dosadením napätí do pohybovej rovnice (2.2) dostaneme vzťah

$$\frac{du_i}{dt} = g_i + \frac{1}{\rho} \left[ -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\lambda \dot{\mathcal{G}}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (2\mu \dot{\varepsilon}_{ij}) \right]. \quad (3.8)$$

Dosadením rovníc (3.5) a (3.4) do vzťahu (3.8) rozpíšeme vzťah do tvaru

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} v_j = g_i + \frac{1}{\rho} \left[ -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \lambda \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right\} \right]. \quad (3.9)$$

Vzťah (3.9) je pohybová rovnica viskózne kvapaliny v najvšeobecnejšom tvare. V mnohých prípadoch môžeme pokladať koeficienty  $\lambda$  a  $\mu$  za konštantné a zjednodušiť rovnicu do tvaru

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} v_j = g_i - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\lambda + \mu}{\rho} \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{\mu}{\rho} \Delta u_i. \quad (3.10)$$

Ďalšia rovnica, ktorú pri odvodení úplnej pohybovej rovnice viskózne kvapaliny využijeme je rovnica kontinua

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i)}{\partial x_i} = 0. \quad (3.11)$$

Ak uvažujeme nestlačiteľnú kvapalinu, tak môžeme rovnicu kontinua (3.11) zjednodušiť na podmienku nestlačiteľnosti

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0. \quad (3.12)$$

Po jej dosadení do rovnice (3.10) dostaneme pohybovú rovnicu viskózne kvapaliny

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \bar{u} = g_i - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\mu}{\rho} \Delta \bar{u}, \quad (3.13)$$

ktorú nazývame Navier-Stokeseova rovnica nestlačiteľnej viskózne kvapaliny. Zložkový tvar bol vhodný pri odvádzaní rovnice, avšak pre použitie v nasledujúcich kapitolách je vhodné zapísať rovnicu aj v podobe

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + (\bar{u} \cdot \text{grad}) \bar{u} = \bar{g} - \frac{1}{\rho} \text{grad} p + \frac{\mu}{\rho} \Delta \bar{u}. \quad (3.14)$$

V rovnici (3.14) vystupuje koeficient viskozity  $\mu$  len v pomere s hustotou  $\rho$ . Tento pomer sa označuje kinematická viskozita  $\nu$  a  $\mu$  sa nazýva dynamická viskozita. Kinematická aj dynamická viskozita sú v nezjednodušenom prípade závislé na teplote. Vo všeobecnosti platí, že hodnoty oboch viskozít u kvapaliny s rastúcou teplotou klesajú, u plynov naopak stúpajú.

### 3.1.1 Nekonštantná viskozita

Zväčša sa vychádza z predpokladu, že viskozita je konštantná alebo málo premenlivá. Tieto predpoklady nám umožnili zjednodušiť rovnicu z tvaru (3.9) do podoby (3.14). Avšak ich platnosť nemusí byť v prípade toku zohriateho skla splnená. Budeme sa venovať procesom s exponenciálnou závislosťou viskozity od teploty. Preto je vhodné odvodiť Navier-Stokesovu rovnicu aj bez uváženia vyššie spomenutého predpokladu konštantnej viskozity. Vychádzame z pohybovej rovnice viskóznej kvapaliny v najvšeobecnejšom tvare (3.9). Podobne ako pri predchádzajúcich úpravách predpokladáme koeficienty  $\lambda$  za konštantné a rovnicu upravíme do tvaru

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} v_j = g_i - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\lambda + \mu}{\rho} \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i^2} + \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \mu}{\partial x_j}. \quad (3.15)$$

Dosadením podmienky nestlačiteľnosti (3.12) dostávame

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} v_j = g_i - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i^2} + \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \mu}{\partial x_j}. \quad (3.16)$$

Prepíšeme (3.16) do tvaru

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \text{grad}) \vec{u} = \vec{g} - \frac{1}{\rho} \text{grad} p + \frac{\mu}{\rho} \Delta \vec{u} + \text{rot} \vec{u} \cdot \text{grad} \mu. \quad (3.17)$$

Rovnica (3.17) je rovnicou nestlačiteľnej kvapaliny s nekonštantnou viskozitou.

### 3.2 Energetická rovnica

Podobne ako sme pri predchádzajúcom odvodení Navier-Stokesovej rovnice vychádzali zo vzťahov zachovania hybnosti a hmotnosti, odvodíme energetickú rovnicu z prvej vety termodynamickkej, vyjadrujúcej zachovanie energie:

*Celková energia izolovanej sústavy ostáva konštantná.*

Definujeme veličiny vnútorná energia  $e$ , zdroj tepla  $\tilde{q}'''$  a tepelný tok  $\vec{q}''$ , ktorý popisuje prenos tepla vodivosťou.

Ak predpokladáme fixný objem  $V$ , tak sa energetická rovnica skladá z:

- nárastu tepelnej energie v objeme  $V$ ,
- vnútorných zdrojov energie,
- prenosu tepla tokom kvapaliny cez hranicu objemu  $V$ ,
- prenosu tepla vodivosťou,
- tepelnej výmeny objemu  $V$  s okolím.

Tieto vzťahy zapísané matematicky vyjadrujú zákon zachovania energie v integrálnej podobe

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t}(\rho e) d\vec{x} = \int_V \tilde{q}''' d\vec{x} - \int_{\partial V} \rho e \vec{u} \cdot \vec{n} ds - \int_{\partial V} \vec{q}'' \cdot \vec{n} ds + \int_V \tau \cdot \text{grad } \vec{u} d\vec{x} \quad (3.18)$$

Rovnicu (3.18) prepíšeme do diferenciálneho tvaru použitím Gaussovej vety

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) = \tilde{q}''' - \text{div}(\rho e \vec{u}) - \text{div}(\vec{q}'') + \tau' \cdot \text{grad } \vec{u}. \quad (3.19)$$

Pre ďalšie úpravy zavádzame materiálovú deriváciu

$$\frac{D}{Dt} := \frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \cdot \text{grad}. \quad (3.20)$$

Využitím materiálovej derivácie a preusporiadaním členov rovnice (3.19) dostávame vzťah

$$\rho \frac{De}{Dt} + e \left( \frac{D\rho}{Dt} + \rho \text{div} \vec{u} \right) = \tilde{q}''' - \text{div}(\vec{q}'') - p \text{div}(\vec{q}'') + \tau' \cdot \text{grad } \vec{u}. \quad (3.21)$$

Zavedením veličiny entalpie

$$h := e + \frac{p}{\rho}, \quad (3.22)$$

môžeme prepísať materiálovú deriváciu vnútornej energie do tvaru

$$\frac{De}{Dt} = \frac{Dh}{Dt} - \frac{1}{\rho} \frac{Dp}{Dt} + \frac{p}{\rho^2} \frac{D\rho}{Dt}. \quad (3.23)$$

Budeme predpokladať platnosť Fourierovho zákona, ktorý popisuje prenos tepla v rámci kontinua tepelnou vodivosťou, v diferenciálnej podobe

$$\vec{q}'' = -\kappa \text{grad}T . \quad (3.24)$$

$\kappa$  je tepelná vodivosť a  $T$  je teplota. Vzťah (3.24) poukazuje na dôležitý fakt, a to, že tepelný tok  $q$  je priamo úmerný gradientu teploty. Dosadením podmienky nestlačiteľnosti a Fourierovho zákona upravíme rovnicu (3.21) do tvaru

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \vec{q}''' + \text{div}(\kappa \text{grad}T) + \frac{Dp}{Dt} + \tau \cdot \text{grad}\vec{u} . \quad (3.25)$$

Keďže sa snažíme odvodiť rovnicu závislú len od veličín teploty  $T$ , hustoty  $\rho$  a rýchlostného pola  $\vec{u}$ , použijeme termodynamický vzťah

$$dh = c_p dT + \frac{1}{\rho} (1 - \beta T) dp . \quad (3.26)$$

Hodnoty veličín špecifického tepla pri konštantnom tlaku  $c_p$  a koeficiente tepelnej rozťažnosti  $\beta$  sú definované nasledovne:

$$c_p := \left. \frac{\partial h(p, T)}{\partial T} \right|_{p=\text{konšt.}} , \quad (3.27)$$

$$\beta := - \left. \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho(p, T)}{\partial T} \right|_{p=\text{konšt.}} , \quad (3.28)$$

Dosadením vzťahu (3.26) do rovnice (3.25) dostaneme energetickú rovnicu v podobe

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} = \vec{q}''' + \text{div}(\kappa \text{grad}T) + \beta T \frac{Dp}{Dt} + \tau' \cdot \text{grad}\vec{u} . \quad (3.29)$$

Ak sa obmedzíme na konštantnú tepelnú vodivosť a zanedbáme viskóznú disipáciu  $\tau \cdot \text{grad}\vec{u}$ , tak dostávame energetickú rovnicu pre zjednodušený model kvapaliny

$$\frac{DT}{Dt} + \vec{u} \cdot \text{grad}T = \alpha \Delta T + q''' , \quad (3.30)$$

v ktorom je  $\alpha$  tepelná difuzivita

$$\alpha = \frac{\kappa}{\rho_\infty c_p} , \quad (3.31)$$

$q''$  je škálovaný\_tepelný zdroj

$$q''' = \frac{\tilde{q}'''}{\rho_{\infty} c_p}. \quad (3.32)$$

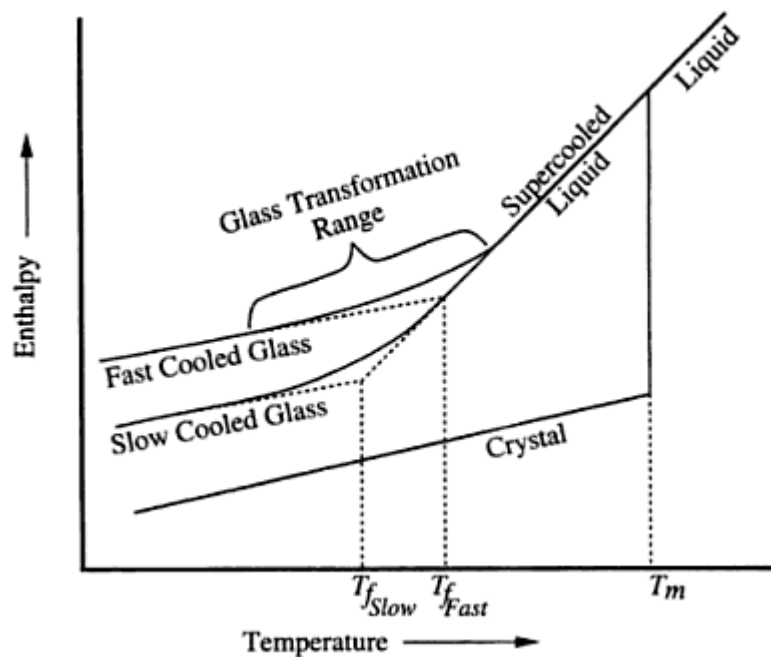
### 3.3 Sklo

Definícia skla ako materiálu nie je jednoduchá. Napriek tomu, že väčšina skiel v histórii ľudstva bola založená na kremíku ako hlavnom prvku existuje množstvo neorganických skiel, ktoré vôbec neobsahujú kremík. Zakladať definíciu na chemickom zložení z kremíku by teda nebolo vhodné. Definovanie skla pomocou fyzikálneho procesu vzniku tiež nie je jednoduché, keďže samotný proces tavenia nie je nevyhnutný. Sklo môže vzniknúť aj kondenzáciou pár tzv. *sol-gel* procesmi alebo neutrónovým ožarovaním kryštalických materiálov. Väčšina skiel je nekovová a anorganická. V priemysle sa však využíva široké spektrum organických skiel a využitie kovových skiel každým rokom narastá.

Všetky sklá však zdieľajú dve spoločné charakteristiky:

- Žiadne sklo nemá dlhé periodické atómové štruktúry.
- Každé sklo vykazuje časovo závislé sklo-menné (*glass-transformation*) správanie

Toto správanie je pozorované len v určitom rozmedzí teplôt, pre ktoré sa používa v angličtine názov *glass transformation region* tj. sklo-menná oblasť. Vzhľadom na vyššie uvedené vlastnosti, sa zvyčajne definuje sklo ako: “ Amorfna pevná látka bez akýchkoľvek dlhých periodických štruktúr, majúca *glass transformation region*“ Akýkoľvek materiál vykazujúci sklo-menné správanie definujeme ako sklo.



Obr.3.1. Závislosti entalpie od teploty pre jednotlivé materiály

Stále sme však nedefinovali pojem správania skla zvaný *glass transformation*. Zvyčajne je vhodné si pri definícii pomôcť diagramom entalpie alebo objemu, závislých od teploty, ktorý je zobrazený na Obr. 3.1.. Keďže objem a entalpia sa správajú veľmi podobne v závislosti od teploty nezáleží na výbere veličiny použitej k definícii. V obidvoch prípadoch si môžeme predstaviť malý objem kvapaliny pri teplote nad teplotou topenia danej látky. Pri postupnom ochladzovaní kvapaliny sa štruktúra taveniny postupne mení a je určená teplotou pri ktorej taveninu udržíme. Ďalšie ochladzovanie vo všeobecnosti vedie k tvorbe kryštálov, dlho periodických atómových štruktúr. Ďalšie ochladzovanie kryštálu spôsobí pokles entalpie.

Pokiaľ sa kvapalina ochladí pod teplotu topenia bez tvorby kryštalickej štruktúry, vznikne podchladená kvapalina. Pri klesajúcej teplote sa preskupuje štruktúra kvapaliny, ale nedochádza k náhlemu poklesu entalpie spôsobenému nespojitou zmenou usporiadania štruktúry. S ďalším ochladzovaním stúpa viskozita kvapaliny. Viskozita môže postupným ochladzovaním stúpnúť na hodnoty tak extrémne vysoké, že kvapalina nie je schopná dosiahnuť hydrostatickú rovnováhu, a to i v rámci dlhých experimentálnych časov. Štruktúra začne zaostávať za tou, ktorá by nastala pri dostatočne dlhom čase. Krivka závislosti entalpie sa odčlení od krivky rovnováhy a začne postupne klesať až pokiaľ hodnoty viskozity nenarastú do takých rozmerov, že štruktúra kvapaliny sa môže považovať za



pevnú a nezávislú na teplote. Oblasť teplôt medzi hraničnými teplotami, pri ktorých je entalpia rovná kvapaline v rovnováhe a teplotou, pri ktorej má entalpia hodnotu porovnateľnú s entalpiou tuhej látky, je *glass transformation region*.

Keďže teplota, pri ktorej sa entalpia oddelí od krivky rovnováhy je kontrolovaná viskozitou kvapaliny, pomalšie ochladzovanie umožní entalpiu lepšie sledovať krivku rovnováhy k nižším teplotám. Oblasť *glass transformation* sa posunie do nižších teplôt a rovnako sa posunie aj teplota úplného ochladenia kvapaliny. Sklá získané jednotlivými procesmi ochladzovania majú odlišnú molekulárnu štruktúru. Sklo získané rýchlym ochladzovaním bude mať pri rovnakých teplotách, nižšiu entalpiu než sklo získané pomalým ochladzovaním.

Napriek tomu, že ku *glass transformation* dochádza len v určitom teplotnom rozmedzí, je vhodnejšie presne definovať člen, ktorý nám dovolí rozlíšiť dva typy skiel v závislosti od histórie ochladzovania. Ak predĺžime v diagrame priamky skla a podchladených kvapalín, pretnú sa vo *fictive temperature*. Pri teplote *fictive temperature* je štruktúra skla ekvivalentná štruktúre akejkoľvek kvapaliny. Hoci členenie skiel podľa hodnôt *fictive temperature* nie je plne uspokojujúcim spôsobom ich rozlišovania, dostatočne popisuje vplyv rýchlosti ochladzovania na štruktúru skla.

Ako vidno z Obr. 2.1. *glass transformation* dochádza v oblastiach teplôt a teda sa nedajú definovať len jednou hodnotou teploty. Je však možné definovať jednu počiatočnú hodnotu pre *glass transformation region* počas zahrievania kvapaliny. Táto teplota sa zvyčajne nazýva *glass transformation temperature* alebo *glass transition temperature* a označuje sa  $T_g$ . Presnú definíciu možno určiť pomocou analýzy kriviek teplotných rozťažností alebo teplotnou analýzou. Teplote  $T_g$  si môžeme predstaviť približnú teplotu, pri ktorej sa podchladená kvapalina stáva pevnou, resp. takou, pri ktorej sa začne správať tuhá látka viskoelasticky alebo viskoplasticky (v závislosti na fenomenologickom procese toku skla).

## 4. Numerické riešenie

### 4.1 Diskretizácia riešenia v jednom rozmere

Predpokladajme interval  $\Omega := [0, a] \subset \mathbb{R}$ , v ktorom hľadáme riešenie diferenciálnej rovnice.

Interval rozdeľme na  $i_{\max}$  podintervalov dĺžky  $h$ , platí  $h = \frac{a}{i_{\max}}$ . Získame sieť bodov

$x_i := i\delta x$  pre  $i = 0, \dots, i_{\max}$ . Ďalej predpokladajme len riešenie v týchto bodoch. Derivácia diferencovateľnej funkcie  $u$  je definovaná vzťahom

$$\frac{du}{dx} := \lim_{h \rightarrow 0} \frac{u(x+h) - u(x)}{h}. \quad (4.1)$$

Vyššie uvedenú spojitú deriváciu aproximujeme v bodoch  $x_i$  vzťahom

$$\left[ \frac{du}{dx} \right]_i^r = \frac{u(x_{i+1}) - u(x_i)}{h}. \quad (4.2)$$

Pričom  $h$  má konečnú veľkosť. Bod  $x_{i+1}$  je susedným bodom  $x_i$  a platí  $x_{i+1} = x_i + hx$ .

Aproximáciu (4.2) nazývame *forward difference*. Môžeme definovať jej podobnú *backward difference* v tvare

$$\left[ \frac{du}{dx} \right]_i^l = \frac{u(x_i) - u(x_{i-1}))}{h} \quad (4.3)$$

a *central difference*

$$\left[ \frac{du}{dx} \right]_i^c = \frac{u(x_{i+1}) - u(x_{i-1}))}{2h}. \quad (4.4)$$

Zmenšovanie rozmeru  $h$  (zvyšovanie počtu sieťových bodov  $i_{\max}$ ) vedie k presnejším aproximáciám derivácie. Chyba, ktorej sa použitím *forward difference* a *backward difference* dopustíme je rádu  $O(h)$ . Pri použití *central difference* dostávame presnejšiu aproximáciu s chybou rádu  $O(h^2)$ . Teda pri zdvojnásobení počtu bodov siete a výpočtu derivácií pomocou *central difference* môže klesnúť chyba aproximácie až na štvrtinu.

Aproximáciu druhej derivácie funkcie  $u$  definujeme vzťahom

$$\left[ \frac{d^2 u}{dx^2} \right]_i = \frac{u(x_{i+1}) - 2u(x_i) + u(x_{i-1}))}{h^2} \quad (4.5)$$

Majme obyčajnú diferenciálnu rovnicu druhého rádu

$$-\frac{d^2 u}{dx^2} + k \frac{du}{dx} = f \quad \text{v oblasti } \Omega \quad (4.6)$$

a Dirichletove okrajové podmienky

$$u(0) =: u_0, \quad u(a) =: u_{i_{\max}} \quad (4.7)$$

Použitím *central difference* (4.4) a aproximácie druhej derivácie (4.5) môžeme pre každý bod siete  $x_i$  s indexmi  $i = 1, \dots, i_{\max-1}$ , aproximovať riešenie diferenciálnej rovnice (4.7) rovnicami

$$\frac{u(x_{i+1}) - 2u(x_i) + u(x_{i-1}))}{h^2} + k \frac{u(x_{i+1}) - u(x_{i-1}))}{h} = f(x_i) \quad (4.8)$$

V maticovom zápise majú rovnice (4.8) tvar

$$Au = f \quad (4.9)$$

pričom jednotlivé členy rovnice (4.9) sú

$$A = \begin{pmatrix} a_{1,1} & \dots & a_{1,i_{\max-1}} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{i_{\max-1},1} & \dots & a_{i_{\max-1},i_{\max-1}} \end{pmatrix}, u = \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_{i_{\max-1}} \end{pmatrix}, f = \begin{pmatrix} f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_{i_{\max-1}}) \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

$u_i$  sú hodnoty funkcie  $u$  vo vnútorných bodoch výpočtovej siete  $x_i$ . Prvky matice  $A$  sú definované ako

$$a_{i,i} := \frac{2}{h^2}, \quad a_{i,i-1} := -\frac{k}{2h} - \frac{1}{h^2}, \quad a_{i,i+1} := \frac{k}{2h} - \frac{1}{h^2}, \quad a_{i,j} := 0 \quad \text{pre } |i-j| > 1. \quad (4.11)$$

Druhý člen diferenciálnej rovnice (4.6) je konvekčný člen. Vyššie navrhnuté riešenie rovnice (4.6) pre konvekčno-difúzne problémy používajúce *central difference* aproximáciu môže viesť k nestabilnému riešeniu pre riedko usporiadanú sieť. Výsledným riešením v takýchto prípadoch bývajú nefyzikálne oscilácie hľadaného riešenia. Pre správne riešenie by mali mať všetky vlastné hodnoty matice  $A$  kladné reálne časti. Avšak pri voľbe príliš

riedkeho usporiadania sieťových bodov dostávame záporné vlastné hodnoty. Záporné hodnoty dostávame pre

$$h > \frac{2}{|k|}. \quad (4.12)$$

Riešenie vysoko-konvekčných problémov pomocou *central difference* nutne vyžaduje použitie hustej siete bodov a je obzvlášť časovo a výpočtovo náročné pri riešení dvojrozmerných a trojrozmerných problémov.

Definujeme *upwind difference* aproximáciu závislú aj od hodnoty parametra  $k$ . *Upwind difference* definujeme ako rovnú *backward difference* pre záporné hodnoty parametra  $k$  a *forward difference* pre kladné hodnoty parametra  $k$ . Má tvar

$$\left[ \frac{du}{dx} \right]_i^{up} := \frac{(1 + \varepsilon)(u_i - u_{i-1}) + (1 - \varepsilon)(u_{i+1} - u_i)}{2h} \quad (4.13)$$

Pričom definujeme  $\varepsilon := \text{sign}(k)$ . Keď nahradíme vo vzťahu (4.8) *central difference* *upwind difference* dostávame všetky vlastné hodnoty matice  $A$  kladné a nezávisle od veľkosti sieťového kroku  $h$ . Nevýhodou použitia *upwind difference* je presnosť len rádu  $O(h)$ .

Pre zvýšenie presnosti výpočtu siete sa často používa aproximácia kombinujúca výsledky *upwind difference* a *central difference*.

$$\gamma \cdot \text{upwind difference} + (1 - \gamma) \cdot \text{central difference} \quad (4.14)$$

Parameter  $\gamma$  je váhový koeficient z intervalu  $[0,1]$ .

## 4.2. Numerické riešenie Navier-Stokesovej rovnice

Budeme sa zaoberať riešením Navier-Stokesovej rovnice pre nestlačiteľnú vysoko viskóznou tekutinu metódou konečných diferencií na striedavo usporiadanej sieti. Riešime pohybovú Navier-Stokesovu rovnicu (3.14) v bezrozmernom tvare

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \text{grad}) \vec{u} + \text{grad} p = \frac{1}{Re} \Delta \vec{u} + \vec{g}. \quad (4.15)$$

$Re$  je Reynoldsovo číslo definované pre charakteristický rozmer toku  $L$  a charakteristické rýchlosti  $u_\infty$  vzťahom

$$Re = \frac{\rho L u_\infty}{\mu}. \quad (4.16)$$

Predpokladáme nestlačiteľnú kvapalinu, platí teda podmienka

$$\operatorname{div} \vec{u} = 0. \quad (4.17)$$

Pokiaľ sa obmedzíme na dva rozmery môžeme prepísať zložky Navier-Stokesovej pohybovej rovnice (4.15) a podmienku nestlačiteľnosti do nasledujúcich rovníc:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial x} &= \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial(u^2)}{\partial x} - \frac{\partial uv}{\partial y} + g_x \\ \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial y} &= \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial(v^2)}{\partial y} - \frac{\partial uv}{\partial x} + g_y \end{aligned} \quad (4.18)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (4.19)$$

$g_x, g_y$  sú horizontálna a vertikálna zložka súčtu objemových síl,  $u$  je horizontálna zložka vektorového rýchlostného poľa  $\vec{u}$  a  $v$  je vertikálna zložka.

#### 4.2.1 Striedavo usporiadaná sieť

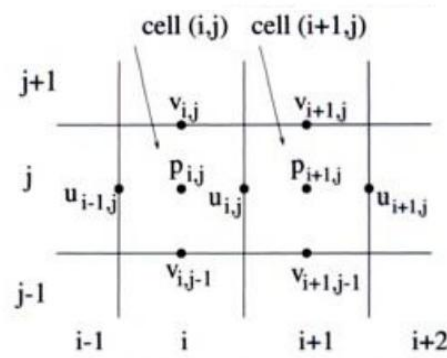
Predpokladajme obdĺžnikovú oblasť  $\Omega$ , ktorú definujeme ako

$$\Omega := [0, a] \times [0, b] \subset \mathbb{R}^2. \quad (4.20)$$

Na oblasti zavádzame sieť s veľkosťou kroku  $h$ , v oboch smeroch rovnakou. Bunkou budeme nazývať priestor vymedzený dvomi vertikálnymi a dvomi horizontálnymi susednými priamkami vedúcimi cez sieťové body. Bunku a neznáme hodnoty premenných v poli budeme označovať indexmi  $i$  a  $j$ . Oblasť rozčleníme na  $i_{\max}$  buniek v horizontálnom smere a  $j_{\max}$  vo vertikálnom smere

$$i_{\max} := \frac{a}{h} \quad a \quad j_{\max} := \frac{b}{h}. \quad (4.21)$$

Oblasť výpočtu Navier-Stokesových rovníc sa zvyčajne rozkladá do striedavo usporiadanej siete. Použijeme usporiadanie, v ktorom sa body výpočtu tlaku nachádzajú uprostred buniek, zložky horizontálneho rýchlostného poľa sa nachádzajú v stredoch vertikálnych hrán buniek a zložky vertikálneho rýchlostného poľa sa nachádzajú uprostred horizontálnych hrán buniek siete.

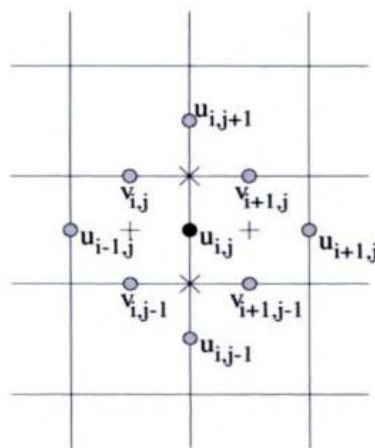


Obr. 4.1. Striedavo usporiadaná sieť

Striedavé rozloženie poľa tlaku a rýchlostných polí predchádza osciláciám, ku ktorým môže dôjsť v schémach, v ktorých sa nachádzajú hodnoty rýchlostí a tlaku v tom istom bode výpočtovej siete

#### 4.2.2 Podmienky na hranici

Na hraniciach výpočtovej oblasti sa rýchlostné pole nespojite mení. Pre správny výpočet hodnôt rýchlostných polí pri hraniciach, teda výpočet *forward difference*, je nevyhnutné dodefinovať hodnoty na hraniciach výpočtovej siete.



Obr. 4.2. Body nevyhnutné pre výpočet pohybovej rovnice v bode  $u_{i,j}$

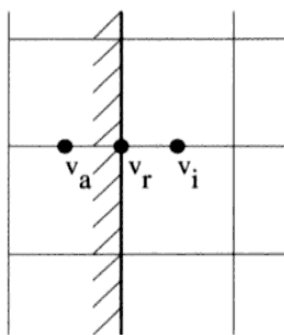
Prvú definujeme podmienku nulového sklzu na hraniciach (*no-slip condition*). Podmienka vychádza z vlastností viskózneho kvapaliny. Ak definujeme konštantnú rýchlosť na hranici, tak kvapalina v blízkom okolí hranice musí mať pôsobením viskózných síl rovnakú rýchlosť.

Pre statickú stenu platí, že hodnoty rýchlostného poľa patriace priamo hraniciam definujeme ako nulové:

$$\begin{aligned} u_{0,j} = 0, \quad u_{i_{\max},j} = 0, \quad j = 1, \dots, j_{\max} \\ v_{i,0} = 0, \quad v_{i,j_{\max}} = 0, \quad i = 1, \dots, i_{\max} \end{aligned} \quad (4.22)$$

Niektoré výpočtové body zložiek rýchlostného poľa neležia priamo na hranici, napr.  $v_a$  a  $v_i$  na Obr. 4.3. Podmienka nulového sklzu musí platiť i v takom prípade. Preto definujeme priemer rýchlostí v bodoch medzi ktorými sa nachádza hranica ako nulový:

$$\begin{aligned} v_{0,j} = -v_{1,j}, \quad v_{i_{\max}+1,j} = -v_{i_{\max},j}, \quad j = 1, \dots, j_{\max} \\ u_{i,0} = -u_{i,1}, \quad u_{i,j_{\max}+1} = -u_{i,j_{\max}}, \quad i = 1, \dots, i_{\max} \end{aligned} \quad (4.23)$$



Obr. 4.3. Rozloženie bodov pri hranici

V prípade posúvajúcej sa hranice definujeme hodnotu rýchlosti na hranici rovnú rýchlosti posunu hranice. Rovnako definujeme priemer hodnôt rýchlostí v bodoch medzi ktorými leží hranica.

Podmienka pre odtok cez hranicu (*outflow condition*) požaduje, aby derivácie oboch zložiek rýchlostí kolmej na oblasť hranice, kde kladieme podmienku, boli nulové. Požadujeme teda, aby sa tok na hranici nespojite nemenil. V diskretnom prípade používanej siete to znamená, že kladieme hodnoty danej zložky rýchlostného poľa na hranici rovnú hodnote v susednom bode v smere derivácie

$$\begin{aligned} u_{0,j} = u_{1,j}, \quad u_{i_{\max},j} = u_{i_{\max}-1,j}, \\ v_{0,j} = v_{1,j}, \quad v_{i_{\max}+1,j} = v_{i_{\max},j}, \quad j = 1, \dots, j_{\max} \\ u_{i,0} = u_{i,1}, \quad u_{i,j_{\max}+1} = u_{i,j_{\max}}, \\ u_{i,0} = u_{i,1}, \quad u_{i,j_{\max}+1} = u_{i,j_{\max}}, \quad i = 1, \dots, i_{\max} \end{aligned} \quad (4.24)$$

Podmienka pre prítok cez hranicu jednoducho pevne definuje hodnoty rýchlostí na hranici. V prípade zložiek rýchlostného poľa rovnobežných s oblasťou hranice, na ktorej

kladieme podmienku hodnotu, teda v prípade keď výpočtové uzly neležia priamo na hranici, hodnoty definujeme pomocou derivácie podobne ako pri podmienke nulového sklzu na hranici (4.23).

### 4.2.3 Výpočet v čase

Ako počiatočný čas definujeme čas  $t = 0$  a postupne určujeme hodnoty polí v nasledujúcich časoch posunutých o hodnotu  $\delta t$  až pokým nedosiahneme vopred určený čas  $t_{kon}$ . Jednotlivé časové hladiny budeme označovať indexom  $n$ . V časovej hladine  $t_n$  sú všetky hodnoty premenných definované a je možné z nich určiť hodnoty polí v časovej hladine  $t_{n+1}$ .

Hodnoty rýchlostných polí  $u$  a  $v$  v nasledujúcich časových hladinách môžeme odvodiť z rovnice (4.18) aproximovaním časovej derivácie zložiek rýchlostného poľa pomocou *forward difference*. Pre  $u$  a  $v$  v nasledujúcej časovej hladine platí:

$$\begin{aligned} u^{(n+1)} &= u^{(n)} + \delta t \left[ \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial(u^2)}{\partial x^2} - \frac{\partial(uv)}{\partial y} + g_x - \frac{\partial p}{\partial x} \right] \\ v^{(n+1)} &= v^{(n)} + \delta t \left[ \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial(v^2)}{\partial y^2} - \frac{\partial(uv)}{\partial x} + g_y - \frac{\partial p}{\partial y} \right]. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Zavedieme si pomocné veličiny:

$$\begin{aligned} F &:= u^{(n)} + \delta t \left[ \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial(u^2)}{\partial x^2} - \frac{\partial(uv)}{\partial y} + g_x \right] \\ G &:= v^{(n)} + \delta t \left[ \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial(v^2)}{\partial y^2} - \frac{\partial(uv)}{\partial x} + g_y \right]. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Dosadením pomocných veličín do pohybových rovníc (4.25) dostávame:

$$\begin{aligned} u^{(n+1)} &= F^{(n)} + \delta t \frac{\partial p^{(n+1)}}{\partial x} \\ v^{(n+1)} &= G^{(n)} + \delta t \frac{\partial p^{(n+1)}}{\partial y}. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Toto riešenie je *explicitné* v rýchlostných poliach a *implicitné* v priestore. Dosadením vyššie uvedených rovníc do podmienky nestlačiteľnosti dostaneme *Poissonovu rovnicu* pre tlak v nasledujúcej časovej hladine v tvare



$$\frac{\partial^2 p^{(n+1)}}{\partial^2 x} + \frac{\partial^2 p^{(n+1)}}{\partial^2 y} = \frac{1}{\delta t} \left( \frac{\partial F^{(n)}}{\partial x} + \frac{\partial G^{(n)}}{\partial y} \right) \quad (4.28)$$

Na základe vyššie odvodených vzťahov môžeme výpočet pre každú časovú hladinu rozčleniť do troch krokov:

- Výpočet hodnôt pomocných funkcií F a G
- Riešenie Poissonovej rovnice pre tlak p
- Určenie hodnoty zložiek rýchlostného poľa u a v d'alšom časovom kroku

Vypočítať hodnoty F a G vieme priamo použitím *upwind difference* aproximácie a podobne vieme aproximovať aj zložky rýchlostného pola. Avšak Poissonovu rovnicu nevieme riešiť priamym využitím *upwind difference*.

#### 4.2.4 Riešenie Poissonovej rovnice

Riešenie Poissonovej rovnice nutne vyžaduje definované hraničné hodnoty tlaku. Hraničné hodnoty vieme určiť vektorovým prenasobením pohybových rovníc s jednotkovým normálovým vektorom na plochu ohraničujúcu výpočtovú oblasť

$$\begin{aligned} \text{grad} p^{(n+1)} \cdot \vec{n} &= \frac{\partial p^{(n+1)}}{\partial x} n_1 + \frac{\partial p^{(n+1)}}{\partial y} n_2 \\ &= -\frac{1}{\delta t} \left( (u^{(n+1)} - F^{(n)}) n_1 - (v^{(n+1)} - G^{(n)}) n_2 \right). \end{aligned} \quad (4.29)$$

Požadujeme rovnosť tlakov na hranici. Tento prístup sa nazýva *Chronin projection method* navrhnutý Chroninom (Chronin, 1969) a Temamom (Temam, 1969).

Takéto riešenie je ekvivalentné SMAC metóde (Amsden & Harlow, 1970a), v ktorej je z rovnice kontinua určená korekcia na tlak  $\delta p$ . Pripočítaním korekcie tlaku získame tlak v nasledujúcej časovej hladine. Tretiu možnosť navrhol Hirt (Hirt et al., 1975) a skladá sa z výpočtu tlaku a rýchlosti v jednej časovej hladine  $n$ .

Pomocou vzťahu pre aproximáciu druhej derivácie (4.5) rozpíšeme Poissonovu rovnicu (4.28) do tvaru

$$\begin{aligned} \frac{p_{i+1,j}^{(n+1)} - 2p_{i,j}^{(n+1)} + p_{i-1,j}^{(n+1)}}{h^2} + \frac{p_{i,j+1}^{(n+1)} - 2p_{i,j}^{(n+1)} + p_{i,j-1}^{(n+1)}}{h^2} \\ = \frac{1}{\delta t \cdot h} \left( F_{i,j}^{(n)} - F_{i-1,j}^{(n)} + G_{i,j}^{(n)} - G_{i,j-1}^{(n)} \right). \end{aligned} \quad (4.30)$$

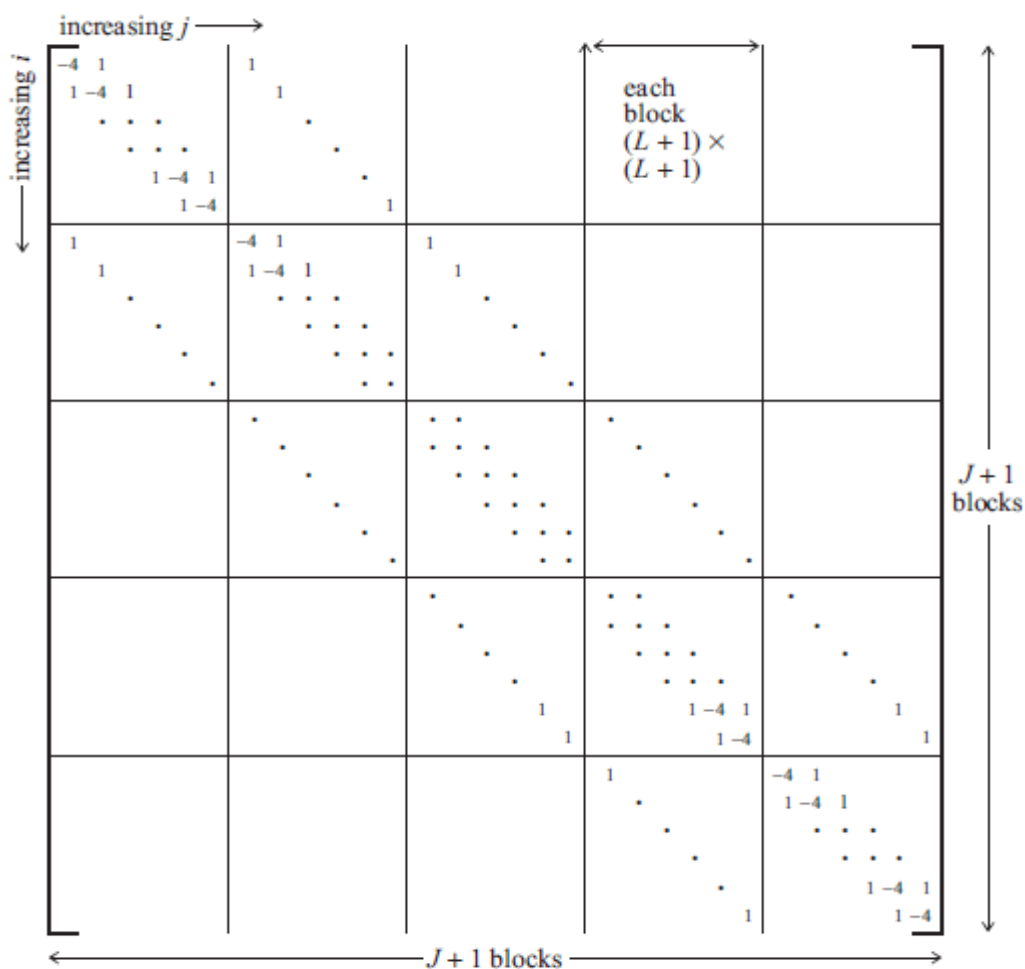
Pre výpočet Poissonovej rovnice (4.30) musíme riešiť veľkú a veľmi riedku maticu. Aby sme tento systém lineárnych rovníc mohli riešiť vo forme matice, musíme prepísať pole tlakov a pomocných funkcií  $F$  a  $G$  do vektorov, najjednoduchšie preindexovaním

$$k = i(J + 1) + j \quad \text{pre } i = 0, 1, \dots, J \quad j = 0, 1, \dots, L \quad (4.31)$$

Preindexovaním polí  $p$  a súčtu pomocných funkcií do vektorov  $P$  a  $\Phi$  získame systém lineárnych rovníc (4.51) ako súčin

$$A.P' = h^2 \Phi' \quad (4.32)$$

Matica  $A$  je tzv. trojdiagonálna matica so strapcami zobrazená na Obr.4.5.



Obr. 4.5 Trojdiagonálna matica so strapcami (*tridiagonal matrix with fringes*)

Problém je neriešiteľný pokiaľ, nepoznáme hraničné hodnoty tlaku a pomocných funkcií  $F$  a  $G$ . Pre určenie hraničných podmienok kladieme podmienku (4.29). V diskretizovanom tvare má napr. podmienka pre hornú hranicu ( $j=0$ ) podobu

$$\frac{p_{i,0}^{(n+1)} - p_{i,1}^{(n+1)}}{h} = \frac{1}{\delta t} (v_{i,0}^{(n+1)} - G_{i,0}^{(n)}) \quad (4.33)$$

Po opätovným dosadením do Poissonovej rovnice dostaneme vzťah

$$\frac{p_{i+1,1}^{(n+1)} - 2p_{i,1}^{(n+1)} + p_{i-1,1}^{(n+1)}}{h} + \frac{p_{i,2}^{(n+1)} - p_{i,1}^{(n+1)}}{h} = \frac{1}{\delta t} (F_{i,1}^{(n)} - F_{i-1,1}^{(n)} + G_{i,1}^{(n)} - v_{i,0}^{(n+1)}). \quad (4.34)$$

Vzťah (4.34) poukazuje na fakt, že nezáleží na voľbe hodnôt  $G_{i,0}^{(n)}$ , analogické riešenia by sme dostali aj pre  $F_{0,j}^{(n)}$  a ďalšie hodnoty pomocných veličín  $F$  a  $G$  na hraniciach. Hodnoty sa pri zahrnutí *Chronin projection method* navzájom odčítajú a môžu byť ľubovoľne zvolené. Najvýhodnejšou voľbou sú:

$$\begin{aligned} F_{0,j} &= u_{0,j} & F_{i_{\max},j} &= u_{i_{\max},j} & \text{pre } j &= 1, \dots, j_{\max} \\ G_{i,0} &= v_{i,0} & G_{i,j_{\max}} &= v_{i,j_{\max}} & \text{pre } i &= 1, \dots, i_{\max} \end{aligned} \quad (4.35)$$

Definovanie hraničných podmienok podľa (4.35) nám umožní zjednodušiť hraničnú podmienku (4.31) pre tlak do podoby rovníc:

$$\begin{aligned} p_{0,j} &= p_{1,j} & p_{i_{\max}+1,j} &= p_{i_{\max},j} & \text{pre } j &= 1, \dots, j_{\max} \\ p_{i,0} &= p_{i,1} & p_{i,j_{\max}+1} &= p_{i,j_{\max}} & \text{pre } i &= 1, \dots, i_{\max} \end{aligned} \quad (4.36)$$

Na riešenie systému rovníc XX je Gaussova eliminácia časovo náročná a nevhodná. Ani Jacobiho rotácia nie je vhodná pre veľké matice. Vhodnejšie sú iteratívne metódy, ktoré postupnými odhadmi prerozdelenia tlaku konvergujú k riešeniu za daných podmienok. Jednou z takých metód je Gauss-Seidelova metóda. Jej vylepšenou verziou je *successive overrelaxation method* (SOR). Výpočet tlaku v časovej hladine  $n$  má potom tvar

$$\begin{aligned} p_{i,j}^{it+1} &= (1-\omega) p_{i,j}^{it} + \frac{\omega}{4} \cdot (p_{i+1,j}^{it} + p_{i-1,j}^{it+1} + p_{i,j+1}^{it} + p_{i,j-1}^{it+1} - rhs_{i,j}) \\ \text{pre } it &= 1, \dots, it_{\max}, \quad i = 1, \dots, i_{\max} \quad a \quad j = 1, \dots, j_{\max} \end{aligned} \quad (4.37)$$

$rhs_{i,j}$  je pravá strana Poissonovej rovnice (4.30),  $\omega$  je parameter z intervalu [0,2]. Index  $it$  určuje iteráciu. Okrajové podmienky (4.36) je možné priamo zahrnúť vo vzťahu (4.37) vo forme koeficientov, ktoré sú, buď nulové, alebo rovné jednej v závislosti od indexov  $i$  a  $j$ . Výpočtovo najefektívnejší spôsob je predefinovanie hraničných hodnôt tlaku nasledovne:

$$\begin{aligned}
p_{0,j}^{it+1} &= p_{1,j}^{it} & p_{i_{\max}+1,j}^{it+1} &= p_{i_{\max},j}^{it} & pre & j = 1, \dots, j_{\max} \\
p_{i,0}^{it+1} &= p_{i,1}^{it} & p_{i,j_{\max}+1}^{it+1} &= p_{i,j_{\max}}^{it} & pre & i = 1, \dots, i_{\max}
\end{aligned}
\tag{4.38}$$

Hodnoty tlaku v nasledujúcej iterácii teda kopírujú hodnoty v susedných bodoch. Takáto zdanlivo obmedzujúca metóda v mnohých prípadoch predchádza nefyzikálnym nárastom alebo poklesom tlaku.

Iteratívny výpočet ukončíme, keď počet iterácií dosiahol predpísanú hodnotu alebo je splnená podmienka normy rezíduí. Definujeme rezíduum  $r_{i,j}^{it}$

$$r_{i,j}^{it} = \frac{1}{h^2} (p_{i+1,j}^{it} + p_{i-1,j}^{it} + p_{i,j+1}^{it} + p_{i,j-1}^{it} - 4p_{i,j}^{it}) - rhs_{i,j} \tag{4.39}$$

Dve najčastejšie používané normy sú  $L^2$  norma

$$\|r_{i,j}^{it}\|_2 = \left( \frac{1}{i_{\max} j_{\max}} \sum_{i=1}^{i_{\max}} \sum_{j=1}^{j_{\max}} (r_{i,j}^{it})^2 \right)^{1/2} \tag{4.40}$$

a maximová norma

$$\|r_{i,j}^{it}\|_{\infty} := \max \left\{ |r_{i,j}^{it}| \mid i = 1, \dots, i_{\max} \quad j = 1, \dots, j_{\max} \right\} \tag{4.41}$$

Keď hodnota zvolenej normy klesne pod vopred stanovený koeficient  $\varepsilon$ , pokladáme podmienku za splnenú.

#### 4.2.5 Podmienka stability výpočtu

Pri numerickej simulácii musia byť splnené podmienky veľkosti časového kroku a sieťového kroku  $h$ . Najčastejšie používané sú tieto tri podmienky:

$$\frac{2\delta t}{Re} < h^2, \quad |v_{\max}| \delta t < h, \quad |u_{\max}| \delta t < h \tag{4.42}$$

$|v_{\max}|$  a  $|u_{\max}|$  sú maximálne hodnoty vo vertikálnom a horizontálnom smere. Podstatou všetkých troch metód je *Courant-Friedrich-Levy (CFL) podmienka*. Pointou CFL je, že žiadna častica kvapaliny nemôže za čas  $\delta t$  prekonať vzdialenosť väčšiu než sieťový krok  $h$ . Na základe týchto podmienok bola zavedená adaptívna kontrola časového kroku (Tome & McKee, 1994).

Jej princíp je voľba časového kroku v každej iterácii

$$\delta t = \tau_{sf} \min \left( h^2 \frac{Re}{2}, \frac{h}{|v_{max}|}, \frac{h}{|u_{max}|} \right) \quad (4.43)$$

$\tau_{sf}$  je *safety factor* z intervalu [0,1].

#### 4.2.6 Algoritmus výpočtu

Zhrnutím jednotlivých krokov výpočtu toku viskózne kvapaliny pomocou striedavej siete dostaneme nasledujúci postup:

##### **Postup:**

Nastavíme  $n = 0, t = 0$ .

Priradíme počiatočné hodnoty rýchlostným poliam a tlaku.

Pokiaľ platí  $t < t_{kon}$ :

Ak používame adaptívnu metódu určenia časového kroku tak použijeme (4.43).

Prepočítame rýchlostné pole podľa hraničných podmienok (4.22)-(4.24) v závislosti od toku.

Vypočítame hodnoty polí  $F^{(n)}$  a  $G^{(n)}$  (4.26).

Určíme pravú stranu Poissonovej rovnice  $rhs_{i,j}$  (4.29).

Počítame Poissonovu rovnicu (4.37) iteratívnou metódou pokým nedosiahneme stanovený počet iterácií, alebo podmienku pre normu iterácie (4.40).

Vypočítame rýchlostné polia v nasledujúcom časovom kroku (4.27).

$t = t + \delta t$ .

$n = n + 1$ .

$n$ - index iteračnej hladiny

$t_{kon}$  - čas ukončenia výpočtu

#### 4.3. Vírivosť a prúdová funkcia

Ďalšou možnou metódou výpočtu toku je výpočet vo vírivosti a prúdovej funkcií. Toto riešenie zoberieme ako alternatívu k predchádzajúcemu.

Prúdová funkcia  $\psi$  je definovaná ako

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} = u, \quad \frac{\partial \psi}{\partial x} = v \quad (4.44)$$

a vírivosť toku  $\xi$

$$\xi = \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \quad (4.45)$$

Krivky spájajúce rovnaké hodnoty prúdovej funkcie sú pre ustálené toky totožné s prúdočiarami toku. Táto vlastnosť sa často využíva pri spracovaní dát.

Dosadením prúdovej funkcie a vírivosti do Navier-Stokesovej rovnice a podmienky nestlačiteľnosti získame rovnice:

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = -\text{div}(\vec{u}) + \frac{1}{Re} \cdot \nabla^2 \xi, \quad \nabla^2 \psi = \xi \quad (4.46).$$

Rovnice (4.46) nutne spĺňajú podmienku nestlačiteľnosti kvapaliny a zároveň sú vhodnejšie pre taký výpočet, počas ktorého priamo chceme odhad prúdočiar toku, lebo poskytuje hodnoty poľa vírivosti a poľa prúdovej funkcie priamo počas výpočtu.

Rovnako ako pri riešení Navier-Stokesovej rovnice budeme riešiť tok v obdĺžnikovej oblasti (4.20). Hodnoty vírivosti určujeme uprostred výpočtových buniek a teda sa nejedná o použitie striedavo usporiadanej siete.

### 4.3.1 Výpočet prúdovej funkcie a vírivosti v čase

Riešenie upravenej Navier-Stokesovej rovnice (4.46) aproximujeme riešením v podobe do časových hladín, analogicky s riešením v rýchlostnom a poli tlakov. Hlavný časový krok v rámci vírivosti je definovaný v podobe

$$\xi_{i,j}^{(n+1)} \doteq \xi_{i,j}^{(n)} + \delta t \left[ -\text{div} \left( \xi_{i,j}^{(n)} \vec{u}_{i,j}^{(n)} \right) + \frac{1}{Re} \nabla^2 \xi_{i,j}^{(n)} \right] \quad (4.47)$$

Pre zjednodušenie zavádzame pomocnú funkciu

$$\gamma_{ij}^{(n)} = -\text{div} \left( \xi_{i,j}^{(n)} \vec{u}_{i,j}^{(n)} \right) + \frac{1}{Re} \nabla^2 \xi_{i,j}^{(n)} \quad (4.48)$$

Rovnicu (4.48) rozpíšeme do podoby

$$\gamma_{i,j}^{(n)} = - \left[ \xi_{i,j}^{(n)} \left( \frac{\partial u_{i,j}^{(n)}}{\partial x} + \frac{\partial v_{i,j}^{(n)}}{\partial y} \right) + u_{i,j}^{(n)} \frac{\partial \xi_{i,j}^{(n)}}{\partial x} + v_{i,j}^{(n)} \frac{\partial \xi_{i,j}^{(n)}}{\partial y} \right] + \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial^2 \xi_{i,j}^{(n)}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \xi_{i,j}^{(n)}}{\partial y^2} \right) \quad (4.49)$$

jednotlivé derivácie v rovnici (4.49) aproximujeme diskrétnymi vzťahmi.

Pokračujeme riešením Poissonovej rovnice

$$\nabla^2 \psi_{i,j}^{t+1} = \xi_{i,j}^{t+1} \quad (4.50).$$

Riešenie je analogické k riešeniu Poissonovej rovnice pre tlak

$$\psi_{i+1,j}^t + \psi_{i-1,j}^t + \psi_{i,j+1}^t + \psi_{i,j-1}^t - 4\psi_{i,j}^t = h^2 \xi_{i,j}^t \quad (4.51)$$

Podobne ako pri riešení Poissonovej rovnice pre tlak musíme prepísať pole prúdových funkcií a pole vírivosti do tvaru vektorov.

Systém rovníc (4.51) vieme riešiť len pre vnútorné body, pre zvyšné kladieme nulové okrajové podmienky. Preindexovaním polí  $\psi$  a  $\xi$  do vektorov  $\Psi$  a  $\Xi$  získame súčin

$$A \cdot \Psi^t = h^2 \Xi^t \quad (4.52)$$

Poissonovu rovnicu (4.52) riešime pomocou metódy multigrid, teda Jacobiho iterácií

$$\Psi_i^{it+1} = \frac{h^2 \Xi_i - \sum_{j=1, j \neq i}^{N-1} A_{i,j} \Psi_j^{it+1, it}}{A_{i,i}} \quad (4.53)$$

Metóda multigrid je dosť často používanou metódou, je vhodné ju otestovať pri výpočte prúdovej funkcie a spoznať jej výpočtové vlastnosti. Podmienky pre ukončenie výpočtu iterácií kladieme rovnaké ako pri riešení Poissonovej rovnice (4.30). Následne spätne preindexujeme vektor prúdových funkcií do tvaru matice.

### 4.3.2. Algoritmus výpočtu pomocou vírivosti a prúdovej funkcie

**Postup:**

Nastavíme  $n = 0, t = 0$ .

Priradíme počiatočné hodnoty rýchlostným poliam.

Vypočítame hodnoty prúdovej funkcie a vírivosti.

Pokiaľ platí  $t < t_{kon}$ :

Preusporiadame pole vírivosti do vektoru.

Pomocou metódy multigrid riešime Poissonovu rovnicu, pokým nedosiahneme stanovený počet iterácií alebo podmienku pre normu iterácie (4.38).

Vírivosť preusporiadame naspäť.

Prepočítam hodnoty vírivosti pre nasledujúcu časovú hladinu.

$t = t + \delta t$ .

$n = n + 1$ .

Prípadne doplníme výpočet rýchlostí a tlaku v určitých časových hladinách pre ucelenie dátového alebo grafického výstupu.

### 4.4. Riešenie energetickej rovnice

Aby sme mohli správne vypočítať teplotu  $T$  kvapaliny musíme sa zaoberať termodynamickými vlastnosťami kvapaliny. Vychádzame zo zákona zachovania energie (3.30). Predpokladáme konštantnú tepelnú vodivosť  $\alpha$ , zanedbateľnú viskóznú disipáciu energie a zdroj tepla  $q'''$ . Bilančná rovnica má potom tvar

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u} \cdot \text{grad} T = \alpha \Delta T + q''' \quad (4.54)$$

Ak chceme riešiť prípady zahrňujúce tepelne hnanú konvekciu alebo tepelne závislú viskozitu je nevyhnutný výpočet teploty. Zohriata kvapalina má menšiu hustotu než nezohriata a v gravitačnom poli na ňu pôsobí Archimedova sila. Úplné zahrnutie pôsobenia zmeny teploty na výsledné riešenie je veľmi komplikované. Priestorovo nekonštantná hodnota hustoty je v rozpore s doposiaľ používanou podmienkou nestlačiteľnosti kvapaliny. Numerické riešenie takéhoto problému je omnoho komplikovanejšie než pôvodného a vedie k ťažko riešiteľným nelineárnym rovniciam. Obmedzíme sa teda na najčastejšie používané a najintuitívnejšie priblíženie – Boussinqovu aproximáciu. Boussinqova aproximácia predpokladá:

- Hustota je všade konštantná s výnimkou vztlakových členov.
- Viskózná disipácia je zanedbateľne malá.



Prvý predpoklad nám umožňuje, napriek rôznym hodnotám teploty v objeme, ponechať rovnicu kontinua v pôvodnom tvare a pracovať s podmienkou nestlačiteľnosti. Zmena hustoty sa prejaví len v zmene členov objemových síl. Viskózna disipácia je pre nami definovaný problém zanedbateľne malá, jej zahrnutie by zbytočne predlžovalo výpočtový čas programu a komplikovalo riešenie pohybovej rovnice.

Po zahrnutí Boussinqovej aproximácie má pohybová rovnica tvar

$$\rho_{\infty} \left( \frac{\partial}{\partial t} \bar{u} + (\bar{u} \cdot \text{grad}) \bar{u} \right) + \text{grad } p = \mu \Delta \bar{u} + \rho(T) \bar{g} . \quad (4.55)$$

(Dynamickú viskozitu  $\mu$  budeme zatiaľ brať ako tepelne nezávislú a zahrnutiu efektov jej tepelnej závislosti sa budeme venovať neskôr)

Boussinqovu aproximácia ďalej predpokladá lineárny vzťah medzi hustotou  $\rho$  a teplotou  $T$

$$\rho(T) = \rho_{\infty} (1 - \beta(T(\bar{x}, t) - T_{\infty})), \quad \beta := -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T} \quad (4.56)$$

$T_{\infty}$  a  $\rho_{\infty}$  sú referenčné hodnoty teploty a hustoty. Pohybovú rovnicu (4.55) môžeme teda prepísať do tvaru

$$\rho_{\infty} \left( \frac{\partial}{\partial t} \bar{u} + (\bar{u} \cdot \text{grad}) \bar{u} \right) + \text{grad } p = \mu \Delta \bar{u} + \rho_{\infty} (1 - \beta(T(\bar{x}, t) - T_{\infty})) \bar{g} . \quad (4.57)$$

#### 4.4.1 Hraničné podmienky

Budeme používať dve hraničné podmienky. Pre ich správny popis si rozdelíme hranicu na dve časti  $\Gamma_1$  a  $\Gamma_2$ .

Dirichletova hraničná podmienka predpokladá definovanú, konštantnú teplotu na hranici. Teplota na hranici sa nemení v závislosti od teploty kvapaliny.

$$T|_{\Gamma_1} = T_1 \quad (4.58)$$

je Dirichletova hraničná podmienka. Rovnica (4.58) vyjadruje to, že hranica je ohrievaná, alebo ochladzovaná a efekt ochladenia, zohriatia hranice kvapalinou je zanedbateľný.

Neumannova hraničná podmienka je

$$-\kappa \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{\Gamma_2} = q_{\omega} . \quad (4.59)$$

$\kappa$  je tepelná vodivosť kvapaliny a  $q_w$  je tepelný tok cez hranicu. Táto hraničná podmienka popisuje aké množstvo energie odovzdala kvapalina hranici. Táto podmienka zohľadňuje materiálové vlastnosti kvapaliny a steny a rozdiel ich teplôt na hranici. Neumannova hraničná podmienka určuje rýchlosť ochladzovania a zohrievania v závislosti nielen od teploty okolia, ale aj od tepelnej vodivosti steny. Ak je  $q_w = 0$ , tak takúto hraničnú podmienku nazývame adiabatická. Adiabatická podmienka je ekvivalentom dokonale tepelne izolovanej kvapaliny.

#### 4.4.2 Numerické riešenie energetickej rovnice

Podobne ako pri pohybovej rovnici sa pre jednoduchosť odvodenia obmedzíme na bezrozmernú energetickeú rovniciu. Rozpísaním bilančnej rovnice (4.54) pre dvojrozmerný prípad dostaneme rovnicu

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (uT) + \frac{\partial}{\partial y} (vT) = \alpha \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + q'''. \quad (4.60)$$

Hodnoty teplôt rovnako ako hodnoty tlakov budeme určovať v strede bunky. Použitím *forward difference* v čase podobne ako pri pohybovej rovnici dostaneme diskretnú rovnicu určujúcu hodnoty teplôt v časovej hladine  $n + 1$

$$T_{i,j}^{(n+1)} = T_{i,j}^{(n)} + \delta t \cdot \frac{\alpha \cdot \mu}{\rho} \left( \left[ \frac{\partial^2 T^{(n)}}{\partial x^2} \right]_{i,j} + \left[ \frac{\partial^2 T^{(n)}}{\partial y^2} \right]_{i,j} \right) + \delta t \cdot \left( q_{i,j}^{m(n)} - \left[ \frac{\partial(u^{(n)}T^{(n)})}{\partial t} \right]_{i,j} - \left[ \frac{\partial(v^{(n)}T^{(n)})}{\partial t} \right]_{i,j} \right). \quad (4.61)$$

Podobne ako pri pohybovej rovnici budeme používať *upwind difference*, kombinujúcu *central difference* a *forward difference*.

Pokiaľ neuvažujeme nekonštantnú viskozitu, môžeme vzťah (4.61) prepísať do bezrozmernej energetickej rovnice. Aby sme tak mohli urobiť definujeme pomocné veličiny:

$$T^* := \frac{T - T_\infty}{T_\Delta}, \quad \beta^* := T_\Delta \beta, \quad q^{m*} := \frac{L}{T_\Delta u_\infty} q'''. \quad (4.62)$$

$T_\infty$  je referenčná teplota a  $T_\Delta$  je škálovací parameter. Dosadením preškálovaných bezrozmerných premenných (4.62) do pohybovej rovnice (4.57) dostávame vzťah

$$\frac{\partial}{\partial t^*} \vec{u}^* + (\vec{u}^* \cdot \text{grad}^*) \vec{u}^* + \text{grad}^* p^* = \frac{1}{Re} \Delta^* \vec{u}^* + (1 - \beta^* T^*) \vec{g}^* \quad (4.63)$$

a energetickú rovnicu

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \vec{u}^* \cdot \text{grad}^* T^* = \frac{1}{Re} \frac{1}{Pr} \Delta^* T^* + q^{m*} \quad (4.64)$$

$Pr$  je Prandtlovo číslo

$$Pr := \frac{\nu}{\alpha} \quad (4.65)$$

ktoré je na rozdiel od Reynoldsového čísla materiálovou vlastnosťou kvapaliny. Typické hodnoty Prandtlovo čísla sú v rozsahu 3 až 300.

#### 4.4.3. Podmienka stability výpočtu

Podmienka stability pre tok s nenulovými gradientami teploty a tepelne závislou viskozitou je rozšírená z pôvodnej (4.42) o

$$\frac{4 \cdot \delta t \cdot \alpha}{Re} < \nu_{\min} \cdot h^2 \quad (4.66)$$

Adaptívna zmena časového kroku počas výpočtu bude mať tvar

$$\delta t = \tau_{sf} \min \left( \frac{Re \cdot \nu_{\min} \cdot h^2}{4}, \frac{Re \cdot h}{2}, \frac{h}{|u_{\max}|}, \frac{h}{|v_{\max}|} \right) \quad (4.67)$$

#### 4.4.4 Vztlakové členy

Do výpočtu musíme nevyhnutne zahrnúť aj vztlakové členy, objemové sily, ktoré sme v predchádzajúcej podkapitole neuvažovali. Najvýhodnejší spôsob je rozšíriť už definované pomocné veličiny  $F$  a  $G$ :

$$\begin{aligned} \tilde{F}_{i,j}^{(n)} &= F_{i,j}^{(n)} - \beta \frac{\delta t}{2} (T_{i,j}^{(n+1)} + T_{i+1,j}^{(n+1)}) \cdot g_x \\ \tilde{G}_{i,j}^{(n)} &= G_{i,j}^{(n)} - \beta \frac{\delta t}{2} (T_{i,j}^{(n+1)} + T_{i,j+1}^{(n+1)}) \cdot g_y \end{aligned} \quad (4.68)$$

Analogicky s riešením Navier-Stokesových pohybových rovníc pre určenie rýchlosti v ďalšej časovej hladine bez vztlakových členov () zapisujeme riešenie :

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{(n)} &= \tilde{F}_{i,j}^{(n)} - \frac{\delta t}{h} (p_{i+1,j}^{(n+1)} - p_{i,j}^{(n+1)}) \\ v_{i,j}^{(n)} &= \tilde{G}_{i,j}^{(n)} - \frac{\delta t}{h} (p_{i,j+1}^{(n+1)} - p_{i,j}^{(n+1)}) \end{aligned} \quad (4.69)$$

#### 4.4.5 Rozšírenie algoritmu o vztlakové členy

##### Postup:

Nastavíme  $n = 0, t = 0$ .

Priradíme počiatočné hodnoty rýchlostným poliam a tlaku.

Pokiaľ platí  $t < t_{kon}$  :

Ak používame adaptívnu metódu určenia časového kroku tak použijeme (4.67).

Prepočítame rýchlostné pole podľa hraničných podmienok (4.22)-(4.24) v závislosti od toku.

Určíme hodnoty teplôt na hraniciach, podľa podmienok (4.58), alebo (4.59)

Vypočítame hodnoty teplôt v aktuálnom časovom kroku, podľa (4.61)

Vypočítame hodnoty polí  $\tilde{F}_{i,j}^{(n)}$  a  $\tilde{G}_{i,j}^{(n)}$  zo vzťahov (4.66)

Určíme pravú stranu Poissonovej rovnice  $rhs_{i,j}$  (4.29)

Počítame Poissonovu rovnicu (4.35) iteračnou metódou pokým nedosiahneme stanovený počet iterácií, alebo podmienku pre normu iterácie (4.38)

Vypočítame rýchlostné polia v nasledujúcom časovom kroku (4.27)

$t = t + \delta t$

$n = n + 1$

#### 4.5 Nekonštantná viskozita

Pre výpočet toku skla použijeme a porovnáme dva rozličné algoritmy. Prvý algoritmus bude pokladať nulové derivácie viskozity a druhý ich zahrnie vo výpočte. Predpoklad nulových derivácií viskozity je veľmi častý, ale v literatúre nie je často podložený. Pri mnohých tokoch s nekonštantnou viskozitou sa primárne predpokladá tvar (4.15). I keď pri jeho odvádzaní sa zanedbáva práve derivácia viskozity v priestore, Pri odvádzaní algoritmu pre tok z nekonštantnou viskozitou musíme použiť vzťah (3.17)

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \text{grad}) \vec{u} = \vec{g} - \frac{1}{\rho} \text{grad} p + \frac{\mu}{\rho} \Delta \vec{u} + \text{rot} \vec{u} \cdot \text{grad} \mu. \quad (4.70)$$

Pri riešení takýchto tokov nemôžeme vychádzať z bezrozmerného tvaru Navier-Stokesovej rovnice, zápisu pomocou Reynoldsovo čísla. Analogicky s postupom pri bezrozmernej formulácii budeme postupovať vo výpočtových hladinách označovaných indexom  $n$ . Použitím vzťahu pre *forward difference* rozložíme (4.66) do rovníc:

$$\begin{aligned} u^{(n+1)} &= u^{(n)} + \delta t \left[ \frac{\mu}{\rho} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial(u^2)}{\partial x^2} - \frac{\partial(uv)}{\partial y} + g_x - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \left( \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial \mu}{\partial x} \right] \\ v^{(n+1)} &= v^{(n)} + \delta t \left[ \frac{\mu}{\rho} \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial(v^2)}{\partial y^2} - \frac{\partial(uv)}{\partial x} + g_y - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \left( \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial \mu}{\partial x} \right]. \end{aligned} \quad (4.71)$$

Analogicky s predchádzajúcimi definujeme pomocné veličiny  $F$  a  $G$ .

$$\begin{aligned} F &:= u^{(n)} + \delta t \left[ \frac{\mu}{\rho} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial(u^2)}{\partial x^2} - \frac{\partial(uv)}{\partial y} + g_x + \left( \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial \mu}{\partial x} \right] \\ G &:= v^{(n)} + \delta t \left[ \frac{\mu}{\rho} \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial(v^2)}{\partial y^2} - \frac{\partial(uv)}{\partial x} + g_y + \left( \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial \mu}{\partial x} \right]. \end{aligned} \quad (4.72)$$

Dosadením pomocných veličín do pohybových rovníc (4.25) dostávame:

$$\begin{aligned} u^{(n+1)} &= F^{(n)} + \frac{\delta t}{\rho} \frac{\partial p^{(n+1)}}{\partial x} \\ v^{(n+1)} &= G^{(n)} + \frac{\delta t}{\rho} \frac{\partial p^{(n+1)}}{\partial y}. \end{aligned} \quad (4.73)$$

Dosadením vyššie uvedených rovníc do podmienky nestlačiteľnosti dostaneme Poissonovu rovnicu pre tlak v nasledujúcej časovej hladine v tvare

$$\frac{\partial^2 p^{(n+1)}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p^{(n+1)}}{\partial y^2} = \frac{1}{\delta t} \left( \frac{\partial F^{(n)}}{\partial x} + \frac{\partial G^{(n)}}{\partial y} \right). \quad (4.74)$$

Pri odvodení nebudeme zahŕňať vztlakové sily, ktoré sú pri toku zohriateho skla zanedbateľne malé. Hodnoty teplôt vo výpočtovej oblasti budeme určovať podľa vzťahu (4.61).

Viskozitu skla budeme určovať pomocou empirickej *Vogel-Fuchler-Tammann* (VFT) rovnice

$$\mu = \mu_0 \exp\left(\frac{k}{T - T_0}\right). \quad (4.75)$$

$\mu_0$ ,  $T_0$  a  $k$  sú materiálové parametre. Závislosť viskozity od teploty (4.70) bola nezávisle navrhnutá tromi vedcami: Vogelom, Fuchlerom a Tammannom. Vogel skúmal závislosť viskozity od teploty rozličných mazív. Fuchler analyzoval tú istú závislosť u kremičitých skiel a Tammann závislosť odvodil na základe procesov tvorby organických skiel.

#### 4.5.1. Algoritmus výpočtu toku s nekonštantnou viskozitou

**Postup:**

Nastavíme  $n = 0, t = 0$ .

Priradíme počiatočné hodnoty rýchlostným poliam a tlaku.

Pokiaľ platí  $t < t_{kon}$ :

    Ak používame adaptívnu metódu určenia časového kroku tak použijeme (4.41).

    Prepočítame rýchlostné pole podľa hraničných podmienok (4.22)-(4.24) v závislosti od toku.

    Určíme hodnoty teplôt na hraniciach, podľa podmienok (4.58), alebo (4.59).

    Vypočítame hodnoty teplôt v aktuálnom časovom kroku, podľa (4.61).

    Prepočítame hodnoty viskozity podľa (4.71).

    Vypočítame hodnoty polí  $F$  a  $G$  zo vzťahov (4.68), podľa voľby metódy volíme priestorové derivácie viskozity nulové alebo nenulové.

    Určíme pravú stranu Poissonovej rovnice  $rhs_{i,j}$  (4.70).

    Počítame Poissonovu rovnicu (4.35) iteračnou metódou pokým nedosiahneme stanovený počet iterácií, alebo podmienku pre normu iterácie (4.38).

    Vypočítame rýchlostné polia v nasledujúcom časovom kroku (4.27).

$t = t + \delta t$

$n = n + 1$ .

## 5. Výpočet

V nasledujúcej kapitole sa budeme venovať výpočtu tokov pomocou jednotlivých algoritmov spomínaných v predchádzajúcich kapitolách.

### 5.1 Tok generovaný posunom hranice

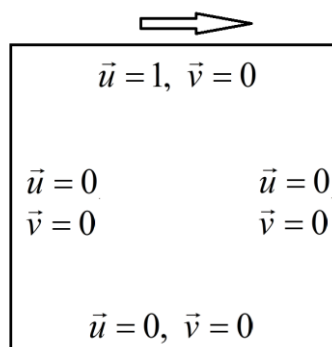
Najčastejšie používaným problémom na overenie kvality výpočtu a jeho stability je tok generovaný posunom hranice (v angl. *driven cavity flow*).

Uvažujme štvorcovú výpočtovú oblasť vyplnenú viskóznou kvapalinou. Posúvaním jednej z hraníc v smere rovnobežnom s protihľadou hranicou generujeme v objeme tok. Na všetkých hraniciach kladieme podmienku nulového sklzu. Budeme posúvať hranicu  $j=0$ , v nasledujúcom texte ju budeme označovať ako hornú hranicu. Na všetkých hraniciach s výnimkou hornej hranice platí podmienka nulového sklzu (4.22) a na hornej hranici predpisujeme podmienku

$$u_{i,0} = 2 - u_{i,1} \quad \text{pre} \quad i = 1, \dots, i_{\max} \quad (5.1)$$

Pripomíname, že výpočtové body horizontálnej zložky rýchlosti neležia priamo na hranici a kladieme podmienku aby priemer rýchlostí tesne nad a pod bol rovný rýchlosti posunu hranice.

Pre jednoduchosť označme stranu s  $i=0$  ako ľavú a jej protihľadú ako pravú a stranu  $j = j_{\max}$  ako dolnú.

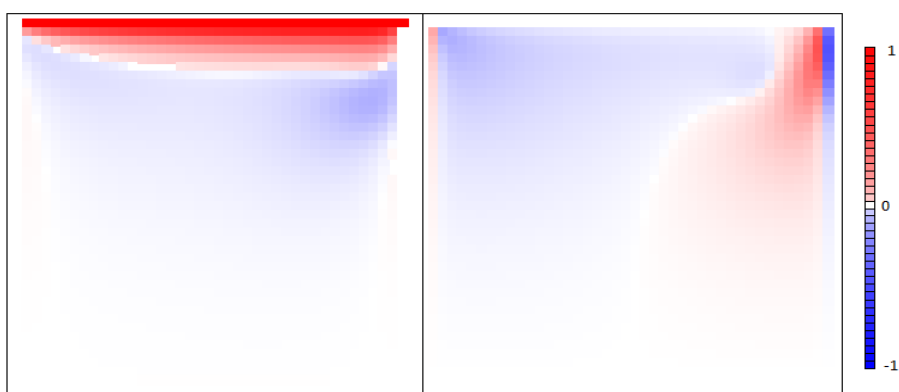


Obr. 5.1. Okrajové podmienky toku generovaného posunom hranice

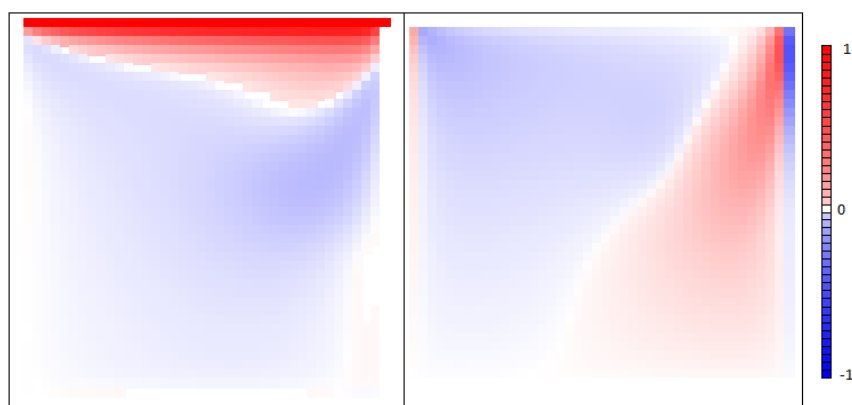
Podmienka nulového toku a sklzu na hornej hranici spôsobí, že kvapalina blízko hornej hranice začne byť unášaná viskóznym pôsobením k pravej hranici. Keďže na pravej hranici predpokladáme podmienku nulového sklzu, kvapalina nemôže tiecť ďalej cez pravú hranicu. Vzhľadom na podmienku nestlačiteľnosti, z ktorej sme pri odvádzaní algoritmu výpočtu vychádzali, môžeme predpokladať, že v zvyšnom objeme musí tiecť kvapalina v smere

opačnom smeru posunu. V numerickej simulácii tomu predchádza nárast tlaku v okolí pravého horného rohu výpočtovej oblasti a pokles tlaku v ľavom hornom toku výpočtovej oblasti. Kvapalina je unášaná z oblastí s vyšším tlakom do oblastí s nižším tlakom. I keď je pôsobenie týchto síl najväčšie priamo pri hornej hranici, je stále menšie než viskózne pôsobenie posunu hranice v danej oblasti. Ďalej od hornej hranice však prestáva prevládať viskózne pôsobenie posuvu hornej hranice a kvapalina tečie v smere opačnom smeru posunu hranice.

Úlohou riešenia tohto problému je overiť fungovanie prvého algoritmu z podkapitoly 4.2.6, riešenie Navier-Stokesovej rovnice. Generovanie vírivého toku je smerodajným údajom o správnosti výpočtu viskózných síl a tlaku vo výpočtovej oblasti. Nasledujúce obrázky znázorňujú horizontálnu a vertikálnu zložku vektorového poľa rýchlostí.

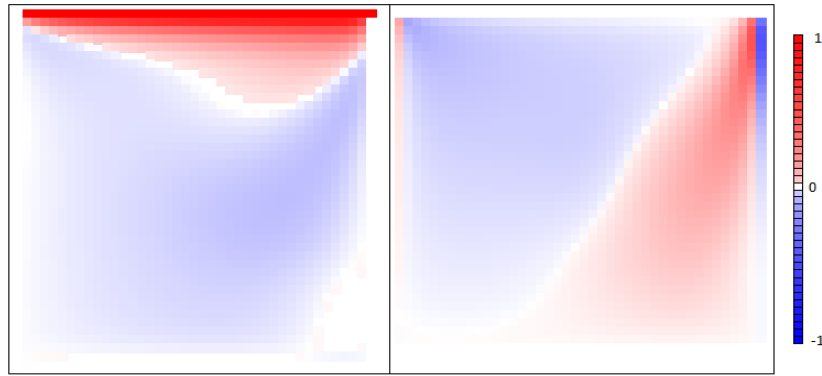


Obr. 5.2 Prerozdelenie horizontálnej zložky (vľavo) a vertikálnej zložky (vpravo) bezrozmernej rýchlosti v čase 1,5 s

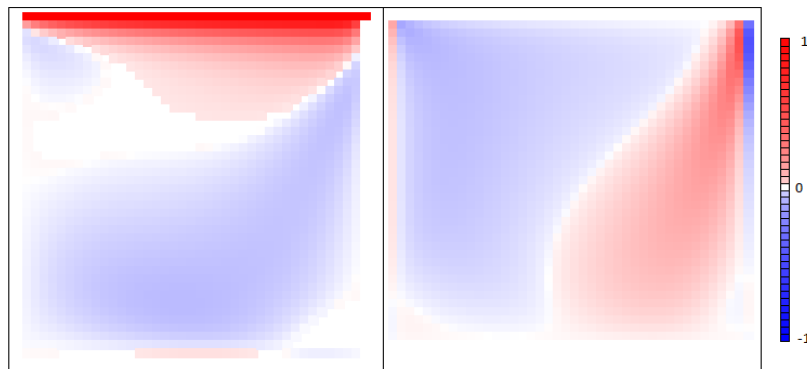


Obr. 5.3 Prerozdelenie horizontálnej zložky (vľavo) a vertikálnej zložky (vpravo) bezrozmernej rýchlosti v čase 4,5 s





Obr. 5.4 Prerozdelenie horizontálnej zložky (vľavo) a vertikálnej zložky (vpravo) bezrozmernej rýchlosti v čase 7,5 s



Obr. 5.5 Prerozdelenie horizontálnej zložky (vľavo) a vertikálnej zložky (vpravo) bezrozmernej rýchlosti pri ustálenom toku v čase 19,5 s

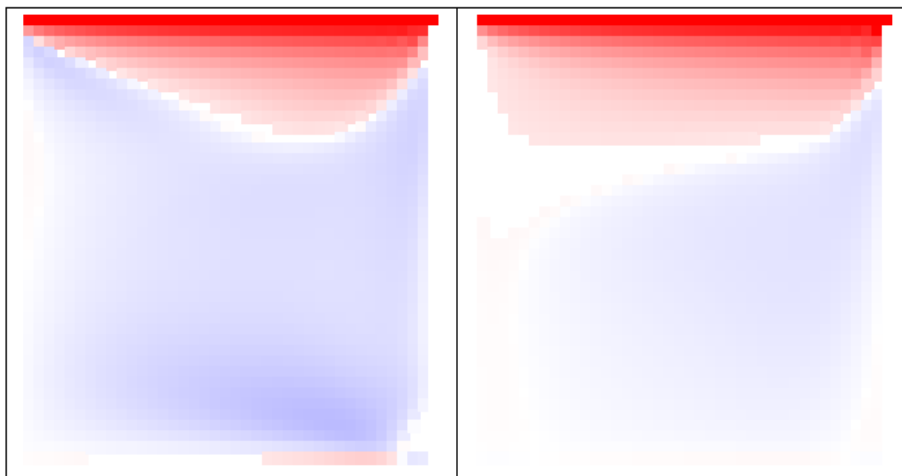
Vyššie zobrazený tok bol simulovaný pri nastavení výpočtových parametrov:

$$Re=1000, \tau_{sf} = 0.0005, h=0.023, i_{\max} = 42, j_{\max} = 42, \omega=1,7, \gamma = 0,9, it_{\max} = 200$$

Kladné rýchlosti (červené oblasti) v horizontálnom smere značia tok vľavo, kladné hodnoty v vertikálnom smere značia tok smerom k dolnej hranici. Bod, v ktorom by sa pretli hranice medzi oblasťami kladných a záporných hodnôt rýchlostí po prekrytí zobrazení horizontálnej a vertikálnej zložky rýchlostných poli je stredom víru. Na Obr.5.2 až Obr. 5.5 môžeme pozorovať mierny posun víru. Obrázky obsahujú aj hraničnú oblasť a teda na všetkých obrázkoch môžeme vidieť (napr. úplne napravo) úzke pásy opačných hodnôt. Je to spôsobené definíciou podmienky nulového sklzu (4.22).

Výsledky testu odpovedajú predpokladom. Problémom je voľba bezpečnostného faktoru  $\tau_{sf}$ . Je pomerne malý a výpočet simulácií pre väčšie oblasti je časovo náročný. Bezpečnostný faktor je vhodné meniť v závislosti od veľkosti siete. Platnosť podmienky pre voľbu časového kroku teda nie je úplne popísaná v CFL. Je nutné kontrolovať či počas

simulácie nedochádza k nefyzikálnym osciláciám zložiek rýchlostného poľa alebo iným nefyzikálnom procesom.

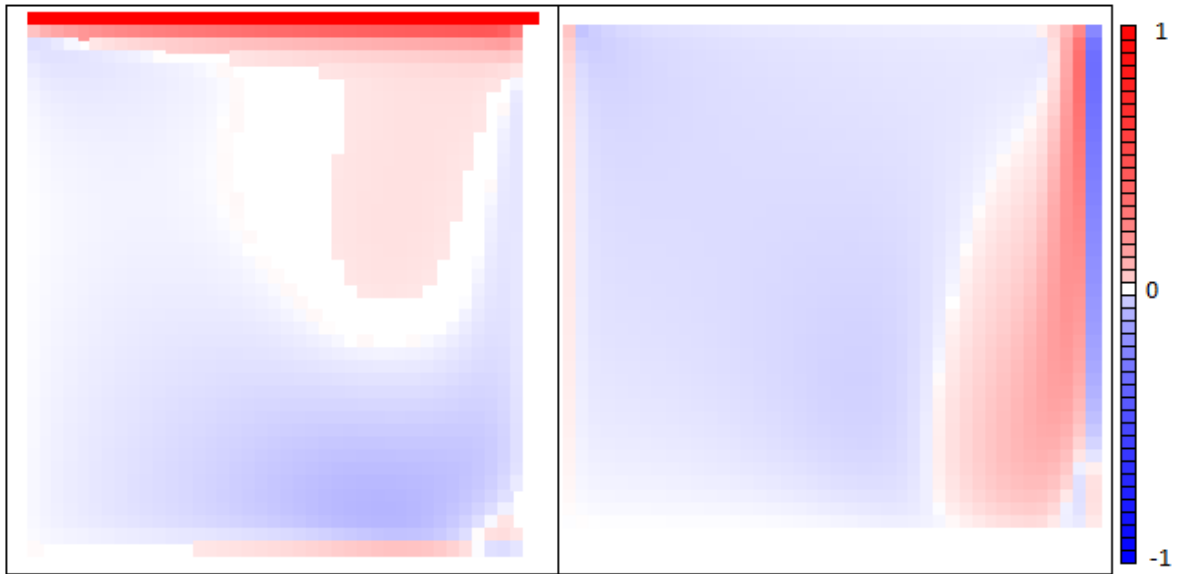


Obr. 5.6 Porovnanie horizontálnych zložiek rýchlostného poľa pri rozličných hodnotách bezpečnostného faktoru

Obr.5.6 znázorňuje horizontálne toky v čase 6.5 sekundy počítané pri totožných nastaveniach všetkých parametrov okrem bezpečnostného faktoru. Tok vľavo ma bezpečnostný parameter  $\tau_{sf} = 0.0005$  a tok vpravo  $\tau_{sf} = 0.005$ . Problém s voľbou bezpečnostného faktoru sčasti kompenzuje fakt, že výpočty aj pri nižšom počte bodov (napr. 20x20 a 30x30) veľmi dobre odpovedajú predpokladom a nie sú tak časovo náročné. Výpočtový čas je najviac ovplyvnený požadovaným rozlíšením výstupných dát.

### 5.1.2 Tok s vysokým Reynoldsovým číslom

Stabilita výpočtu bez rozmernej Navier-Stokesovej rovnice sa často overuje riešením tokov s vysokým Reynoldsovým číslom. Pri vyššom Reynoldsovom čísle je tok viac premenlivý v čase a priestore. Experimenty ukázali, že pri tokoch s vysokým Reynoldsovým číslom sa pri toku generovanom posunom hranice v spodných rohoch oblasti tvoria víry opačného smeru ako je smer hlavného víru. Pri overovaní kvality výpočtového algoritmu teda sledujeme či dochádza k tvorbe takýchto vírov. Pri posune hranice smerom doprava by mal byť vír v pravo dole dominantný, jeho absencia by poukazovala na nedostatočne malý priestorový krok alebo zle navrhnutý algoritmus. Druhy vír je menej výrazný a rýchlosť jeho toku je oveľa menšia než u pravého víru.



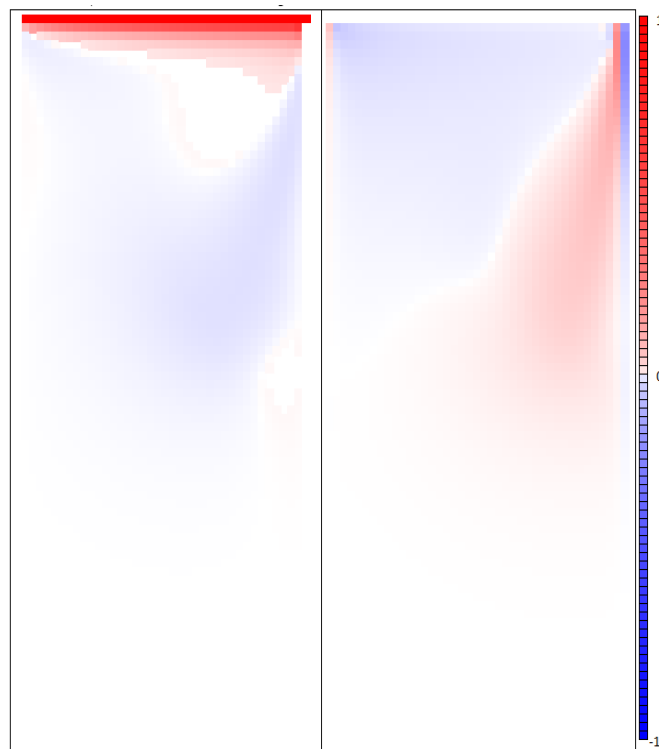
Obr. 5.7 Prerozdelenie horizontálnej zložky (vľavo) a vertikálnej zložky (vpravo) bezrozmernej rýchlosti v toku s vysokým Reynoldsovým číslom.

Obr. 5.7. zobrazuje nami vypočítaný tok pri parametroch:

$$\text{Re}=10000, \tau_{sf} = 0.0005, h=0,023, i_{\max} = 42, j_{\max} = 42, \omega=1,7, \gamma = 0,9, it_{\max} = 150$$

Pravý vír predstavujú rýchlosti orientované opačne než v okolitej oblasti pravého spodného rohu. Ľavý vír nie je možné na obrázku pri zvolenej farebnej škále pozorovať. V dátach sme mohli pozorovať vír orientovaný opačne než hlavný smer víru, ale rýchlosti boli na úrovni chýb.

Ďalším tokom, ktorý sme riešili na overenie kvality výpočtu Navier-Stokesovej rovnice je tok v obdĺžnikovej oblasti. Riešenie takéhoto toku, podobne ako predchádzajúceho, overuje stabilitu výpočtu a je často riešením problémom. Strana, ktorej posunom sme generovali tok bola kratšia. Podobne ako pri predchádzajúcom riešenom toku sme zvolili vysoké Reynoldsovo číslo a sledujeme tvorbu vedľajších vírov. Výpočet takéhoto toku často predchádza overovaniu výpočtov turbulentných tokov. Napriek tomu, že cieľom práce nie je simulovanie turbulentných tokov, je dobré poznať výpočtové možnosti nami naprogramovaného algoritmu.



Obr. 5.8 Prerozdelenie horizontálnej zložky (vľavo) a vertikálnej zložky (vpravo) bezrozmernej rýchlosti toku v obdĺžnikovej oblasti.

Tok zobrazený na Obr. 5.8. bol počítaný pri nasledovnom nastavení parametrov:

$$Re=10000, \tau_{sf} = 0.0002, h=0,0123, i_{max} = 84, j_{max} = 42, \omega=1,7, \gamma = 0,9, it_{max} = 150$$

Na Obr. 5.8. môžeme pozorovať chybu výpočtu toku. Horizontálna zložka rýchlostného poľa je v oblasti medzi rozhraním kladnej a zápornej zložky (rozhranie modrej a červenej) a oblasťou viskózneho strhávania toku (červená oblasť v hornej oblasti pravej časti obrázku) nulová. Dôvodom je príliš veľký bezpečnostný parameter. Reynoldsovo číslo je pomerne vysoké a výpočet vyžaduje nastavenie časového kroku na extrémne malý. Nastavenie kroku na dostatočne malý by výpočet predĺžilo na násobne dlhší. Výpočet do bodu zobrazenia trval 11 hodín a 8 minút. Na Obr. 5.8 môžeme sledovať malý vedľajší vír avšak nie je výrazný. Použitie algoritmu z podkapitoly 4.2.6 bez akýchkoľvek úprav nie je vhodné pre výpočet tokov nízkoviskózných kvapalín s komplikovanými štruktúrami toku.

## 5.2 Tok s nekonštantnou teplotou

V nasledujúcej podkapitole sa budeme venovať overeniu rozšírenia výpočtu Navier-Stokesovej rovnice vztlakovými členmi a riešením energetickej rovnice. Nebudeme uvažovať nekonštantnú viskozitu a výpočet bude prebiehať podľa postupu z podkapitoly 4.4.5.

Prvý výpočet prebiehal pri nasledujúcich nastaveniach parametrov a počiatočných podmienok:

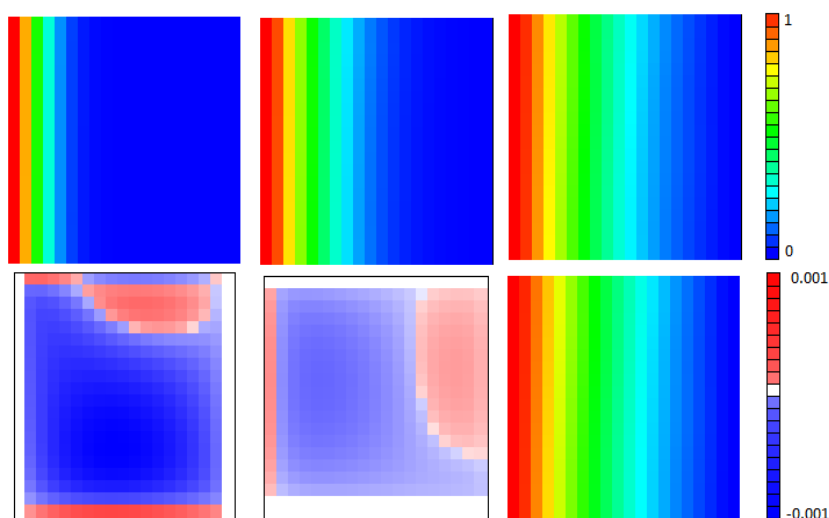
$$Re=985,7, Pr=7, h=0,04, i_{\max} = 25, j_{\max} = 25, \omega=1,7, \gamma = 0,9, it_{\max} = 150, g_y = -0.098$$

Ľavú stranu ohrievame a nastavujeme  $T_h = 1$  a na pravú stranu ochladzujeme  $T_c = 0$  (obe sú bezrozmerné škálované teploty).

$\vec{u} = 0, \vec{v} = 0$	
$\vec{u} = 0$	$\vec{u} = 0$
$\vec{v} = 0$	$\vec{v} = 0$
$T_h = 1$	$T_c = 0$
$\vec{u} = 0, \vec{v} = 0$	

Obr.5.9. Okrajové podmienky toku generovaného ohrievaním a ochladzovaním kvapaliny

Spodnú a hornú stenu predpokladáme tepelne izolované a používame Neumannove hraničné podmienky. Na všetkých hraniciach kladieme podmienku nulového sklzu (4.22).



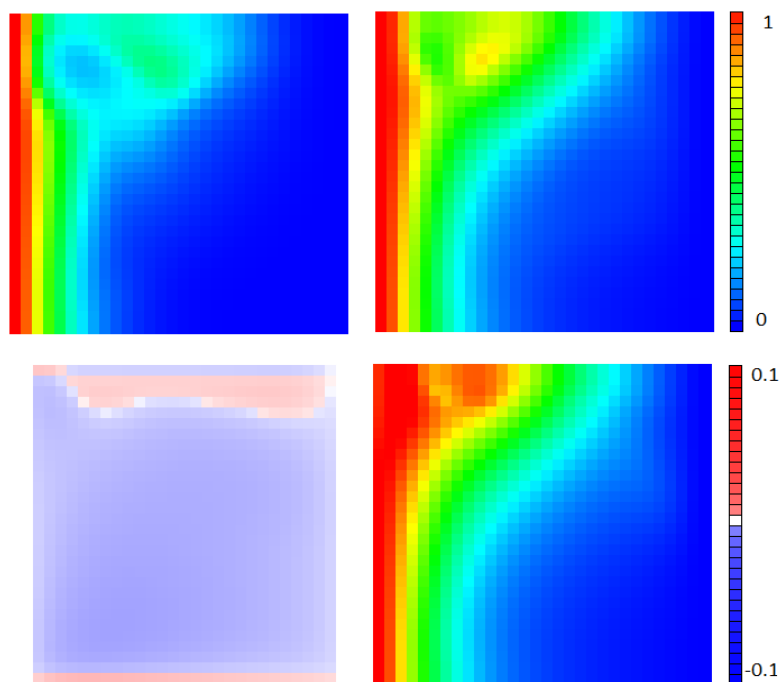
Obr.5.10 Tok zohrievanej kvapaliny s  $Re=985,7$

Na Obr. 5.10. hore môžeme pozorovať postupné ohrievanie kvapaliny a dole prerozdelenie zložiek rýchlostného poľa a teploty odpovedajúce ustálenému stavu. Výsledky poukazujú na to, že v objeme dochádza ku konvekcií tvorenej gradietntom teploty. Zohriata kvapalina pri pravej hranici sa "rozpína" (podľa definície Bossinesqouvej aproximácie) a ochladená kvapalina na pravej strane sa "sťahuje". Tok kvapaliny je pomalší než proces ochladzovania a otepľovania kvapaliny a teda môžeme pozorovať takmer rovnomerné prerozdelenie teploty a pomerne symetricky hlavný vír.

Druhý výpočet prebiehal pri nasledujúcich nastaveniach parametrov:

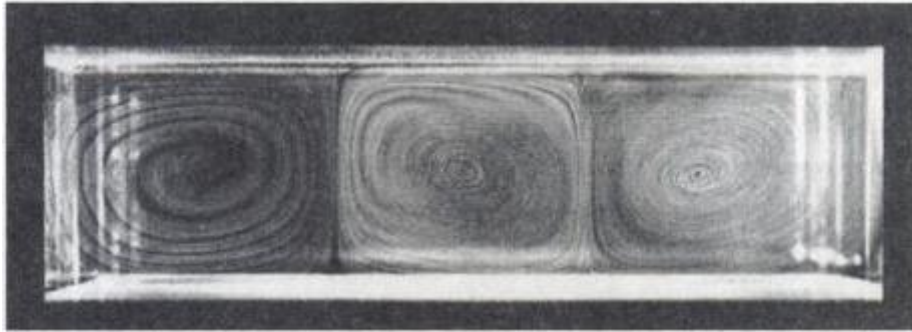
$$Re=11063, Pr= 7, h=0.03, i_{\max} = 30, j_{\max} = 30, \omega=1,7, \gamma = 0,9, it_{\max} = 150 g_y = -1.1005$$

Hraničné podmienky boli totožné s predchádzajúcim výpočtom.



Obr. 5.11. Hore je zobrazené postupné zohrievanie kvapaliny a dole je zobrazené prerozdelenie horizontálnej zložky rýchlostného poľa odpovedajúce teplotnému prerozdeleniu vpravo dole

Podobne ako pri predchádzajúcom výpočte môžeme pozorovať postupný nárast teplôt a tvorbu vírivého toku. Voľba vyššieho Reynoldsovho čísla však výrazné pozmenila prerozdelenie teplôt. Pomer vztlakových síl oproti viskóznym silám v porovnaní s predchádzajúcim prípadom narástol. Tok unášal zohriatu kvapalinu k ochladenej hranici a obrátene.



Obr. 5.12. Fotografia experimentu Prof. Kimuru pri ktorom bola spodná stena ohrievaná a horná ochladzovaná

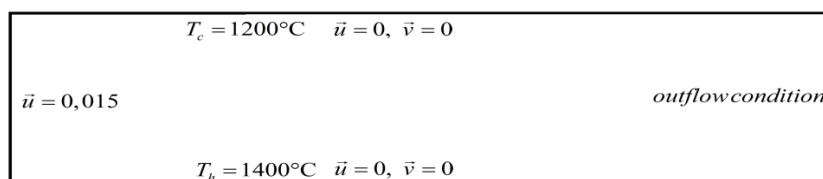
Výpočty dobre odpovedajú očakávaniam a experimentom (Kimura & Bejan, 1983).

### 5.3 Výpočet pomocou vírivosti a prúdovej funkcie

Výpočet toku pomocou vírivosti a prúdovej funkcie napriek tomu, že sa pomerne často používa, sa nám nepodarilo správne naprogramovať a jeho výsledky boli často úplne nesprávne. Dôvodom bola absencia špeciálnych okrajových podmienok a nami navrhnutá schéma nebola stabilná. Výpočet divergoval už pri pomerne malých hodnotách časového kroku a pri voľbe veľmi malých hodnôt dochádzalo k úplnému poklesu hodnôt poľa prúdovej funkcie. Týmto programom sme začali naše výpočty, ale jeho nedostatky nedovoľovali rozšírenie výpočtu na tok s nekonštantnou viskozitou a teplotou. Navier-Stokesova rovnica sa jednoduchšie upravuje v procesoch s nekonštantnou viskozitou a teplotou. Táto metóda je vo všeobecnosti vhodnejšia pokiaľ nepotrebujeme priamo poznať prerozdelenie rýchlostí a postačuje nám zobrazenie prúdočiar a vírivosti.

### 5.4 Tok skla

V nasledujúcej kapitole sa budeme venovať aplikácii výpočtového postupu navrhnutého v podkapitole 4.5.1 pre simuláciu toku skla. Konkrétne toku skla podobného pri toku pri výrobe tabuľového skla, teda tečenie zhora a zdola ohraničené stenami, na ktorých platí podmienka nulového sklzu. Podobne ako v predchádzajúcich podkapitolách budeme oblasť blízku  $i = i_{\max}$  nazývať ako pravú. Predpokladáme, že pravej strane vteká sklo vopred definovanou rýchlosťou a teplotou 1450 C a na ľavej strane vyteká.



Obr. 5.13 Okrajové podmienky toku skla

Pri postupe sme predpokladali tok sodno-draselného skla a parametre VTF rovnice (4.75) sme stanovili podľa tabuľkových hodnôt:

$$\mu_0 = 0.002069, k = 4397.784, T_0 = 266.3158$$

Výpočet toku zahŕňa dva hlavné procesy: ohrievanie skla a tok skla. Ohrievanie skla prebieha relatívne pomaly, ustálenie teplôt trvá dlhšie než ustálenie toku skla. Pri voľbe časového kroku sa vyskytol problém. Nastavenie dost' veľkého časového kroku na to, aby sa teplotne ustálil model viedlo k numerickým nestabilitám vo výpočte toku. Nastaviť časový krok dostatočne malý, aby sme mohli pozorovať zmeny toku by bolo nezmyselné. Viskozita pri teplote neustáleného modelu je príliš vysoká a tok pri týchto podmienkach nie je objektom nášho pozorovania. Výpočtový čas, po ktorom by sa teplotný model ustálil by bol zbytočne veľký. Pre to sme navrhli riešenie zložené z dvoch častí výpočtu.

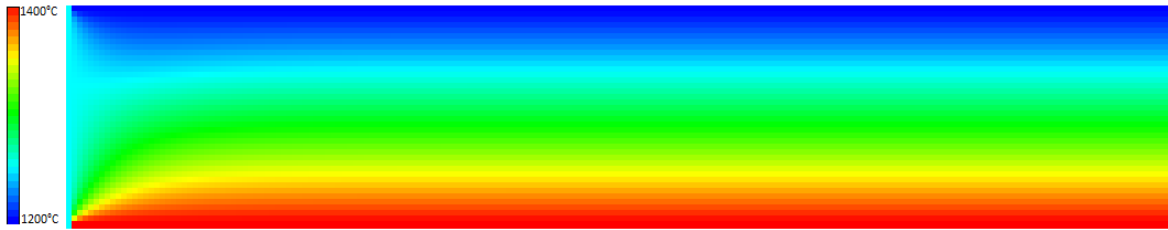
V prvej časti výpočtu stanovíme krok výpočtu vhodný pre proces ustáľovania teploty a definujeme v každej časovej hladine nulové rýchlostné pole. Po ustálení teplotného modelu predefinujeme časový krok na hodnotu dostačujúcu pre pozorovanie zmien toku skla a stanovujeme podmienku vtoku na ľavej hranici. Problémy v numerickej stability toku boli spôsobené hlavne náhlým spomalením toku v oblastiach s vysokou viskozitou a blízko hraníc.

#### 5.4.1 Porovnanie výsledkov s výsledkami ANSYSu

Výsledky nášho výpočtu porovnáme s výsledkami komerčného softvéru ANSYS obsahujúceho balík doplnkov na výpočet rozličných tokov. Solver ANSYSu je založený na metóde konečných objemov a jeho jadro tvorí algoritmus SIMPLE.

ANSYS na rozdiel od nami navrhnutého postupu počíta ten istý tok v troch rozmeroch. Operátor softvéru v problémoch podobných riešenému môže pracovať s objemom, ktorý má periodické hraničné podmienky na rovinách záujmu. Rozmer v smere kolmom na záujmovú rovinu je spravidla veľmi malý, pri našom výpočte mal hodnotu 0,05mm.



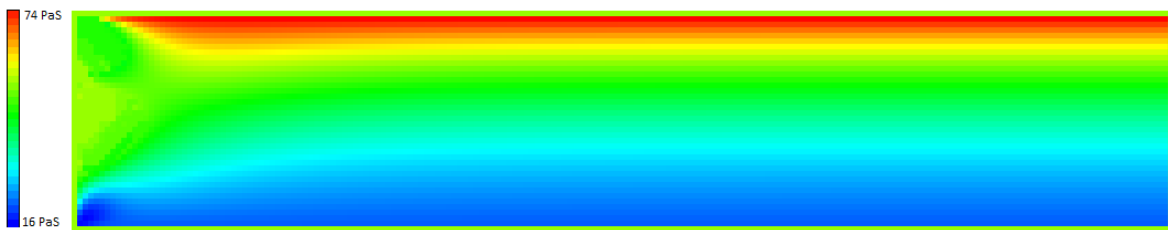


Obr.5.13 Prerozdelenie teplôt po prvej časti výpočtu

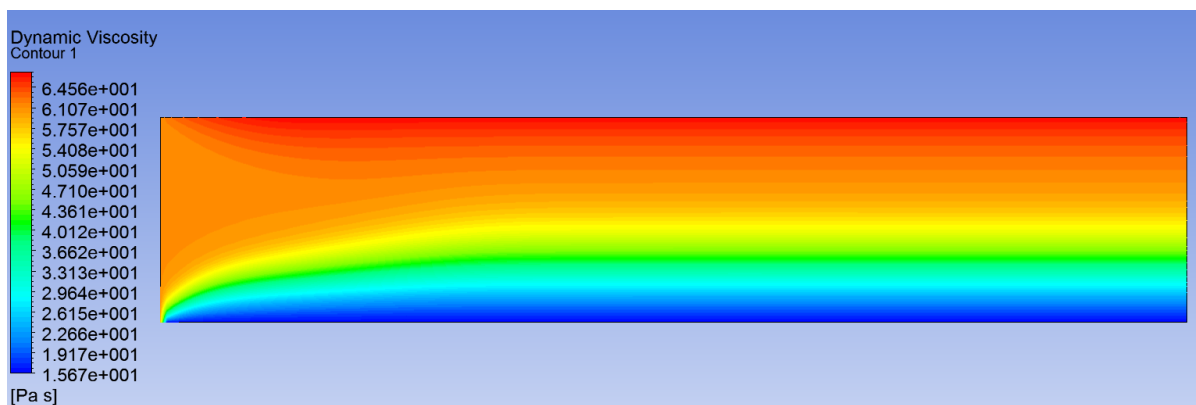
Obr.5.13 zobrazuje nami vypočítané prerozdelenie teplôt skla po ukončení prvej časti výpočtu. Parametre výpočtu prvej časti boli nasledovné:

$$\delta t = 0.01 h = 0,00125, i_{\max} = 200, j_{\max} = 40, \omega = 1,7, \gamma = 0,9, it_{\max} = 0$$

Solver ANSYSu na rozdiel od nami navrhnutého výpočtu nerozkladá tok na proces zohrievania a tok ohrievaného skla, teda nemáme zobrazenie prerozdelenia teplôt vhodné na porovnanie s nami vypočítaním prerozdelením.

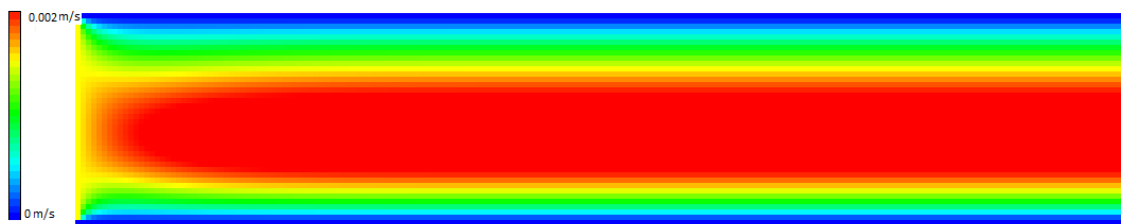


Obr.5.14. Hodnoty viskozity vypočítané nami navrhnutým softvérom

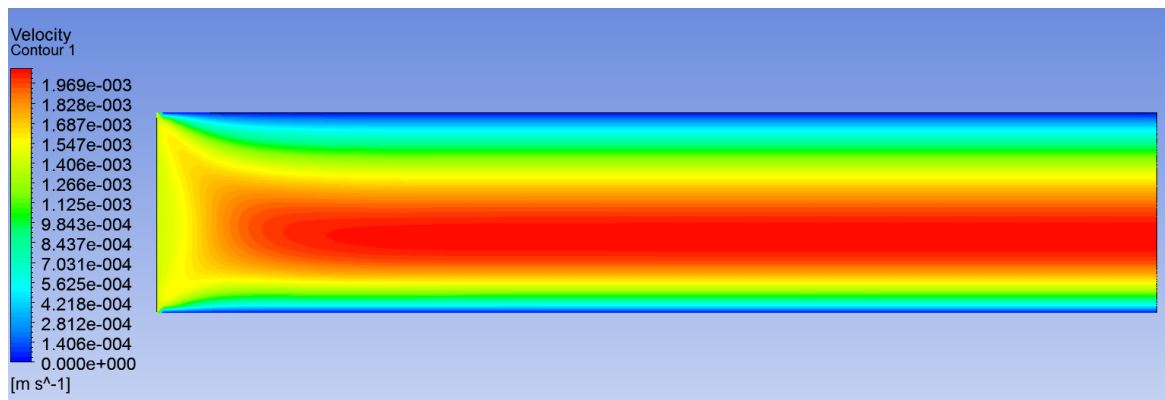


Obr. 5.15. Hodnoty viskozity vypočítané za pomoci softvéru ANSYS

Napriek tomu, že sa jednotlivé zobrazenia farebne odlišujú, jedná sa veľmi dobrú zhodu vo výpočte. Nami navrhnutá farebná škála nie je totožná s farebnou škálou používanou post procesorom ANSYSU. Škála farieb na Obr. 5.14 je lineárna a škála na Obr.5.15 je logaritmická. Obidva toky boli počítané pri tých istých parametroch VFT rovnice.



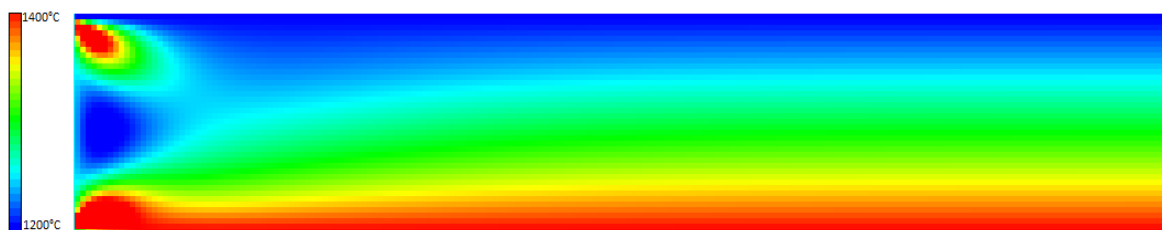
Obr.5.16 Prerozdelenie rýchlostí nami navrhnutým postupom



Obr.5.17 Prerozdelenie rýchlostí vypočítané programom ANSYS

Zhoda je pomerne dobrá. Tok je mierne posunutý smerom nahor. Domnievame sa, že tento posun je spôsobený riedkou sieťou a faktom, že sme neuvažovali závislosť tepelnej vodivosti skla od teploty. ANSYS predpokladá zjednodušenú závislosť tepelnej vodivosti od teploty kvapaliny (šírenie tepla sálaním). Tepelná vodivosť nelienárne narastá s teplotou a tepelný profil nie je tak rovnomerný ako v našom výpočte. Tepelne závislú vodivosť sme nepoužili lebo sa jedná o príliš hrubé s nie vždy správne zjednodušenie zložitej závislosti. Pre ďalšie riešenie by bolo vhodné použiť sieť s nerovnomerným sieťovým krokom, ktorá by umožnila zvýšiť počet výpočtových uzlov v spodnej oblasti z nižšou viskozitou.

Riešenie taktiež poukázalo na chybu výpočtu teplôt vtekajúcej kvapaliny, ku ktorej dochádzalo pri okrajovej podmienke toku a zároveň pri ohrievaní hranice.



Obr.5.19 Teplotný profil toku skla pri použití Dirichletovej okrajovej podmienky

Chybu sme odstránili nasledovne. Definovali sme hraničnú teplotu ako priemer teplôt za hranicou a pred hranicou. To spôsobilo fiktívne ochladenie mimo výpočtovej oblasti. Časť energetickej rovnice popisujúca teplo prenášané tokom však zohľadňuje oblasti za hranicou (pri jej definícii sme neuvažovali vtok) a teda aj pomocné teploty nižšie než je teplota

hranice. Vtekajúce sklo pri takto stanovenej podmienke nemalo odpovedajúcu teplotu 1250 °C ale postupne chladlo. To sme vyriešili pevnou definíciou teplôt v okrajovej oblasti.

## 6. Záver

Stanovené ciele sme splnili nasledovne:

- Popísali sme matematicko-fyzikálny model toku vysoko-viskózne kvapaliny v prostredí s nehomogénnou teplotou.
- Odvodili sme konečno-diferenčnú schému pre dvojrozmerný model.
- Vytvorili sme výpočtový program v jazyku C++.
- Výsledky numerických simulácií získané vyvinutým softvérom sú v dobrej zhode s výsledkami získanými komerčným softvérom

V práci sme ukázali, že použitím metódy konečných diferencií je možné simulovať aj pomerne komplikovaný proces toku vysokoviskózne kvapaliny - skla. Náklady na tvorbu takejto simulácie sú omnoho menšie než je cena komerčného softvéru. Hlavnou výhodou je pomerne jednoduché prispôsobenie výpočtu špecifikám konkrétneho prostredia, napr. rozdelenie výpočtu toku skla na dve časti. Komerčný softvér, ktorý rieši procesy toku univerzálnejšie má výhodu v tom, že pri zmene problému je postačujúca len zmena počiatočných a okrajových podmienok a parametrov. Nami navrhnuté riešenie je nevyhnutné pre každý problém upraviť a otestovať.

Nevýhodou nášho softvéru je absencia akéhokoľvek užívateľského rozhrania a teda program, v takej podobe ako sme použili, vyžaduje znalosť programovacieho jazyka C++ a výpočtových algoritmov popísaných v tejto práci. Rozhodnutie použiť sieť s rovnomerným sieťovým krokom nebolo úplne správne a napokon spôsobilo nezanedbateľnú odchýlku výpočtu. Zobrazovanie tokov v podobe prerozdelení rýchlostí (ako napr. Obr. 5.7. ) nie je najvhodnejšie a pre používateľov NSTK môže byť komplikované sa v takomto výstupe zorientovať.

Práca predkladá priestor na ďalší rozvoj. Program by mohol byť rozšírený o:

- Fungujúci výpočet vo vírivosti a prúdovej funkcie.
- Jednoduché užívateľské rozhranie.
- Kvalitnejšiu vizualizáciu (možnosť vektorových grafov a zobrazenie prúdočiar)

Vytvorili sme program, ktorý by mohol pomôcť pri výpočte toku skla pri určitých výrobných procesoch, v ktorých je relevantná dvojrozmerná aproximácia.

## Zoznam použitej literatúry

- Barus, C., Č. Strouhal, 1891.** The Viscosity of Solids. *Washington Printing Office*
- Shi, X., J. M. Khodadadi, 2003.** Transient evolution to periodic fluid flow and heat transfer in a lid-driven cavity due to an oscillating thin fin. *Elsevier*
- Brdička, M., 1959,** Mechanika kontinua, *Nakladatelství československé akademie věd.*  
Praha
- Choi, H., H. G. Choi a J. Y. Yoo 1998.** ICCFD5 *Springer*
- Constatin, P., C. Foias, 1908.** Navier-Stokes Equations. *The University of Chicago Press.*  
Chicago
- Doch, E. J., T. Dornseifer a T. Neunhoeffler, 1998.** The Glass Transition: Relaxation Dynamics in Liquids and Disordered Materials. *Springer-Verlag Berlin, 30*
- Drazin, P. G., 2002.** Introduction to Hydrodynamic Stability. *Cambridge University press*
- Fletcher, C. A. J., 2006,** Computotonal Techniques for Fluid Dynamics 2, Specific Techniques for Different Flow Categories, *Springer-Verlag Berlin*
- Freiseisl, M., 2004.** Dynamics of viscous compressible fluids, *Oxford university press*
- Greibel, M., T. Dornseifer a T. Neunhoeffler, 1998.** Numerical Simulation in Fluid Dynamics. A practical introduction. *Society for Industrial and Applied Mathematics.* 32-39
- Gutzow, I. S., V. Mazurin a W. P. Jurn, 1998.** Glasses and the Glass Transition. *Wiley-VCH, 42-43*
- Hirsch. C., 2001,**Numerical Computation of Internal and External Flows, Volume 1: Fundamentals *A Wiley-interscience Publication*
- Loch, H., D. Krause, 2002.** Mathematical Simulation in Glass Technology, *Springer-Verlag Berlin*
- Malalasekera, W. a H. K. Veersteeg 2007.** An introduction to computational fluid Dynamics, *Pearson Education, 2-5.*
- Moczo, P., J. Kristek, and L. Halada, 2004.** The finite-difference method for seismologist. An introduction. *Comenius University, Bratislava*
- Pletcher, R. H., J. C. Tannehill a D. A. Anderson, 2013,** Computotonal Fluid Mechanics and Heat Transfer, *CRC Press*
- Pozrikidis C., 2001.** Fluid Dynamics: Theory, Computation, and Numerical Simulation. *Kluwer Academic Publishers*

**Sherman, S. F.,1990.** Viscous flow fluid, *McGraw-ill, Inc.*

**Shelby, J. E., 2005.** Introduction to glass science and technology. *Royal society of Chemistry*

**Stolarski, T., Y. Nakasone a S. Yoshimoto, 2006.** Engineering Analysis with ANSYS Software. *Elsevier*

**Wesseling, P.,2001.** Principles of Computational Fluid Dynamics. *Springer-Verlag Berlin*

**White, F. M.,1991.** Viscous fluid flow, *McGraw-ill, Inc.*

**Zeytounian, R. K., 2004.** Theory and application of viscous fluid flows, *Springer*, Berlin Heidelberg

## **Prílohy**

CD ROM obsahujúci zdrojový kód programu v jazyku C++