



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY



FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ
ÚSTAV MATEMATIKY

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING
INSTITUTE OF MATHEMATICS

BEZSÍŤOVÉ METODY VE VÝPOČETNÍ DYNAMICE TEKUTIN

MESHLESS METHODS FOR COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS

DIPLOMOVÁ PRÁCE

MASTER'S THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Bc. PAVEL NIEDOBA

VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

doc. RNDr. LIBOR ČERMÁK, CSc.

BRNO 2012

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství

Ústav matematiky

Akademický rok: 2011/2012

ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

student(ka): Bc. Pavel Niedoba

který/která studuje v **magisterském navazujícím studijním programu**

obor: **Matematické inženýrství (3901T021)**

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

Bezsíťové metody ve výpočetní dynamice tekutin

v anglickém jazyce:

Meshless methods for computational fluid dynamics

Stručná charakteristika problematiky úkolu:

Studium bezsíťových metod (zejména smooth particle hydrodynamic), zpracování rešerše k vyžití bezsíťových metod pro řešení problémů dynamiky tekutin, modifikací programů G.R.Liu a M.B.Liu, viz [2], vyřešit problém proudění v dvourozměrné kavitě, získané výsledky ověřit metodou konečných objemů.

Cíle diplomové práce:

Cílem práce je a) seznámit se s bezsíťovými metodami řešení diferenciálních rovnic, zejména s tzv. SPH metodou (smoothed particle hydrodynamics method)b) problém proudění v kavitě řešit pomocí SPH metody a získané výsledky ověřit pomocí výpočtu založeného na metodě konečných objemů.

Seznam odborné literatury:

- 1) G.R.Liu: Mesh Free Methods: Moving beyond the Finite Element Method. CRC Press, Boca Raton, 2003.
- 2) G.R.Liu, M.B.Liu: Smoothed Particle Hydrodynamics - a meshfree particle method. World Scientific Publishing, New Jersey, 2003.
- 3) G.R.Liu, Y.T.Gu: An Introduction to Meshfree Methods and Their Programming. Springer Dordrecht, Berlin, 2005.

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

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

V Brně, dne 27.10.2010

L.S.

prof. RNDr. Josef Šlapal, CSc.
Ředitel ústavu

prof. RNDr. Miroslav Doupovec, CSc.
Děkan fakulty

ABSTRAKT

Práce se věnuje bezsíťovým metodám, především SPH metodě. Výhradně se práce zabývá problémem konvergence v blízkosti hranice definičního oboru úlohy a jeho následným řešením v podobě použití tzv. fiktivních částic jakožto okrajové podmínky. Dále je zde uvedeno vhodné nastavení parametrů pro shock tube 2D úlohu, které bylo získáno na základě mnoha testů a softwarových úprav.

KLÍČOVÁ SLOVA

SPH metoda, konzistence, fiktivní částice, virtuální částice

ABSTRACT

This thesis deals with meshfree methods, especially the SPH method. It is focused on the question of convergence near the boundary of the problem domain and its following solution in the form of using the so-called ghost particles as a boundary condition. There is also presented a suitable setting of parameters for a shock tube 2D problem based on many tests and software modifications.

KEYWORDS

SPH method, consistency, ghost particles, virtual particles

NIEDOBA, P. *Bezsíťové metody ve výpočetní dynamice tekutin*: diplomová práce. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2012. 65 s. Vedoucí diplomové práce doc. RNDr. Libor Čermák, CSc..

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci *Bezsíťové metody ve výpočetní dynamice tekutin* vypracoval samostatně pod vedením doc. RNDr. Libora Čermáka, CSc. s využitím pramenů uvedených v seznamu literatury.

Pavel Niedoba

Na tomto místě bych chtěl poděkovat svému školiteli doc. RNDr. Liboru Čermákovi, CSc. za vedení, cenné rady a věnovaný čas při zpracování mé diplomové práce.

Pavel Niedoba

OBSAH

Úvod	13
1 Bezsíťové metody (MFree metody)	15
1.1 Úvod	15
1.1.1 Myšlenka MFree metod	15
1.1.2 Definice MFree metody	16
1.2 Procedura MFree metody	16
1.2.1 Základní kroky	16
1.2.2 Porovnání s FEM	19
1.3 Tvarové funkce	19
1.4 Rozdělení MFree metod	21
2 MFree metody ve výpočetní dynamice tekutin	25
2.1 Navierovy-Stokesovy rovnice	25
2.2 SPH metoda	28
2.2.1 Formulace	28
2.2.2 Váhové funkce	31
2.2.3 Konzistence	36
2.2.4 Diskretizace Navierových-Stokesových rovnic	39
2.2.5 Numerické aspekty	42
2.3 RKPM	48
3 Shock tube 2D úloha	49
3.1 Popis úlohy	49
3.2 Zadání úlohy	50
3.3 Nastavení parametrů	51
3.4 Vyhodnocení simulace	53
3.5 Softwarové úpravy	54
Závěr	61
Literatura	63
Seznam příloh	65

ÚVOD

V dnešní době se k řešení úloh výpočetní dynamiky tekutin používají především tradiční numerické metody, jako například FDM, FVM a FEM. Společným znakem těchto metod je použití příslušné sítě (mřížky) při diskretizaci definičního oboru. I přes velkou oblibu těchto metod existují některé typy úloh, se kterými se tyto metody „špatně“ vypořádávají. Jedná se zejména o typy úloh, kde dochází k extrémní deformaci modelovaného objektu a kde dochází k pohybu hranice definičního oboru. Dále se jedná o úlohy s volnou hladinou. Problémy vznikající při řešení těchto úloh jsou spojeny s použitím mřížky, nebo sítě.

Velmi přirozeným způsobem se tedy vyvíjí myšlenka bezsíťových metod, které byly poprvé použity v r. 1977 (Lucy L.B., Gingold R.A. & Monaghan J.J.). Jednalo se konkrétně o metodu SPH aplikovanou na astrofyzikální úlohy při modelování pohybu hvězd a vesmírných objektů.

Hlavní myšlenka těchto metod spočívá v modelování definičního oboru pomocí uzlových bodů bez předepsané vazby. Samotná aproximace funkce se poté provádí pomocí uzlových bodů v lokálních oblastech. Bezsíťové metody jsou však vzhledem ke své krátké existenci stále ve fázi výzkumu a vývoj nových přístupů je stále velmi aktuální.

První kapitola nás seznamuje s bezsíťovými metodami z obecného hlediska, tj. je zavedena definice, základní procedura v porovnání s FEM a rozdělení bezsíťových metod vzhledem k tvorbě tvarových funkcí, které jsou také v této části zavedeny.

Ve druhé kapitole se věnujeme metodám lokální integrální reprezentace. Do této kategorie patří metoda SPH, které je věnována podstatná část kapitoly. Práce se zabývá vlivem okrajových podmínek na konzistenci SPH aproximace, která má vliv na konvergenci metody. Dále je zde popsán způsob diskretizace Navierových-Stokesových rovnic popisujících dynamiku tekutin. V závěru kapitoly je pojednáno o různých numerických aspektech souvisejících s implementací SPH metody.

Třetí kapitola se zabývá řešením konkrétní shock tube 2D úlohy. Hlavní důraz je kladen na testování různých parametrů a modifikaci SPH zdrojového kódu tak, aby se výsledky úlohy co nejvíce přiblížily přesnému řešení. V této souvislosti byla do kódu implementována okrajová podmínka ve formě tzv. fiktivních částic, která zlepšuje konzistenci SPH aproximace v blízkosti hranice.

1 BEZSÍŤOVÉ METODY (MFree METODY)

V dalším textu budeme bezsíťové metody označovat jakožto *MFree* metody (z angl. Meshfree). Někdy se v literatuře můžeme setkat i s označením Meshless metody.

Tato kapitola bude věnována MFree metodám v obecném slova smyslu. Uvedeme definici, základní proceduru a rozdělení těchto metod.

1.1 Úvod

Úvodem se seznámíme s hlavní myšlenkou MFree metod.

1.1.1 Myšlenka MFree metod

Metoda konečných prvků, dále jen *FEM*, je vyvinuta pro statické i dynamické, lineární i nelineární úlohy pevných těles, struktur a pro proudění tekutin. Nicméně zde existuje několik následujících omezení této metody.

- Vysoké náklady, zejména časové, při tvorbě FEM sítě, která je při použití této metody nezbytná. U problémů se složitou geometrií je při generování sítě často nutný lidský zásah za účelem zvýšení kvality procesu síťování.
- Při manipulaci s velkými deformacemi se výrazným způsobem ztrácí přesnost této metody. Tento jev je způsoben deformací FEM prvků.
- Je velmi složité simulovat některé fyzikální jevy jako např. šíření trhliny, fázové přeměny a rozbití materiálu na velké množství fragmentů.
- K zajištění přesnosti řešení je často potřebná adaptivní analýza. Je zde však nutné přesíťování, což působí značné komplikace. Jednou z nich je požadované zobrazení proměnných mezi původní a nově vytvořenou sítí v jednotlivých fázích analýzy. Tento proces vede k dalším výpočtům a tím ke zvýšení časových nároků i ke snížení přesnosti řešení.

Společným základem výše uvedených obtíží je použití prvků, a tedy sítě, s předdefinovanou konektivitou. Z tohoto důvodu se velice přirozeně vyvíjí myšlenka MFree metod, ve kterých je definiční obor reprezentován pouze množinou libovolně rozložených uzlových bodů. Proto tyto metody mají velký potenciál při řešení výše zmíněných problémů. Navíc mohou být snadno vyvíjena adaptivní schémata, protože není zapotřebí žádná a priori informace o vazbách mezi uzlovými body. Toto nám během výpočtu poskytuje jistou míru flexibility v přidávání nebo odebírání uzlových bodů v potřebných místech definičního oboru, který budeme značit symbolem Ω .

Můžeme tedy celkem volně přidávat uzlové body do oblastí koncentrace napětí (např. čelo trhliny) bez obav o jejich vazbu s ostatními již existujícími uzlovými body.

S ohledem na snadnou implementaci adaptivních algoritmů není rozhodující počáteční rozložení uzlových bodů. V mnoha aplikacích je tedy zcela dostačující rovnoměrné rozdělení uzlových bodů, což může být prováděno výpočetní technikou zcela automatickým způsobem.

1.1.2 Definice MFree metody

Nyní uvedeme definici MFree metody dle (G.R.Liu, 2002, [8]).

Definice 1.1. Metoda, užívaná k vytvoření systému algebraických rovnic pro celý definiční obor úlohy bez použití předdefinované sítě pro diskretizaci definičního oboru, je definována jakožto *MFree* metoda.

Upřesněme tuto definici zavedením minimálního a ideálního požadavku pro MFree metody:

- Minimální požadavek: Předdefinovaná síť není použita pro aproximaci proměnných (např. hustoty).
- Ideální požadavek: Není zapotřebí žádná síť během celého procesu formulace a řešení problému daného libovolnou geometrií a popsáním systémem diferenciálních rovnic v závislosti na všech typech okrajových podmínek.

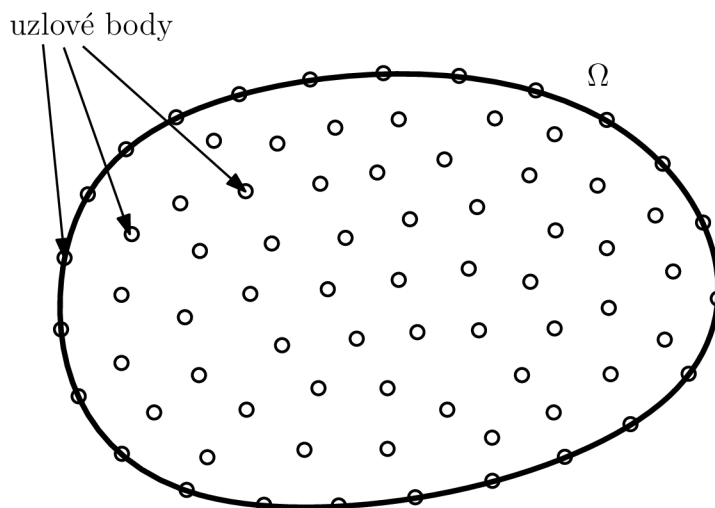
1.2 Procedura MFree metody

V této části si uvedeme základní kroky procedury řešení MFree metod a porovnání s FEM.

1.2.1 Základní kroky

1: Reprezentace definičního oboru

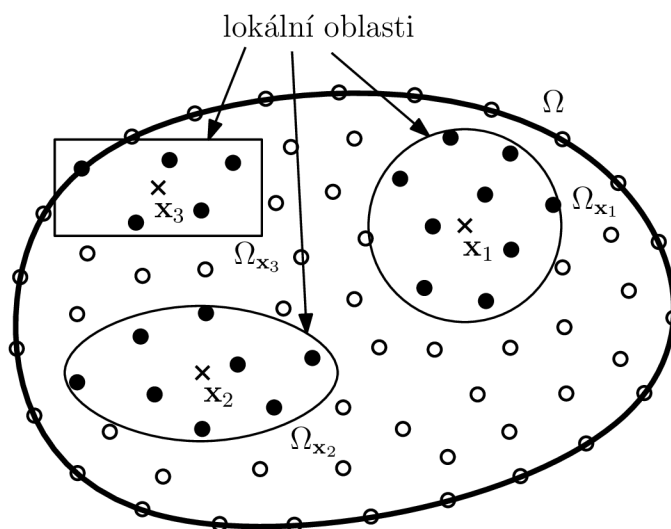
U MFree metod se definiční obor Ω a jeho hranice $\partial\Omega$ modeluje a reprezentuje (nikoliv diskretizuje!) pomocí libovolně rozložených uzlových bodů v definičním oboru a na jeho hranici (obr. 1.1). Tyto uzlové body se často nazývají *částice* a „nesou“ hodnoty proměnných (Lagrangeův popis). Hustota rozmístění těchto uzlových bodů závisí na požadované přesnosti a na dostupných výpočetních prostředcích. V případě použití adaptivního algoritmu není důležité počáteční rozložení uzlových bodů. MFree metoda by měla být schopná pracovat s libovolným rozložením uzlových bodů.



Obr. 1.1: Reprezentace definičního oboru pomocí uzlových bodů

2: Aproximace funkce

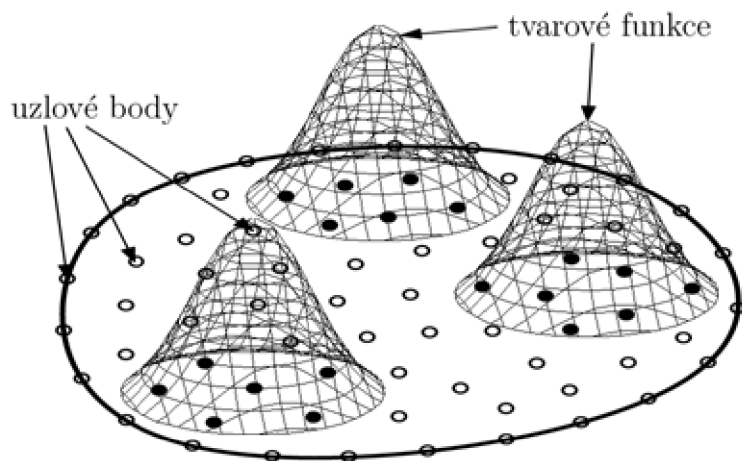
Z důvodu neexistence sítě proměnnou funkci u v libovolném bodě $\mathbf{x} = (x, y, z)$ uvnitř nebo na hranici definičního oboru aproximujeme pomocí funkčních hodnot v uzlových bodech uvnitř malé *lokální oblasti* (obr. 1.2) příslušné bodu \mathbf{x} (v lit. *support domain*), kterou budeme značit symbolem $\Omega_{\mathbf{x}}$. Tedy



Obr. 1.2: Tvary lokálních oblastí užívané ke konstrukci tvarových funkcí (nejčastěji kulový)

$$u(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \phi_i(\mathbf{x})u_i = \Phi^T(\mathbf{x})\mathbf{U}_s, \quad (1.1)$$

kde n je počet uzlových bodů obsažených v lokální oblasti $\Omega_{\mathbf{x}}$, u_i je uzlový parametr proměnné v i -tém uzlovém bodě $\Omega_{\mathbf{x}}$, \mathbf{U}_s je vektor uzlových parametrů proměnných v uzlových bodech $\Omega_{\mathbf{x}}$, $\phi_i(\mathbf{x})$ je *tvarová funkce* (obr. 1.3) v i -tém uzlovém bodě $\Omega_{\mathbf{x}}$, vypočtená pomocí uzlových bodů obsažených v $\Omega_{\mathbf{x}}$.



Obr. 1.3: Tvarové funkce

Poznamenejme, že lokální oblast bodu \mathbf{x} určuje počet uzlových bodů, které jsou použity při aproximaci/podpoře (z angl. support) funkční hodnoty v bodě \mathbf{x} . Tvar lokální oblasti bývá nejčastěji kruhový pro 2-dimenzionální úlohy a kulový pro 3-dimenzionální úlohy. Můžeme se také setkat s jinými tvary, např. eliptický a obdélníkový pro 2D úlohy, nebo elipsoidní a kvádrový u 3D úloh.

Dále poznamenejme, že koncept lokální oblasti pro určení uzlových bodů k aproximaci funkční hodnoty bodu \mathbf{x} funguje dobře, pokud se hustota rozmístění uzlových bodů v definičním oboru úlohy neliší příliš výrazně. V opačném případě, tj. při tzv. nevyváženém rozložení uzlových bodů, může dojít ke vzniku „špatné“ tvarové funkce. Představme si extrémní situaci, kde jsou všechny uzlové body uvnitř $\Omega_{\mathbf{x}}$ situovány pouze na jedné straně od bodu \mathbf{x} . Takto vytvořené tvarové funkce mohou způsobit výraznou chybu řešení. Z tohoto důvodu se u úloh s výrazně nerovnoměrným rozložením uzlových bodů užívá tzv. koncept *oblastí vlivu*, tj. ke tvorbě tvarové funkce příslušné bodu \mathbf{x} užijeme uzlové body \mathbf{x}_j , jejichž lokální oblast $\Omega_{\mathbf{x}_j}$ obsahuje bod \mathbf{x} .

3: Sestavení systému rovnic

Diskretizované rovnice mohou být formulovány pomocí tvarových funkcí a klasické nebo slabé formulace úlohy. Vzniklé rovnice jsou zpravidla zapisovány v maticové formě a zařazeny do globálních matic pro celý definiční obor úlohy.

Pro statické úlohy jsou globální rovnice ve tvaru soustavy algebraických rovnic. U dynamických problémů se jedná o soustavu obyčejných diferenciálních rovnic.

4: Řešení globálních rovnic

Forma řešení se liší dle typu úlohy:

- Statická úloha: Pro řešení lineární algebraické soustavy rovnic můžeme využít standartní řešič lineárních algebraických rovnic, např. Gaussovu eliminační metodu. V případě nelineární úlohy uijeme vhodnou linearizaci, např. Newtonovu metodu.
- Dynamická úloha: Soustavu obyčejných diferenciálních rovnic řešíme nejčastěji explicitní metodou (vhodné pro rychlé děje, např. srážka, exploze atd.), nebo implicitní metodou (vhodné pro relativně pomalé děje).

Poznamenejme, že u úloh výpočetní dynamiky tekutin, dále jen *CFD* úlohy (z angl. Computational Fluid Dynamics), jsou diskretizované rovnice v zásadě nelineární.

1.2.2 Porovnání s FEM

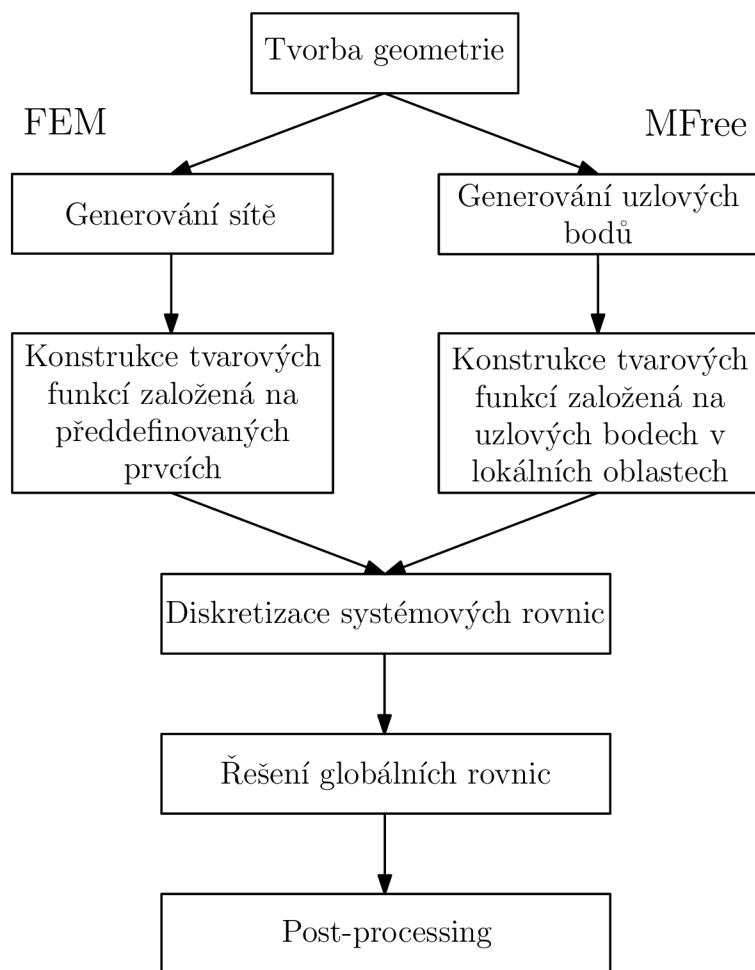
Následující schéma (obr. 1.4) ukazuje základní proceduru MFree metod a její porovnání s FEM. Za zmínku stojí následující body.

1. Metody se začínají lišit ve fázi generování sítě u FEM a generování uzlových bodů u MFree metod.
2. U FEM jsou tvarové funkce konstruovány na prvcích triangulace pomocí předdefinovaných referenčních prvků, zatímco u MFree metod se tvarové funkce konstruují pro konkrétní uzlový bod \mathbf{x} pomocí uzlových bodů z lokální oblasti $\Omega_{\mathbf{x}}$.
3. Ve chvíli, kdy je sestaven globální diskretizovaný systém rovnic, se obě metody řídí stejnou procedurou.

Vidíme tedy, že mezi FEM a MFree metodami existuje mnoho společných rysů, a proto je vhodné uvažovat o využití některých částí FEM, která je robustní a zcela vyvinutá, do MFree metod, které jsou stále ve fázi vývoje.

1.3 Tvarové funkce

Konstrukce tvarových funkcí zavedených vztahem (1.1) je jedním z hlavních témat MFree metod. Uvedeme si nutnou podmínku pro tvarové funkce a některé vhodné



Obr. 1.4: Ukázka

požadavky, které by měly „dobré“ tvarové funkce splňovat.

Nutnou podmínkou, kterou musí tvarová funkce splňovat, je tzv. *podmínka normality*

$$\sum_{i=1}^n \phi_i(\mathbf{x}) = 1, \quad (1.2)$$

kde n je počet uzlových bodů obsažených v $\Omega_{\mathbf{x}}$.

Splněním následujících požadavků na tvarové funkce je zajištěna snadná implementace a rozumná přesnost MFree metod.

1. libovolné rozložení uzlových bodů
2. stabilita
3. konzistence
4. kompaktní nosič
5. kompatibilita

6. vlastnost Diracovy delta funkce
7. efektivnost

Jednotlivé vlastnosti si nyní ozřejmíme.

add 1 : Požadavek libovolného (nejen rovnoměrného) rozložení uzlových bodů je zásadní při řešení praktických problémů. Často je nutné v určitých místech zvýšit počet uzlových bodů k dosažení požadované přesnosti.

add 2 : Stabilitou rozumíme, že numerické řešení bude ohraničené a bez oscilací.

add 3 : Požadavek konzistence je zásadní pro přesnost a konvergenci řešení. Rozumíme tím schopnost aproximačního schématu reprodukovat polynomy stupně k (C^k konzistence, viz dále v sekci 2.2.3).

add 4 : Tvarová funkce příslušná uzlovému bodu \mathbf{x} je nenulová jen v malé lokální oblasti $\Omega_{\mathbf{x}}$.

add 5 : Kompatibilita tvarové funkce příslušné bodu \mathbf{x} vyjadřuje hladkost (spojitost v hodnotách a případně i v derivacích) jejího prodloužení nulou z $\Omega_{\mathbf{x}}$ do Ω .

add 6 : Vlastnost Diracovy delta funkce vyjadřuje, že tvarová funkce příslušná uzlovému bodu \mathbf{x} je rovna jedné v uzlovém bodě \mathbf{x} , jinak je rovna nule.

add 7 : Požadavek efektivnosti poskytuje prevenci před příliš nákladným konstruováním tvarových funkcí. Vývoj efektivních metod ke konstrukci tvarových funkcí u MFree metod je stále ve fázi výzkumu.

1.4 Rozdělení MFree metod

Existuje několik cest, jak konstruovat tvarové funkce. Dle tohoto hlediska se MFree metody dělí do následujících tří skupin (G.R.Liu a Y.T.Gu, 2005, [9]).

1. Metody lokální integrální reprezentace
 - Smoothed particle hydrodynamics metoda (SPH)
 - Reproducing kernel particle metoda (RKPM)

2. Metody rozvoje do konečné řady

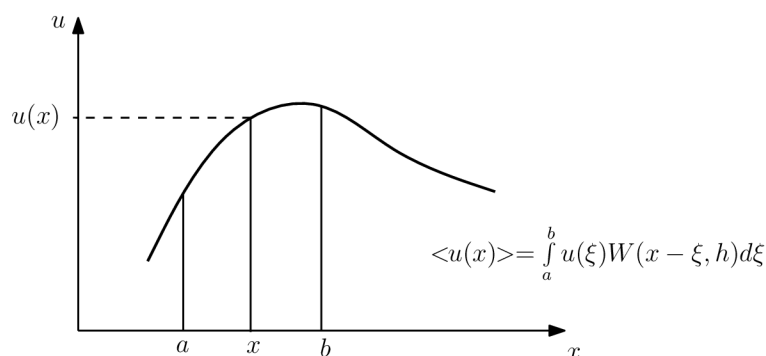
- Moving least squares metoda (MLS)
- Point interpolation metoda (PIM)
- Finite point metoda (FPM)

3. Metody lokální diferenciální reprezentace

- General Finite difference metoda (GFDM)

Pro jednotlivé metody budeme v dalším textu používat označení uvedené v závorce.

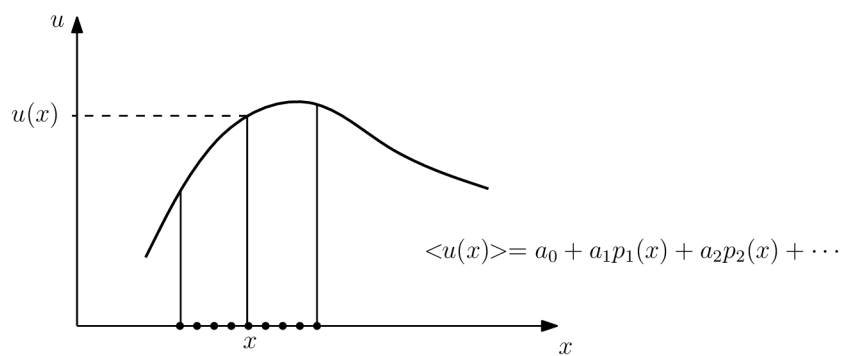
U metod *lokální integrální reprezentace* (obr. 1.5) je funkce reprezentována svými hodnotami v lokální oblasti pomocí vážené integrální operace. Konzistence je zaručena vhodně zvolenou váhovou funkcí. Do této kategorie patří často užívaná SPH metoda [10] a její modifikace, tj. RKPM [11].



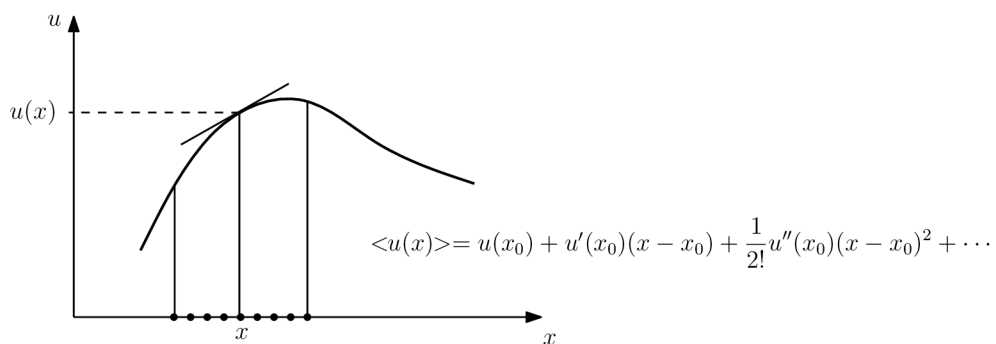
Obr. 1.5: Lokální integrální reprezentace

Metody *rozvoje do konečné řady* (obr. 1.6) byly zcela vyvinuty pro FEM a nyní nacházejí využití i u MFree metod, založených na libovolně rozložených uzlových bodech bez vazeb. Konzistence je zajištěna úplností básových funkcí, viz [4]. Do této kategorie patří MLS metoda [6], která patří mezi nejčastěji užívané přístupy. Časté je i použití PIM metody, užívající radiální básovou funkci (RBF), tj. RPIM metoda [15]. Do této kategorie spadá i FPM metoda [13], která k aproximaci vektoru neznámých využívá metodu nejmenších čtverců s váhou (WLSQ - Weighted Least Squares).

Metody *lokální diferenciální reprezentace* (obr. 1.7) byly vyvinuty a používány u metody konečných diferencí (FDM - Finite Difference Method). Konzistence vychází z teorie Taylorových řad. Do této kategorie patří GFDM metoda [14] užívající nepravidelnou mřížku.



Obr. 1.6: Rozvoj do konečné řady

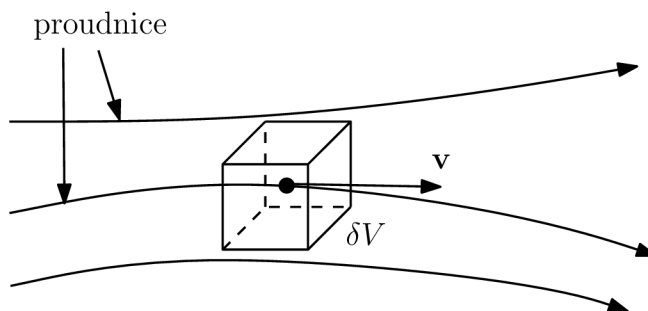


Obr. 1.7: Lokální diferenciální reprezentace

2 MFREE METODY VE VÝPOČETNÍ DYNAMICE TEKUTIN

2.1 Navierovy-Stokesovy rovnice

Při popisu dynamiky tekutin budeme užívat tzv. *Lagrangeův přístup* a s ním související pojem *Lagrangeův kontrolní objem* (obr. 2.1). Tento přístup je charakteristický



Obr. 2.1: Lagrangeův kontrolní objem

tím, že hodnoty veličin (hustota, rychlost, energie atd.) jsou přímo spjaty s jednotlivými částicemi. Tedy, jinak řečeno, každá částice si s sebou nese svoji hustotu, rychlost, energii atd. Rovnice popisující dynamiku tekutin vycházejí z následujících tří zákonů zachování.

1. Zákon zachování hmoty
2. Zákon zachování hybnosti
3. Zákon zachování energie

První zákon nám říká, že časová změna hmotnosti, uzavřené uvnitř Lagrangeova kontrolního objemu, je nulová. Tedy máme

$$\frac{D(\delta m)}{Dt} = 0, \quad (2.1)$$

přičemž

$$\delta m = \rho \delta V, \quad (2.2)$$

kde δm , ρ a δV je *hmotnost*, *hustota* a *objem* Lagrangeova kontrolního objemu a $\frac{D}{Dt}$ je tzv. *materiálová derivace* (derivace podél trajektorie pohybující se částice), viz [3]. Dosazením rovnice (2.2) do (2.1) a derivací součinu obdržíme vztah

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \frac{1}{\delta V} \frac{D(\delta V)}{Dt} = 0. \quad (2.3)$$

Tuto rovnici můžeme přepsat do tvaru (viz [10])

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (2.4)$$

kde $\nabla \cdot \mathbf{v}$ je *divergence rychlosti*, která je interpretována jako míra časové změny jednotkového objemu. Vztah (2.4) bývá označován jako *rovnice kontinuity*.

Zákon zachování hybnosti, neboli 2. Newtonův zákon, tvrdí, že celková síla působící na Lagrangeův kontrolní objem je rovna součinu hmotnosti a zrychlení tohoto kontrolního objemu. Tedy platí

$$\mathbf{F} = \delta m \mathbf{a}. \quad (2.5)$$

Celková síla se skládá z vnitřních (gravitačních, magnetických atd.) a vnějších (tlakových, smykových atd.) sil.

Pravou stranu rovnice (2.5), ve směru osy x , můžeme přepsat následujícím způsobem

$$\delta m a_x = \delta m \frac{dv_x}{dt} = \rho \delta V \frac{dv_x}{dt} = \rho dx dy dz \frac{dv_x}{dt}, \quad (2.6)$$

kde dx , dy a dz jsou rozměry Lagrangeova kontrolního objemu. Při rozepisování levé strany rovnice (2.5), ve směru osy x , uvedeme působící síly již v upraveném tvaru. Podrobnější postup je uveden v pramenu [10].

$$F_x = F_x^s + F_x^b = -\frac{\partial p}{\partial x} dx dy dz + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} dx dy dz + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} dx dy dz + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} dx dy dz + F_x^b, \quad (2.7)$$

kde F_x^s (F_x^b) značí *celkovou vnější (vnitřní) sílu* ve směru osy x (z. angl. surface force, body force), p vyjadřuje *tlak* a τ_{ij} značí *napětí* ve směru j působící na rovinu kolmou k ose i .

Po dosazení upravených tvarů (2.6), (2.7) do x -ové složky rovnice (2.5) a vydělení výrazem $dx dy dz$ obdržíme následující vztah

$$\rho \frac{Dv_x}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho F_x^b, \quad (2.8)$$

který bývá označován jakožto *pohybová rovnice* ve směru osy x . Obdobným způsobem obdržíme pohybové rovnice ve směru osy y a z . Uvažujeme-li Newtonskou tekutinu, pak je *tenzor napětí* τ přímo úměrný *tenzoru rychlosti deformace*, který budeme označovat symbolem ε . Materiálovou konstantou této úměry je *dynamická viskozita* μ . Tedy máme

$$\tau_{ij} = \mu \varepsilon_{ij}, \quad (2.9)$$

kde

$$\varepsilon_{ij} = \frac{\partial v_j}{\partial i} + \frac{\partial v_i}{\partial j} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \delta_{ij}, \quad (2.10)$$

kde δ_{ij} je Kroneckerův symbol.

Zákon zachování energie odpovídá 1. zákonu termodynamiky, který tvrdí, že časová změna *vnitřní energie*, kterou budeme značit symbolem e , uvnitř Lagrangeova kontrolního objemu je rovna součtu celkového tepelného toku tímto kontrolním objemem a práci vykonané vnitřními a vnějšími silami působícími na kontrolní objem. Jinak řečeno, energie v izolované soustavě nemůže samovolně vznikat ani zanikat. V případě zanedbání tepelného toku a vnitřních sil se časová změna vnitřní energie uvnitř Lagrangeova kontrolního objemu skládá z práce vykonané izotropickým tlakem vynásobeným objemovou deformací a z energetických ztrát zapříčiněných viskózními silami. Tedy obdržíme tzv. *rovnicí energie* v následujícím tvaru

$$\begin{aligned} \rho \frac{De}{Dt} = & -p \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) + \tau_{xx} \frac{\partial v_x}{\partial x} + \tau_{yx} \frac{\partial v_x}{\partial y} + \tau_{zx} \frac{\partial v_x}{\partial z} + \\ & + \tau_{xy} \frac{\partial v_y}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial v_y}{\partial y} + \tau_{zy} \frac{\partial v_y}{\partial z} + \tau_{xz} \frac{\partial v_z}{\partial x} + \tau_{yz} \frac{\partial v_z}{\partial y} + \tau_{zz} \frac{\partial v_z}{\partial z}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Shrnutí:

Obdrželi jsme tedy systém parciálních diferenciálních rovnic v Lagrangeově tvaru popisujících dynamiku tekutin, které jsou známé jakožto *Navierovy-Stokesovy rovnice*. Tyto rovnice si nyní uvedeme v komprimovaném tvaru, kde indexy α, β, γ vyjadřují souřadnicové směry. V této práci budeme užívat tzv. Einsteinovu sumační konvenci pouze v případě opakujících se indexů α, β, γ . Máme tedy následující systém rovnic.

1. Rovnice kontinuity

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \frac{\partial \mathbf{v}^\alpha}{\partial \mathbf{x}^\alpha} \quad (2.12)$$

2. Pohybové rovnice (v případě $\mathbf{F}^b = \mathbf{0}$)

$$\frac{D\mathbf{v}^\alpha}{Dt} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma^{\alpha\beta}}{\partial \mathbf{x}^\beta} \quad (2.13)$$

3. Rovnice energie

$$\frac{De}{Dt} = \frac{\sigma^{\alpha\beta}}{\rho} \frac{\partial \mathbf{v}^\alpha}{\partial \mathbf{x}^\beta} \quad (2.14)$$

Ve výše uvedených rovnicích symbol σ značí tenzor napětí, přičemž

$$\sigma^{\alpha\beta} = -p\delta^{\alpha\beta} + \tau^{\alpha\beta}, \quad (2.15)$$

kde (uvažujeme Newtonskou kapalinu)

$$\tau^{\alpha\beta} = \mu\varepsilon^{\alpha\beta}, \quad (2.16)$$

kde

$$\varepsilon^{\alpha\beta} = \frac{\partial \mathbf{v}^\beta}{\partial \mathbf{x}^\alpha} + \frac{\partial \mathbf{v}^\alpha}{\partial \mathbf{x}^\beta} - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial \mathbf{v}^\gamma}{\partial \mathbf{x}^\gamma} \right) \delta^{\alpha\beta}. \quad (2.17)$$

Tlak p se v případě stlačitelné tekutiny vypočte ze stavové rovnice

$$p = (\lambda - 1)\rho e, \quad (2.18)$$

kde λ je tzv. *Poissonova* konstanta. U nestlačitelných tekutin se často zavádí tzv. umělá stlačitelnost (viz dále v sekci 2.2.5).

Vztahy (2.15),(2.16), (2.17) resp. (2.18) bývají označovány jako *konstituční vztahy* resp. *stavová rovnice*. Užitím těchto konstitučních vztahů je možné pro konstantní μ převést pohybové rovnice (2.13) a rovnici energie (2.14) do tvarů

$$\frac{D\mathbf{v}^\alpha}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \mathbf{x}^\alpha} + \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial \varepsilon^{\alpha\beta}}{\partial \mathbf{x}^\beta}, \quad (2.19)$$

$$\frac{De}{Dt} = -\frac{p}{\rho} \frac{\partial \mathbf{v}^\alpha}{\partial \mathbf{x}^\alpha} + \frac{\mu}{2\rho} \varepsilon^{\alpha\beta} \varepsilon^{\alpha\beta}, \quad (2.20)$$

ve kterých je oddělena tlaková a viskózní složka.

2.2 SPH metoda

Smoothed Particle Hydrodynamics, neboli SPH metoda, je základním zástupcem MFree metod a patří do kategorie metod lokální integrální reprezentace. Používá se k řešení parciálních diferenciálních rovnic aproximací neznámých funkcí a jejich prostorových derivací, což produkuje systém obyčejných diferenciálních rovnic, který nejčastěji řešíme explicitními metodami.

2.2.1 Formulace

Aproximace funkce

Formulace SPH metody vychází z následující integrální reprezentace. Uvažujme funkci $u(\mathbf{x})$ v libovolném bodě $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$, kde N je značí dimenzi prostoru. Pak

$$u(\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^N} u(\boldsymbol{\xi}) \delta(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.21)$$

kde $\delta(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi})$ je Diracova delta funkce.

Integrální reprezentace funkce $u(\mathbf{x})$, uvedená v rovnici (2.21), je přesná, ale nepoužitelná pro numerické řešení.

Z tohoto důvodu se užívá následující lokální integrální reprezentace funkce, která vznikne nahrazením $\delta(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi})$ funkcí $W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, h)$. Tedy

$$u(\mathbf{x}) \doteq \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} u(\boldsymbol{\xi}) W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, h) d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.22)$$

kde $W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, h)$ je *váhová funkce* (*vyhlazovací funkce*, *jádrová funkce*), přičemž h je *vyhlazovací délka*, která určuje velikost lokální oblasti $\Omega_{\mathbf{x}} \subset \mathbb{R}^N$ takovým způsobem, že $\Omega_{\mathbf{x}} = \{ \boldsymbol{\xi} \mid |\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}| < \kappa h \}$, kde κ je vhodně zvolená konstanta.

Poznamenejme, že vztah (2.22) je aproximací funkce $u(\mathbf{x})$. Dále budeme užívat aproximační operátor značený symboly $\langle \rangle$ a tedy aproximaci (2.22) pomocí něho zapíšeme do tvaru

$$\langle u(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} u(\boldsymbol{\xi}) W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, h) d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.23)$$

který bývá konvenčně označován jako *jádrová aproximace* funkce $u(\mathbf{x})$.

K praktickému výpočtu je nutné aproximaci (2.23) diskretizovat do tvaru následující sumace (připomínající numerickou integraci na $\Omega_{\mathbf{x}}$)

$$\langle u(\mathbf{x}) \rangle = \sum_{j=1}^n u(\boldsymbol{\xi}_j) W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}_j, h) \Delta V_j, \quad (2.24)$$

kde n značí počet částic v lokální oblasti $\Omega_{\mathbf{x}}$ a ΔV_j reprezentuje objem částice $\boldsymbol{\xi}_j$ aproximovaný vztahem

$$\Delta V_j = \frac{m_j}{\rho_j}, \quad (2.25)$$

kde m_j značí hmotnost částice $\boldsymbol{\xi}_j$ a ρ_j je hustota částice $\boldsymbol{\xi}_j$.

Substitucí (2.25) do (2.24) obdržíme vztah

$$\langle u(\mathbf{x}) \rangle = \sum_{j=1}^n u(\boldsymbol{\xi}_j) W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}_j, h) \frac{m_j}{\rho_j}, \quad (2.26)$$

který bývá často označován jako *částicová aproximace* funkce $u(\mathbf{x})$.

Poznamenejme, že aproximace (2.26) odpovídá aproximaci (1.1) zavedené pro obecnou MFree metodu, kde funkce $\phi_j(\mathbf{x})$ má tvar

$$\phi_j(\mathbf{x}) = W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}_j, h) \frac{m_j}{\rho_j}. \quad (2.27)$$

Aproximace derivace funkce

Při odvození aproximace prostorové derivace $\nabla \cdot u(\mathbf{x})$ vyjdeme ze vztahu (2.23), kde výraz $u(\mathbf{x})$ nahradíme výrazem $\nabla \cdot u(\mathbf{x})$. Tedy máme

$$\langle \nabla \cdot u(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} [\nabla_{\xi} \cdot u(\xi)] W(\mathbf{x} - \xi, h) d\xi, \quad (2.28)$$

kde na integrand aplikujeme vzorec o *derivaci součinu* a dostáváme vztah

$$\langle \nabla \cdot u(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} \nabla_{\xi} \cdot [u(\xi) W(\mathbf{x} - \xi, h)] d\xi - \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} u(\xi) \cdot \nabla_{\xi} W(\mathbf{x} - \xi, h) d\xi. \quad (2.29)$$

První integrál pravé strany rovnice (2.29) převedeme pomocí *Greenovy věty* na integrál přes hranici $\partial\Omega_{\mathbf{x}}$, tj.

$$\int_{\Omega_{\mathbf{x}}} \nabla_{\xi} \cdot [u(\xi) W(\mathbf{x} - \xi, h)] d\xi = \int_{\partial\Omega_{\mathbf{x}}} u(\xi) W(\mathbf{x} - \xi, h) \cdot \mathbf{n} d\partial\Omega_{\mathbf{x}}, \quad (2.30)$$

kde \mathbf{n} je jednotkový vektor normály k hranici $\partial\Omega_{\mathbf{x}}$.

Za předpokladu, že váhová funkce W je na hranici $\partial\Omega_{\mathbf{x}}$ nulová, můžeme integrál přes hranici $\partial\Omega_{\mathbf{x}}$, na pravé straně rovnice (2.30), položit roven nule. S využitím tohoto předpokladu a po dosazení do rovnice (2.29) dostáváme výsledný vztah

$$\langle \nabla \cdot u(\mathbf{x}) \rangle = - \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} u(\xi) \cdot \nabla_{\xi} W(\mathbf{x} - \xi, h) d\xi \quad (2.31)$$

pro aproximaci prostorové derivace. Můžeme si rovněž povšimnout, že aproximace prostorové derivace funkce u se určí pouze pomocí hodnot funkce u a derivací váhové funkce W nikoliv pomocí derivací samotné funkce u . Je tedy vhodné volit váhové funkce, u kterých snadno obdržíme jejich derivaci, např. polynomické funkce, po částech polynomické funkce (splajny) atd.

Poznámka 2.1. Váhové funkce je možné zapisovat ve tvaru

$$W(\mathbf{x} - \xi, h) \equiv W(R, \kappa h) = \alpha_d(\kappa h) \cdot W_R(R) \equiv \alpha_d \cdot W_R,$$

kde $\alpha_d = \alpha_d(\kappa h)$ je funkce vyhlazovací vzdálenosti κh , která je konstruována tak, aby byla splněna podmínka normality daná vztahem (2.34), symbol R značí *relativní vzdálenost* bodu \mathbf{x} od bodu ξ , tj.

$$R = \frac{r}{d} = \frac{|\mathbf{x} - \xi|}{\kappa h},$$

kde r je vzdálenost těchto dvou bodů a $d = \kappa h$ reprezentuje „velikost“ lokální oblasti $\Omega_{\mathbf{x}}$. Je-li např. $\Omega_{\mathbf{x}}$ koule, pak κh je její poloměr.

Při diskretizaci vztahu (2.31) budeme postupovat obdobným způsobem jako v předešlé části. Částicová aproximace prostorové derivace funkce u je tedy

$$\langle \nabla \cdot u(\mathbf{x}) \rangle = \sum_{j=1}^n u(\boldsymbol{\xi}_j) \nabla_{\mathbf{x}} W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}_j, h) \frac{m_j}{\rho_j}, \quad (2.32)$$

kde

$$\nabla_{\mathbf{x}} W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}_j, h) = -\nabla_{\boldsymbol{\xi}} W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, h) \Big|_{\boldsymbol{\xi}=\boldsymbol{\xi}_j} = \frac{\alpha_d}{d} \frac{\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}_j}{r_j} W'_R(R), \quad (2.33)$$

přičemž $r_j = |\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}_j|$.

Ze vztahů (2.26), (2.32) obdržíme numerické hodnoty funkce u a také hodnoty jejích prostorových derivací pomocí tzv. částicové aproximace. Tento typ aproximace je charakteristický tím, že k aproximaci funkce u v bodě \mathbf{x} využíváme pouze částice ležící uvnitř malé lokální oblasti $\Omega_{\mathbf{x}}$, přičemž body \mathbf{x} mezi sebou nemají žádnou předdefinovanou vazbu, tj. netvoří síť. Toto je podstata SPH metody a také hlavní rozdíl v porovnání s tradičními numerickými metodami.

2.2.2 Váhové funkce

Váhové funkce patří k nejdůležitějším tématům MFree metod. Nejenže určují šablonu pro funkční aproximaci, ale určují také stupeň konzistence (viz dále v sekci 2.2.3) a tím i celkovou přesnost aproximace. Navíc konvergence lokální integrální reprezentace závisí pouze na vlastnostech váhových funkcí W , které v této části uvedeme společně s příklady nejčastěji používaných váhových funkcí.

Vlastnosti

Mezi minimální požadavky pro konstrukci váhové funkce patří tzv. *podmínka normality*

$$\int_{\Omega_{\mathbf{x}}} W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, h) d\boldsymbol{\xi} = 1. \quad (2.34)$$

Dalším minimálním požadavkem je *podmínka kompaktnosti*

$$W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, h) = 0 \quad \text{pro } \forall \boldsymbol{\xi} \notin \Omega_{\mathbf{x}}, \quad (2.35)$$

která nám zaručí, že aproximace $\langle u(\mathbf{x}) \rangle$ závisí pouze na hodnotách funkce u v uzlových bodech uvnitř lokální oblasti $\Omega_{\mathbf{x}}$. Posledním minimálním požadavkem je *vlastnost Delta funkce*, tj.

$$\lim_{h \rightarrow 0} W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, h) = \delta(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}). \quad (2.36)$$

Tato podmínka slouží výhradně k explicitnímu sledování, zda-li metoda konverguje.

Dále si uvedeme požadavky, které mají spíše fyzikální význam a zajišťují smysluplnou interpretaci zkoumaného jevu. Jedná se především o *podmínku positivity*

$$W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, h) > 0 \quad \text{pro } \forall \boldsymbol{\xi} \in \Omega_{\mathbf{x}}, \quad (2.37)$$

např. hustota nemůže nabývat záporných hodnot. Dále se jedná o požadavek, který vyjadřuje, že působení částice na jinou částici klesá se vzrůstající vzdáleností mezi těmito částicemi. Tedy váhová funkce W je *ryze klesající funkcí*, tj.

$$\forall \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2 \in \Omega_{\mathbf{x}}; |\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}_1| < |\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}_2| \Rightarrow W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}_1, h) > W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}_2, h), \quad (2.38)$$

kde $|\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}|$ značí *Euklidovskou vzdálenost* bodu \mathbf{x} od bodu $\boldsymbol{\xi}$.

Další požadavky na váhovou funkci W , které si zde uvedeme, mají vést ke zlepšení aproximace. Jedná se především o *podmínku symetrie*, tj.

$$\forall \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2 \in \Omega_{\mathbf{x}}; |\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}_1| = |\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}_2| \Rightarrow W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}_1, h) = W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}_2, h). \quad (2.39)$$

Poslední podmínkou je požadavek na dostatečnou *hladkost* váhové funkce. Obvykle platí, že hladší váhová funkce vede k lepším výsledkům.

Příklady

Nyní uvedeme příklady nejpoužívanějších váhových funkcí, které byly zkonstruovány na základě výše uvedených vlastností. Poznamenejme, že je velice obtížné sestavit váhovou funkci tak, aby splňovala všechny výše uvedené vlastnosti a zároveň měla dostatečně jednoduchý tvar k zajištění efektivnosti celé metody.

Váhové funkce byly v rámci této práce převedeny do tvaru pro obecný parametr κ . Volba tohoto parametru je velmi důležitá, protože určuje velikost lokálních oblastí a tím i počet uzlových bodů určených k aproximaci. Uvedeme si tedy doporučené hodnoty κ pro jednotlivé váhové funkce podle [8] a [10].

Poznámka 2.2. V grafech váhových funkcí W bude vykresleno sudé rozšíření $\hat{W}_R \equiv \hat{W}_R(R)$ funkce W_R , tj.

$$\begin{aligned} \hat{W}_R(R) &= W_R(R) & \text{pro } & 0 \leq R \leq 1, \\ \hat{W}_R(R) &= W_R(-R) & \text{pro } & -1 \leq R < 0. \end{aligned}$$

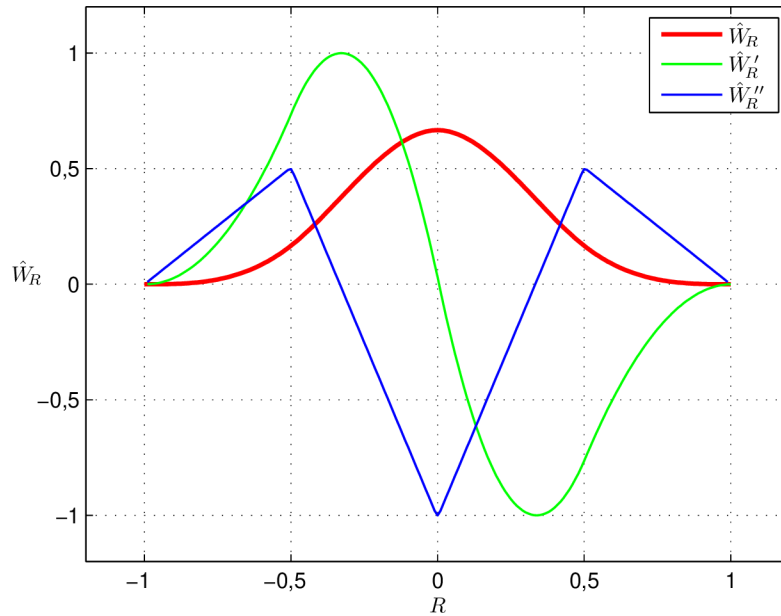
V grafech jsou též zobrazeny tvary první a druhé derivace funkce \hat{W}_R , tj. \hat{W}'_R, \hat{W}''_R , které byly modifikovány tak, aby

$$\max |\hat{W}'_R| = \max |\hat{W}''_R| = 1.$$

V dnešní době nejrozšířenější váhovou funkcí je tzv. *kubický splajn* (Monaghan a Lattanzio, 1985), známý také jako *B-splajn* (obr. 2.2), daný vztahem

$$W(\mathbf{x}-\boldsymbol{\xi}, h) \equiv W(R, h) = \alpha_d \cdot \begin{cases} \frac{2}{3} - 4R^2 + 4R^3 & \text{pro } 0 \leq R < \frac{1}{2}, \\ \frac{4}{3} - 4R + 4R^2 - \frac{4}{3}R^3 & \text{pro } \frac{1}{2} \leq R < 1, \\ 0 & \text{pro } R \geq 1, \end{cases} \quad (2.40)$$

kde $\alpha_d = \frac{2}{\kappa h}$, $\frac{60}{7\pi\kappa^2 h^2}$, $\frac{12}{\pi\kappa^3 h^3}$ pro $N = 1, 2, 3$. V literatuře [10] je doporučeno $\kappa = 2$.

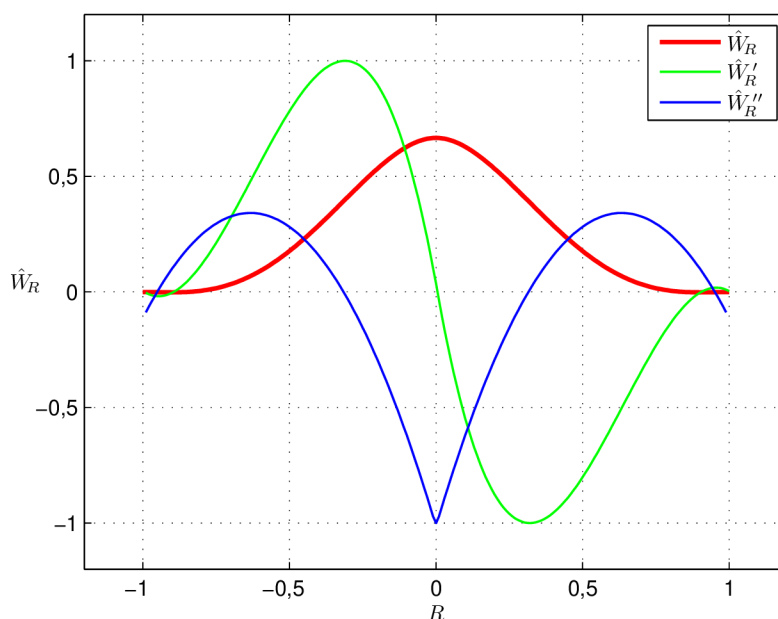


Obr. 2.2: B-splajn

Další používanou váhovou funkcí je *kvartická funkce* (G.R.Liu, 2002) znázorněná na obr. 2.3. Tvar této funkce je

$$W(R, h) = \alpha_d \cdot \begin{cases} \frac{2}{3} - \frac{9}{2}R^2 + \frac{19}{3}R^3 - \frac{5}{2}R^4 & \text{pro } 0 \leq R < 1, \\ 0 & \text{pro } R \geq 1, \end{cases} \quad (2.41)$$

kde $\alpha_d = \frac{2}{\kappa h}$, $\frac{60}{7\pi\kappa^2 h^2}$, $\frac{315}{26\pi\kappa^3 h^3}$ pro $N = 1, 2, 3$. Doporučeno $\kappa = 2$, [10].



Obr. 2.3: kvartická funkce

Při porovnání těchto dvou váhových funkcí si můžeme povšimnout několika výhod kvartické funkce oproti kubickému splajnu.

1. Kvartická funkce má menší hodnotu *druhého momentu* M_2 , což obecně dává přesnější výsledky, přičemž

$$M_2 = \int_{\Omega_x} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi})^2 W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, h) d\boldsymbol{\xi}.$$

2. Hladší váhová funkce vede obecně k větší stabilitě řešení. Z grafů je patrné, že kvartická funkce má hladší druhou derivaci než po částech lineární druhá derivace kubického splajnu.
3. Kvartická funkce má jednodušší tvar.

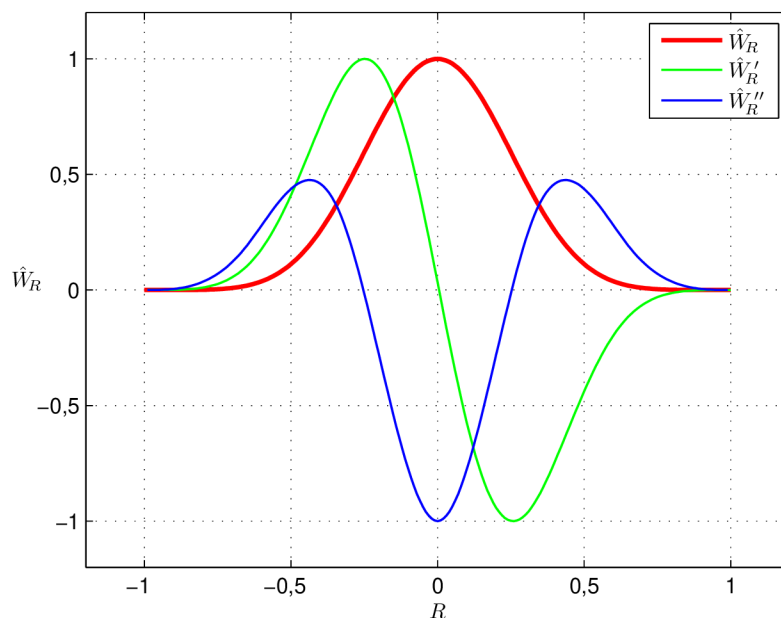
Jedinou nevýhodou kvartické funkce je nenulovost druhé derivace na hranici lokální oblasti, viz obr. 2.3.

Další možností je použití splajnu vyšších řádů (kvartický, kvintický), které lépe aproximují Gaussovu funkci e^{-R^2} a jsou stabilnější. Tedy *kvintický splajn* (Morris,

1996) na obr. 2.4 má tvar

$$W(R, h) = \alpha_d \cdot \begin{cases} \frac{81}{22}(1-R)^5 - \frac{1}{11}(2-3R)^5 + \frac{5}{22}(1-3R)^5 & \text{pro } 0 \leq R < \frac{1}{3}, \\ \frac{81}{22}(1-R)^5 - \frac{1}{11}(2-3R)^5 & \text{pro } \frac{1}{3} \leq R < \frac{2}{3}, \\ \frac{81}{22}(1-R)^5 & \text{pro } \frac{2}{3} \leq R < 1, \\ 0 & \text{pro } R \geq 1, \end{cases} \quad (2.42)$$

kde $\alpha_d = \frac{33}{20\kappa h}$, $\frac{2079}{239\pi\kappa^2 h^2}$, $\frac{297}{20\pi\kappa^3 h^3}$ pro $N = 1, 2, 3$. Doporučeno $\kappa = 3$, [10].



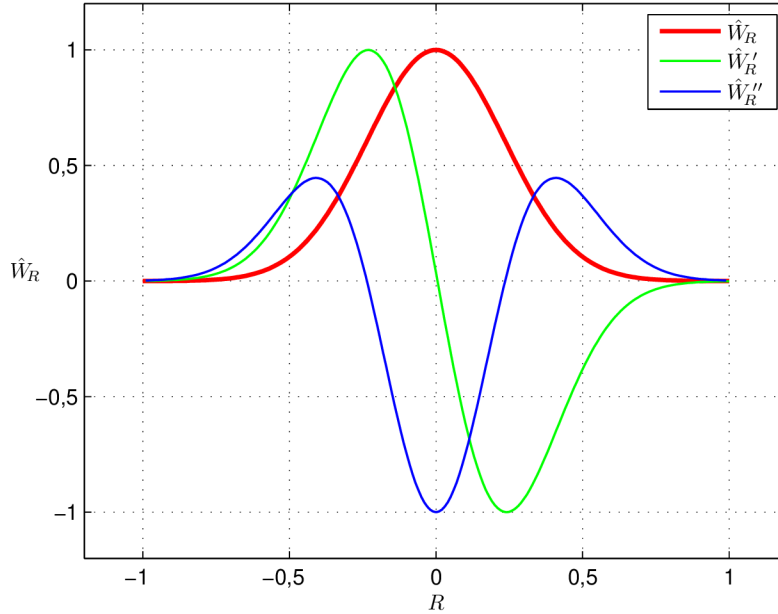
Obr. 2.4: kvintický splajn

Zástupcem třídy Gaussových funkcí je následující *exponenciální funkce* (obr. 2.5) daná vztahem

$$W(R, h) = \alpha_d \cdot \begin{cases} e^{-(3R)^2} & \text{pro } 0 \leq R < 1, \\ 0 & \text{pro } R \geq 1, \end{cases} \quad (2.43)$$

kde $\alpha_d = \frac{3}{\sqrt{\pi}\kappa h}$, $\frac{9}{\pi\kappa^2 h^2}$, $\frac{27}{\sqrt{\pi^3}\kappa^3 h^3}$ pro $N = 1, 2, 3$. Uveďme, že Gaussovy funkce nejsou spojité na hranici $\partial\Omega_{\mathbf{x}}$ a tudíž nesplňují podmínku hladkosti váhových funkcí. Z tohoto důvodu je nutné volit κ dostatečně velké tak, aby váhová funkce byla „skoro“ nulová na $\partial\Omega_{\mathbf{x}}$ a zároveň dostatečně malé, aby nedocházelo k nežádoucímu

vyhlazování. V literatuře [10] se doporučuje volit $\kappa = 3$ resp. v jiné knize [8] je doporučeno $\kappa = 3, \bar{3}$.



Obr. 2.5: exponenciální funkce

K simulaci vysokorychlostních nárazů je vhodné používat *kvadratickou funkci* (Johnson, 1966) znázorněnou na obr. 2.6. Tato funkce je dána vztahem

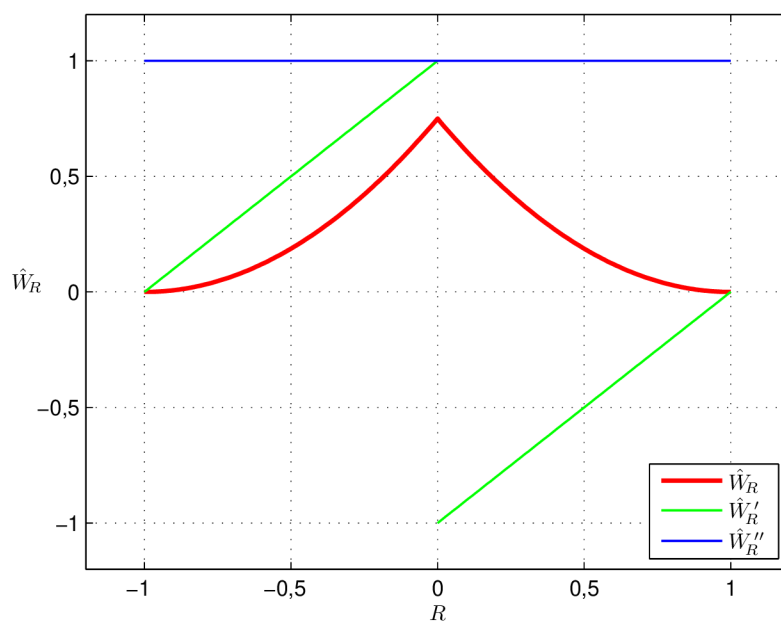
$$W(R, h) = \alpha_d \cdot \begin{cases} \frac{3}{4} - \frac{3}{2}R + \frac{3}{4}R^2 & \text{pro } 0 \leq R < 1, \\ 0 & \text{pro } R \geq 1, \end{cases} \quad (2.44)$$

kde $\alpha_d = \frac{2}{\kappa h}$, $\frac{8}{\pi \kappa^2 h^2}$, $\frac{10}{\pi \kappa^3 h^3}$ pro $N = 1, 2, 3$. Doporučeno $\kappa = 2$, [10].

Všechny váhové funkce jsou konstruovány tak, aby co nejlépe vystihovaly tvar Gaussovy funkce, která je považována za tzv. „zlatou“ volbu. Gaussova funkce však konverguje velmi pomalu k nule, což by mělo za následek velkou lokální oblast $\Omega_{\mathbf{x}}$ a velký počet aproximujících částic. Tento problém lze řešit vhodným nastavením parametru κ , viz (2.43). Pro některé úlohy je tedy mnohem vhodnější použít váhové funkce ve tvaru polynomů či splajnů, zejména kubického splajnu (2.40) a kvartické funkce (2.41).

2.2.3 Konzistence

Pod pojmem konvergence u MFree metod rozumíme, stejně jako u FEM, že numerické řešení obdržené MFree metodou se musí blížit k přesnému řešení, pokud se



Obr. 2.6: kvadratická funkce

vzdálenost mezi uzlovými body blíží k nule. K zajištění konvergence u MFree metod je zapotřebí, aby SPH aproximace splňovala jistý řád konzistence. Pojem konzistence aproximace úzce souvisí s reprodukcí polynomů, pomocí níž si konzistenci zavedeme.

Pokud aproximace dokáže reprodukovat přesně polynomy stupně k , tj.

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = f(\mathbf{x}), \quad (2.45)$$

kde $f(\mathbf{x})$ je polynom stupně k , pak řekneme, že aproximace je *konzistentní řádu k* , tj. C^k konzistentní.

Konkrétně u metody SPH, která vychází z lokální integrální reprezentace (2.23), dostaneme podmínku pro zaručení C^0 konzistence následujícím způsobem. Požadujeme, aby aproximace reprodukovala přesně polynom 0-tého stupně tj. konstantní funkci $u(\boldsymbol{\xi}) = c$, kde c je konstanta. Dosazením do (2.23) obdržíme

$$\langle u(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} cW(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, h)d\boldsymbol{\xi} = c, \quad (2.46)$$

což nám po vydělení konstantou c dává vztah

$$\int_{\Omega_{\mathbf{x}}} W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, h)d\boldsymbol{\xi} = 1, \quad (2.47)$$

který odpovídá podmínce normality (2.34). Vidíme tedy, že SPH aproximace je minimálně C^0 konzistentní, protože podmínka normality patří mezi minimální požadavky váhových funkcí W .

Nyní vyšetříme, zda-li je SPH aproximace C^1 konzistentní. Předpokládejme lineární funkci $u(\boldsymbol{\xi}) = c_0 + c_1^T \boldsymbol{\xi}$, kde c_0 je konstanta a c_1 je konstantní vektor. Substitucí do rovnice (2.23) obdržíme

$$\langle u(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} (c_0 + c_1^T \boldsymbol{\xi}) W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, h) d\boldsymbol{\xi}. \quad (2.48)$$

Pro zaručení C^1 konzistence musí platit

$$\langle u(\mathbf{x}) \rangle = c_0 + c_1^T \mathbf{x}. \quad (2.49)$$

Porovnáním pravých stran rovnic (2.48), (2.49) dostáváme

$$c_0 + c_1^T \mathbf{x} = \int_{\Omega_{\mathbf{x}}} (c_0 + c_1^T \boldsymbol{\xi}) W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, h) d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.50)$$

což nám po několika úpravách a užití vztahu (2.34) dává podmínku pro zaručení C^1 konzistence, tj.

$$\int_{\Omega_{\mathbf{x}}} \boldsymbol{\xi} W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, h) d\boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}. \quad (2.51)$$

Obdobným způsobem získáme podmínky konzistence vyšších řádů. Můžeme tedy zavést následující definici.

Definice 2.1. SPH aproximaci nazveme C^k konzistentní právě tehdy, když váhové funkce splňují podmínku

$$\int_{\Omega_{\mathbf{x}}} \boldsymbol{\xi}^l W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, h) d\boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}^l \quad \text{pro } l = 0, 1, \dots, k. \quad (2.52)$$

K lepšímu porozumění podmínky (2.51), pro C^1 konzistenci, nám dopomůže následující věta.

Věta 2.1. SPH aproximace je C^1 konzistentní právě tehdy, když je C^0 konzistentní a zároveň příslušná váhová funkce W je sudou funkcí.

Důkaz. „ \Rightarrow “: Předpokládáme platnost podmínek pro C^1 konzistenci, tj. (2.47), (2.51). Tedy C^0 konzistence plyne zřejmě. Po vynásobení rovnice (2.47) výrazem \mathbf{x} dostáváme

$$\int_{\Omega_{\mathbf{x}}} \mathbf{x} W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, h) d\boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}. \quad (2.53)$$

Nyní odečteme rovnici (2.51) od rovnice (2.53) a máme

$$\int_{\Omega_{\mathbf{x}}} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}) W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, h) d\boldsymbol{\xi} = 0, \quad (2.54)$$

kde daný integrál je tzv. *první moment* váhové funkce W . Z rovnosti (2.54) plyne, že W musí být sudá funkce.

„ \Leftarrow “: Předpokládáme platnost podmínky pro C^0 konzistenci (2.47) a platnost vztahu (2.54), který zaručuje sudost váhové funkce W . Obdobně jako v první části důkazu vynásobíme rovnici (2.47) výrazem \mathbf{x} a obdržíme vztah (2.53). Po odečtení rovnice (2.54) od rovnice (2.53) zřejmě dostaneme vztah (2.51), který zaručuje C^1 konzistenci SPH aproximace. \square

Objasnili jsme si tedy důvod, proč je vhodné volit váhové funkce W jakožto sudé funkce. V případě splnění podmínky pro C^0 konzistenci nám ihned zaručí C^1 konzistenci SPH aproximace. Navíc vidíme, že řád konzistence závisí pouze na vlastnostech váhových funkcí.

2.2.4 Diskretizace Navierových-Stokesových rovnic

V této části uvedeme způsoby diskretizace Navierových-Stokesových rovnic zavedených v části 2.1 pomocí částicové aproximace funkce (2.26) a částicové aproximace prostorové derivace funkce (2.32).

Nejprve si zavedeme zjednodušený zápis uvedených aproximací. Pro částicovou aproximaci funkce máme

$$\langle u_i \rangle \quad (\equiv \langle u(\mathbf{x}_i) \rangle) = \sum_{j=1}^n u_j W_{ij} \frac{m_j}{\rho_j}, \quad (2.55)$$

kde $u_j \equiv u(\boldsymbol{\xi}_j)$ a váhová funkce

$$W_{ij} \equiv W(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\xi}_j, h).$$

Částicovou aproximaci prostorové derivace budeme zapisovat následovně

$$\left\langle \frac{\partial u_i}{\partial \mathbf{x}_i^\alpha} \right\rangle = \sum_{j=1}^n u_j \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i^\alpha} \frac{m_j}{\rho_j}, \quad (2.56)$$

kde

$$\frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i^\alpha} = \alpha_d(h) \frac{\mathbf{x}_i^\alpha - \boldsymbol{\xi}_j^\alpha}{|\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\xi}_j|} W'_R \left(\frac{|\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\xi}_j|}{\kappa h} \right).$$

Aproximace hustoty

Prvním přístupem je tzv. *sumační metoda*, která je odvozena přímým aplikováním částicové aproximace (2.55) na hustotu, tj.

$$\rho_i = \sum_{j=1}^n m_j W_{ij}, \quad (2.57)$$

kde ρ_i značí částicovou aproximaci hustoty i -tého uzlového bodu (i -té částice) definičního oboru Ω , n je počet částic v lokální oblasti i -té částice $\Omega_i \equiv \Omega_{\mathbf{x}_i}$ a m_j značí hmotnost j -té částice.

Z rovnice (2.57) je patrná podstata sumační metody, tj. hustota částice je aproximována pomocí váženého průměru hustot částic v lokální oblasti této částice. Výhodou tohoto přístupu je, že hmotnost je zachována přesně. Hlavní nevýhodou je však tzv. „edge“ efekt, který způsobuje nepřesné výsledky v blízkosti hranice definičního oboru, což lze řešit pomocí vhodně zvolené okrajové podmínky (viz dále) a navíc tento efekt způsobuje tzv. vyhlazování na rozhraních látek s odlišnou hustotou.

Při snaze odstranit negativní vlastnosti sumační metody začaly vznikat její modifikace. Jednou z nich je *normalizovaná sumační metoda* daná vztahem

$$\rho_i = \frac{\sum_{j=1}^n m_j W_{ij}}{\sum_{j=1}^n \left(\frac{m_j}{\rho_j}\right) W_{ij}}, \quad (2.58)$$

která zlepšuje přesnost v blízkosti hranice definičního oboru a v blízkosti rozhraní dvou látek, pokud je sumace brána pouze přes částice stejné látky.

Dalším přístupem je tzv. *kontinuitní metoda*, přímo vycházející z rovnice kontinuity (2.12). Existuje několik variant tohoto přístupu, z nichž nejpoužívanější vznikne aplikováním vzorce o derivaci součinu na pravou stranu rovnice (2.12), tj.

$$-\rho_i \frac{\partial \mathbf{v}_i^\alpha}{\partial \mathbf{x}_i^\alpha} = - \left(\frac{\partial \rho_i \mathbf{v}_i^\alpha}{\partial \mathbf{x}_i^\alpha} - \mathbf{v}_i^\alpha \cdot \frac{\partial \rho_i}{\partial \mathbf{x}_i^\alpha} \right),$$

a použitím částicové aproximace (2.56) na každou prostorovou derivaci, tj.

$$- \left\langle \frac{\partial \rho_i \mathbf{x}_i^\alpha}{\partial \mathbf{x}_i^\alpha} \right\rangle + \mathbf{v}_i^\alpha \left\langle \frac{\partial \rho_i}{\partial \mathbf{x}_i^\alpha} \right\rangle = - \sum_{j=1}^n \rho_j \mathbf{v}_j^\alpha \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i^\alpha} \frac{m_j}{\rho_j} + \mathbf{v}_i^\alpha \sum_{j=1}^n \rho_j \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i^\alpha} \frac{m_j}{\rho_j}. \quad (2.59)$$

Pravou stranu rovnice (2.59) můžeme upravit do tvaru

$$\sum_{j=1}^n (\mathbf{v}_i^\alpha - \mathbf{v}_j^\alpha) \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i^\alpha} m_j, \quad (2.60)$$

ze kterého již obdržíme výsledný vztah pro aproximaci časové změny hustoty

$$\frac{D\rho_i}{Dt} = \sum_{j=1}^n \mathbf{v}_{ij}^\alpha \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i^\alpha} m_j, \quad (2.61)$$

kde \mathbf{v}_{ij}^α je relativní rychlost daná vztahem

$$\mathbf{v}_{ij}^\alpha = \mathbf{v}_i^\alpha - \mathbf{v}_j^\alpha.$$

Rovnice (2.61) ukazuje, že časová změna hustoty částice je úzce spjata s relativními rychlostmi mezi touto částicí a částicemi v její lokální oblasti, přičemž gradient váhové funkce určuje příspěvek těchto relativních rychlostí. Výhodou tohoto přístupu je neexistence „edge“ efektu a také menší výpočetní náročnost. Nicméně hmotnost není zachována přesně.

Při simulování obecného proudění tekutin je pro aproximaci hustoty doporučována normalizovaná sumační metoda (2.58) a při simulacích jevů s velkou nespojitostí (exploze, vysokorychlostní srážky) je preferována kontinuální metoda (2.61).

Aproximace pohybových rovnic

Při odvozování částicové aproximace pohybových rovnic (2.13) se vychází z upravené rovnice (2.19) oddělující tlakovou a viskózní složku. Postup je obdobný jako u kontinuální metody a různé transformace mohou vést k různým aproximacím. Často používané jsou následující dvě varianty (G.R.Liu a M.B.Liu, 2003, [10])

$$\frac{D\mathbf{v}_i^\alpha}{Dt} = - \sum_{j=1}^n \frac{p_i + p_j}{\rho_i \rho_j} \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i^\alpha} m_j + \sum_{j=1}^n \frac{\mu_i \varepsilon_i^{\alpha\beta} + \mu_j \varepsilon_j^{\alpha\beta}}{\rho_i \rho_j} \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i^\beta}, \quad (2.62)$$

$$\frac{D\mathbf{v}_i^\alpha}{Dt} = - \sum_{j=1}^n \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} \right) \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i^\alpha} m_j + \sum_{j=1}^n \left(\frac{\mu_i \varepsilon_i^{\alpha\beta}}{\rho_i^2} + \frac{\mu_j \varepsilon_j^{\alpha\beta}}{\rho_j^2} \right) \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i^\beta}, \quad (2.63)$$

kde

$$\varepsilon_i^{\alpha\beta} = \sum_{j=1}^n \mathbf{v}_{ji}^\beta \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i^\alpha} \frac{m_j}{\rho_j} + \sum_{j=1}^n \mathbf{v}_{ji}^\alpha \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i^\beta} \frac{m_j}{\rho_j} - \left(\frac{2}{3} \sum_{j=1}^n \mathbf{v}_{ji}^\gamma \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i^\gamma} \frac{m_j}{\rho_j} \right) \delta^{\alpha\beta}. \quad (2.64)$$

Aproximaci $\varepsilon_j^{\alpha\beta}$ obdržíme obdobným způsobem.

Poznamenejme, že Navierovy-Stokesovy rovnice jsou parciální diferenciální rovnice druhého řádu (PDR2), obsahující druhé derivace rychlostí podle prostorových proměnných. Při diskretizaci si ovšem vystačíme pouze s aproximací první prostorové derivace, kterou nejdříve využijeme k určení $\varepsilon^{\alpha\beta}$ a poté k výpočtu $D\mathbf{v}^\alpha/Dt$.

Aproximace energie

Při uvádění částicové aproximace rovnice energie (2.14) budeme opět vycházet z upravené rovnice (2.20) oddělující tlakovou a viskózní složku. Nejrozšířenější jsou následující dvě varianty (G.R.Liu a M.B.Liu, 2003, [10])

$$\frac{De_i}{Dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \frac{p_i + p_j}{\rho_i \rho_j} \mathbf{v}_{ij}^\alpha \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i^\alpha} m_j + \frac{\mu_i}{2\rho_i} \varepsilon_i^{\alpha\beta} \varepsilon_i^{\alpha\beta}, \quad (2.65)$$

$$\frac{De_i}{Dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} \right) \mathbf{v}_{ij}^\alpha \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i^\alpha} m_j + \frac{\mu_i}{2\rho_i} \varepsilon_i^{\alpha\beta} \varepsilon_i^{\alpha\beta}. \quad (2.66)$$

Ukázali jsme si možné způsoby aproximace Navierových-Stokesových rovnic a poznamenejme, že v případě zanedbání viskózního členu v rovnicích (2.62), (2.63) a (2.65), (2.66), obdržíme Eulerovy rovnice.

2.2.5 Numerické aspekty

V této části si uvedeme často používané techniky sloužící především ke zvýšení stability a přesnosti řešení.

Proměnlivá vyhlazovací délka

Připomeňme, že vyhlazovací délka h určuje velikost lokální oblasti κh , a tím i počet částic použitých při aproximaci. Malá hodnota h zapříčiní nízkou přesnost. Naopak, pokud je hodnota h příliš velká, dochází k vyhlazování lokálních vlastností, což rovněž negativně ovlivňuje přesnost řešení a navíc se zvyšuje časová náročnost metody. Obvykle volíme h tak, aby lokální oblast obsahovala zhruba 5, 21, 57 částic pro dimenzi $N = 1, 2, 3$ v tomto pořadí. Existuje několik přístupů pro výpočet vyhlazovací délky tak, aby počet částic v lokální oblasti byl po celou dobu řešení zhruba konstantní. Poznamenejme, že $h = h(t)$.

První variantou je výpočet h podle vztahu

$$h = h_0 \left(\frac{\rho_0}{\rho} \right)^{\frac{1}{N}}, \quad (2.67)$$

kde $h_0 = h(0)$ a $\rho_0 = \rho(0)$.

Větší oblibu má vztah (Benz, 1989)

$$\frac{dh}{dt} = -\frac{1}{N} \frac{h}{\rho} \frac{d\rho}{dt}, \quad (2.68)$$

který může být aproximován pomocí částicové aproximace a vyhodnocován paralelně s ostatními diferenciálními rovnicemi.

Symetrizace vyhlazovacích délek

Symetrizace vyhlazovacích délek h má za úkol zajistit platnost 3. Newtonova zákonu. Tedy, pokud částice i působí na částici j silou \mathbf{F}_{ij} , pak částice j působí na částici i silou \mathbf{F}_{ji} tak, že $\mathbf{F}_{ji} = -\mathbf{F}_{ij}$ a $|\mathbf{F}_{ji}| = |\mathbf{F}_{ij}|$. Nejčastěji se používá následující symetrizace

$$h_{ij} = \frac{h_i + h_j}{2}, \quad (2.69)$$

kde h_i, h_j jsou vyhlazovací délky příslušné částicím i, j .

Tento přístup se využívá při vyhledávání sousedních částic (viz dále) a následně při vyčíslení váhové funkce W a její prostorové derivace tak, že použijeme h_{ij} místo h .

Poznamenejme, že vztah (2.69) odpovídá aritmetickému průměru jednotlivých vyhlazovacích délek. Dále lze použít geometrický průměr a maximální, nebo minimální hodnotu z jednotlivých vyhlazovacích délek.

Umělá viskozita

Při snaze simulovat rázové vlny je potřeba zabránit nefyzikálním oscilacím v numerickém řešení, tzv. *numerickým oscilacím*. Vliv těchto oscilací často znehodnotí celou simulaci. První z možností, jak tento problém řešit, je dostatečné zmenšení časového kroku, což podstatně zvýší časovou náročnost výpočtu. Dále se k odstranění numerických oscilací používá tzv. *umělá viskozita*, která má za úkol rozšířit rázovou vlnu a regulovat tímto numerickou nestabilitu způsobenou nespojitostí. Nejčastěji se používá Monaghanův typ umělé viskozity Π_{ij} , který mimo jiné brání i nefyzikálnímu průniku dvou přibližujících se částic (Monaghan, 1989). Máme

$$\Pi_{ij} = \begin{cases} \frac{(\beta_{\Pi}\theta_{ij} - \alpha_{\Pi}\bar{c}_{ij})\theta_{ij}}{\bar{\rho}_{ij}} & \text{pro } \mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{x}_{ij} < 0, \\ 0 & \text{pro } \mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{x}_{ij} \geq 0, \end{cases} \quad (2.70)$$

kde

$$\theta_{ij} = \frac{h_{ij}\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{x}_{ij}}{|\mathbf{x}_{ij}|^2 + \eta^2}, \quad \bar{c}_{ij} = \frac{1}{2}(c_i + c_j), \quad \bar{\rho}_{ij} = \frac{1}{2}(\rho_i + \rho_j),$$

přičemž $\mathbf{x}_{ij} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$, $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$. α_{Π} , β_{Π} jsou konstanty (obvykle $\alpha_{\Pi} = \beta_{\Pi} = 1$), $\eta = 0,1h_{ij}$ je faktor bránící singularitě v případě $|\mathbf{x}_{ij}|^2 \rightarrow 0$ a c je rychlost zvuku.

Umělá viskozita se obvykle přidává do tlakového členu Navierových-Stokesových

rovníc (2.66), (2.63) následovně

$$\frac{D\mathbf{v}_i^\alpha}{Dt} = - \sum_{j=1}^n \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} + \Pi_{ij} \right) \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i^\alpha} m_j + \sum_{j=1}^n \left(\frac{\mu_i \varepsilon_i^{\alpha\beta}}{\rho_i^2} + \frac{\mu_j \varepsilon_j^{\alpha\beta}}{\rho_j^2} \right) \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i^\beta}, \quad (2.71)$$

$$\frac{De_i}{Dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} + \Pi_{ij} \right) \mathbf{v}_{ij}^\alpha \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i^\alpha} m_j + \frac{\mu_i}{2\rho_i} \varepsilon_i^{\alpha\beta} \varepsilon_i^{\alpha\beta}. \quad (2.72)$$

Umělá stlačitelnost

Uvažujeme-li stlačitelnou tekutinu, pak se tlak vypočte ze *stavové rovnice* pro ideální plyn

$$p = (\lambda - 1)\rho e, \quad (2.73)$$

kde konstanta $\lambda = \frac{c_p}{c_v}$, přičemž c_p resp. c_v je *měrná tepelná kapacita* za konstantního tlaku resp. objemu. Pro vzduch klademe $\lambda = 1,4$.

U nestlačitelných tekutin ovšem nastává problém, jak určit tlakový člen z pohybových rovnic. Jednou z možností je předpoklad konstantní hustoty, což není příliš vhodné. Mnohem efektivnější postup je zavedení tzv. *umělé stlačitelnosti*, vycházející z předpokladu, že každá teoreticky nestlačitelná kapalina je prakticky „téměř“ stlačitelná. Při modelování nestlačitelného proudění se často používá následující vztah

$$p = c^2 \rho, \quad (2.74)$$

kde c je rychlost zvuku.

Speciálně u úloh s volnou hladinou je tlak vyjádřen ze stavové rovnice vody (Monaghan, 1994, [12])

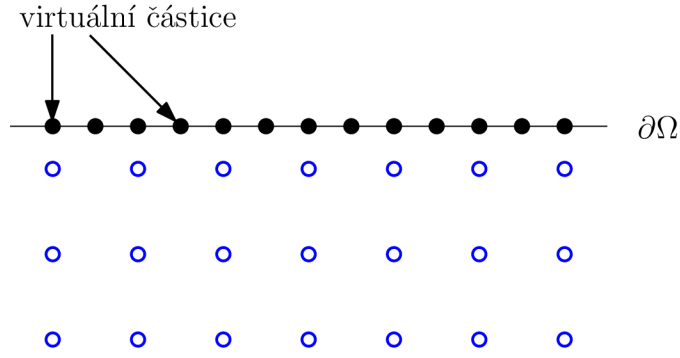
$$p = B \left(\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\lambda - 1 \right), \quad (2.75)$$

kde B je parametr (obvykle $B = p_0$), ρ_0 je referenční hustota a λ je konstanta (většinou $\lambda = 7$).

Okrajové podmínky

Okrajové podmínky jsou obecně v SPH metodě velký problém. Řešíme otázku, jak vhodně definovat okrajovou podmínku, aby částice „neunikly“ z definičního oboru úlohy. Dále se budeme zabývat konzistencí v blízkosti hranice.

Prvním přístupem je použití tzv. *virtuálních částic* (obr. 2.7).



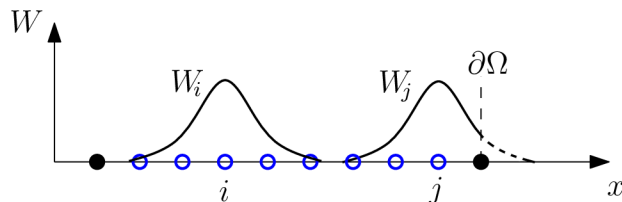
Obr. 2.7: Virtuální částice

Tyto částice jsou situovány na hranici definičního oboru a působí *odpudivou silou* \mathbf{F}^r (z angl. *repulsive force*) na částice v blízkosti hranice. Máme

$$\mathbf{F}_{ij}^r = \begin{cases} D \left[\left(\frac{r_0}{|\mathbf{x}_{ij}|} \right)^{p_1} - \left(\frac{r_0}{|\mathbf{x}_{ij}|} \right)^{p_2} \right] \frac{\mathbf{x}_{ij}}{|\mathbf{x}_{ij}|^2} & \text{pro } \left(\frac{r_0}{|\mathbf{x}_{ij}|} \right) \leq 1, \\ 0 & \text{pro } \left(\frac{r_0}{|\mathbf{x}_{ij}|} \right) > 1, \end{cases} \quad (2.76)$$

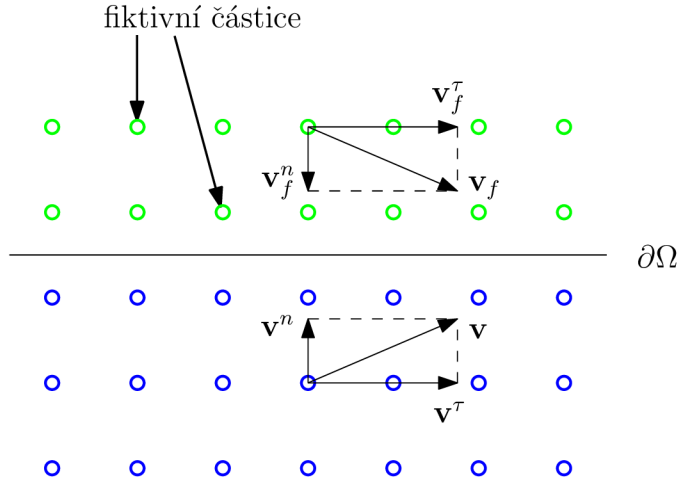
kde r_0 je vzdálenost určující oblast působnosti virtuálních částic. Tedy částice, které mají od virtuálních částic vzdálenost menší než r_0 , jsou odpuzovány. Pokud je hodnota r_0 příliš velká, částice jsou odpuzovány již v počátečním rozestavení a vzniklé vlny, postupující od hranice, mohou znehodnotit celou simulaci. Naopak pokud je hodnota r_0 příliš malá, může dojít k úniku částic z definičního oboru. D, p_1, p_2 jsou vhodně zvolené parametry, které výrazně ovlivňují působení hraničních částic na částice uvnitř definičního oboru.

Vidíme tedy, že použití virtuálních částic je jakousi alchymii v nastavování velkého množství parametrů, které podstatně ovlivňují řešení. Navíc tento přístup porušuje podmínku pro C^1 konzistenci aproximace v blízkosti hranice, což je způsobeno useknutím nosiče váhové funkce na hranici definičního oboru, která poté není sudou funkcí, viz obr. 2.8.



Obr. 2.8: Příklad 1D úlohy, částice j leží v blízkosti hranice

Mnohem lepší variantou je použití tzv. *fiktivních částic*, viz obr. 2.9, (v lit. *ghost particles*). Na rozdíl od virtuálních částic, tento přístup vytváří dynamickou



Obr. 2.9: Fiktivní částice

stěnu, která je konstruována v každém časovém kroku na základě polohy a vlastností „vnitřních“ částic v blízkosti hranice. Fiktivní částice se vytváří symetricky (vzhledem k hranici, neboli pevné stěně) k částicím v blízkosti hranice. Vlastnosti fiktivních částic závisí na požadovaných vlastnostech hranice, např. nekluzká/kluzká stěna (no-slip/free-slip condition) atd. Předpokládejme rychlost částice v blízkosti hranice $\mathbf{v} = (v^\tau \ v^n)^\top$, kde v^τ, v^n je tangenciální a normálová složka rychlosti částice vzhledem k pevné stěně. Pak v případě pevné kluzké stěny máme

$$v_f^\tau = v^\tau, \quad (2.77)$$

$$v_f^n = -v^n, \quad (2.78)$$

kde $\mathbf{v}_f = (v_f^\tau \ v_f^n)^\top$ je rychlost fiktivní částice příslušné k částici v blízkosti hranice, viz obr. 2.9.

Použití fiktivních částic zaručuje C^1 konzistenci aproximace z důvodu, že vnitřní částice v blízkosti hranice jsou podporovány i fiktivními částicemi v jejich lokální oblasti. Navíc tento přístup ve své formulaci neobsahuje žádné „podivné“ parametry.

Integrace v čase

Připomeňme, že diskretizací Navierových-Stokesových rovnic vznikne soustava obyčejných diferenciálních rovnic 1. řádu (SODR1). K řešení této SODR1 se používají především explicitní metody, např. Leap-Frog metoda (LF) a Rungeovy-Kuttovy metody (RK). LF je metoda 2. řádu a pravá strana se v každém časovém kroku vyhodnocuje pouze jednou, což je výhoda z hlediska časových nároků. Konstantní

nastavení časového kroku může v některých úlohách způsobovat nestabilitu a proto se také používá RK s adaptivním časovým krokem, který je volen tak, aby byla splněna CFL podmínka (Courant-Friedrichs-Levy condition).

Vyhledávání sousedních částic

Proces vyhledávání sousedních částic (zkr. NNPS, z angl. nearest neighboring particle searching), které patří do lokální oblasti uvažované částice, je obecně velice časově náročný. Musí se provádět v každém časovém kroku výpočtu z důvodu neexistence vazby mezi jednotlivými částicemi (uzlovými body).

Při samotném vyhledávání sousedních částic se využívá symetrizace vyhlazovacích délek h_{ij} . Řekneme, že částice j je sousední s částicí i právě tehdy, když

$$r_{ij} < \kappa h_{ij}, \quad (2.79)$$

kde $r_{ij} = |\mathbf{x}_{ij}| = |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|$ je vzdálenost částic, tj. částice navzájem leží ve svých „průměrných“ lokálních oblastech.

Prvním přístupem je *all-pair metoda*. Jedná se o implementačně nejjednodušší metodu, která ke každé částici i definičního oboru vypočte všechny vzdálenosti r_{ij} pro $j = 1, \dots, \bar{n}$, kde \bar{n} je celkový počet částic definičního oboru. Sousední částice určíme dle vztahu (2.79). Složitost tohoto algoritmu je $O(\bar{n}^2)$ a proto je použitelný pouze pro úlohy s malým počtem částic.

Další možností je *linked-list metoda*. Hlavní myšlenka tohoto přístupu je následující. Rozdělíme definiční obor na čtvercové (2D) resp. krychlové (3D) podoblasti vytvářející pravidelnou mřížku. Délka strany podoblasti je volena jako velikost lokální oblasti (průměrná). Výsledné vyhledávání sousedních částic částice i se provádí pouze v podoblasti, kde daná částice leží a v podoblastech, které s touto podoblastí sousedí. Tedy vyhledávání je prováděno pouze přes 3, 9, 27 podoblastí pro $N = 1, 2, 3$ v tomto pořadí, kde N je dimenze prostoru. Složitost tohoto algoritmu je řádu $O(\bar{n})$ a je efektivní pro úlohy s konstantní vyhlazovací délkou.

Pro problémy s proměnlivou vyhlazovací délkou se používá *tree metoda*. Základem tohoto přístupu je vytvoření stromové struktury nad definičním oborem úlohy, který rozdělíme na kvadranty a pokud některý z nich obsahuje více než jednu částici, opět jej rozdělíme na kvadranty. Celý postup opakujeme a ukončíme jej v případě, kdy listy stromu obsahují maximálně jednu částici. Samotné vyhledávání sousedních částic částice i spočívá v prohledávání jednotlivých větví stromu, které mají neprázdný průnik s čtvercem (2D) resp. krychlí (3D) se středem v poloze částice i a

stranou délky $2\kappa h = 2d$, kde d je velikost lokální oblasti částice i . Složitost této metody je řádu $O(\bar{n} \log \bar{n})$. Ukázalo se, že tree metoda je velice efektivní v úlohách s velkým počtem částic a proměnlivou vyhlazovací délkou.

2.3 RKPM

Reproducing kernel particle metoda patří do kategorie lokálních integrálních metod a je modifikací SPH metody zavedené v části 2.2. Tato metoda zavádí do SPH formulace korekční funkci zajišťující C^1 konzistenci aproximace, zejména vylepšuje přesnost SPH metody v blízkosti hranice. Lokální integrální reprezentace funkce $u(\mathbf{x})$ má tvar

$$\langle u(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} u(\boldsymbol{\xi}) C(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, h) d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.80)$$

kde $C(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$ je *korekční funkce*. V případě $N = 1$ má korekční funkce následující tvar

$$C(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = c_1(\mathbf{x}) + c_2(\mathbf{x})(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{x}), \quad (2.81)$$

kde $c_1(\mathbf{x}), c_2(\mathbf{x})$ jsou koeficienty, které byly zkonstruovány tak, aby byla zaručena C^1 konzistence. Lze odvodit (W. K. Liu, 1995, [11]), že

$$c_1(\mathbf{x}) = \frac{m_2(\mathbf{x})}{m_0(\mathbf{x})m_2(\mathbf{x}) - m_1^2(\mathbf{x})}, \quad (2.82)$$

$$c_2(\mathbf{x}) = \frac{m_1(\mathbf{x})}{m_0(\mathbf{x})m_2(\mathbf{x}) - m_1^2(\mathbf{x})}, \quad (2.83)$$

kde m_0, m_1, m_2 jsou momenty váhové funkce W , přičemž k -tý moment váhové funkce W je definován předpisem

$$m_k(\mathbf{x}) = \int \boldsymbol{\xi}^k W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}. \quad (2.84)$$

Po diskretizaci lokální integrální reprezentace (2.80) obdržíme částicovou aproximaci funkce $u(\mathbf{x})$ ve tvaru

$$\langle u(\mathbf{x}) \rangle = \sum_{j=1}^n u(\boldsymbol{\xi}_j) C(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_j) W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}_j, h) \frac{m_j}{\rho_j}. \quad (2.85)$$

Poznamenejme, že aproximace (2.85) odpovídá aproximaci (1.1) zavedené pro obecnou MFree metodu, kde funkce $\phi_j(\mathbf{x})$ má tvar

$$\phi_j(\mathbf{x}) = C(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_j) W(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}_j, h) \frac{m_j}{\rho_j}. \quad (2.86)$$

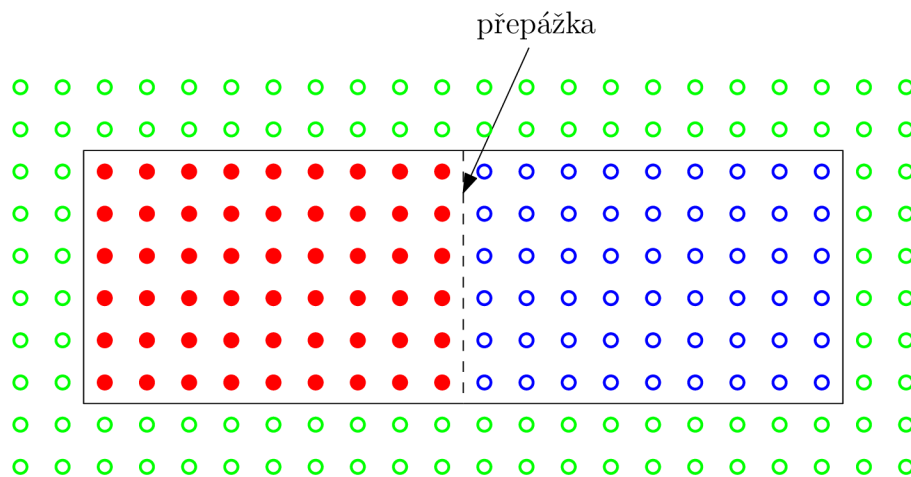
3 SHOCK TUBE 2D ÚLOHA

V této části si ukážeme výsledky tzv. *shock tube* úlohy ve 2D obdržené pomocí programu založeném na metodě SPH zavedené v sekci 2.2. Jedná se o srovnávací numerickou úlohu, tzv. benchmark, který slouží k ukázce schopnosti numerické metody vypořádat se s nespojitostí. Navíc známe přesné řešení této úlohy v 1D a tudíž jej využijeme při porovnání s obdrženými výsledky 2D úlohy.

Program sloužící k výpočetní části byl napsán v programovacím jazyku *Fortran* (Intel(R) Visual Fortran Compiler Professional 11.1.067) ve vývojovém prostředí MS Visual Studio 2008 pro .NET Framework verze 3.5. Jako podklad byl využit SPH zdrojový kód z knihy [10]. Post-processing, tj. vykreslování grafů jednotlivých proměnných, byl realizován pomocí software *matlab* verze 7.11.0 (R2010b).

3.1 Popis úlohy

Shock tube 2D úlohou rozumíme zkoumání jevu, který nastane v nádobě po odstranění tzv. „pomyslné“ přepážky oddělující dvě různé (hustota, tlak a energie) tekutiny, viz obr. 3.1 Na počátku je tekutina v obou částech nádoby v rovnovážném



Obr. 3.1: shock tube 2D úloha

stavu s konstantní hustotou, tlakem a energií. Po odstranění přepážky budeme sledovat šíření *rázové vlny* (shock wave), *vlny zředění* (rarefaction wave) a *kontaktní nespojitosti* (contact discontinuity).

3.2 Zadání úlohy

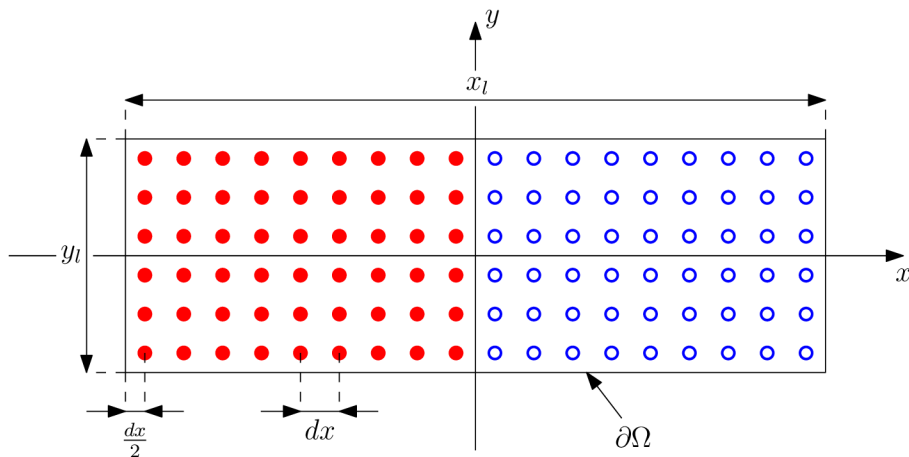
Počáteční podmínky byly převzaty z (L. Hernquist, 1989, [5]) pro 1D úlohu, tj.

$$\begin{aligned} \rho_L &= 1, & p_L &= 1, & v_L &= 0, & \text{pro } x < 0; \\ \rho_R &= 0.25, & p_R &= 0.1795, & v_R &= 0, & \text{pro } x \geq 0. \end{aligned}$$

Předpokládáme, že obě tekutiny splňují vlastnosti *ideálního plynu*, tzn. počáteční hodnotu vnitřní energie e vypočteme ze stavové rovnice (2.18) pro $\gamma = 1,4$. Máme tedy

$$\begin{aligned} e_L &= 2.5, \\ e_R &= 1.795. \end{aligned}$$

V simulaci bylo použito 3200 částic, konkrétně 320 v ose x a 10 v ose y . Rozměry definičního oboru (nádoby) jsou $x_l = 0,8$ a $y_l = 0,025$. Rozestupy mezi jednotlivými částicemi jsou konstantní, tj. $dx = dy = 2,5 \cdot 10^{-3}$. Střed nádoby je umístěn v počátku soustavy souřadnic, tj. $x = 0$, $y = 0$. Rozmístění částic je patrné z obr. 3.2, který je vzhledem k velkému počtu částic pouze ilustrativní (zde 18 v ose x a 6 v ose y).



Obr. 3.2: Počáteční rozmístění částic

Okrajová podmínka je nastavena jakožto pevná kluzká stěna, tj. $v_n = 0$. Koncový čas simulace byl nastaven na hodnotu $t = 0,2$ s.

Vzhledem k předpokladu, že tekutiny jsou ideální plyny, vystačíme při řešení úlohy s Eulerovými rovnicemi, tj. rovnicemi (2.12), (2.19) a (2.20) bez viskózní složky.

3.3 Nastavení parametrů

Shock tube úloha je obecně velmi rychlý děj, tudíž lze usuzovat na velkou citlivost vzhledem k volbě parametrů, což se prokázalo i testováním. K dosažení „správného“ nastavení těchto parametrů, které zajistí dostatečné přiblížení k přesnému řešení, je obvykle zapotřebí mnoho úsilí.

Nyní si uvedeme volbu parametrů pro shock tube 2D úlohu, kterou se podařilo získat na základě mnoha testů.

Váhová funkce: Vlastnosti a příklady těchto funkcí jsme si zavedli v části 2.2.2. Pro shock tube úlohu byla zvolena exponenciální váhová funkce (2.43). I přes velkou nevýhodu ve formě globální nespojitosti (nenulovost na hranici lokálních oblastí) splňuje exponenciální funkce podmínku hladkosti všech řádů uvnitř lokální oblasti (spojitost všech derivací), která je pro tento typ úlohy prioritní. Připomeňme, že hladší váhová funkce zajišťuje větší stabilitu řešení. Při testování dalších váhových funkcí, tj. kubický splajn (2.40) a kvintický splajn (2.42), docházelo ke značným oscilacím v řešení.

Změna vyhlazovací délky: Testovali jsme obě varianty pro změnu vyhlazovací délky zavedené v sekci 2.2.5. První varianta daná vztahem (2.67) byla pro účely testování tohoto parametru doprogramována do SPH kódu. K simulaci jsme nicméně vybrali druhou variantu danou vztahem (2.68), protože na základě testování byla prokázána větší přesnost. Možnost ponechat vyhlazovací délku beze změny jsme zamítli. Důvodem je značná změna hustoty během simulace.

Vyhledávání sousedních částic: Z důvodů popsaných v části 2.2.5, tj. velké množství částic a proměnlivá vyhlazovací délka, byla k vyhledávání sousedních částic použita tree metoda.

Výpočet hustoty: Vzhledem k vlastnostem jednotlivých přístupů popsaných v sekci 2.2.4 byla k výpočtu hustoty zvolena kontinuální metoda (2.61). Při použití sumační metody docházelo k nežádoucímu vyhlazování nespojitostí („edge“ efekt), což jsme očekávali vzhledem k principu této metody.

Umělá viskozita: K odstranění oscilací, které vznikaly v místech nespojitosti, byla použita umělá viskozita zavedená v části 2.2.5.

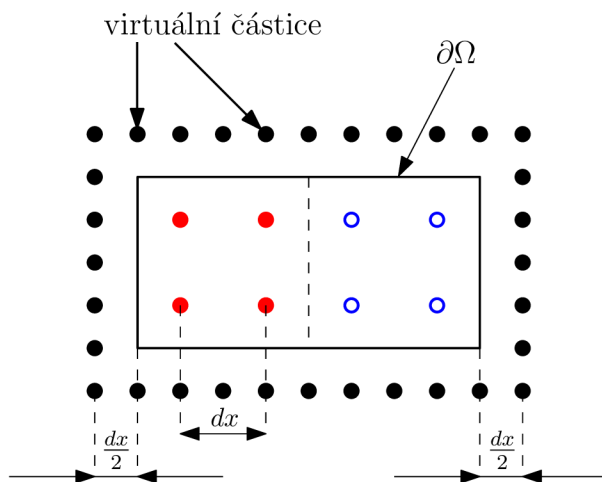
Časový krok: Z charakteru úlohy je patrné, že se jedná o velice rychlý děj a tudíž je k zajištění stability nutný dostatečně malý časový krok. Po testech byl časový krok

nastaven na hodnotu $dt = 0,0005$ a k dosažení koncového času simulace $t = 0,2$ bylo tedy zapotřebí 400 kroků.

Okrajové podmínky: V sekci 2.2.5 jsme si ukázali, že SPH metoda ve spojení s virtuálními částicemi nespĺňuje podmínku C^1 konzistence v blízkosti hranice definičního oboru, což je způsobeno useknutím nosiče příslušných váhových funkcí, které poté nejsou sudými funkcemi, viz obr. 2.8. Tento problém odstraňuje právě použití fiktivních částic, které se nacházejí za hranicí definičního oboru a tím zaručují C^1 konzistenci i v blízkosti hranice.

Nyní si zde uvedeme implementační obtíže a způsob jejich řešení při použití těchto okrajových podmínek.

- Virtuální částice: Zde jsme řešili problém, jak nastavit odpudivou sílu dostatečně velkou, aby částice „neunikly“ z definičního oboru a dostatečně malou, aby působení virtuálních částic neznehodnotilo řešení. Jedná se tedy o jakýsi kompromis, který se pro klasické rozestavení těchto částic (na hranici definičního oboru) nepodařilo nalézt. Tento problém se podařilo vyřešit tak, že obdélník tvořený virtuálními částicemi se na každé straně zvětšil o $dx/2$ dle obr. 3.3. Tento přístup nám umožnil nastavit odpudivou sílu \mathbf{F}_{ij}^r , která



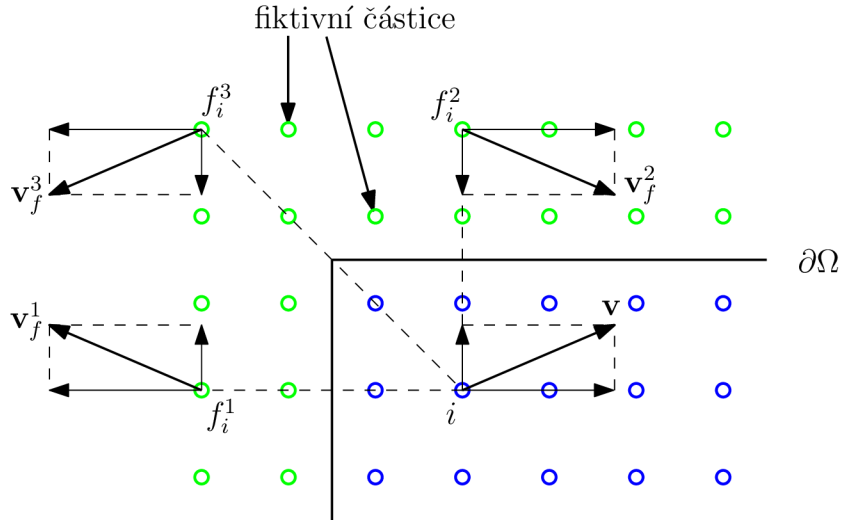
Obr. 3.3: Nová pozice virtuálních částic

brání částicím v úniku z definičního oboru a zároveň je dostatečně malá. Parametry odpudivé síly dané vztahem (2.76) byly nastaveny na hodnoty $r_0 = 2.5 \cdot 10^{-3}$, $D = 10^{-3}$, $p_1 = 9.5$ a $p_2 = 4$.

Zvolili jsme tento přístup, protože zachovává počet částic i jejich rozestupy. Nicméně dojde ke zvětšení definičního oboru o dx v každém souřadnicovém směru. Při striktním požadavku na zachování definičního oboru by bylo nutné

změnit rozestavení částic (počet, rozestupy).

- **Fiktivní částice:** U tohoto přístupu jsme řešili problém, jak nastavit vlastnosti a pozice fiktivních částic, které se vytváří k částicím umístěným v „rozech“ definičního oboru. S využitím [2] se podařilo vyřešit pozice fiktivních částic. Tedy k částici i v „rohu“ definičního oboru se vytvoří vždy tři fiktivní částice f_i^1 , f_i^2 a f_i^3 s rychlostmi v_f^1 , v_f^2 a v_f^3 dle obr. 3.4. Dále jsme řešili problém, jak



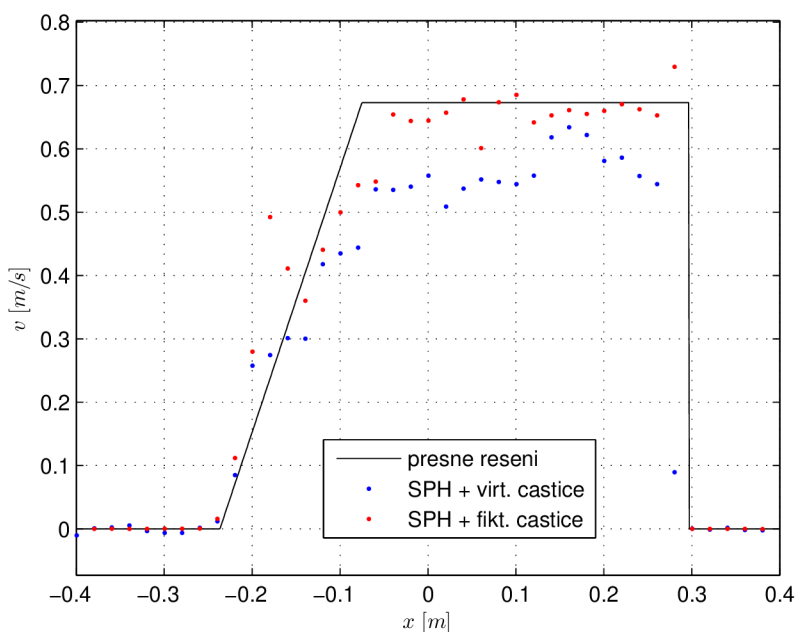
Obr. 3.4: Pozice a rychlosti fiktivních částic příslušných k částici i

vhodně nastavit hmotnost těchto fiktivních částic. Nejlepší varianta byla zvolit hmotnosti stejné, tj. $m_f^1 = m_f^2 = m_f^3 = m$, což odpovídá i textu [1].

3.4 Vyhodnocení simulace

Simulaci jsme provedli pro oba typy okrajových podmínek, tj. nejdříve jen pro virtuální částice a poté jen pro fiktivní částice, které byly implementovány do SPH kódu v rámci této diplomové práce. Obrázky 3.5, 3.6, 3.7 a 3.8 znázorňují v horizontálním řezu ($y = 0$) průběh rychlosti, hustoty, tlaku a vnitřní energie obou simulací. Plná čára udává přesné řešení příslušných Eulerových rovnic pro 1D úlohu.

Je vidět, že řešení získané za pomoci fiktivních částic vystihuje tvar přesného řešení lépe než řešení, které využívá virtuální částice. Demonstrujeme tím vliv C^1 konzistence SPH aproximace v blízkosti hranice definičního oboru. Připomeňme, že použití fiktivních částic zaručuje C^1 konzistenci, přičemž použití virtuálních částic nikoliv.



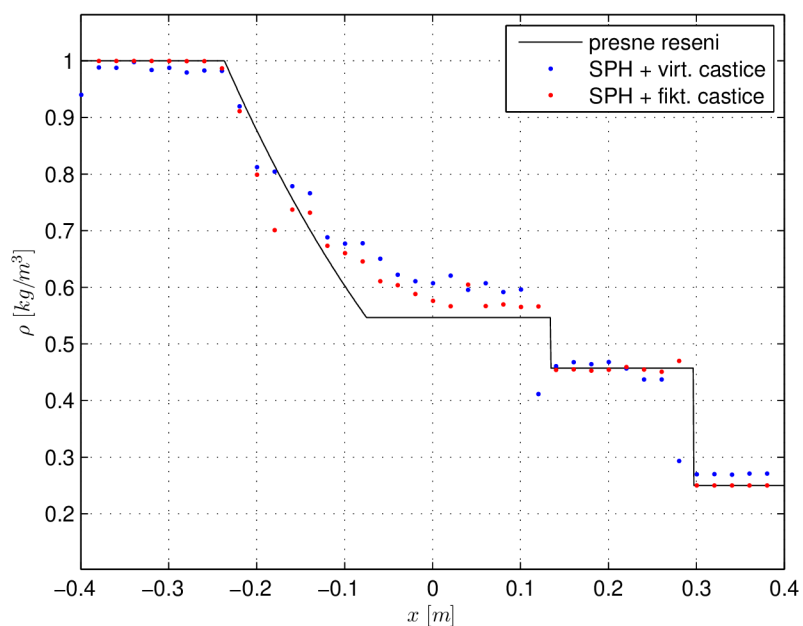
Obr. 3.5: rychlost, horizontální řez, $t = 0.2$ s

Z obrázků rovněž určíme pozici čela rázové vlny, která je pozorována okolo $x = 0,3$; vlna zředění je situována mezi $x = -0,3$ a $x = 0$ a kontaktní nespojitost se nachází mezi $x = 0,1$ a $x = 0,2$. Nepatrné odchylky obou simulací od přesného řešení zejména v oblasti vlny zředění jsou pravděpodobně způsobeny použitím kontinuitní metody (2.61) při výpočtu hustoty, která nezachovává hmotnost přesně.

Obrázek 3.5 znázorňuje konkrétní polohu částic na konci simulace v případě použití fiktivních částic. Můžeme si rovněž povšimnout souvislosti mezi změnou vyhlazovací délky a počtem fiktivních částic. Počet fiktivních částic se zvyšuje v místech, kde se vnitřní částice oddalují. Tento fakt je způsoben snižující se hustotou, což má za následek zvětšení vyhlazovací délky, a tedy zvětšení počtu částic, jejichž lokální oblast „dosáhne“ za hranici definičního oboru úlohy. Obdobně dostaneme, že počet fiktivních částic se snižuje v místech, kde se vnitřní částice přibližují. Na obrázku 3.10 je přiblížena detailně oblast kontaktní nespojitosti kolem $x = 0,13$.

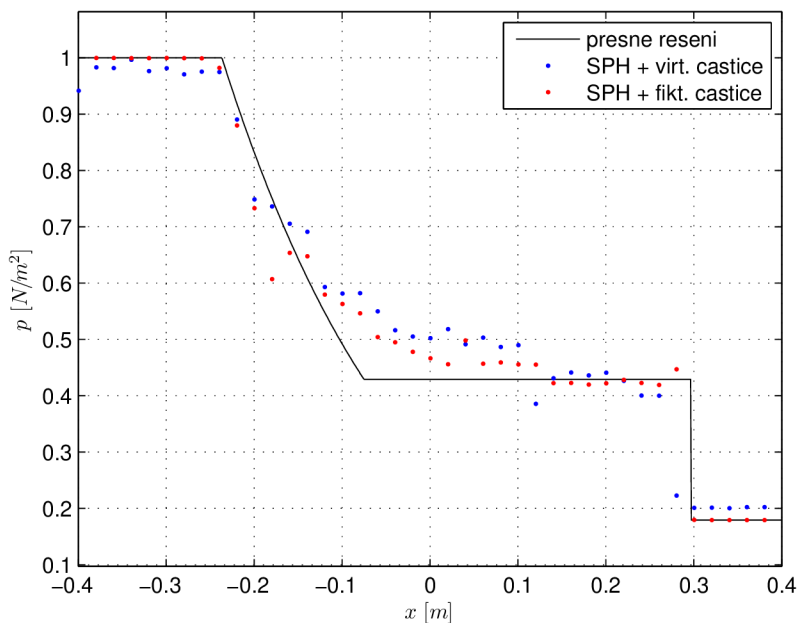
3.5 Softwarové úpravy

K dosažení uvedených výsledků bylo nutné SPH zdrojový kód z knihy [10] značně modifikovat. V této části si tedy uvedeme výčet změn, které byly provedeny v rámci této práce. Poznamenejme, že uvedené změny byly prováděny nejen za účelem řešení shock tube úlohy, ale i zrychlení celého výpočtu.



Obr. 3.6: hustota, horizontální řez, $t = 0.2$ s

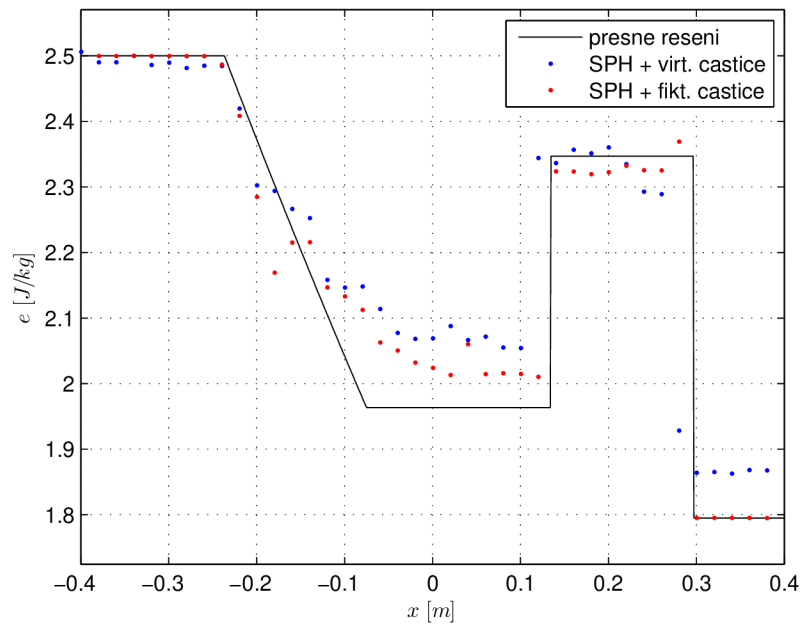
- Bylo provedeno kompletní zavedení okrajové podmínky v podobě fiktivních částic popsaných v části 2.2.5 a následně byly vyřešeny implementační obtíže spojené s tvarem definičního oboru, tj. jakým způsobem definovat tuto okrajovou podmínku v „rozích“ definičního oboru.
- Dále jsme zavedli modifikaci okrajové podmínky v podobě virtuálních částic popsané v části 3.3. Konkrétně byla provedena změna pozice těchto částic a vyladění parametrů odpuzivé síly tak, aby částice neunikly z definičního oboru a nedošlo k přílišnému znehodnocení výsledků.
- Pro účely testování parametru změny vyhlazovací délky byla do SPH kódu doprogramována varianta daná vztahem (2.67). Poznamenejme, že nebylo ihned zřejmé, že tento přístup v kódu není implementován. Popis kódu dokonce přiděloval hodnotu parametru pro tuto variantu. Po prověření výsledků simulace bylo zjištěno, že vyhlazovací délka zůstala beze změny, a tudíž byl tento nedostatek odhalen a opraven.
- Za účelem zrychlení simulace byla do kódu přidána *if* podmínka tak, aby se neprováděly „zbytečné“ výpočty. V podprogramu pro určení změny celkové vnitřní energie byl výpočet prováděn i pro virtuální či fiktivní částice, který



Obr. 3.7: tlak, horizontální řez, $t = 0.2$ s

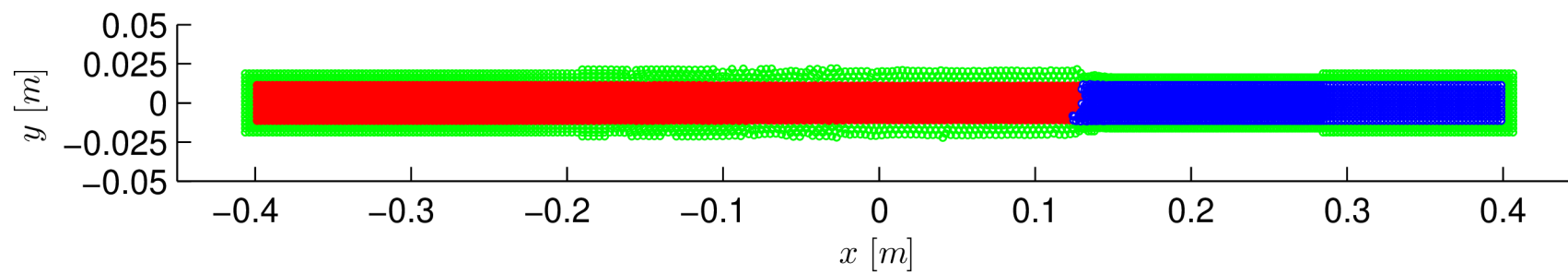
se následně z principu obou přístupů neuplatnil, tj. virtuální částice mají po celou dobu simulace konstantní energii a fiktivní částice „přebírají“ vlastnosti, tedy i energii, od vnitřních částic, ke kterým byly vytvořeny. Zavedením této podmínky jsme snížili celkový čas simulace přibližně o 6% v případě použití fiktivních částic.

- Podprogram pro definování počátečních vlastností částic byl obohacen o možnost pracovat se dvěma tekutinami během jedné simulace. Tato úprava je nezbytná pro shock tube úlohu.
- Mnoho úsilí bylo vynaloženo při testování vhodných parametrů pro shock tube 2D úlohu, což je popsáno v části 3.3.
- V původním konceptu tohoto kódu byl čas jedné simulace měřen od spuštění programu až do spuštění další simulace, nebo ukončení programu. Tento přístup může uživatele zmást, protože k očekávanému výslednému času simulace je připočten i čas, který uplyne mezi spuštěním programu a spuštěním simulace. Čas simulace je tedy nyní měřen od spuštění simulace do ukončení simulace.

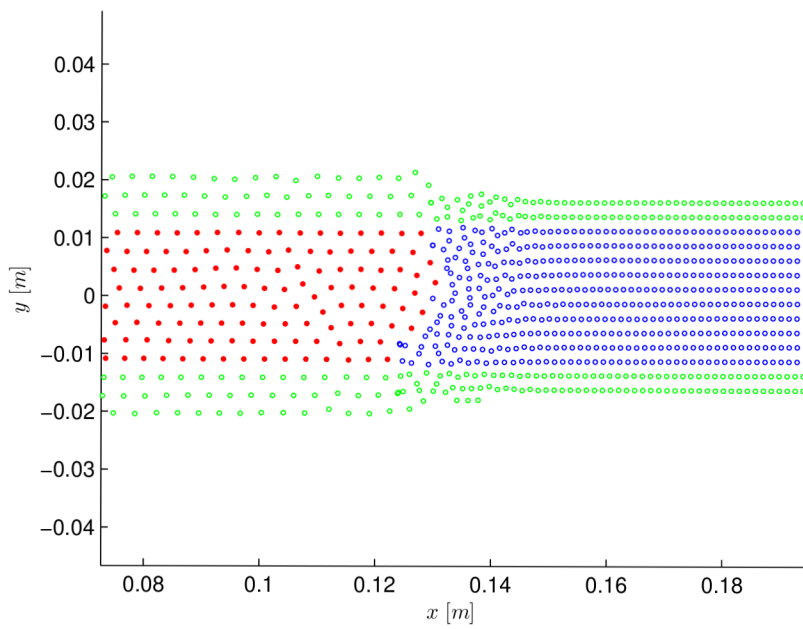


Obr. 3.8: vnitřní energie, horizontální řez, $t = 0.2$ s

Poznamenejme, že SPH zdrojový kód ze kterého jsme v této práci vycházeli, má pouze výukový charakter. Slouží tedy především k porozumění celého principu SPH metody.



Obr. 3.9: poloha častic, $t = 0.2$ s



Obr. 3.10: poloha částic - kontaktní nespojitost, $t = 0.2$ s

ZÁVĚR

V práci jsme se zabývali problémem konvergence SPH metody v blízkosti hranice definičního oboru, který se podařilo vyřešit implementací fiktivních částic jakožto okrajové podmínky. Použití fiktivních částic, na rozdíl od virtuálních částic, zaručuje C^1 konzistenci SPH aproximace, a tím zvyšuje přesnost celé metody.

Popsaná teorie byla demonstrována na shock tube 2D úloze, jejíž řešení vyžadovalo značné softwarové úpravy a testování nastavení různých parametrů. Ukázalo se tedy, že SPH metoda s použitím fiktivních částic vystihuje tvar přesného řešení lépe, než SPH metoda s použitím virtuálních částic.

LITERATURA

- [1] Børve S., *Generalized Ghost Particle method for handling reflecting boundaries*, Proc. 6th SPHERIC Workshop, Hamburg, 2011.
- [2] Colagrossi A., Colicchio G., Le Touzé D., *Enforcing boundary conditions in SPH applications involving bodies with right angles*, Proc. 2nd SPHERIC Workshop, Madrid, p. 59, 2007.
- [3] Feistauer M., *Mathematical Methods in Fluid Dynamics*, Longman Scientific & Technical, Harlow, 1993.
- [4] Fries T.P., Matthies H.G., *Classification and Overview of Meshfree Methods*, Institute of Scientific Computing, Technical University Braunschweig, Brunswick, 2004.
- [5] Hernquist L., Katz N., *A unification of SPH with the hierarchical tree method*, The Astrophysical Journal Supplement Series, vol. 70, 419-446, 1989.
- [6] Lancaster P., Sakauskas K., *Surfaces Generated by Moving Least Squares Methods*, Mathematics of Computation, vol. 37, 141-158, 1981.
- [7] Libersky L.D., Petscheck A.G., Carney T.C., Hipp J.R., Allahdadi F.A., *High strain Lagrangian hydrodynamics-a three-dimensional SPH code for dynamic material response*, Journal of Computational Physics, vol. 109, 67-75, 1993.
- [8] Liu G.R., *Mesh Free Methods: Moving beyond the Finite Element Method*, CRC Press, Boca Raton, 2002.
- [9] Liu G.R., Gu Y.T., *An Introduction to Meshfree Methods and Their Programming*, Springer Dodrecht, Berlin, 2005.
- [10] Liu G.R., Liu M.B., *Smoothed Particle Hydrodynamics - a meshfree particle method*, World Scientific Publishing, New Jersey, 2003.
- [11] Liu W.K., Jun S., Zhang Y.F., *Reproducing Kernel Particle Methods*, International Journal for Numerical Methods in Fluids, vol. 20, 1081-1106, 1995.
- [12] Monaghan J.J., *Simulating free surface flow with SPH*, Journal of Computational Physics, vol. 110, 399-406, 1994.
- [13] Oñate E., Idelsohn S., Zienkiewicz O.C., Taylor R.L., *A Finite Point Method in Computational Mechanics. Applications to Convective Transport and Fluid Flow*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, vol. 39, 3839-3866, 1996.

- [14] Perrone N., Kao R., *A general finite difference method for arbitrary meshes* Computers & Structures, vol. 5, 45-57, 1975.
- [15] Wang J.G., Liu G.R., *A point interpolation meshless method based on radial basis functions*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, vol. 54, 1623-1648, 2002.

SEZNAM PŘÍLOH

1. CD

- text diplomové práce ve formátu pdf
- program meshfree.exe
- projekt meshfree (zdrojové kódy programu)
- skript plt2.m (vykreslování výsledků)

