

Uniwersytet Wrocławski Instytut Fizyki Teoretycznej



Praca magisterska

Badanie zjawisk zachodzących w cieczach nieściśliwych metodą cząstek znaczonych



Maciej Matyka

Opiekun pracy: dr Janusz Szwabiński

Woda bywa czasem gwałtowna, a czasem silna, czasem kwaśna, a czasem gorzka, czasem słodka, a czasem rzadka lub gęsta, czasem przynosi cierpienie lub zarazę, czasem daje zdrowie, czasem jest trująca. Przechodzi tak liczne i różne zmiany, jak różne są miejsca, przez które przepływa. Tak jak lustro zmienia kolor wraz z tym, co się w nim odbija, tak woda zmienia się wraz z charakterem otoczenia, staje się głośna, niszcząca, spokojna, siarczana, słona, wcielona, smutna, wściekła, zła, czerwona, żółta, zielona, czarna, niebieska, tłusta, gęsta lub rzadka. Czasami powoduje pożar, czasami go gasi, bywa gorąca lub zimna, zabiera lub przynosi, niszczy lub buduje, przyspiesza lub jest stała; wyznacza czas życia i śmierci, wzrostu lub zaniku, czasami żywi, a kiedy indziej wręcz przeciwnie; czasem ma posmak, a czasem jest bez smaku, czasami zatapia wioski wielką powodzią. Wraz z upływem czasu i wody wszystko się zmienia.

Leonardo da Vinci

1	Wstęp									
2	Róv 2.1	Równania Naviera–Stokesa 2.1 Równanie ciągłości								
	2.2		9							
	2.3	Bezwymiarowa postać równań	10							
		2.3.1 Liczba Reynoldsa	11							
		2.3.2 Liczba Froude'a	11							
		2.3.3 Inne liczby kryterialne	11							
	2.4	Równania w kartezjańskim układzie odniesienia	12							
3	Alg	orytmy numeryczne	13							
	3.1	Dyskretyzacja przestrzeni	13							
		3.1.1 Rozbieżna siatka obliczeniowa typu Eulera	13							
	3.2	Analogi różnicowe pochodnych	15							
	3.3	Postać dvskretna równań przepływu	16							
	3.4	Dyskretyzacja członu konwekcyjnego	17							
		3 4 1 Schemat centralny (CD)	17							
		3.4.2 Schemat pod prad" pierwszego rzedu (FOU)	18							
		343 Bównanie adwekcii	18							
	3.5	Bównanie Poissona	20							
	0.0	3.5.1 Metoda Jacobiego	$\frac{20}{23}$							
		3.5.2 Metoda Gaussa-Seidla	20							
		3.5.2 Metoda sukcesuwnei nadrelaksacii (SOB)	$\frac{20}{24}$							
		3.5.4 Porównanie zbieżności metod iteracyjnych	$\frac{24}{24}$							
4	Dor	wiezenie itereavine	20							
4	1 1	Metada korakcij ajźnienia	29 20							
	4.1		29							
	4.2		ა0 იი							
		4.2.1 Algorytin obliczeniowy	32							
		4.2.2 Kryteria stabilnosci	32							
	4.0	4.2.3 Zmienny krok czasowy	33							
	4.3	Walidacja kodu SIMPLE	34							
		4.3.1 Driven-Lid Cavity flow	34							
		4.3.2 Couette Flow	36							
5	Pow	vierzchnia Swobodna Cieczy	39							
	5.1	Cząstki znaczone	40							
	5.2	Warunki brzegowe na powierzchni cieczy	40							
		5.2.1 Konfiguracje komórek powierzchniowych	42							
	5.3	Ruch cząstek znaczonych	45							
	5.4	Algorytm SIMPLE-MAC	47							
	5.5	Walidacja kodu SIMPLE-MAC	48							
		•								

6	Wyniki						
	6.1 Przepływ przez zakrzywiony kanał	53					
	6.2 Przepływ przez pęk rur	54					
	6.3 Ścieżka wirowa von Karmana	56					
	6.4 Kropla cieczy	58					
	6.5 Kropla spadająca na płaską powierzchnię	58					
	6.6 Kropla wpadająca do głębokiego zbiornika	59					
7	Wnioski	65					
\mathbf{A}	Dodatek: Wizualizacje zjawisk przepływu	67					

$\varrho(\mathbf{r},t)$	-	gęstość cieczy
$\mathbf{u}^*(\mathbf{r},t)$	-	wektor prędkości elementu cieczy
u^*	-	prędkość elementu cieczy w kierunku osi x
v^*	-	prędkość elementu cieczy w kierunku osi y
w^*	-	prędkość elementu cieczy w kierunku osi z
$\mathbf{u}(\mathbf{r},t)$	-	wektor bezwymiarowej prędkości elementu cieczy
u	-	bezwymiarowa prędkość elementu cieczy w kierunku osi x
v	-	bezwymiarowa prędkość elementu cieczy w kierunku osi y
w	-	bezwymiarowa prędkość elementu cieczy w kierunku osi z
g	-	wektor grawitacji
$\hat{g} = (\hat{g}_x, \hat{g}_y, \hat{g}_z)$	-	wektor jednostkowy w kierunku wektora ${f g}$
u_{∞}	-	prędkość charakterystyczna
ϱ_{∞}	-	gęstość charakterystyczna (stała)
p*	-	ciśnienie
p	-	bezwymiarowe ciśnienie
$\varphi = \frac{p}{\rho_{\infty}}$	-	stosunek ciśnienia do gęstości (stałej) płynu
L	-	długość charakterystyczna
μ	-	lepkość dynamiczna
$\nu = \frac{\mu}{\rho_{\infty}}$	-	lepkość kinematyczna
λ_{μ}	-	lepkość objętościowa
$\dot{R}e$	-	liczba Reynoldsa
Fr	-	liczba Froude'a
i, j	-	indeksy komórek siatki różnicowej
Δx	-	poziomy rozmiar komórki
Δy	-	pionowy rozmiar komórki
Δt	-	rozmiar kroku czasowego
t_0	-	chwila początkowa
\mathbf{A}	-	macierz współczynników równania Poissona w postaci różnicowej
ε	-	dokładność rozwiązania iteracyjnego
ω	-	parametr wagowy metody sukcesywnej nadrelaksacji
ω_{opt}	-	optymalna wartość parametru nadrelaksacji
Ψ	-	wirowość
ξ	-	funkcja prądu
λ_{CFL}	-	parametr wzmacniający kryterium stabilności CFL
λ	-	parametr wzmacniający ogólne kryterium stabilności
T	-	tensor naprężeń wewnętrznych
E	-	tensor prędkości odkształceń
$\sigma_{\tilde{a}}$	-	napięcie powierzchniowe warstwy oddzielających dwie różne ciecze
R	-	promień krzywizny powierzchni swobodnej

1 Wstęp

Gwałtowny rozwój komputeryzacji we wczesnych latach 50' i pojawienie się szybkich superkomputerów w dużych ośrodkach naukowych na świecie, umożliwiło rozpoczęcie prac nad metodami symulacji skomplikowanych zjawisk fizycznych [17]. Jedna z rozwijajacych się do dziś dziedzin symulacji są komputerowe badania nad dynamiką cieczy, ang. Computational Fluid Dynamics (CFD), które mają ogromne znaczenie praktyczne w przemyśle oraz innych dziedzinach nauki. Z najciekawszych zastosowań CFD wymienić można m.in. komputerowe tunele aerodynamiczne i badania oporów powstających przy opływie ciał o różnych kształtach (przemysł motoryzacyjny, badania nad sportem), czy modelowanie zjawisk mieszania i filtrowania cieczy w trakcie przepływu [5]. Również wymiana ciepła i zjawiska takie jak chłodzenie (elementy mechaniczne, mikrokomputery) często stają się celem badań. Symulacje komputerowe cieczy nie są jednak wykorzystywane jedynie w przemyśle, znajdują bowiem swoje miejsce w wielu innych dziedzinach nauki. W medycynie, bada się np. przepływ krwi przez naczynia krwionośne [36]. W ochronie środowiska problemy emisji i rozprzestrzeniania zanieczyszczeń analizowane są również z pomocą narzędzi komputerowego badania przepływów [7]. Dość nową i obiecującą dziedziną wiedzy silnie związaną z CFD są badania nad środowiskiem wodnym i panującym w nim życiem [26, 29].

Nie bez znaczenia są również walory estetyczne zjawisk towarzyszących dynamice cieczy [9]. Burzliwy rozwój grafiki komputerowej w ostatnich latach spowodował zapotrzebowanie przemysłu filmowego i gier komputerowych na coraz bardziej wyrafinowane efekty specjalne. Jedną z najtrudniejszych aspektów komputerowej animacji jest realistyczne odtworzenie ruchu cieczy z uwzględnieniem jej fizycznych właściwości. Pionierskie prace w tym obszarze wykonali Foster i Metaxas w 1996 roku [12]. Możemy nie zdawać sobie z tego sprawy, jednak oglądając filmy animowane z ostatnich lat, oprócz dobrego kina, przyglądamy się również rozwiązaniom złożonych równań matematycznych [11].

Konsekwencją skomplikowanych zjawisk towarzyszących dynamice przepływów jest złożony opis matematyczny sformułowany w postaci nieliniowych równań różniczkowych cząstkowych. Ogólne rozwiązanie równań przepływu możliwe jest jedynie poprzez ich numeryczne przybliżenie z użyciem odpowiednich schematów numerycznych. Duża ilość praktycznych zastosowań metod symulacji CFD spowodowały powstanie komercyjnych pakietów obliczeniowych (Fluent, ICEM CFD, Flow3d itp.). Oprócz zastosowań czysto praktycznych istnieją również przesłanki naukowe do konstrukcji nowych kodów. Nie istnieje bowiem rozwiązanie idealne, a wybrane metody całkowania i w konsekwencji schemat numeryczny rozwiązania ograniczony jest do określonego zakresu zjawisk fizycznych. W przypadku gotowego oprogramowania, nie jesteśmy w stanie poznać bliższych szczegółów budowy i jego działania, a to niekiedy wpływa na ograniczone możliwości analizy otrzymywanych rezultatów. Z tego względu w celu dokładnej analizy badanych zjawisk, po dokładnym określeniu warunków w jakich one przebiegają, wygodniej jest stworzyć kod numeryczny od początku, sprawdzając na każdym etapie prac zgodność jego działania z danymi doświadczalnymi.

W niniejszej pracy główny nacisk położony zostanie na stworzenie kodu obliczeniowego pozwalającego na symulację zjawisk zachodzących w cieczach nieściśliwych. Omówienie konstrukcji kodu numerycznego zaczniemy od wprowadzenia w rozdziale 2 podstaw matematycznych, równań przepływu Naviera–Stokesa. Następnie w rozdziale 3, po wprowadzeniu pojęcia siatki różnicowej, zajmiemy się budową schematów różnicowych potrzebnych do dyskretyzacji równań, analizując i testując poszczególne przybliżenia. To pozwoli nam w rozdziale 4 zająć się szczegółami procedur numerycznych dla cieczy w obszarach zamkniętych (bez powierzchni swobodnej). Przeprowadzone zostaną też testy walidacyjne uzyskanego kodu, gdyż poprawność jego działania na tym etapie będzie miała kluczowe znaczenie dla dalszego rozwijania. W rozdziale 5, kod numeryczny rozszerzony zostanie o bezmasowe cząstki znaczone, które pozwolą na śledzenie ruchomych warunków brzegowych na powierzchni swobodnej cieczy. Po ich wyprowadzeniu, przeprowadzone zostaną kolejne testy poprawności działania kodu, a otrzymane wyniki sprawdzone zostaną z teorią i doświadczeniem. Tak uzyskany kod obliczeniowy, który roboczo nazwiemy metodą SIMPLE-MAC, pozwoli nam następnie na przeprowadzenie kilku ważnych, z punktu widzenia hydrodynamiki, symulacji. Zajmiemy się zjawiskami zachodzących w cieczach nieściśliwych w kanałach zamkniętych oraz otwartych (ciecz z powierzchnią swobodną). Wprowadzenie do rozwiązywanych zagadnień oraz wyniki ich symulacji przedstawione zostaną w rozdziale 6. Analizę, wnioski oraz kierunki rozwoju kodu obliczeniowego SIMPLE-MAC omawiamy w 7. W dodatku A zamieszczone zostaną rezultaty symulacji po zastosowaniu kolorowej wizualizacji.

Fotografia kropli na stronie tytułowej umieszczona została dzięki uprzejmości jej autora, prof. Andrew Davidhazy'ego z Rochester Institute of Technology. Sentencja Leonarda da Vinci w cytowanej formie pochodzi ze strony internetowej:

http://www.water.eat-online.net/polski/arts/leonardo_water.htm.

Za cierpliwość i wsparcie dziękuję żonie, Klaudii. Przy kolejnych etapach powstawania pracy swoją pomoc zaoferowali m.in.: dr Tomasz Bednarz, Katarzyna Borońska, Piotr Boroński, prof. Xing Cai, Francis F. Harlow, Jakub Kominiarczuk, prof. Henryk Kudela, prof. Sean McKee, dr Witold Suchecki, Szymon Tengler oraz opiekun tej pracy dr Janusz Szwabiński. Osobom tym chciałbym w tym miejscu serdecznie podziękować.

Do składu pracy wykorzystane zostało oprogramowanie ogólnodostępne (\mathbb{IATEX} , dystrybucja MikTex), pracujące pod systemem operacyjnym *Windows*. Kody numeryczne pisane były w środowisku *Visual C* + + 6.0, a obrazki do pracy powstały w programie *Visio* 2000. Za wykupienie i udostępnienie licencji na użycie wymienionego oprogramowania chciałbym podziękować władzom Uniwersytetu Wrocławskiego.

2 Równania Naviera–Stokesa

Jednym z najczęściej stosowanych modeli matematycznych w hydrodynamice są równania Naviera–Stokesa. Można je wyprowadzić z fundamentalnych praw zachowania (masy i energii) oraz drugiej zasady dynamiki Newtona [3, 40]. W tym rozdziale przedstawiony zostanie szkic wyprowadzenia równań Naviera–Stokesa dla cieczy nieściśliwej.

2.1 Równanie ciągłości

Pierwszym z równań, które omówimy, będzie równanie ciągłości w sformułowaniu hydrodynamicznym. Wprowadźmy do rozważań zlokalizowaną gęstość cieczy $\rho(\mathbf{r}, t)$ zakładając jej zmienność względem czasu i przestrzeni. Z warunku zachowania masy w układzie zamkniętym zapiszemy relację pomiędzy szybkością zmian masy w objętości V, a strumieniem masy przechodzącym przez powierzchnię S ograniczającą tę objętość:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{V} \varrho d\tau = - \oiint_{S} \varrho \mathbf{u} d\mathbf{S}.$$
⁽¹⁾

Korzystając z twierdzenia Gaussa,

$$\oint_{S} (\rho \mathbf{u}) d\mathbf{S} = \iiint_{V} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) d\tau, \tag{2}$$

z równania (1) otrzymujemy równanie różniczkowe wyrażające warunek zachowania masy w układzie zamkniętym¹:

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \mathbf{u}) = 0. \tag{3}$$

W ogólnym przypadku równanie (3) jest równaniem ciągłości cieczy o zmiennej gęstości. Jednak w zakresie zjawisk omawianych w niniejszej pracy (ciecz nieściśliwa), naturalnym założeniem, które przyjmiemy, jest założenie stałej gęstości płynu ($\varrho = \varrho_{\infty} = const$) w całej objętości. W takim układzie równanie (3) upraszcza się, gdyż pochodna $\partial \varrho_{\infty}/\partial t$ jest równa zeru. Otrzymujemy warunek

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0,\tag{4}$$

który mówi, że dywergencja pola prędkości wynosi zero. Równanie (4) stanowi pierwsze z dwóch równań Naviera–Stokesa dla cieczy nieściśliwej.

2.2 Równanie dynamiki

Podobnie jak w przypadku równania ciągłości, do wyznaczenia równania różniczkowego opisującego dynamikę elementu cieczy wykorzystuje się zasady zachowania (tu: pędu i energii). Czytelnika odsyłamy do źródeł [3, 15, 40], gdzie znaleźć można dokładne i ścisłe wyprowadzenia

 $^{^1{\}rm Za}$ układ zamknięty uważać będziemy układ, w którym nie dochodzi do wymiany masy z otoczeniem.

omawianych równań. W poniższym podrozdziale zajmiemy się opisem i fizycznym uzasadnieniem równania dynamiki - zarówno jako całości jak i poszczególnych jego członów. Omówione zostaną również niezbędne uproszczenia wyjściowej postaci równań. Celem naszym jest matematyczne sformułowanie przepływu cieczy nieściśliwej w polu sił zewnętrznych.

Ogólną postać równania ruchu elementu cieczy zapiszemy przy pomocy operatorów różniczkowych, co oznacza, że postać ta prawdziwa jest dla dowolnego układu współrzędnych. Następnie przejdziemy do postaci różniczkowej, gdzie poszczególne operatory zamienione zostaną na pochodne określając jednocześnie założony przy przejściu układ odniesienia.

Równanie dynamiki elementu cieczy zapisać możemy w następującej postaci² [15]:

$$\frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t} = -(\mathbf{u}^* \cdot \nabla)\mathbf{u}^* - \frac{1}{\varrho_{\infty}}\nabla p^* + \frac{\mu}{\varrho_{\infty}}\nabla^2 \mathbf{u}^* + \mathbf{g}^*.$$
(5)

Każdy z czterech członów, stojących po prawej stronie równania (5) posiada swoją literaturową nazwę i konkretne znaczenie fizyczne:

- człon konwekcyjny $-(\mathbf{u}^* \cdot \nabla)\mathbf{u}^*$, odpowiadający za obecność sił inercyjnych w cieczy,
- człon lepkościowy (dyfuzyjny) $\frac{\mu}{\rho_{\infty}} \nabla^2 \mathbf{u}^*$, odpowiadający za zjawiska związane z tarciem wewnętrznym w cieczach,
- człon ciśnieniowy $-\frac{1}{\rho_{\infty}}\nabla p^*$, zapewniający nieściśliwość płynu w przypadku takiego sformułowania równań (równoważy niezerową dywergencję członu konwekcyjnego),
- człon opisujący wpływ sił zewnętrznych \mathbf{g}^* .

Równanie (5) uznać można za analog drugiej zasady dynamiki Newtona w przypadku dynamiki cieczy. Pochodna cząstkowa prędkości (lewa strona równania) ma znaczenie przyspieszenia elementu objętości, a prawa część równania posiada wymiar siły dzielonej przez masę.

2.3 Bezwymiarowa postać równań

W praktyce dość często występuje sytuacja, kiedy niemożliwym jest dokładne odtworzenie warunków fizycznych charakterystycznych dla badanego zjawiska. Podstawowymi problemami przy modelowaniu i badaniu cieczy mogą być: duże rozmiary badanych układów, niewielka lepkość wprowadzająca niestabilności do numerycznych rozwiązań, duże prędkości lokalne - trudne do pomiaru jak i symulacji.

W celu lepszego opisu numerycznego badanego zjawiska wprowadzimy za [15] bezwymiarową postać równań Naviera–Stokesa. Dla konkretnego problemu określamy długość charakterystyczną L oraz prędkość charakterystyczną u_{∞} . Możemy wówczas wyznaczyć wielkości bezwymiarowe: długość $x = x^*/L$, prędkość $\mathbf{u} = \mathbf{u}^*/u_{\infty}$ oraz czas $t = t^*u_{\infty}/L$.

 $^{^{2}}$ W celu odróżnienia wartości wymiarowych od bezwymiarowych w równaniu (5) poszczególne wyrazy oznaczone zostały gwiazdką, co wskazuje, że podane wartości posiadają wymiar.

Podstawiając te wielkości do równania (5), po przeprowadzeniu kilku prostych operacji arytmetycznych na całym równaniu, otrzymujemy równania Naviera–Stokesa w postaci bezwymiarowej:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} - \nabla\varphi + \frac{1}{Re}\nabla^2\mathbf{u} + \frac{1}{(Fr)^2}\hat{g},\tag{6}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \tag{7}$$

Liczby Reynoldsa (Re) oraz Froude'a (Fr) występujące w równaniu (6) są przykładem tzw. liczb specjalnych (znanych też pod nazwą liczb kryterialnych). Poprzez podanie wartości liczb specjalnych jednoznacznie definiujemy rodzaj i dynamikę badanego przepływu. Używając liczb Reynoldsa i Froude'a możemy dowolnie przeskalować układ do żądanych, wygodnych doświadczalnie bądź numerycznie wartości nie zmieniając przy tym właściwości badanego zjawiska³.

2.3.1 Liczba Reynoldsa

Liczba Reynoldsa może być zdefiniowana jako:

$$Re = \frac{u_{\infty}L}{\nu},\tag{8}$$

gdzie $\nu = \frac{\mu}{\rho_{\infty}}$ jest lepkością kinematyczną, mówi o stosunku sił bezwładności do sił lepkościowych (tarcia wewnętrznego) w cieczach.

2.3.2 Liczba Froude'a

W przypadku cieczy z powierzchnią swobodną mówi się również o tzw. liczbie Froude'a równej⁴:

$$(Fr)^2 = \frac{u_\infty^2}{L|\mathbf{g}|},\tag{9}$$

określającej stosunek sił bezwładności do ciężaru cieczy.

2.3.3 Inne liczby kryterialne

Wprowadzone liczby kryterialne wiążą się ściśle z pojęciem podobieństwa przepływów. Spełnienie warunku równości liczb Reynoldsa i Froude'a dla dwóch różnych (ze względu na rozmiary, prędkości początkowe) przepływów oznaczać będzie, że pomimo tych różnic badane będą układy o tych samych właściwościach dynamicznych.

Wprowadzone tu dwie liczby specjalne oraz związane z nimi kryteria podobieństwa przepływów nie są jedynymi istniejącymi. W mechanice płynów wyróżniamy jeszcze m.in.

- kryterium zjawisk okresowych i liczbę Strouhala,
- kryterium podobieństwa sił ciśnieniowych w cieczach i liczbę Eulera,
- kryterium podobieństwa sił ciśnieniowych w gazach i liczbę Macha.

Bardziej dokładną i wyczerpującą klasyfikację liczb kryterialnych znaleźć można w literaturze, np. w [16]. W zakresie badanych przez nas zjawisk określenie podobieństwa przepływów ze względu na równość liczb Reynoldsa i Froude'a jest wystarczająca.

 $^{^3}$ Innymi słowy, przeskalowanie układu przy zachowaniu wartości liczb specjalnych pozwoli zachować właściwości przepływu czyniąc go tzw. przepływem podobnym.

⁴Dla wygody zapisu zwykło się w literaturze tematu podawać kwadrat liczby Froude'a.

2.4 Równania w kartezjańskim układzie odniesienia

Ze względu na wybór układu odniesienia w którym badać będziemy numerycznie przepływ cieczy, równania Naviera–Stokesa zapisać możemy w charakterystycznej dla tego układu postaci różniczkowej. Wybierzmy kartezjański układ odniesienia, a w celu uproszczenia zapisu postać różniczkową równań zapiszemy dla przypadku dwuwymiarowego.

Równanie ciągłości dla cieczy nieściśliwej (4) zapiszemy w postaci różniczkowej wykorzystując bezpośrednio definicję operatora ∇ w układzie kartezjańskim:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \tag{10}$$

Podobnie równanie dynamiki (6) zapisać można w przypadku dwuwymiarowym w zachowawczej postaci:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial u^2}{\partial x} - \frac{\partial uv}{\partial y} - \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{(Fr)^2} \hat{g}_x,\tag{11}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -\frac{\partial v^2}{\partial y} - \frac{\partial v u}{\partial x} - \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{(Fr)^2} \hat{g}_y, \tag{12}$$

gdzie odpowiednio równanie (11) opisuje przyspieszenie elementu cieczy w kierunki osi x, a równanie (12) przyspieszenie elementu cieczy w kierunki osi y. W przypadku potrzeby wprowadzenia trzeciego wymiaru, konstrukcja odpowiednich równań jest analogiczna.

3 Algorytmy numeryczne

Niniejszy rozdział zawiera opis metod numerycznych potrzebnych do dyskretyzacji równań przepływu cieczy nieściśliwej. Podane metody numeryczne oraz stosowna analiza pod względem ich właściwości, użyte zostaną w rozwiązaniu numerycznym w dalszej części pracy.

3.1 Dyskretyzacja przestrzeni

Ze względu na sposób dyskretyzacji obszaru zajmowanego przez ciecz, symulacje hydrodynamiczne dzieli się na dwa rodzaje wyróżniając podejście Lagrange'a i podejście Eulera [31]. Różnica objawia się w sposobie konstrukcji oraz dynamice siatek obliczeniowych rozpiętych nad obszarem symulacji.



Rysunek 1: Siatka obliczeniowa typu Lagrange'a (po lewej) i Eulera (po prawej).

Na rysunku 1 pokazane zostały siatki obliczeniowe typu Lagrange'a oraz Eulera. Siatka po stronie lewej (Lagrange'a) dynamicznie zmienia ustawienie punktów węzłowych wraz z ruchem (dynamiką) cieczy. Siatka po stronie prawej (Eulera) posiada sztywno określone (niezmienne) położenia punktów węzłowych.

Wybór rodzaju dyskretyzacji przestrzeni zależy od typu zagadnienia, jednak w praktyce metod symulacji hydrodynamicznych podejście Lagrange'a ma ograniczone zastosowanie i stosuje się je głównie w opisie przepływów ściśliwych, jednowymiarowych. Dość ciekawą cechą tego typu rozwiązań jest samozagęszczenie siatki w miejscach, gdzie występują duże gradienty pól prędkości, czyli tych najbardziej narażonych na błędy rozwiązania numerycznego. Ze względu na chęć posiadania możliwie ogólnego rozwiązania oraz charakter zjawisk, jakie zamierzamy badać (ciecz nieściśliwa o powierzchni swobodnej), obliczenia numeryczne przeprowadzone zostaną na siatce typu Eulera.

3.1.1 Rozbieżna siatka obliczeniowa typu Eulera

Przed przystąpieniem do konstrukcji analogów różnicowych równań Naviera - Stokesa sprecyzować musimy budowę i rozmieszczenie zmiennych na siatce różnicowej. Rozważania te przeprowadzimy dla dwóch wymiarów przestrzennych oraz ze względu na wybór układu współrzędnych - w kartezjańskim układzie odniesienia.

Kompletny stan układu opisywany jest przez pole wektorowe prędkości $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ oraz pole skalarne ciśnienia⁵ $\varphi(\mathbf{r})$. Do celów dyskretyzacji przyjmiemy najprostszą postać siatki prosto-

 $^{^5 \}rm W$ dalszej części pracy stosować będziemy określenie "ciśnienie", w przypadku pola φ pamiętać należy, że mowa o ciśnieniu odniesionym do stałej gęstości płynu.

kątnej regularnej, dzieląc przestrzeń symulacji na równe komórki - podobnie jak przedstawione zostało to na rysunku 1.

Jednym ze sposobów rozmieszczenia zmiennych pierwotnych na siatkach typu Eulera jest umieszczenie wszystkich trzech zmiennych w centrach komórek siatki. Podejście takie okazuje się jednak posiadać cechy uniemożliwiające sprawne przeprowadzenie numerycznego rozwiązania przy pomocy znanych schematów numerycznych. Oprócz niezbyt jasnej definicji dywergencji prędkości przez komórkę na tego rodzaju siatce okazuje się również, że przy rozwiązaniu iteracyjnym układu równań liniowych wynikającym z równania Poissona na takiej siatce występuje tzw. efekt szachownicy, gdzie ze względu na dyskretyzację części źródłowej równania, następuje wzmocnienie i osłabienie wielkości w naprzemiennych węzłach sieci [3, 15].

uvp	uvp	 u	–v– p	 u 	_v_ p	u U
uvp	uvp	u	_v_ p _v_	u U	_v_ p v_	u

Rysunek 2: Podział przestrzeni przy pomocy siatki prostokątnej z różnym rozmieszczeniem zmiennych pierwotnych.

Na rysunku 2 pokazane zostały dwa typy rozmieszczenia zmiennych w przestrzeni. Dla celów niniejszej pracy wybrana została siatka różnicowa rozbieżna⁶ pokazana po prawej stronie rysunku 2. Ciśnienie umiejscowione zostało w centrum komórki, składowa prędkości w kierunku osi x w środku prawej i lewej, a składowa prędkości w kierunku osi y w środku górnej i dolnej krawędzi komórki. Historycznie, siatka rozbieżna tego typu wprowadzona została pierwszy raz w obliczeniach numerycznych cieczy nieściśliwej w roku 1965 w pracy [48]. Dzięki takiemu rozmieszczeniu zmiennych na siatce definicja dywergencji przez komórkę uzyska bardzo elegancką formę wynikającą z bezpośredniej dyskretyzacji. Również problem związany z iteracją ciśnienia zostanie wyeliminowany jak pokazano to w [15].



Rysunek 3: Pojedyncza komórka siatki rozbieżnej typu Eulera.

Na rysunku 3 pokazana została pojedyncza komórka siatki obliczeniowej z zaznaczonym ułożeniem zmiennych pierwotnych w dwuwymiarowym układzie odniesienia. Dodatkowo zdefiniowane zostały konkretne pozycje tych zmiennych względem centrum omawianej komórki.

⁶W literaturze występująca pod nazwą *ang. staggered grid* w odróżnieniu od siatki z rozmieszczeniem centralnym zmiennych *ang. collocated grid.*

Rozmiary liniowe komórki Δx i Δy są cechą omawianej siatki obliczeniowej. W przypadku potrzeby rozróżnienia miejsc bardziej interesujących w obszarze symulacji lub miejsc podatnych na niestabilności numeryczne, wprowadzić można jedną z technik podziału (zagęszczenia) siatki obliczeniowej [30, 8], jednak dla naszych potrzeb ograniczymy się do stałych Δx i Δy .

Siatki różnicowej złożonej z komórek przedstawionych na rysunku 3 użyjemy do budowy numerycznych przybliżeń kolejnych pochodnych i członów równań różniczkowych Naviera– Stokesa.

3.2 Analogi różnicowe pochodnych

Do wyprowadzenia schematów różnicowych podstawowych pochodnych użyjemy rozwinięcia w szereg Taylora. W celu uogólnienia rozważań wprowadźmy funkcję f określoną w centrach siatki obliczeniowej⁷. Wartości funkcji oznaczmy przy pomocy indeksów dolnych wskazujących umiejscowienie na siatce, co pozwoli zapisać wartość w węźle (i, j) jako: $f(i\Delta x, j\Delta y) = f_{i,j}$. Znajomość wartości węzłowych funkcji f pozwala rozwinąć funkcję w szereg Taylora w otoczeniu węzła (i, j):

$$f_{i+1,j} = f_{i,j} + \frac{\partial f}{\partial x}\Big|_{i,j} \Delta x + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{i,j} \Delta x^2 + O(\Delta x^3).$$
(13)

Rozwiązanie powyższego równania względem poszczególnych wyrazów stojących po jego prawej stronie pozwoli przybliżyć kolejne pochodne przy pomocy znanych wartości węzłowych. Korzystając z tej techniki⁸ wyprowadzić możemy analogi różnicowe kolejnych pochodnych używając wartości węzłowych siatki Eulera.

Bezpośrednie wyliczenie członu $\frac{\partial f}{\partial x}\Big|_{i,j}$ z równania (13), przy zaniedbaniu wyrazów (pochodnych) wyższego rzędu daje analog różnicowy postaci:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{f_{i+1,j} - f_{i,j}}{\Delta x} + O(\Delta x),\tag{14}$$

którego postać wynika wprost z rozwinięcia funkcji f w szereg Taylora. Zgodnie z literaturowym nazewnictwem mówi się o aproksymacji różnicowej "w przód" dokładności pierwszego rzędu. Podobnie konstruuje się tzw. analogi różnicowe "w tył" postaci:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{f_{i,j} - f_{i-1,j}}{\Delta x} + O(\Delta x),\tag{15}$$

które są wygodne w przypadku potrzeby ścisłego nałożenia warunków brzegowych lub wyliczenia wartości pochodnych w "trudnych" miejscach siatek obliczeniowych. Ważnym ze względu na rząd dokładności schematem różnicowym jest również schemat centralny:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{f_{i+1,j} - f_{i-1,j}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2).$$
(16)

⁷Odpowiednie zastosowanie wyprowadzonych wzorów do wielkości umiejscowionych w innych miejscach siatki sprowadzi się do przesunięć indeksów

⁸Istnieje inny sposób na wyprowadzenie schematów przybliżeń pochodnych na dyskretnej przestrzeni poprzez przybliżanie wielomianowe - czytelników odsyłamy do [16].

Jest to schemat drugiego rzędu. W celu przybliżenia drugiej pochodnej funkcji f w punkcie węzłowym siatki $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\Big|_{i,j}$ należy rozwinąć funkcję f w dwa szeregi Taylora - względem punktu (i + 1, j) oraz (i - 1, j). Po ich zsumowaniu oraz rozwiązaniu tak otrzymanego równania względem $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$ otrzymujemy schemat drugiego rzędu przybliżający drugą pochodną funkcji f w następującej postaci:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\Big|_{i,j} = \frac{f_{i+1,j} - 2f_{i,j} + f_{i-1,j}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2).$$
(17)

Sposób konstrukcji schematów różnicowych w przypadku innych zmiennych (inne kierunki, czas t) nie wymaga dalszego komentarza, gdyż schematy te konstruuje się analogicznie.

3.3 Postać dyskretna równań przepływu

Budowę analogów różnicowych równań Naviera–Stokesa opisywać będziemy bazując na ich różniczkowej postaci wyrażonej równaniami (10), (11) oraz (12). Warunek ciągłości zapiszemy przy bezpośrednim użyciu schematu różnicowego "w przód", co daje nam wyrażenie na dywergencję przez komórkę (i, j) postaci:

$$D = \frac{u_{i+0.5,j} - u_{i-0.5,j}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+0.5} - v_{i,j-0.5}}{\Delta y} = 0.$$
(18)

W dalszej części rozważań równanie (18) będzie często używane w przypadku wyprowadzania warunków brzegowych oraz w celu weryfikacji spełnienia zasad zachowania masy w obszarze siatki różnicowej.

Podobnie korzystając z wprowadzonych wcześniej schematów jesteśmy już w stanie wprowadzić dyskretne analogi równań dynamiki dla obu kierunków przepływu. Korzystając z równania (11) przez dyskretyzację kolejnych członów otrzymujemy analog postaci:

$$\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^{n}}{\Delta t} = CONV(u)_{i+0.5,j}^{n} + \frac{\varphi_{i+1,j}^{n} - \varphi_{i,j}^{n}}{\Delta x} + \frac{1}{Re} \left(\frac{u_{i-0.5,j}^{n} - 2u_{i+0.5,j}^{n} + u_{i+1.5,j}^{n}}{\Delta x^{2}} + \frac{u_{i+0.5,j-1}^{n} - 2u_{i+0.5,j}^{n} + u_{i+0.5,j+1}^{n}}{\Delta y^{2}} \right) + \frac{1}{(Fr)^{2}} \hat{g}_{x}.$$
(19)

Podobnie dla kierunku y bezpośrednia dyskretyzacja równania (11) daje analog postaci:

$$\frac{v_{i,j}^{n+1} - v_{i,j}^{n}}{\Delta t} = CONV(v)_{i,j+0.5}^{n} + \frac{\varphi_{i,j+1}^{n} - \varphi_{i,j}^{n}}{\Delta y} + \frac{1}{Re} \left(\frac{v_{i,j-0.5}^{n} - 2v_{i,j+0.5}^{n} + v_{i,j+1.5}^{n}}{\Delta y^{2}} + \frac{v_{i-1,j+0.5}^{n} - 2v_{i,j+0.5}^{n} + v_{i+1,j+0.5}^{n}}{\Delta x^{2}} \right) + \frac{1}{(Fr)^{2}} \hat{g}_{y}. \quad (20)$$

Występujące w analogach różnicowych (19) oraz (20) wyrażenie CONV() zawiera w sobie postać dyskretną członu konwekcyjnego⁹. Nie podajemy gotowego wzoru z uwagi na to, że w dalszych podrozdziałach podejmiemy próbę analizy różnych sposobów jego dyskretyzacji.

 $^{^9\}mathrm{Notacja}$ wg [10]

3.4 Dyskretyzacja członu konwekcyjnego

Jak wspomnieliśmy w rozdziale 2.2, równanie dynamiki wchodzące w skład równań Naviera– Stokesa zawiera oprócz sił zewnętrznych i ciśnienia dwa charakterystyczne człony: człon konwekcyjny i lepkościowy. W niniejszym podrozdziale zajmiemy się problemem dyskretyzacji członu konwekcyjnego równań Naviera–Stokesa. Okazuje się bowiem [10, 47] że w przypadku dominującego członu konwekcyjnego dużą trudność stanowi dokładna i stabilna symulacja.

Wprowadzonych zostanie kilka najbardziej znanych schematów dyskretyzacji, a ich właściwości zbadamy na przykładzie modelowego równania adwekcji dla jednego kierunku przepływu.



Rysunek 4: Notacja użyta do wprowadzenia ogólnych wyrażeń na dyskretyzację członu konwekcyjnego. Linią przerywaną zaznaczony został obszar kontrolny obliczeń.

Wprowadźmy oznaczenia przedstawione na rysunku 4 [10]. Rozważamy zagadnienie jednowymiarowe z obszarem kontrolnym wielkości Δx , gdzie w dowolnym punkcie węzłowym, np. C, znajduje się wielkość oznaczona przez indeks dolny, np. ϕ_C . Zakładamy również znajomość prędkości konwekcyjnych u_E oraz u_W odpowiednio w punktach węzłowych x = E oraz x = W. Pierwszą pochodną członu konwekcyjnego w punkcie x = E zapiszemy w ogólnej postaci, nie wyróżniając jeszcze sposobu dyskretyzacji:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_C = \frac{\phi_{CE} - \phi_{CW}}{\Delta x}.$$
(21)

Dzięki notacji w równaniu (21) wyrazić możemy nieznane wielkości ϕ_{CE} oraz ϕ_{CW} przez odpowiednie punkty węzłowe i przedstawić klasyfikację metod dyskretyzacji pochodnej konwekcyjnej.

3.4.1 Schemat centralny (CD)

Bezpośrednie przybliżenie członu konwekcyjnego schematem różnicowym (16) daje następujące wyrażenia na nieznane wielkości w punktach x = CE oraz x = CW:

$$\phi_{CE} = \frac{\phi_E - \phi_C}{2},\tag{22}$$

$$\phi_{CW} = \frac{\phi_C - \phi_W}{2}.\tag{23}$$

Równania (22) oraz (23) stanowią definicję schematu różnicowego centralnego dla równania konwekcji znanego w literaturze pod nazwą ang. Central Difference (CD).

3.4.2 Schemat "pod prąd" pierwszego rzędu (FOU)

Korzystając z wartości prędkości konwekcyjnych w punktach x = CE oraz x = CW wprowadzimy wyrażenia na nieznane wielkości ϕ między węzłami, całkując schematami różnicowymi pierwszego rzędu (14) i (15), uzależniając kierunek całkowania od prędkości u_{CE} i u_{CW} . Niech:

$$\phi_{CE} = \begin{cases} \phi_C, & u_{CE} \ge 0\\ \phi_E, & u_{CE} < 0 \end{cases}, \tag{24}$$

$$\phi_{CW} = \begin{cases} \phi_W, & u_{CW} \ge 0\\ \phi_C, & u_{CW} < 0 \end{cases}$$

$$(25)$$

Równania (24) oraz (25) stanowią definicję schematu różnicowego "pod prąd" znanego w literaturze pod nazwą ang. First Order Upwind (FOU.

3.4.3 Równanie adwekcji

W celu przeprowadzenia analizy poszczególnych metod dyskretyzacji członu konwekcyjnego¹⁰ rozważmy problem adwekcji na przykładzie jednowymiarowego równania transportu, bez członu dyfuzyjnego, postaci:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} = 0, \tag{26}$$

gdzie f określa koncentrację przestrzenną, a u jest parametrem określającym prędkość przepływu. Rozwiązaniem analitycznym dla stałego parametru u jest transport właściwości f wzdłuż kierunku wyznaczonego przez prędkość przepływu u.

Przyjmijmy następujące warunki początkowe, wyznaczające stromy próg koncentracji w prostym kanale [44]:

$$f(x,t_0) = \begin{cases} 1.0, & x < x_p \\ 0.5, & x = x_p \\ 0, & x > x_p \end{cases}$$
(27)

gdzie x_p wyznacza początkowy próg koncentracji. Wartość brzegową przyjmijmy równą $\forall t > t_0$, f(x = 0, t) = 1.0. W dalszej części tego podrozdziału przeprowadzimy proces całkowania numerycznego równania (26) przy wprowadzonych tu warunkach początkowych i warunku brzegowym.

Zapiszmy analog różnicowy równania (26) korzystając ze schematów różnicowych wprowadzonych w podrozdziale 3.2. Do dyskretyzacji pochodnej czasowej użyjemy schematu pierwszego rzędu "w przód" (14). Dla członu konwekcyjnego przybliżymy pochodną schematem centralnym drugiego rzędu (16). W rezultacie otrzymamy wyrażenie:

$$f_i^{n+1} = f_i^n - \Delta t \frac{u}{2\Delta x} (f_{i+1}^n - f_{i-1}^n).$$
(28)

 $^{^{10}}$ Termin adwekcja odnoszący się do nazwy omawianego równania modelowego jest tożsamy z konwekcją odnoszącą się do odpowiednich członów równań Naviera–Stokesa. Rozróżnienie wprowadzone zostało w celu wygody opisu słownego, jak i ze względu na różnice występujące w literaturze tematu.

Równanie (28) jawnie wyznacza stan układu w (n + 1) kroku czasowym przy znajomości rozkładu funkcji f w kroku n.

Ze względu na kierunek przepływu wyznaczony przez znak współczynnika u w równaniu (26) wprowadźmy również dyskretyzację członu konwekcyjnego metodą "pod prąd", czyli przeciwnie do stałego w naszym wypadku kierunku transportu korzystając ze schematu "w tył" (15), dla której analog różnicowy równania czystej adwekcji przyjmie postać:

$$f_i^{n+1} = f_i^n - \Delta t \frac{u}{\Delta x} (f_i^n - f_{i-1}^n).$$
(29)

Korzystając ze schematów (28) oraz (29), rozwiążmy zagadnienie transportu postawione w podrozdziale 3.4.3. Za rozmiar siatki obliczeniowej przyjmiemy $\Delta x = 0.1m$. Obliczenia przeprowadzone zostaną dla $x \in [0; 100]m$ przy prędkości konwekcyjnej $u = 0.01m \cdot s^{-1}$. Za krok czasowy przyjmijmy $\Delta t = 0.01s$;



Rysunek 5: Rozwiązanie równania czystej adwekcji dla t = 3000[s]. Porównanie rozwiązania dla schematu centralnego oraz schematu "w tył" z rozwiązaniem analitycznym.

Na rysunku 5 przedstawione zostały wyniki obliczeń numerycznych w chwili t = 3000s dla dwóch schematów całkowania członów konwekcyjnych. Rozwiązanie analityczne posiada stromy uskok progu koncentracji właściwości f. Jak widać na wykresie, rozwiązanie przy użyciu schematu centralnego drugiego rzędu wprowadza oscylacje, wzrastające przy samym uskoku wartości f. Okazuje się, że zmiana gęstości siatki obliczeniowej wcale nie eliminuje tych niedokładności i pomimo stabilności rozwiązania uzyskujemy wynik niedokładny. Tymczasem rozwiązanie metodą niższego rzędu (metodą "w tył") dało rozwiązanie gładkie, co sugerowałoby, że metoda niższego rzędu lepiej przybliża człon konwekcyjny w obliczeniach numerycznych. Okazuje się jednak, że numeryczna dyfuzja wprowadzana przez zastosowanie schematu "w tył" jest bardzo duża. Biorąc pod uwagę dalszą ewolucję czasową progu koncentracji, charakterystyczne rozmycie wartości f w jego otoczeniu staje się bardzo duże, co pokazane zostało na rysunku 6.

Przedstawione na rysunkach 5 oraz 6 porównanie rozwiązań równania adwekcji dla dwóch różnych schematów całkowania pokazało, jak niestabilne okazuje się rozwiązanie przy całkowaniu bezpośrednio przy pomocy schematu centralnego. Tymczasem użycie schematu całkującego, który do aproksymacji pochodnej używa różnic pierwszego rzędu i wartości węzłowych w kierunku przeciwnym do kierunku wskazywanego przez prędkość *u* wprowadza sztuczną dyfuzję wygładzającą rozwiązanie. Wygładzenie rozwiązania modelowego przez numeryczną dyfuzję sugeruje, iż równanie posiadające oprócz członu konwekcyjnego również człon dyfuzyjny powinno dać się łatwiej rozwiązać przy pomocy procedur numerycznych.



Rysunek 6: Rozwiązanie równania adwekcji dla u > 0 schematem różnicowym "w tył" (linia przerywana). Porównanie do rozwiązania analitycznego (linia ciągła) dla kilku chwil czasowych. Obliczenia dla $\Delta x = 0.5$, $x \in [0; 200]m$, reszta parametrów bez zmian.

3.5 Równanie Poissona

W trakcie konstrukcji algorytmu rozwiązywania równań Naviera–Stokesa¹¹ pojawia się zagadnienie numerycznego rozwiązania równania Poissona, czyli problemu postaci:

$$\nabla^2 \Phi = -\varrho(\mathbf{r}). \tag{30}$$

Równanie Poissona występuje bardzo często przy próbie opisu matematycznego zjawisk fizycznych i w niniejszym podrozdziale zajmiemy się jego rozwiązaniem numerycznym. Równanie (30) zapiszemy, dla uproszczenia dalszych rozważań, w postaci jednowymiarowej:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = -\rho(x). \tag{31}$$

Zastosujmy schemat dyskretyzacji drugiej pochodnej (17) i dla uproszczenia równań przyjmijmy krok $\Delta x = 1$, co nie zmienia w żadnym stopniu ogólności rozważań [40]. Otrzymujemy ogólne wyrażenie na analog różnicowy równania Poissona w jednym wymiarze:

$$\Phi_{i+1} - 2\Phi_i + \Phi_{i-1} = -\rho_i$$

Zakładając, że znany jest nam rozkład źródeł ρ , otrzymujemy następujący układ równań liniowych, wynikający z dyskretyzacji równania (31) na siatce różnicowej typu Eulera o N węzłach:

$$\begin{array}{rcl}
-2\Phi_{2} & +\Phi_{1} & = & \rho_{1} \\
\Phi_{1} & -2\Phi_{2} & +\Phi_{3} & = & \rho_{2} \\
& \Phi_{2} & -2\Phi_{3} & +\Phi_{4} & = & \rho_{3} \\
& & & \vdots \\
& & & & & \vdots \\
\Phi_{N-2} & -2\Phi_{N-1} & +\Phi_{N} & = & \rho_{N-1} \\
& & & & & & \phi_{N-1} \\
& & & & & & \phi_{N-1}
\end{array}$$
(32)

¹¹Czytelnika odsyłamy do rozdziału 4.2 poświęconemu konstrukcji algorytmu SIMPLE.

Układ (32) zapiszemy w zwartej postaci równania macierzowego:

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b},\tag{33}$$

gdzie macierz **A** jest macierzą współczynników występujących przy wartościach węzłowych Φ z równania (32), a wektory **x** oraz **b** są N wymiarowymi wektorami, których składowe zdefiniowane są następująco: $x_i = \Phi_i$ dla wektora **x** oraz $b_i = \rho_i$ dla wektora **b**. Rozwińmy równanie (33), zapisując jawnie macierz **A** oraz wektory **x** i **b**:

$$\begin{bmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & 1 & -2 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & & 1 & -2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \vdots \\ \Phi_{N-1} \\ \Phi_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \\ \vdots \\ \rho_{N-1} \\ \rho_N \end{bmatrix}$$
(34)

Macierz A jest macierzą trójdiagonalną i zagadnieniem, jakie stawiamy w przypadku jednowymiarowego równania Poissona, jest numeryczne rozwiązanie układu równań liniowych (34) przy tej szczególnej postaci macierzy współczynników. Do rozwiązania układu (34) ze względu na dużą liczbę zer, zastosować można metodę Thomasa [3], czyli odpowiednio zmodyfikowaną metodę Gaussa dla trójdiagonalnej macierzy współczynników [2].

W przypadku dwuwymiarowym musimy rozwiązać równanie Poissona w postaci:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = -\rho(x, y). \tag{35}$$

Podobnie jak w przypadku jednowymiarowym, zapisujemy analog różnicowy korzystając ze schematu (17), co po prostych przekształceniach algebraicznych dla siatki kwadratowej¹² $\Delta x = \Delta y = h$, oraz przy oznaczeniu $\rho(i, j) = \rho_{i,j}$ pozwala zdefiniować pięciopunktowy analog różnicowy operatora Laplace'a ∇^2 na siatce kwadratowej [16, 32]

$$\nabla_{51}^2 \Phi\Big|_{i,j} = \Phi_{i+1,j} + \Phi_{i-1,j} + \Phi_{i,j+1} + \Phi_{i,j-1} - 4 \cdot \Phi_{i,j}.$$
(36)

W literaturze (np. [16]) spotyka się również analogi operatora Laplace'a więcej niż 5-cio punktowe, mające wyższy rząd dokładności przybliżenia na siatce różnicowej.

Wprowadźmy dodatkowe przybliżenie pierwszego rzędu biorąc do przybliżenia różnicowego punkty węzłowe położone na ukos względem wartości w której liczymy operator ∇^2 :

$$\nabla_{52}^2 \Phi\Big|_{i,j} = \Phi_{i+1,j+1} + \Phi_{i-1,j+1} + \Phi_{i+1,j-1} + \Phi_{i-1,j-1} - 4 \cdot \Phi_{i,j}.$$
(37)

 $^{^{12}}$ Wybór siatki kwadratowej pozwoli na eleganckie przedstawienie idei rozwiązania dwuwymiarowego równania Poissona. W dalszej części pokazane zostanie również w jaki sposób konstruować macierze współczynników dla dowolnych Δx oraz Δy

Analog różnicowy $\nabla_{52}^2|_{i,j} \Phi$ w kombinacji liniowej z $\nabla_{51}^2|_{i,j} \Phi$ tworzy schemat 9-punktowy gwarantujący większą dokładność przybliżenia na siatkach kwadratowych [16]:

$$\nabla_9^2\Big|_{i,j} = (1-\varepsilon) \left.\nabla_{51}^2\Big|_{i,j} + \varepsilon \left.\nabla_{52}^2\right|_{i,j}.$$
(38)

W zależności od wyboru współczynnika wagowego ε otrzymamy różny rozkład wag określających wpływ poszczególnych węzłów na numeryczną wartość operatora Laplace'a w punkcie i, j.



Rysunek 7: Dwa 5-cio punktowe operatory różnicowe $\nabla_{51}^2|_{i,j} \Phi$, $\nabla_{52}^2|_{i,j} \Phi$ i 9-cio punktowy operator różnicowy $\nabla_9^2|_{i,j} \Phi(\text{dla } \varepsilon = \frac{1}{4})$ Laplace'a dla siatki kwadratowej.

Na rysunku 7 zaznaczone zostały punkty węzłowe wykorzystane do wyliczenia wartości operatora Laplace'a wraz z odpowiednimi współczynnikami wagowymi.

Korzystając z pięciopunktowego analogu różnicowego operatora ∇^2 wyrażonej przez (36), równanie (35) zapiszemy w postaci dyskretnej:

$$\nabla_{51}^2 \Phi\Big|_{i,j} = \Phi_{i+1,j} + \Phi_{i-1,j} + \Phi_{i,j+1} + \Phi_{i,j-1} - 4 \cdot \Phi_{i,j} = h^2 \rho_{i,j}.$$
(39)

Podobna analiza jak w przypadku jednowymiarowym prowadzi do rzadkiej macierzy współczynników A. Równanie macierzowe przyjmie w przypadku dwuwymiarowym postać [2]:

$$\begin{bmatrix} -4 & 1 & 1 & & & \\ 1 & -4 & 1 & 1 & & \\ & 1 & -4 & 1 & 1 & & \\ & & & -4 & 1 & & 1 & \\ & & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 1 & & & 1 & -4 & 1 & & 1 \\ & 1 & & & 1 & -4 & 1 & & 1 \\ & & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & & 1 & -4 & 1 \\ & & & & & 1 & -4 & 1 \\ & & & & & 1 & -4 & 1 \\ & & & & & 1 & -4 & 1 \\ & & & & & 1 & -4 & 1 \\ & & & & & 1 & -4 & 1 \\ & & & & & 1 & -4 & 1 \\ & & & & & 1 & -4 & 1 \\ & & & & & 1 & -4 & 1 \\ & & & & & 1 & -4 & 1 \\ & & & & & 1 & -4 & 1 \\ & & & & & 1 & -4 & 1 \\ & & & & & 1 & -4 & 1 \\ & & & & & 1 & -4 & 1 \\ & & & & & & 1 & -4 & 1 \\ \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Phi_{1,1} \\ \Phi_{2,1} \\ \Phi_{3,1} \\ \vdots \\ \Phi_{I,2} \\ \vdots \\ \Phi_{I,J-1} \\ \Phi_{I,J} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h^2 \rho_{1,1} \\ h^2 \rho_{2,1} \\ h^2 \rho_{3,1} \\ \vdots \\ h^2 \rho_{1,2} \\ h^2 \rho_{I,J-1} \\ h^2 \rho_{I,J} \end{bmatrix} .$$
 (40)

Równanie macierzowe otrzymane w wyniku dyskretyzacji dwuwymiarowego równania Poissona można oczywiście rozwiązać przy pomocy metody eliminacji Gaussa. Jednak z uwagi na rozmiary oraz specyficzną budowę powstających macierzy rzadkich rozwiązywanie w ten sposób jest mało wydajne. Algorytm Gaussa złożoności $O(n^3)$, gdzie *n* jest rozmiarem macierzy, wydaje się w tym przypadku nie najlepszym wyborem, bo większość czasu obliczeniowego zostanie zmarnowana na miejsca, gdzie macierz współczynników wypełniona jest zerami. W przypadku macierzy rzadkich powstających w rachunku różnic skończonych używa się tzw. metod iteracyjnych rozwiązywania równań liniowych [2, 16, 40], których wprowadzeniem, analizą i porównaniem zajmiemy się w następnych podrozdziałach. Ścisłe i kompletne wyprowadzenie podanych schematów iteracyjnych, wraz z dowodami ich zbieżności, można znaleźć znajdzie w wymienionej wyżej literaturze tematu.

3.5.1 Metoda Jacobiego

Najprostszą metodą iteracyjną rozwiązania równania macierzowego (40) jest metoda iteracyjna Jacobiego [2]. Z różnicowej postaci równania Poissona (39) wyznaczmy wartość funkcji Φ w dowolonym¹³ punkcie węzłowym siatki kwadratowej ($\Delta x = \Delta y = h$) i, j:

$$\Phi_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{4} (\Phi_{i+1,j}^n + \Phi_{i-1,j}^n + \Phi_{i,j+1}^n + \Phi_{i,j-1}^n - h^2 \rho_{i,j}),$$
(41)

lub w ogólnym przypadku siatki prostokątnej ($\Delta x \neq \Delta y$):

$$\Phi_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} \right)^{-1} \cdot \left(\frac{1}{\Delta x^2} (\Phi_{i+1,j}^n + \Phi_{i-1,j}^n) + \frac{1}{\Delta y^2} (\Phi_{i,j+1}^n + \Phi_{i,j-1}^n) + \rho_{i,j} \right).$$
(42)

Korzystając z tak zdefiniowanego wzoru na wartość węzłową funkcji $\Phi_{i,j}$ przeprowadzamy procedurę iteracyjną wyliczając po kolei wartości funkcji w każdym węźle siatki obliczeniowej. Pokazano [2, 40], że proces taki jest zbieżny do prawidłowego rozwiązania - pola skalarnego Φ spełniającego dwuwymiarowe¹⁴ równanie Poissona. Proces iteracyjny wyznaczania wartości funkcji Φ kontynuujemy tak długo, jak długo nie spełniony jest warunek konwergencji:

$$\sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} \left| \Phi_{i,j}^{n+1} - \Phi_{i,j}^{n} \right| < \varepsilon,$$
(43)

gdzie ε jest stałą określającą dokładność rozwiązania. W praktyce stosuje się wartości bliskie zeru, np. $\varepsilon=0.002.$

Za warunki początkowe tak wprowadzonego procesu iteracyjnego wybrać możemy dowolną postać pola Φ^0 . Warto jednak znaleźć analityczny opis nawet uproszczonego modelu badanego zjawiska, gdyż start procedury iteracyjnej z przybliżonego stanu początkowego Φ^0 pozwala uzyskać żądaną konwergencję po dużo mniejszej liczbie iteracji.

3.5.2 Metoda Gaussa–Seidla

Metoda Jacobiego jest niezbyt efektywna ze względu na szybkość zbieżności procesu iteracyjnego [2]. Wprowadzone zostały więc modyfikacje mające na celu uzyskanie większej dokładności rozwiązania. Równanie na wartość węzłową zapiszemy w zmienionej postaci:

$$\Phi_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} \right)^{-1} \cdot \left(\frac{1}{\Delta x^2} (\Phi_{i+1,j}^n + \Phi_{i-1,j}^{n+1}) + \frac{1}{\Delta y^2} (\Phi_{i,j+1}^n + \Phi_{i,j-1}^{n+1}) + \rho_{i,j} \right), \quad (44)$$

 $^{^{13}{\}rm Podane}$ wyrażenie ma sens dla punktów węz
łowych nie leżących w bezpośrednim kontakcie z wartościami brzegowymi.

¹⁴Rozważania można łatwo uogólnić na trzy wymiary przestrzenne.

gdzie wartość $\Phi_{i,j}^{n+1}$ jest wyrażona również przez wyliczone wcześniej w procesie iteracji¹⁵ wartości pola Φ w punktach (i-1,j) oraz (i, j-1). Inne szczegóły procesu iteracyjnego pozostają takie same, jak było to w przypadku metody Jacobiego, a równanie (44) opisuje metodę iteracyjną Gaussa–Seidla.

3.5.3 Metoda sukcesywnej nadrelaksacji (SOR)

Kolejnym krokiem przyspieszającym proces iteracyjny rozwiązania równania Poissona jest zastosowanie tzw. sukcesywnej nadrelaksacji otrzymanego rozwiązania [2, 40]. Wprowadźmy za [2] parametr wagowy ω :

$$\Phi_{i,j}^{n+1} = (1-\omega) \cdot \Phi_{i,j}^{n} + \omega \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} \right)^{-1} \cdot \left(\frac{1}{\Delta x^2} (\Phi_{i+1,j}^n + \Phi_{i-1,j}^{n+1}) + \frac{1}{\Delta y^2} (\Phi_{i,j+1}^n + \Phi_{i,j-1}^{n+1}) + \rho_{i,j} \right).$$
(45)

W zależności od wyboru parametru ω mamy do czynienia z podrelaksacją rozwiązania ($\omega < 1$) lub nadrelaksacją rozwiązania $\omega > 1$. W przypadku $\omega = 1$ równanie (45) przyjmuje postać równania dla metody Gaussa–Seidla (44). Wybór wielkości parametru ω nie jest jednoznaczny i zawiera się w przedziale (0,2). Optymalną wartość ω w przypadku sieci kwadratowej dla metody SOR wyznaczyć można ze wzoru [2]:

$$\omega_{opt} = 2\left(1 + \frac{\pi}{N}\right)^{-1},\tag{46}$$

gdzie N jest liczbą kolumn siatki obliczeniowej. W praktyce wartość tego parametru dobrać można sprawdzając szybkość zbieżności dla różnych wartości używając równania (46) do ich wstępnego oszacowania.

3.5.4 Porównanie zbieżności metod iteracyjnych

W tym podrozdziale przeprowadzimy numeryczny eksperyment badający zbieżność wprowadzonych metod iteracyjnych rozwiązania dwuwymiarowego równania Poissona (35). Pozwoli nam to przekonać się o faktycznych zaletach wprowadzanych komplikacji do wyjściowej, najprostszej metody Jacobiego.

Chcemy znaleźć funkcję prądu cieczy z wirowością wyznaczającą rozkład źródeł w równaniu Poissona [40]. Wirowość definiujemy przez rotację wektora prędkości lokalnej cieczy:

$$\xi = \nabla \times \mathbf{u}.\tag{47}$$

Funkcję prądu za [16, 40] definiujemy zgodnie ze wzorem

$$\nabla \times \Psi = \mathbf{u}.\tag{48}$$

W prowadzone zagadnienie można uprościć do dwóch wymiarów przestrzennych przez założenie Ψ oraz ξ postaci:

 $^{^{15}\}mathrm{We}$ wzorze (44) zakładamy kierunek iteracji od lewej do prawej i od dołu do góry.



Rysunek 8: Zagadnienie przykładowe użyte do testów rozwiązań numerycznych równania Poissona w dwóch wymiarach.

$\xi = (0, 0, \xi),$ $\Psi = (0, 0, \Psi),$

co po wykonaniu kilku prostych operacji na równaniach (47) oraz (48) pozwala wyprowadzić związek między wirowością ξ , a funkcją prądu cieczy ξ , wyrażoną równaniem Poissona postaci [40]:

$$\nabla^2 \Psi = -\xi. \tag{49}$$

Równanie (49) rozwiążemy przy pomocy wprowadzonych wyżej metod, korzystając z siatki różnicowej typu Eulera o rozdzielczości NxN komórek, zakładając warunki brzegowe dla funkcji prądu Ψ w postaci:

$$i = 1 \dots N \land (j = 0 \lor j = N)$$

$$\lor \qquad \implies \Psi(i, j) = 0$$
(50)
$$j = 1 \dots N \land (i = 0 \lor i = N)$$

Dodatkowo w centrum układu umieścimy punktowe źródło wirowości otoczone brzegiem na którym $\Psi(i, j) = 0$ z charakterystyczną szczeliną, gdzie funkcja prądu nie jest ustalona. Na rysunku 8 pokazany został schemat układu, który będziemy rozwiązywać.

Na rysunku 9 prezentujemy rozwiązanie równania Poissona przy pomocy metody sukcesywnej nadrelaksacji po 71 krokach iteracji uzyskane z konwergencją mniejszą niż 10^{-8} . Rozwiązanie z taką dokładnością uznać możemy za wzorcowe.

W celu porównania zbieżności różnych metod iteracyjnych przeprowadzimy test polegający na wyliczaniu konwergencji wg wzoru (43).

Wyniki takiego pomiaru dla trzech metod zebrane zostały na rysunku 10. Widzimy wyraźnie, że zbieżność metody sukcesywnej nadrelaksacji do wyniku wzorcowego jest najszybsza. Metoda Jacobiego nie jest nawet w stanie w rozsądnym czasie osiągnąć zbieżności dla tak



Rysunek 9: Rozkład funkcji prądu pochodzący od punktowego źródła wirowości w pudle ze szczeliną. Rozwiązanie numeryczne zagadnienia Poissona metodą sukcesywnej nadrelaksacji (SOR). Siatka obliczeniowa 60×60 , krok $\Delta x = 0.1$, $\omega = 1.8$.



Rysunek 10: Wykres zbieżności rozwiązania Ψ wyznaczony dla różnych metod iteracyjnych.

prostego zagadnienia. Tymczasem metoda Gaussa-Seidla osiąga dużo lepszą zbieżność, jednak nadal krzywa opisująca bezwzględne odchylenie od wartości wzorcowej maleje dość powoli. Początkowe, duże wartości konwergencji dla metod SOR i Gaussa–Seidla są wyrazem szybkiej zmiany rozwiązania w początkowej fazie obliczeń.

Zastanawiający w wynikach przedstawionych na rysunku 10 są niewielkie różnice względne między wartościami odchyleń dla różnych schematów iteracyjnych. Dla wybranej metody liczenia konwergencji jedynie schemat SOR wykazuje względnie poprawną zależność pomiędzy wartością konwergencji, a uzyskiwanym rezultatem obliczeń.

Okazuje się, jak pokazano to na rysunku 11, że różnice pomiędzy omawianymi metoda-



Rysunek 11: Rozwiązanie sytuacji modelowej dla trzech różnych kroków iteracyjnych (góra-dół) oraz metod Jacobiego, Gaussa–Seidla oraz SOR.



Rysunek 12: Porównanie zbieżności metody SOR dla różnych wartości parametru ω . Po prawej stronie przedstawiamy przeskalowaną - najbardziej interesującą część wykresu.

mi, dla tych samych kroków iteracyjnych są znaczące. Na rysunku pokazana została ewolucja rozwiązania równania przy pomocy wprowadzonych metod - dla porównania ułożone w kolejności: krok iteracji (góra - dół), metoda (lewo - prawo). Na rysunku widać wyraźnie, że metoda sukcesywnej nadrelaksacji (SOR) już po kilku krokach obliczeniowych daje wyniki, które przy pomocy metody Gaussa–Seidla osiągnąć można po kilkunastu i więcej krokach. W ostatnim 25 kroku iteracji metoda SOR dała wynik zbieżny z wzorcowym, tymczasem dwie pozostałe metody - nadal nie. Wynik ten zgodny jest z wykresem 10, gdzie dla kroku 25 iteracji widać dość znaczne różnice pomiędzy różnymi metodami.

Biorąc pod uwagę wyniki przedstawione na wykresach 10 oraz 11 w dalszej części pracy używać będziemy metody sukcesywnej nadrelaksacji. Z uwagi na dużą złożoność obliczeniową procesu rozwiązywania równań Naviera–Stokesa oraz potrzebę dokładnego rozwiązania równania Poissona (ciśnienie odgrywać będzie ważną rolę w procesie symulacji) - przeanalizujemy wpływ parametru ω na zbieżność i konwergencję tej metody.

Na wykresie (12) naszkicowane zostały zbieżności rozwiązań iteracyjnych dla obliczeń przeprowadzonych dla różnych wartości parametru nadrelaksacji. Widać wyraźnie, że wartość optymalna $\omega_{opt} \approx 1.9$ wyliczona ze wzoru (46) dla siatki 60 × 60 zgadza się dość dobrze z rezultatem badań zbieżności metody SOR przeprowadzonych w tym rozdziale, który wynosi $\omega = 1.8$

4 Rozwiązanie iteracyjne

W tym rozdziale wprowadzimy metodę pozwalającą rozwiązać numerycznie równania Naviera– Stokesa dla cieczy nieściśliwej bez powierzchni swobodnej. Korzystając z omówionych wcześniej metod numerycznych, przedstawimy schemat konstrukcji oraz algorytm SIMPLE. Następnie, po omówieniu sposobu uwzględnienia warunków brzegowych we wprowadzonym algorytmie, przeprowadzimy pierwsze testy sprawdzające poprawność kodu obliczeniowego.

W roku 1972 S. Patankar i D. Spalding wprowadzili metodę SIMPLE¹⁶ [39] iteracyjnego rozwiązania równań Naviera–Stokesa. Metoda ta zostanie wykorzystana do rozwiązania problemów dynamiki cieczy nieściśliwej bez powierzchni swobodnej, a w następnych rozdziałach zajmiemy się jej rozszerzeniem o śledzenie i uwzględnianie powierzchni swobodnej cieczy.

4.1 Metoda korekcji ciśnienia

Celem obliczeń jest, dla zadanych warunków początkowych $\mathbf{u}^n(\mathbf{r})$ oraz $p^n(\mathbf{r})$, wyznaczenie pól prędkości $\mathbf{u}^{n+1}(\mathbf{r})$ oraz ciśnienia znormalizowanego $p^{n+1}(\mathbf{r})$ w kolejnym kroku czasowym. W przypadku cieczy nieściśliwej, dla której kompletny opis dynamiki cieczy dany jest przez równania Naviera–Stokesa w formie zachowawczej (6) i (7), często spotykanym podejściem do rozwiązania zagadnienia są tzw. metody iteracyjne na ciśnienie. W celu wyprowadzenia prostego związku ciśnienia z prędkością działamy operatorem ∇ na równanie (6), co przy wykorzystaniu przemienności operatorów $\frac{\partial}{\partial t}$ i ∇ daje następujące wyrażenie [16]:

$$\nabla^2 p = -\nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}. \tag{51}$$

Równanie (51) pozwala obliczyć pole ciśnień p dla znanego rozkładu prędkości **u**. W praktyce jednak wygodniejsze okazuje się postępowanie odwrotne (będące głównym założeniem metod korekcji ciśnienia, w tym metody SIMPLE [16, 39]) w którym zakłada się początkową, tzw. próbną postać pola ciśnienia p^* . Następnie przy pomocy dyskretnej postaci równań (11) oraz (12) wyliczona zostaje odpowiadająca ciśnieniu p^* prędkość próbna \mathbf{u}^* . Z uwagi na "próbny" charakter ciśnienia p^* , gdzie poszczególne wartości węzłowe zostały odgadnięte¹⁷, w pierwszym kroku wyliczone prędkości \mathbf{u}^* prawie na pewno nie będą spełniać równania ciągłości dla cieczy nieściśliwej (10). Przy pomocy równania (51) wyznaczamy nowe wartości węzłowe pola ciśnienia przyjmując $\mathbf{u} = \mathbf{u}^*$. Cykliczne powtarzanie tego procesu pozwoli uzyskać, w kolejnych krokach iteracji, pola prędkości coraz bliższe rozwiązaniu, dla którego spełnione jest równanie ciągłości. Przy założeniu, że żądana dokładność osiągnięta została w n + 1 kroku iteracji, wprowadzić możemy poprawki do prędkości \mathbf{u}' :

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* + \mathbf{u}',\tag{52}$$

oraz do ciśnienia [16]:

$$\nabla p^{n+1} = \nabla p^* + \nabla p'. \tag{53}$$

Pola ciśnienia p^{n+1} oraz prędkości \mathbf{u}^{n+1} wyrażone przez wartości próbne oraz odpowiednie poprawki, spełniają równania Naviera–Stokesa dla cieczy nieściśliwej. Przedstawione wyżej postępowanie stanowić będzie podstawę do wyprowadzenia algorytmu SIMPLE.

¹⁶ang. Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations

 $^{^{17}{\}rm W}$ dalszych krokach iteracji za ciśnienie próbne p^* przyjmuje się rozkład pochodzący z poprzedniego kroku czasowego.

4.2 Metoda SIMPLE

W celu konstrukcji algorytmu obliczeniowego wykorzystującego iteracyjną metodę poprawiania ciśnienia, podstawmy wielkości z n + 1 kroku czasowego wyrażone równaniami (52) oraz (53) do układu równań Naviera–Stokesa (6) oraz (7) przyjmując $\mathbf{u} = \mathbf{u}^{n+1}$, $p = p^{n+1}$. Po kilku przekształceniach¹⁸ otrzymujemy związek pomiędzy poprawką do ciśnienia, a prędkością próbną:

$$\nabla^2 p' = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^* \tag{54}$$

Z równania (54) widać, że w przypadku pola prędkości próbnej spełniającego równanie ciągłości poprawka do ciśnienia znika, co kończy proces iteracyjny. W praktyce przyjmuje się możliwe pewne względne odchylenia od tego warunku, jednak na tyle małe, by osiągnąć zbieżny proces iteracyjny.



Rysunek 13: Obszary kontrolne całkowania równań dynamiki cieczy: a) dla kierunku x, b) dla kierunku y.

W celu konstrukcji schematu SIMPLE wprowadźmy tzw. obszar kontrolny jak pokazano to na rysunku 13, dla którego przeprowadzona zostanie dyskretyzacja równań Naviera–Stokesa z użyciem schematów z poprzedniego rozdziału. Wykorzystamy notację użytą w [16, 39] zapisując równania dynamiki (11) oraz (12) w postaci

$$a_{uc}u_c = \sum_{\mu}^{e,w,n,s} a_{\mu}u_{\mu} + b + (p_p - p_e)A_e,$$
(55)

$$a_{vc}v_c = \sum_{\nu}^{e,w,n,s} a_{\nu}v_{\nu} + b + (p_p - p_n)A_n,$$
(56)

gdzie $A_e = \Delta x$ oraz $A_n = \Delta y$ są rozmiarami ścian obszarów kontrolnych¹⁹.

 $^{^{18}}$ Szczegóły wspomnianych wyprowadzeń można znaleźć m.in. w [3, 16, 39].

 $^{^{19}}$ W przypadku trój
wymiarowym przykładowo współczynnik $A_n=\Delta x\cdot\Delta z$ jest polem powierz
chni ściany obszaru kontrolnego.

W równaniu (55) współczynniki a_{μ} są równe:

$$a_e = a_w = \nu \frac{\Delta y}{\Delta x}, \qquad a_n = \nu \frac{\Delta x}{\Delta y} - \frac{1}{2} v_n \Delta x, \qquad a_s = \nu \frac{\Delta x}{\Delta y} - \frac{1}{2} v_s \Delta x, \qquad a_u = u_e \Delta y,$$

 $a_{uc} = a_e + a_w + a_n + a_s + a_u + b.$

Podobnie w równaniu (56) dla kierunku y:

$$a_e = \nu \frac{\Delta y}{\Delta x} - \frac{1}{2} u_e \Delta y, \qquad a_w = \nu \frac{\Delta y}{\Delta x} + \frac{1}{2} u_w \Delta y \qquad a_n = a_s = \nu \frac{\Delta x}{\Delta y}, \qquad a_v = v_n \Delta x,$$

$$a_{vc} = a_e + a_w + a_n + a_s + a_v + b,$$

gdzie:

$$b = \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t}.$$

Podana wyżej postać współczynników występujących w równaniach (55) oraz (56) wynika bezpośrednio z dyskretyzacji członów różniczkowych równań Naviera–Stokesa z użyciem pokazanego na rysunku 13 obszaru kontrolnego [16, 38].

Do wielkości próbnych p^* oraz u^* równania (55) oraz (56) przyjmą postać:

$$a_{uc}u_c^* = \sum_{\mu}^{e,w,n,s} a_{\mu}u_{\mu}^* + b + (p_p^* - p_e^*)A_e,$$
(57)

$$a_{vc}v_c^* = \sum_{\nu}^{e,w,n,s} a_{\nu}v_{\nu}^* + b + (p_p^* - p_n^*)A_n.$$
(58)

W celu wyznaczenia poprawek do prędkości, odpowiadających wprowadzonemu rozkładowi próbnego pola ciśnienia, użyjemy wzoru na ciśnienie skorygowane, będące sumą ciśnienia próbnego p^* oraz poprawki p':

$$p = p^* + p'. \tag{59}$$

Po podstawieniu równania (59) oraz równań na poprawki prędkości (52) do (55) oraz do (56) i odjęciu stronami równań (57) i (58), otrzymamy następujące wyrażenia na poprawki do prędkości próbnych [16]:

$$a_{uc}u'_{c} = \sum_{\mu}^{e,w,n,s} a_{\mu}u'_{\mu} + (p'_{p} - p'_{e})A_{e},$$
(60)

$$a_{\nu c}v_{c}' = \sum_{\nu}^{e,w,n,s} a_{\nu}v_{\nu}' + (p_{p}' - p_{n}')A_{n}.$$
(61)

Wyliczanie poprawek do prędkości byłoby zadaniem trudnym ze względu na wyrazy pod znakiem sumowania występujące w powyższych równaniach. W literaturze omawiającej metodę SIMPLE [16, 38, 39] odrzuca się te wyrazy, a uproszczenie to nie wpływa w żaden sposób na końcowe rozwiązanie procesu iteracyjnego [38]. Otrzymujemy więc następujące wyrażenia na poprawki prędkości:

$$u'_{c} = \frac{A_{e}}{a_{uc}}(p'_{p} - p'_{e}), \tag{62}$$

$$v'_{c} = \frac{A_{n}}{a_{vc}}(p'_{p} - p'_{n}).$$
(63)

4.2.1 Algorytm obliczeniowy

Wyprowadzone w poprzednim podrozdziale zależności pomiędzy prędkościami i ciśnieniem, ich wartościami próbnymi oraz poprawkami pozwoli nam zapisać kolejne kroki algorytmu obliczeniowego metody SIMPLE [38]:

- a) wyznaczenie początkowych (wstępnych) wartości węzłowych pola p^* ,
- b) wyliczenie prędkości u^* oraz v^* odpowiadających ciśnieniu próbnemu przy pomocy pełnych równań dynamiki (55) oraz (56),
- c) rozwiązanie równania Poissona (54) na poprawkę p' do ciśnienia,
- d) obliczenie nowego ciśnienia p przy pomocy wzoru (59),
- e) wyznaczenie nowych wartości uora
zvz równania (52) przy użyciu (62) oraz (63) do wyliczenia wartości
 u'iv'.
- f) kontynuacja procesu iteracyjnego tak długo jak $\nabla\cdot{\bf u}>\varepsilon_s$ za ciśnienie próbne przyjmując $p^*=p$

4.2.2 Kryteria stabilności

Warunki stabilności nakładają ograniczenie na krok czasowy Δt użyty w schemacie numerycznym. Ich spełnienie w każdym kroku czasowym gwarantuje otrzymanie stabilnego rozwiązania [11, 35].

Podstawowym kryterium stabilności jest często występujące w literaturze dotyczącej obliczeń numerycznych tzw. kryterium *Couranta-Friedrichsa-Levy'ego* (CFL) [11]:

$$\Delta t < \frac{\Delta \tau}{|\mathbf{u}|},\tag{64}$$

gdzie $\Delta \tau = {\Delta x, \Delta y}$ jest rozmiarem siatki obliczeniowej w odpowiednim kierunku, $|\mathbf{u}|$ jest długością wektora prędkości²⁰. Równanie (64) posiada prostą interpretację: w jednym kroku czasowym przepływ elementu cieczy wyrażony przez prędkość $|\mathbf{u}|$ nie może przenieść właściwości cieczy o więcej niż jedną komórkę obliczeniową. W przypadku cieczy opisywanej z

 $^{^{20}{\}rm Kryterium}$ CFL można również wyrazić przez uwzględnienie osobno kolejnych składowych wektora prędkości, zamiast jego długości.

uwzględnieniem członu lepkościowego, wprowadza się również dyfuzyjny warunek stabilności [15, 35, 48], który za zapiszemy w postaci:

$$\Delta t < \frac{1}{2} \frac{\Delta x^2 \Delta y^2}{\Delta x^2 + \Delta y^2} \frac{Re}{2}.$$
(65)

Kryterium stabilności (65) wynika z jawnej dyskretyzacji równań Naviera–Stokesa i opisuje lokalne kryterium stabilności von Neumanna [35].

4.2.3 Zmienny krok czasowy

W celu zapewnienia stabilności rozwiązania różnicowego stosujemy technikę zmiennego kroku czasowego [35]. Używając kryteriów stabilności wyprowadzonych w poprzednim podrozdziale zapiszemy wyrażenia na maksymalny krok czasowy dla każdego z wymienionych kryteriów. Następnie zmodyfikujemy procedurę numeryczną tak, by wykonywała poszczególne kroki iteracyjne nie przekraczając zadanych kryteriów stabilności. W praktyce do kryterium CFL wyrażonego wzorem (64) wprowadza się parametr wzmacniający λ_{CFL} :

$$\Delta t_u = \lambda_{CFL} \cdot \frac{\Delta x}{|u_{max}|},\tag{66}$$

$$\Delta t_v = \lambda_{CFL} \cdot \frac{\Delta y}{|v_{max}|},\tag{67}$$

gdzie $0 < \lambda_{CFL} \leq 1$. Modyfikując parametr λ_{CFL} możemy wpłynąć na wielkość kroku czasowego w przeprowadzanych obliczeniach, gdyż kryterium CFL pomimo, że jest koniecznym, nie zawsze jest wystarczającym warunkiem stabilności rozwiązania numerycznego [15]. Podobnie zapiszemy wzorem wyrażenie na maksymalny krok czasowy spełniający kryterium von Neumanna (65):

$$\Delta t_{Re} = \frac{1}{2} \frac{\Delta x^2 \Delta y^2}{\Delta x^2 + \Delta y^2} \frac{Re}{2}.$$
(68)

Korzystając z (66), (67) i (68) zapisać możemy wyrażenie na maksymalny stabilny krok czasowy symulacji przepływu z uwzględnieniem lepkości cieczy:

$$\Delta t_{max} = \lambda \cdot \min\{\Delta t_u, \Delta t_v, \Delta t_{Re}\},\tag{69}$$

gdzie $0 < \lambda \leq 1$ jest parametrem wzmacniającym zadane kryterium stabilności. Spełnienie kryterium wyrażonego wzorem (69) postulujemy dla każdego kroku czasowego i dla wszystkich prędkości u oraz v siatki obliczeniowej. Wprowadźmy oznaczenia: Δt_{max} - maksymalny rozmiar kroku czasowego wyliczony z równania (69), Δt - krok czasowy symulacji. Pomiędzy dwoma krokami iteracyjnymi w celu spełnienia warunku stabilności należy wykonać następujące czynności:

- a) oblicz Δt_{max} , z wzoru (69)
- b) czy $\Delta t \leq \Delta t_{max}$, jeśli tak: $\Delta t = \Delta t \cdot 2$, jeśli nie: $\Delta t = \Delta t/2$

Procedura powyższa jest jedną z najprostszych implementacji techniki zmiennego kroku czasowego. Jedną z potrzebnych w dalszej części pracy cech algorytmu SIMPLE będzie niezmienność kroku czasowego na poziomie jednej iteracji algorytmu. Poszczególne kroki algorytmu metody SIMPLE będą wtedy wykonywane kilka razy, a liczba wywołań zależeć będzie od rozmiaru kroku czasowego (czyli więcej wywołań dla zmniejszonego przez kryteria stabilności kroku czasowego Δt).

4.3 Walidacja kodu SIMPLE

W celu sprawdzenia poprawności proponowanej procedury numerycznej opartej na schemacie iteracyjnym i metodzie SIMPLE przeprowadzimy symulację dwóch standardowych problemów dynamiki cieczy, dla których znane są wyniki analityczne lub dokładne rozwiązania numeryczne. Rozwiązanie zagadnień *Driven-Lid Cavity flow* oraz *Couette flow* pozwoli sprawdzić wprowadzony w poprzednim podrozdziale algorytm numerycznego rozwiązania równań przepływu.

4.3.1 Driven-Lid Cavity flow

Pierwszym z problemów, którego rozwiązaniem się zajmiemy jest Driven-Lid Cavity flow, czyli rozwiązanie problemu zachowania się cieczy nieściśliwej w dwóch wymiarach przestrzennych wewnątrz kwadratowej komory. Zakładamy, że z czterech ścian ograniczających cały układ, górna porusza się z prędkością poziomą $u = u_0 = const$, jak zaznaczono to na rysunku 14. Nasze wyniki kodu numerycznego porównamy m.in. do danych uzyskanych w oparciu o metody niejawne i spektralne [6].



Rysunek 14: Model przepływu cieczy przez komorę, której górna ściana porusza się ze stałą prędkością poziomą $u=u_0$

Symulację problemu zdefiniowanego jak na rysunku 14 przeprowadzimy na siatce obliczeniowej o rozmiarze 81×81 , kierując się warunkami zadanymi przez pracę [6].

Na rysunku 15 narysowane zostały tzw. linie prądu dla rozwiązania zagadnienia *Driven Cavity* przy liczbach kryterialnych Re = 400 oraz Re = 5000 metodą SIMPLE opisaną w poprzednich podrozdziałach. Ze względu na to, że metoda, którą omawiamy, używa do opisu zmiennych prymitywnych u, v, p, konieczne było wyliczenie funkcji prądu Ψ z równania Poissona (48), wcześniej wyznaczając numerycznie rozkład wirowości wprost z równania (47). Dzięki temu podejściu mogliśmy bezpośrednio narysować linie prądu - czyli linie określające stałą wartość funkcji prądu, jak pokazano na rysunku 16. Widać wyraźnie, że osiągnięta zgodność z wynikiem literaturowym dla dwóch różnych liczb Reynoldsa jest bardzo dobra, a niewielkie odstępstwa wynikają z niedokładności numerycznych procedur wyliczania funkcji prądu i wirowości na brzegach obszaru. Pokazane na rysunku 15 wyniki dla różnych liczb Reynoldsa wykazują zgodność z wynikami literaturowymi [6, 34, 50].



Rysunek 15: Obliczenia (strona lewa), wynik z [6] (strona prawa) Re = 400 (góra), Re = 5000 (dół), siatka 81×81 , $\Delta x = \Delta y = \frac{1}{81}$



Rysunek 16: Wartości prędkości poziomych na linii x = 0.5 (strona lewa) oraz pionowych na linii y = 0.5 (strona prawa) dla metody SIMPLE przy użyciu schematów konwekcyjnych: centralnego i "pod prąd". Porównanie z obliczeniami [6], dla: $Re = 5000, 81 \times 81, \Delta x = \Delta y = \frac{1}{81}$.

Dodatkowo w celu dokładniejszego zbadania poprawności otrzymanego rezultatu, na wykresie 16 zaznaczony został profil prędkości poziomej dla linii x = 0.5 oraz prędkości pionowej na prostej y = 0.5. Obliczenia przeprowadzone zostały dla liczby Re = 5000 przy pomocy dwóch schematów dyskretyzacji członów konwekcyjnych - centralnego oraz "pod prąd". Na wykresie widać, że otrzymane rezultaty odbiegają nieznacznie od wyników przedstawionych w [6], oraz że większą dokładność otrzymaliśmy przez symulację z całkowaniem centralnym członu konwekcji. Okazuje się, że sztuczna dyfuzja wprowadzana do rozwiązania numerycznego przez schemat różnicowy "pod prąd" jest na tyle duża, że wygładza znacznie otrzymywane rezultaty. Minima, oraz maksima prędkości poziomej w przypadku schematu "pod prąd" odbiegają znacznie bardziej, od wartości "dokładnej", niż w przypadku metody centralnej. Należy zwrócić uwagę, że schemat centralny nie wprowadził do rozwiązania efektów oscylacyjnych. W przypadku wystąpienia oscylacji metoda "pod prąd" byłaby dużo bardziej efektywna od schematu centralnego.

4.3.2 Couette Flow

Drugim problemem, który rozpatrzymy, jest dwuwymiarowy przepływ cieczy pomiędzy dwoma ograniczającymi ścianami (górna i dolna), z których jedna porusza się ze stałą prędkością $u = u_e$ [33]. Zagadnienie to zostało przedstawione na rysunku 17.



Rysunek 17: Zagadnienie przepływu przez obszar ograniczony ścianką nieruchomą (ściana dolna u = 0) oraz ścianką ruchomą (ściana górna $u = u_0$).

Celem obliczeń jest wyznaczenie profilu prędkości u pomiędzy ścianami ograniczającymi przepływ. Zagadnienie to wybrane zostało ze względu na znane rozwiązanie analityczne, które pozwoli zweryfikować kod numeryczny implementujący metodę SIMPLE [3]:

$$u(y) = \frac{u_0}{D} \cdot y,\tag{70}$$

gdzie u(y) jest szukanym rozkładem prędkości poziomej pomiędzy ściankami ograniczającymi, y jest odległością od ścianki dolnej, D jest odległością pomiędzy ściankami, a ścianka górna porusza się z prędkością $u = u_0$. Rozwiązanie analityczne (70) uzyskane zostało przy zastosowaniu szeregu uproszczeń wyjściowego modelu [3, 33].

W celu przeprowadzenia symulacji rozwiązującej problem przedstawiony powyżej, założyliśmy następujące warunki brzegowe: dla ściany górnej zakładamy stałą prędkość poziomą u = 1.0, dla ściany dolnej obie składowe prędkości są równe zeru (przepływ bez poślizgu). W przypadku lewej ściany ograniczającej przepływ zakładamy tzw. warunek swobodnego wpływu cieczy (*inflow*), a na ścianie prawej tzw. warunek wypływu cieczy (*outflow*). Warunki te jednoznacznie wyrażone są przez równania:

$$u = 1.0, \quad v = 0$$
 ścianka górna,

$$u = 0, \quad v = 0$$
 ścianka dolna,

$$p = 0, \quad u = \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad v = 0$$
ścianka lewa (inflow),

$$p = 0, \quad u = \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad u = \frac{\partial v}{\partial x} = 0$$
ścianka prawa (outflow).
(71)

Przeprowadzona została symulacja problemu *Couette Flow* dla obszaru podzielonego na 40x20 komórek dla liczby Re = 100. W rozwiązaniu analitycznym postaci (70) przyjmujemy D = 1, przyjmując również poziomy rozmiar obszaru symulacji za równy 2. W celu pokazania zbieżności otrzymywanego rezultatu, zebrane zostały wyniki reprezentujące profil prędkości poziomej na pionowej linii przecinającej obszar symulacji w dowolnym punkcie²¹ na osi x, dla różnych kroków iteracji metody SIMPLE.



Rysunek 18: Profil prędkości poziomej dla problemu Couette Flow dla Re = 100. Rozwiązanie dla różnej liczby iteracji k. Rozwiązanie dla k = 4000 zgodne z analitycznym.

Na wykresie 18 przedstawione zostały wyniki przeprowadzonych obliczeń. Widać wyraźnie, że rozwiązanie numeryczne zbiega w kolejnych krokach czasowych do rozwiązania analitycznego, uzyskując charakter stacjonarny około k = 4000 kroku iteracyjnego. Dość duża liczba kroków iteracyjnych potrzebnych do uzyskania wyniku dokładnego jest konsekwencją przyjęcia dość niskiej liczby Re wprowadzającej dyfuzję spowalniającą szybkość zmian prędkości w procesie obliczeniowym.

W przypadku badanego przepływu, którego rozwiązanie analityczne znamy, dość interesującym przypadkiem będzie start symulacji z losowego rozkładu pola prędkości pionowej v. Oczekujemy bowiem [27, 33], że dla dowolnie zadanego rozkładu pola v powinno ono zostać wyzerowane, a niezależnie od tego pole prędkości poziomej zbiegać powinno do wyniku, jak pokazano na wykresie 18.

Na rysunku 19 pokazane zostały wykresy prędkości poziomej i pionowej w obrębie całej siatki obliczeniowej dla przypadku losowego rozkładu prędkości pionowej v. Należy zwrócić uwagę, że skale osi z na poszczególnych krokach iteracyjnych przy wynikach dla prędkości pionowej są różne od siebie nawet o kilka rzędów. Widać wyraźnie, że zgodnie z rozwiązaniem analitycznym pole prędkości pionowej nie wykazuje odstępstw od zera w całym obszarze. Widoczne fluktuacje na poziomie $v = 10^{-16}$ można przyjąć za wynik ograniczonej dokładności liczb w zapisie numerycznym. Dodatkowo test ten pokazał, że otrzymujemy jednolite rozwiązanie w obrębie całego obszaru symulacji, co również jest zgodne z rozwiązaniem analitycznym i dodatkowo weryfikuje kod numeryczny użyty do obliczeń.

²¹Z uwagi na jednowymiarowy charakter zjawiska wybór punktu do reprezentacji wyników nie ma znaczenia.



Rysunek 19: Wykresy prędkości poziomej (kolumna lewa) oraz prędkości pionowej (kolumna prawa) dla losowego rozkładu prędkości v w pierwszym kroku czasowym.

5 Powierzchnia Swobodna Cieczy

W celu symulacji powierzchni swobodnej skonstruować należy metodę jej śledzenia, pozwalającą na uwzględnienie specyficznych warunków brzegowych nakładanych na granicy dwóch ośrodków. Zadanie to jest bardzo skomplikowane, gdyż mamy do czynienia z zagadnieniem warunków brzegowych dla brzegów poruszających się. W zakresie zjawisk omawianych w niniejszej pracy, za [11, 38, 48] ograniczymy rozważania do przypadku cieczy znajdującej się w zbiorniku wypełnionym próżnią. Do śledzenia powierzchni swobodnej wybrany został algorytm MAC, który z jednej strony pozwolił na dokładną reprezentację geometrii cieczy na siatce różnicowej typu Eulera, a z drugiej pozwolił na efektywną symulację jej zmian.

Z uwagi na skomplikowane zachowanie powierzchni swobodnej (występowanie zjawisk takich jak rozbryzgi, łamanie się fal [31, 40]), w literaturze spotkać można wiele metod pozwalających na jej reprezentację, posiadających różne cechy i zastosowania [23]. Historycznie, pionierska praca omawiająca zagadnienia symulacji cieczy z powierzchnią swobodną była [21], gdzie F. Harlow i E. Welch z grupy T-3 laboratorium w Los Alamos zaprezentowali pierwszą postać metody cząstek znaczonych (ang. The MAC Method), wprowadzającej do algorytmu obliczeniowego bezmasowe cząstki reprezentujące geometrię cieczy na siatce obliczeniowej. Cząstki te używane są do wyznaczania obszarów zajętych przez ciecz, co pozwala odpowiednio oznaczyć komórki siatki obliczeniowej: jako pełne, puste lub powierzchniowe. Następnie w każdym kroku symulacji korzystając z oznaczeń siatki obliczeniowej nakładane są odpowiednie warunki brzegowe na komórki oznaczone jako powierzchniowe. Metoda MAC, dzięki swojej uniwersalności, była używana i rozwijana przez wiele lat ewoluując do postaci spotykanej dziś [10, 35]. Jednym z ograniczeń, jakie niosła ona ze sobą, było ogromne zapotrzebowanie na pamieć operacyjna oraz moc obliczeniową, której z trudem sprostać mogły ówczesne komputery. Naturalną konsekwencją tych ograniczeń było powstanie metod próbujących zmniejszyć zapotrzebowanie na zasoby komputera. Pojawiły się na przykład podejścia ograniczające występowanie cząstek tylko w miejscach szczególnie interesujących ze względu na charakter badanych zjawisk lub tylko przy powierzchni swobodnej cieczy [8, 4].

Metody śledzenia powierzchni cieczy ewoluowały również w kierunku kompletnej eliminacji cząstek znaczonych, jako nośnika informacji o geometrii cieczy - takich jak metoda VOF (*ang. Volume-of-Fluid*) [22, 37]. W metodach opartych na VOF, do reprezentacji cieczy konstruuje się dodatkowe pole skalarne o rozdzielczości takiej jak siatka użyta do symulacji. Pole to zawiera wartości nie-całkowite od 0 do 1, gdzie 0 oznacza brak cieczy w komórce, a 1 komórkę wypełnioną cieczą. Tego typu opis wydaje się być dużo wygodniejszy od metody MAC ze względu na brak potrzeby wprowadzania dodatkowych obiektów do algorytmu (takich jak cząstki znaczone). Największą niedogodnością metod VOF jest jednak rekonstrukcja powierzchni cieczy z dostępnych danych (pole skalarne) [23].

Dla potrzeb niniejszej pracy, do reprezentacji powierzchni swobodnej cieczy, wybrana została metoda cząstek znaczonych - będąca dobrym kompromisem pomiędzy prostotą, efektywnością i uniwersalnością [32, 35]. Podstawowe ograniczenie metody MAC, czyli względnie duże zapotrzebowanie na zasoby komputera powoli przestaje mieć znaczenie. Rozwój technologiczny, jaki dokonał się od czasu wprowadzenia metody (lata 60') pozwolił na kontynuowanie badań w tym kierunku. Dlatego jednym z głównych celów niniejszej pracy, będzie próba połączenia algorytmu numerycznego SIMPLE [39] z uniwersalną i względnie prostą w implementacji metodą MAC [21, 35].

5.1 Cząstki znaczone

Cząstkę znaczoną definiujemy jak obiekt niefizyczny, nie posiadający masy, reprezentujący zbiór (skupisko) cząsteczek tworzących ciecz [21]. Zakładamy, że cząstki znaczone wprowadzone zostały do algorytmu jedynie w celu śledzenia zmian geometrii cieczy i ich ruch nie wpływa bezpośrednio na przebieg procesu symulacji. Pośrednio, przesunięcie cząstek może spowodować zmianę oznaczeń komórek w siatce numerycznej, co wpłynie na postać warunków brzegowych. Tak zdefiniowane cząstki w chwili początkowej symulacji wprowadzane są do modelu i rozmieszczone zgodnie z geometrią cieczy w chwili początkowej. W trakcie symulacji, na koniec kroku obliczeniowego, są one przesuwane zgodnie z lokalną prędkością, zmieniając w ten sposób kształt powierzchni swobodnej, którą reprezentują.





Rysunek 20: Powierzchnia cieczy (strona lewa) i odpowiadająca jej konfiguracja cząstek znaczonych na siatce różnicowej Eulera. Oznaczenia komórek: B) brzegowa, F) pełna cieczy, S) powierzchniowa, E) pusta.

Na rysunku 20 pokazana została konfiguracja obszaru symulacji cieczy z powierzchnią swobodną wyznaczoną przez cząstki znaczone. Zdefiniujmy cztery rodzaje komórek na siatce z odpowiednimi oznaczeniami:

- komórki nie zawierające cząstek znaczonych oznaczamy jako puste C_EMP ,
- komórki zawierające cząstki znaczone i sąsiadujące z komórkami pełnymi oznaczamy jako pełne $C_FUL,$
- komórki zawierające cząstki znaczone i sąsiadujące przynajmniej z jedną komórką pustą oznaczamy jako powierzchniowe $C_SUR,$
- komórki brzegowe C_BND

W dalszej części tego rozdziału zajmiemy się wyprowadzeniem wartości brzegowych pól prędkości i ciśnienia na ruchomej powierzchni cieczy. Następnie pokażemy, jak wyznaczyć ruch cząstki znaczonej przy założeniu znajomości pola wektorowego prędkości.

5.2 Warunki brzegowe na powierzchni cieczy

Wprowadzona klasyfikacja komórek pozwala na wyznaczenie miejsc na siatce różnicowej, w których znajduje się warstwa oddzielająca dwa ośrodki między sobą (komórki powierzchniowe). Rozważmy problem z rysunku 20, gdzie pewna ciecz (oznaczmy ją przez 1) graniczy z

cieczą o innych właściwościach fizycznych (oznaczmy ją przez 2). Przy rozwiązaniu numerycznym tego typu zagadnienia powstaje problem wyliczenia prędkości i ciśnienia na powierzchni oddzielającej obie ciecze od siebie. Ze względu na różne właściwości fizyczne obu substancji - równania Naviera–Stokesa nie mogą być bezpośrednio rozwiązane w okolicach warstwy brzegowej (powierzchni swobodnej).

Siła wypadkowa działająca na powierzchnię swobodną cieczy ma kierunek normalnej do tej powierzchni, a jej wartość jest proporcjonalna do stopnia jej zakrzywienia [15]. Przyjmijmy definicję tensora naprężeń \mathbf{T} w cieczy [15, 16]:

$$\mathbf{T} = (-p + \lambda_{\mu} \nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} + 2\mu \mathbf{E},\tag{72}$$

gdzie p jest ciśnieniem elementu cieczy, μ jest lepkością dynamiczną cieczy, a λ_{μ} lepkością objętościową. **E** jest symetrycznym tensorem prędkości odkształceń, który wyrazić możemy w dwuwymiarowym kartezjańskim układzie współrzędnych w postaci macierzowej [16]:

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & \frac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix}.$$
(73)

W przypadku cieczy nieściśliwej ($\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$) równanie (72) przyjmie postać:

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{E},\tag{74}$$

którą wykorzystamy następnie do wyliczenia siły działającej między warstwą oddzielającą dwie ciecze od siebie. Wyrażenie na siłę działającą między dwoma ośrodkami o innych właściwościach fizycznych wprowadził Landau [28]. Można je przedstawić w postaci [15, 16]:

$$(\mathbf{T}^{(1)} - \mathbf{T}^{(2)}) \cdot \mathbf{n} = \sigma \left(\frac{1}{\tilde{R}_1} + \frac{1}{\tilde{R}_2} \right) \mathbf{n},\tag{75}$$

gdzie: $\mathbf{T}^{(1,2)}$ są tensorami, odpowiednio, cieczy 1 i 2, σ jest współczynnikiem napięcia powierzchniowego stałym dla określonych cieczy, \tilde{R} wyraża promień krzywizny warstwy powierzchniowej. We wstępie wspomnieliśmy, że jednym z założeń, jakie przyjmiemy, jest umieszczenie cieczy w zbiorniku wypełnionym próżnią ($\mathbf{T}^{(próźnia)} = 0$). Przyjmijmy, że ciecz jest reprezentowana przez ośrodek 1 z rysunku 20, a próżnia przez ośrodek 2 (czyli $\mathbf{T}^{(2)} = 0$). Załóżmy również, brak napięcia ($\sigma = 0$) na warstwie powierzchniowej [15, 48], co pozwoli zapisać równanie (75) w uproszczonej formie:

$$\mathbf{T}^{(1)} \cdot \mathbf{n} = 0. \tag{76}$$

Po rozwinięciu tensora $\mathbf{T}^{(1)}$ wg wzoru (74), w dwuwymiarowym kartezjańskim układzie odniesienia otrzymujemy dla zmiennych bezwymiarowych równanie:

$$-\begin{pmatrix} \varphi & 0\\ 0 & \varphi \end{pmatrix} \cdot \mathbf{n} + \frac{1}{Re} \begin{pmatrix} 2\frac{\partial u}{\partial x} & \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)\\ \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}\right) & 2\frac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{n} = 0.$$
(77)

Warunki brzegowe, jakie postulujemy na powierzchni cieczy swobodnej, to znikanie składowej prostopadłej i równoległej naprężenia wyrażonego przez (77). Przyjmując, że $\mathbf{n} = (n_x, n_y)^T$ jest wektorem normalnym, a $\mathbf{m} = (m_x, m_y)^T$ równoległym do powierzchni swobodnej otrzymujemy następujące równania [45]:

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = 0 \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = 0$$
 (78)

opisujące warunki znikania obu składowych naprężenia na powierzchni. Na mocy (74) - (78) otrzymamy [15, 45]:

$$\varphi - \frac{2}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial x} n_x^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) n_x n_y + \frac{\partial v}{\partial y} n_y^2 \right) = 0, \tag{79}$$

$$2\frac{\partial u}{\partial x}n_xm_x + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)(n_xm_y + n_ym_x) + 2\frac{\partial v}{\partial y}n_ym_y = 0.$$
(80)

Spełnienie warunków wyrażonych wzorami (79) i (80) zapewni poprawność warunków brzegowych na powierzchni swobodnej dla przyjętych założeń.

5.2.1 Konfiguracje komórek powierzchniowych

W przypadku symulacji dwuwymiarowej komórki powierzchniowe mogą znaleźć się w 15 różnych pozycjach względem sąsiadujących pustych komórek, jak pokazano to na rysunku (21), gdzie zaznaczone zostały również punkty węzłowe prędkości pionowej (trójkąty) i poziomej (kółka). Punkty te w procesie symulacji nie są dobrze określone wprost z równań Naviera– Stokesa. Należy wyznaczyć je korzystając z warunków brzegowych wprowadzonych w poprzednim podrozdziale. Niezaznaczone na rysunku ciśnienie na granicy dwóch ośrodków wyliczane będzie w centrach komórek powierzchniowych.

Z uwagi na podobieństwo części konfiguracji przedstawionych na rysunku (21) rozważania ograniczymy do pięciu wyróżnionych przypadków (równania dla reszty przypadków konstruuje się je analogicznie).

Kolejnym przybliżeniem, jakie przyjmiemy za [15, 45], jest założenie, że w obrębie komórki obliczeniowej powierzchnia swobodna leży prawie równolegle do brzegów komórek siatki obliczeniowej. Dzięki temu można przyjąć, że odpowiednie pary składowych wektorów n_y , m_x lub n_x , m_y są bardzo małe i można je pominąć w równaniach (79) i (80).

W przypadku komórki powierzchniowej z jednym sąsiadem pustym (sytuacja a) z rysunku 21) otrzymujemy z (79):

$$\varphi - \frac{2}{Re} \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \tag{81}$$

co jednoznacznie definiuje wartość ciśnienia w komórce powierzchniowej. Po dyskretyzacji otrzymujemy wartość ciśnienia w komórce powierzchniowej (i, j):

$$\varphi_{i,j} = \frac{2}{Re} \left(\frac{u_{i+0.5,j} - u_{i-0.5,j}}{\Delta x} \right),\tag{82}$$



Rysunek 21: Możliwe konfiguracje ułożenia komórki powierzchniowej (S) względem komórek pustych (E) oraz pełnych i powierzchniowych (bez oznaczenia).

W celu wyliczenia nieznanej prędkości na brzegu między komórką S, a E użyjemy równania ciągłości (10), korzystając z postaci dyskretnej (18). Dla omawianej sytuacji, szukana prędkość $v_{i,j+0.5}$ wynosi:

$$v_{i,j+0.5} = v_{i,j-0.5} + \frac{\Delta y}{\Delta x} (u_{i+0.5,j} - u_{i-0.5,j}).$$
(83)

W podobny sposób wyznaczamy szukane wartości brzegowe ciśnienia i prędkości dla sytuacji oznaczonych od b) do e) z rysunku 21:

b)

$$\varphi_{i,j} = \frac{1}{Re} \left(\frac{u_{i,j+0.5} - u_{i,j-0.5}}{\Delta y} + \frac{v_{i+0.5,j} - v_{i-0.5,j}}{\Delta x} \right),\tag{84}$$

$$u_{i+0.5,j} = u_{i-0.5,j},\tag{85}$$

$$v_{i+0.5,j} = v_{i,j-0.5}.$$
(86)

c) W tym przypadku ciśnienie w komórkach powierzchniowych ustawiamy równe ciśnieniu drugiego z ośrodków (tu próżnia),

$$\varphi_{i,j} = \varphi^{pr \acute{o} \dot{z} n i a}.$$
(87)

W przypadku dwóch naprzeciwległych komórek pustych do wyznaczenia prędkości używamy wyrażeń wynikających z wpływu siły ciężkości na ruch elementu cieczy,

$$u_{i+0.5,j}^{nowe} = u_{i+0.5,j}^{stare} + \frac{g_x}{(Fr)^2} \cdot \Delta t,$$
(88)

$$u_{i-0.5,j}^{nowe} = u_{i-0.5,j}^{stare} + \frac{g_x}{(Fr)^2} \cdot \Delta t.$$
(89)

d)

$$\varphi_{i,j} = \varphi^{pr \acute{o} znia}, \tag{90}$$

$$v_{i,j+0.5}^{nowe} = v_{i,j+0.5}^{stare} + \frac{g_y}{(Fr)^2} \cdot \Delta t,$$
(91)

$$v_{i,j-0.5}^{nowe} = v_{i,j-0.5}^{stare} + \frac{g_y}{(Fr)^2} \cdot \Delta t,$$
(92)

$$u_{i+0.5,j} = u_{i-0.5,j} + \frac{\Delta x}{\Delta y} (v_{i,j+0.5} - v_{i,j-0.5}).$$
(93)

e)

$$\varphi_{i,j} = \varphi^{pr\acute{o}\dot{z}nia},\tag{94}$$

$$v_{i,j-0.5}^{nowe} = v_{i,j-0.5}^{stare} + \frac{g_y}{(Fr)^2} \cdot \Delta t, \tag{95}$$

$$u_{i+0.5,j} = u_{i-0.5,j} + \frac{\Delta x}{\Delta y} (v_{i,j+0.5} - v_{i,j-0.5}),$$
(96)

$$u_{i+0.5,j}^{nowe} = u_{i+0.5,j}^{stare} + \frac{g_x}{(Fr)^2} \cdot \Delta t,$$
(97)

$$u_{i-0.5,j}^{nowe} = u_{i-0.5,j}^{stare} + \frac{g_x}{(Fr)^2} \cdot \Delta t.$$
(98)

Analogicznie konstruuje się wartości prędkości i ciśnienia przy komórkach brzegowych, gdzie nie istnieje problem dynamiki brzegów. W powyższym zestawieniu warunków brzegowych występują wartości prędkości między węzłami, które znajdujemy przez prostą interpolację liniową, np. w celu wyliczenia $u_{i,j+0.5}$ korzystamy ze wzoru:

$$u_{i,j+0.5} = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{u_{i+0.5,j} + u_{i+0.5,j+1}}{2} + \frac{u_{i-0.5,j} + u_{i-0.5,j+1}}{2} \right)$$
(99)

Oprócz podanych wyżej warunków brzegowych, można również ze wzoru (80) wyznaczyć prędkości przy brzegu (komórki puste sąsiadujące z powierzchniowymi). Biorą one bowiem udział w rozwiązaniu równań Naviera–Stokesa dla prędkości na granicy komórek powierzchniowych z pełnymi. Warunki te wyprowadza się analogicznie do przedstawionych powyżej, a ich opis i pełną klasyfikację znaleźć można w literaturze [1, 15]. W [8] znaleźć można również pełniejszą analizę i wyprowadzenie oraz kompletną klasyfikację warunków brzegowych dla metod opartych o cząstki znaczone.

5.3 Ruch cząstek znaczonych

Jak wspomnieliśmy w podrozdziale 5.1, cząstki znaczone poruszają się po siatce obliczeniowej zgodnie z bieżącym rozkładem pola prędkości cieczy. Jako obiekty bezmasowe, cząstki nie posiadają bezwładności, przyjmując w trakcie swojego ruchu prędkość lokalną wyliczoną w miejscu, w którym się znajdują. W celu wyliczenia lokalnej prędkości cieczy w dowolnych punktach niewęzłowych siatki różnicowej wykorzystamy średnią ważoną. Rozpatrzmy sytuację jak na rysunku 22, gdzie zaznaczonych zostało kilka wyróżnionych konfiguracji ułożenia cząstki znaczonej w komórce, w której się ona znajduje.



Rysunek 22: Ułożenie cząstki znaczonej względem centrum komórki siatki różnicowej. Na rysunku zaznaczone zostały: pseudo komórka otaczająca cząstkę (linia przerywana), pozycja cząstki znaczonej (p_x, p_y) dla każdej z czterech sytuacji, indeks komórki w której znajduje się cząstka (i, j), wagi dla poszczególnych prędkości węzłowych a_i , gdzie i = 0...3. Wielkości x_1 , x_2 , y_1 , y_2 są zaznaczonymi długościami boków komórki.

Procedurę rozpoczynamy od wyznaczenia komórki roboczej (linia przerywana na rysunku 22) tak, by cząstka znajdowała się w jej środku. Następnie wyliczamy po kolei pola przecięć komórki roboczej i komórek odpowiadających najbliżej położonym wartościom znanym (węzłowym) odpowiedniego pola prędkości (pola a_0 , a_1 , a_2 , a_3 z rysunku 22). Procedurę tę wykonujemy oddzielnie dla prędkości poziomej (przypadki a i b), oraz prędkości pionowej (przypadki c i d) cząstki. Dla każdego obliczonego pola a_i mamy przyporządkowaną prędkość węzłową u_i , co pozwala wyznaczyć prędkość w punkcie (p_x, p_y) cząstki znaczonej przez unormowanie sumy iloczynów pól i prędkości:

$$u_p = \sum_i \frac{a_i u_i}{\Delta x \cdot \Delta y}.$$
(100)

Pozostaje wyznaczyć wielkości a_i oraz odpowiadające im prędkości u_i . W tym celu rozróżniamy kolejne dwa przypadki, osobno dla prędkości poziomej i pionowej.

Dla prędkości pionowej otrzymamy różne wyrażenia w zależności od tego, czy cząstka znajduje się w prawej lub lewej połówce swojej komórki (i, j), co wyrazić można wprowadzając wielkość f_x równą:

$$f_x = \frac{p_x}{\Delta x} - 1,\tag{101}$$

gdzie p_x jest pozycją cząstki, a Δx rozmiarem komórki w kierunku x. Jeśli $f_x < 0.5$, cząstka znajduje się w lewej połówce komórki, jeśli $f_x > 0.5$ w połówce prawej. Podobnie wyznacza się wielkość f_y :

$$f_y = \frac{p_y}{\Delta y} - 1,\tag{102}$$

której używamy w procedurze wyliczania prędkości poziomej, rozróżniając przypadek gdy cząstka znajduje się w górnej lub dolnej połówce komórki. Analizując geometrycznie wszystkie z czterech przypadków pokazanych na rysunku 22 otrzymujemy następujące wyrażenia na prędkości pionowe i poziome, kolejno dla każdego z rozróżnionych przypadków:

a) prędkość pozioma u_p , górna połówka komórki ($f_y > 0.5$),

$$\begin{cases} x_1 = (i+1) \cdot \Delta x - p_x, \\ x_2 = \Delta x - x_1, \\ y_1 = (j+1.5) \cdot \Delta y - p_y, \\ y_2 = \Delta y - y_1, \end{cases}$$
(103)

$$u_p = \frac{a_0 \cdot u_{i,j} + a_1 \cdot u_{i-1,j} + a_2 \cdot u_{i-1,j+1} + a_3 \cdot u_{i,j+1}}{\Delta x \Delta y},$$
(104)

$$u_p = \frac{x_2 y_1 \cdot u_{i,j} + x_1 y_1 \cdot u_{i-1,j} + x_1 y_2 \cdot u_{i-1,j+1} + x_2 y_2 \cdot u_{i,j+1}}{\Delta x \Delta y},$$
(105)

b) prędkość pozioma $u_p,$ dolna połówka komórki $(f_y < 0.5),$

$$\begin{cases} x_1 = (i+1) \cdot \Delta x - p_x, \\ x_2 = \Delta x - x_1, \\ y_1 = (j+0.5) \cdot \Delta y - p_y, \\ y_2 = \Delta y - y_1, \end{cases}$$
(106)

$$u_p = \frac{a_0 \cdot u_{i,j} + a_1 \cdot u_{i,j-1} + a_2 \cdot u_{i-1,j-1} + a_3 \cdot u_{i-1,j}}{\Delta x \Delta y},$$
(107)

$$u_p = \frac{x_2 y_2 \cdot u_{i,j} + x_2 y_1 \cdot u_{i-1,j} + x_1 y_1 \cdot u_{i-1,j+1} + x_1 y_2 \cdot u_{i,j+1}}{\Delta x \Delta y},$$
(108)

c) prędkość pionowa v_p , prawa połówka komórki ($f_x > 0.5$),

$$\begin{cases} x_1 = (i+1.5) \cdot \Delta x - p_x, \\ x_2 = \Delta x - x_1, \\ y_1 = (j+1) \cdot \Delta y - p_y, \\ y_2 = \Delta y - y_1, \end{cases}$$
(109)

$$y_2 = \Delta y - y_1,$$

$$v_p = \frac{a_0 \cdot v_{i,j} + a_1 \cdot v_{i+1,j} + a_2 \cdot v_{i+1,j-1} + a_3 \cdot v_{i,j-1}}{\Delta x \Delta y},$$
(110)

$$v_p = \frac{x_1 y_2 \cdot v_{i,j} + x_2 y_2 \cdot v_{i+1,j} + x_2 y_1 \cdot v_{i+1,j-1} + x_1 y_1 \cdot v_{i,j-1}}{\Delta x \Delta y},$$
(111)

d) prędkość pionowa v_p , lewa połówka komórki ($f_x < 0.5$),

$$\begin{cases} x_1 = (i+0.5) \cdot \Delta x - p_x, \\ x_2 = \Delta x - x_1, \\ y_1 = (j+1) \cdot \Delta y - p_y, \\ y_2 = \Delta y - y_1, \end{cases}$$
(112)

$$v_p = \frac{a_0 \cdot v_{i,j} + a_1 \cdot v_{i,j-1} + a_2 \cdot v_{i-1,j-1} + a_3 \cdot v_{i-1,j}}{\Delta x \Delta y},$$
(113)

$$v_p = \frac{x_2 y_2 \cdot v_{i,j} + x_2 y_1 \cdot v_{i+1,j} + x_1 y_1 \cdot v_{i+1,j-1} + x_1 y_2 \cdot v_{i,j-1}}{\Delta x \Delta y}.$$
(114)

Po wyliczeniu prędkości cząstki znaczonej wykorzystaliśmy prostą metodę Eulera pierwszego rzędu do przesunięcia cząstki w nowy punkt na siatce obliczeniowej:

$$p_x^{n+1} = p_x^n + u_p^n \cdot \Delta t,$$

$$p_y^{n+1} = p_y^n + v_p^n \cdot \Delta t,$$
(115)

gdzie Δt jest krokiem czasowym symulacji. Mając na uwadze rząd dokładności metody Eulera, warto pamiętać, że przesunięcie cząstki znaczonej na dużą odległość w jednym kroku (duże Δt) miałoby poważne konsekwencje w postaci przybliżenia faktycznie zakrzywionego toru ruchu cząstki przez prostą. Widać tu wyraźnie, jak przydatne okazuje się być w takim układzie spełnienie warunku stabilności CFL wprowadzonego w podrozdziale 4.2.2.

5.4 Algorytm SIMPLE-MAC

Dla cieczy z powierzchnią swobodną skonstruowaliśmy algorytm obliczeniowy SIMPLE-MAC opierający się na metodzie SIMPLE z uwzględnieniem dynamiki oraz warunków brzegowych na powierzchni swobodnej, które wynikają z przyjęcia cząstek znaczonych do reprezentacji cieczy. Poniżej przedstawiamy kompletny algorytm.

- a) inicjalizacja siatki różnicowej, zerowanie pól prędkości i ciśnienia,
- b) wstawienie początkowej konfiguracji cząstek znaczonych (uśrednione prędkości cząstek znaczonych kopiujemy w punkty węzłowe siatki różnicowej),
- c) wyznaczenie początkowych (wstępnych) wartości węzłowych pola p^* ,
- d) wyliczenie prędkości u^* oraz v^* odpowiadających ciśnieniu próbnemu przy pomocy pełnych równań dynamiki (55) oraz (56),
- e) rozwiązanie równania Poissona (54) na poprawkę p' do ciśnienia,
- f) obliczenie nowego ciśnienia p przy pomocy wzoru (59),
- g) nałożenie warunków brzegowych na ciśnienie p (podrozdział 5.2.1),
- h) wyznaczenie nowych wartości u oraz v z równania (52) przy użyciu (62) oraz (63) do wyliczenia wartości u' i v',
- i) nałożenie warunków brzegowych na prędkości u i v (podrozdział 5.2.1),

- j) przesunięcie cząstek znaczonych (podrozdział 5.3),
- k) wyznaczenie nowej konfiguracji komórek dla nowego rozkładu cząstek znaczonych (powierzchniowe \leftrightarrow puste, pełne \leftrightarrow powierzchniowe),
- l) nałożenie warunków brzegowych na ciśnienie $p,\,p^*$ i prędkości $u,\,u^*,\,v$ i v^* (podrozdział 5.2.1),
- m) kontynuacja procesu iteracyjnego (skok do punktu d) tak długo jak $\nabla \cdot \mathbf{u} > \varepsilon_s$ za ciśnienie próbne przyjmując $p^* = p$,
- n) obliczenie Δt_{max} , ze wzoru (69),
- o) czy $\Delta t \leq \Delta t_{max}$, jeśli tak: $\Delta t = \Delta t \cdot 2$, jeśli nie: $\Delta t = \Delta t/2$,
- p) $t = t + \Delta t$, jeśli $t < t_{max}$ skok do d.

Przedstawiony algorytm SIMPLE, oprócz rozszerzenia o cząstki znaczone, różni się nieznacznie od przedstawionego w rozdziale 4.2.1. Potrzeba zmiany konfiguracji brzegu powierzchni swobodnej (przesunięcie cząstek znaczonych i rekonfiguracja komórek siatki obliczeniowej) wymusiła podwójną iterację, gdzie pierwsza iteracja wyniku (skok z punktu m do d) wykonuje się tak długo, jak długo nie jest spełniony podstawowy warunek poprawności rozwiązania (zerowanie dywergencji pola prędkości). Po wykonaniu pierwszej pętli iteracyjnej, przechodzimy do procedur związanych z cząstkami znaczonymi, a następnie jeśli $t < t_{max}$, gdzie t_{max} jest czasem zakończenia obliczeń, ponownie skaczemy do punktu d, zaczynając następną pętlę doiterowującą.

5.5 Walidacja kodu SIMPLE-MAC

W celu sprawdzenia poprawności wyników otrzymywanych przez kod obliczeniowy oparty o metodę SIMPLE oraz cząstki znaczone MAC, rozwiążemy często spotykany w literaturze problem przepływu cieczy swobodnej dla załamania się zapory ograniczającej ciecz (*ang. brokendam problem*). Przykład ten wybraliśmy ze względu na dostępność danych doświadczalnych [24] oraz dokładnych i bardzo aktualnych wyników symulacji numerycznych [14, 25] dla tego problemu.

Rozpatrzmy problem przedstawiony na rysunku 23. Ciecz znajdująca się w zbiorniku jest ograniczona przez sztywną ścianę (gruba linia). Przegroda jest zwolniona w chwili t = 0 i pod wpływem grawitacji ciecz rozleje się w całej objętości układu.

Ze względu na doświadczalny charakter danych, do których porównywać będziemy wyniki, wygodnie jest wprowadzić tu opis wymiarowy danych użytych do symulacji. Zgodnie z [14, 24] kolejno za lepkość dynamiczną, gęstość i grawitację przyjmujemy: $\mu = 1 \cdot 10^{-3} kg/m/s$, $\rho = 1000 kg/m^3$, $g_y = -9.8m/s^2$, co odpowiada liczbom kryterialnym Re = 1.000.000 oraz $(Fr)^2 = \frac{1}{9.8}$. Przyjęliśmy tu jednostkowe wymiary całego układu oraz prędkość charakterystyczną $u_{\infty} = 1m/s$. Z uwagi na bardzo dużą liczbę Reynoldsa i możliwe problemy z tym związane, do obliczeń członu konwekcyjnego z równań Naviera–Stokesa użyliśmy schematu "pod prąd" (patrz rozdział 3.4).

Pierwszym testem, jaki przeprowadziliśmy, było sprawdzenie zgodności geometrii powierzchni swobodnej z kilku różnych kroków czasowych z wynikami przedstawionymi w pracy [14], w której zwiększoną dokładność symulacji osiągnięto przez zastosowanie dynamicznego dzielenia siatki obliczeniowej w trakcie przeprowadzania symulacji. Dodatkowo wyniki w [14] uznać można za dokładne z uwagi na uwzględnienie przepływu w powietrzu (ośrodek drugi, poza



Rysunek 23: Problem *ang. broken-dam.* W chwili początkowej t = 0 ściana utrzymująca ciecz w zbiorniku zaznaczonym kolorem szarym zostaje zwolniona.

zbiornikiem z cieczą), gdzie również rozwiązywane są równania Naviera–Stokesa. W naszym przypadku, w celu uproszczenia zjawiska, ograniczamy się do przypadku cieczy znajdującej się w zbiorniku wypełnionym przez próżnię. Za jednostkę czasu w przeprowadzonych obliczeniach, za [14] przyjęliśmy $T = t \cdot g_y/(2a)$, gdzie *a* jest szerokością początkową zbiornika cieczy (inaczej, pozycja *x* zwalnianej zapory).

Na rysunkach 26 i 27 pokazane zostały konfiguracje powierzchni swobodnej z [14] (strona prawa) w określonych chwilach czasowych oraz konfiguracje cząstek znaczonych z symulacji kodem SIMPLE-MAC (strona lewa) dla tych samych chwil czasu. Rozmiar siatki, jaki przyjęliśmy do obliczeń, to 128 × 128. W przypadku symulacji metodą SIMPLE-MAC wizualizacja jest bardzo prosta i wynikowe rysunki odzwierciedlają bezpośrednio rozkład cząstek znaczonych użytych w obliczeniach do reprezentacji cieczy. Na przedstawionych rysunkach widać wyraźnie bardzo dobrą zgodność naszych wyników z wynikami z pracy [14]. Nieznaczne różnice, jakie da się zauważyć, można zaniedbać, a wynikają one prawdopodobnie z uproszczeń, które przyjęliśmy (próżnia jako ośrodek wypełniający symulowany zbiornik cieczy).

Dodatkowo, w celu dokładniejszego porównania otrzymanych wyników z danymi doświadczalnymi [24] i numerycznymi [14], przeprowadziliśmy pomiar wysokości cieczy w funkcji czasu oraz maksymalnej pozycji frontu cieczy w kierunku osi x. Obie mierzone wielkości: wysokość oraz pozycja frontu cieczy w kierunku osi x zostały unormowane z wykorzystaniem początkowej szerokości kolumny równej a. Wykresy obu wielkości zamieszczone zostały na dwu wykresach na rysunku 24. Na wykresie po prawej stronie odłożone zostały: unormowany czas na osi x, pozycja frontu rozlewającej się cieczy na osi y. Widzimy, że wyniki numeryczne otrzymane metodą SIMPLE-MAC odbiegają nieznacznie od danych eksperymentalnych, jednak osiągnęliśmy wyniki zbliżone, a nawet lepsze od obliczeń numerycznych przedstawionych w [14]. Autorzy tej pracy tłumaczą rozbieżność teorii z eksperymentem, jako wynik problemów jakie powstały w eksperymencie w trakcie pomiaru frontu cieczy, opisanych w [24].

Wykres po stronie lewej, to porównanie wyników kodu SIMPLE-MAC z danymi eksperymentalnymi [24] dla przypadku pomiaru wysokości cieczy od chwili T = 0. Otrzymana tu zgodność z danymi eksperymentalnymi nie pozostawia wątpliwości co do poprawności kodu

numerycznego.

Oprócz porównania wyników otrzymywanych w procesie symulacji, warto w tym miejscu sprawdzić, jak wygląda rozkład dywergencji pola wektorowego prędkości dla kilku różnych chwil czasu. Z założenia wiemy, że aby warunek zachowania masy był spełniony - dywergencja w całej objętości cieczy musi znikać. Na rysunkach 25 przedstawione zostały wykresy $|\nabla \cdot \mathbf{u}|$ dla dwóch chwil czasu: T = 1.617 oraz T = 3.233. Otrzymany wynik wskazuje, że skonstruowana metoda numeryczna wykazuję bardzo dobrą zgodność z doświadczeniem, a skala odchylenia od zera, wartości bezwzględnej dywergencji pola prędkości w obrębie całej siatki jest bardzo mała (średnio $|\nabla \cdot \mathbf{u}| = 10^{-6}$) i akceptowalna [48].



Rysunek 24: Porównanie pomiarów bezwymiarowej wysokości (strona lewa) i szerokości (strona prawa) frontu cieczy.



Rysunek 25: Wykresy bezwzględnej wartości dywergencji pól prędkości $|\nabla \cdot \mathbf{u}|$ dla chwili T = 1.617 (lewa strona) oraz T = 3.233 (prawa strona).



Rysunek 26: Wyniki symulacji problemu opuszczonej tamy dla metody SIMPLE-MAC (lewa strona) oraz z pracy [14] (strona prawa) dla bezwymiarowych chwil czasu: a) T = 0, b) T = 1.617, c) T = 3.233.



Rysunek 27: Wyniki symulacji problemu opuszczonej tamy dla metody SIMPLE-MAC (lewa strona) oraz z pracy [14] (strona prawa) dla bezwymiarowych chwil czasu: a) T = 4.850, b) T = 6.466, c) T = 8.029.

6 Wyniki

W tym rozdziale przedstawione zostaną wyniki obliczeń przeprowadzonych przy pomocy kodów obliczeniowych SIMPLE (bez powierzchni swobodnej) oraz SIMPLE-MAC (z powierzchnią swobodną) dla kilku wybranych problemów hydrodynamiki cieczy nieściśliwej.

6.1 Przepływ przez zakrzywiony kanał

Pierwszym problemem, jaki został rozwiązany, jest przepływ cieczy nieściśliwej o różnych liczbach Reynoldsa przez zakrzywiony, prostokątny kanał (kolanko) [41]. Jest to dobry przykład pokazujący wpływ liczby Reynoldsa na powstające w cieczy wiry przyścienne. Dla wyznaczenia liczb kryterialnych, za wielkości charakterystyczne przyjęliśmy odpowiednio: prędkość wpływową oraz średnicę kanału.



Rysunek 28: Przepływ przez zakrzywiony kanał, dla różnych liczb
 Reynoldsa. Siatka obliczeniowa $40\times40.$

Na rysunku 28 pokazane zostały konfiguracje końcowe przepływu stacjonarnego przez zakrzywiony kanał. Za warunki brzegowe przyjęliśmy ściany sztywne z poślizgiem, a wpływ cieczy na początku kanału następuje ze stałą prędkością znormalizowaną u = 1. Otrzymane wyniki pokazują, że w tego typu przepływie kluczową rolę w powstawaniu wirów wewnątrz przepływów odgrywa liczba kryterialna Reynoldsa. Dla wartości Re=15 przepływ jest całkowicie laminarny, ciecz nie wykazuje żadnych odchyleń od ruchu wzdłuż ścianek ograniczających. Jednak już dla Re=45 widać nieznaczne zawirowanie w prawym dolnym rogu na ugięciu kanału. Efekt ten wzmacnia się wraz ze wzrostem liczby Re i dla Re>65 efekt ten jest już bardzo widoczny. Dodatkowo dla Re=65 i Re=100 tworzy się również dodatkowy wir przy wewnętrznym zakrzywieniu kanału, tuż za nim. Zjawiska towarzyszące przepływowi w kolanku podtwierdzają, że oderwanie linii prądu od ścian ograniczających następuje nie tylko w przypadku opływu ciał z zewnątrz, lecz również w przypadku przepływu wewnątrz zakrzywionych kanałów [41].

6.2 Przepływ przez pęk rur

Następnym zagadnieniem, które postaramy się rozwiązać przy pomocy stworzonego kodu obliczeniowego, jest przepływ cieczy w kanale z umiejscowionym, w obszarze przepływu, pękiem rur. Istniejące dane eksperymentalne [42, 43] dla tego zagadnienia pozwolą potwierdzić działanie kodu oraz odpowiedzieć na pytanie, jaki charakter ma przepływ przez zestaw przeszkód taki jak pęk dość ciasno upakowanych cylindrów. Drugim pytaniem jakie postawimy jest: czy symulacja numeryczna może dać w wyniku dane pełniejsze niż eksperyment?



Rysunek 29: Wektory prędkości dla przepływu cieczy przez kanał z pękiem rur, obliczenia (rysunek po lewej) dla Re=159 i siatki obliczeniowej 100×100 . Porównanie z wynikiem z eksperymentu [43] (rysunek po prawej).

Za [43] przyjmijmy następujące wartości charakteryzujące przepływ: liczbę Re = 159, za prędkość charakterystyczną u = 0.0146m/s (średnia prędkość w cieczy), a za rozmiar charakterystyczny średnicę pojedynczej rury. Na rysunku 29 przedstawione zostały konfiguracje pól wektorowych prędkości dla kodu numerycznego (rysunek po lewej stronie) oraz pochodzące wprost z eksperymentu (rysunek po stronie prawej) utworzone metodą DPIV [42, 43]. Linia na rysunku po lewej stronie wskazuje kierunek i względną prędkość lokalną cieczy w punkcie zaczepienia. Widać wyraźnie, że przepływająca przez pęk rur ciecz tworzy swego rodzaju ścieżki wysokich wartości prędkości tworząc miejsca "martwe" tuż za każdą z rur. Prędkość w tych miejscach jest bardzo mała, jak widać to na rysunku 29, stąd można uznać, że ciecz, która się tam znajdzie, już się stamtąd nie wydostanie. Zestawione wyniki doświadczalne potwierdzają bardzo dobrze poprawność działania kodu obliczeniowego, co również widać porównując oba wyniki na rysunku 29.

W celu dokładniejszego określenia pól prędkości w miejscach słabo widocznych na rysunku 29 zastosowaliśmy wizualizację przy pomocy linii prądu. Dzięki temu, że wektory prędkości są w każdym punkcie równolegle przystające do linii prądu, możemy dokładniej przeanalizować zjawiska występujące w miejscach "martwych" w omawianych wynikach.



Rysunek 30: Przepływ cieczy dla przez kanał z pękiem rur, dla Re=159. Siatka obliczeniowa 100 \times 100. Wizualizacja linii prądu.

Na rysunku 30 pokazana została wizualizacja tego zjawiska przy pomocy linii prądu. Widzimy, że za powstawanie miejsc o małych gradientach prędkości odpowiedzialne jest powstawanie wirów przy tylnej części każdej z rur. Prędkość w obszarze każdego z wirów jest bardzo mała i dlatego reprezentacja przy pomocy wektorów lokalnych pól prędkości nie zdała w tym przypadku rezultatu. W tym miejscu widać również, jak potężnym narzędziem jest działający poprawnie kod numeryczny, bez którego wyjaśnienie zjawisk powstających w miejscach szczególnie interesujących byłoby eksperymentalnie dość trudne.

6.3 Scieżka wirowa von Karmana

Przepływ cieczy przez kanał z przeszkodą ustawioną na jej drodze w przypadku liczb Reynoldsa Re > 50 tworzy bardzo skomplikowane struktury wirowe. Przeprowadziliśmy symulację tego zjawiska przyjmując warunki zadane w literaturze [15]. Za przeszkodę przyjęliśmy walec, a za długość charakterystyczną L przyjęliśmy jego średnicę. Prędkość charakterystyczna przepływu to prędkość wpływu cieczy (ścianka z lewej strony). Na ściance wpływowej przyjęliśmy paraboliczny rozkład prędkości poziomej, przyjmując prędkość u = 1.5 w jej centrum.

Dla tak przyjętych warunków przepływu przeprowadzona została symulacja zjawiska przepływu przez kanał z przeszkodą dla liczby Re = 100. Z uwagi na niestacjonarny charakter przepływu, zamiast wizualizacji przy pomocy linii prądu (*ang. streamlines*), do symulacji wprowadzone zostały cząstki znaczone, śledzone analogicznie jak w przypadku symulacji cieczy z powierzchnią swobodną. Odkładając na każdym kroku czasowym nowe położenia cząstek uzyskujemy obrazy reprezentujące dynamikę cieczy w przepływie niestacjonarnym (*ang. streaklines*).



Rysunek 31: Ścieżka wirowa Karmana dla różnych chwil czasu. Re = 100, siatka 160×40 .

Na rysunku 31 pokazanych zostało pięć różnych konfiguracji cząstek znaczonych dla sześciu różnych chwil czasu. W tym miejscu warto zaznaczyć, że brak cząstek znaczonych w obrębie całej przestrzeni symulowanego zjawiska nie oznacza występowania powierzchni swobodnej. Równania przepływu są rozwiązywane w całej objętości, a cząstki znaczone służą tu jedynie do śledzenia (reprezentowania) jej wybranej części. Najbardziej interesującym zjawiskiem, jakie występuje w przeprowadzonej symulacji, jest powstawanie i odrywanie się skomplikowanych struktur wirowych za przeszkodą dla dalszych chwil czasowych. Na rysunkach 31 prześledzić można, jak struktury te tworza się dynamicznie w czasie.

Dodatkowo przeprowadziliśmy szereg symulacji dla różnych liczb kryterialnych Re z zakresu od 20 do 200, a wyniki przedstawione zostały na rysunkach 32. Widać wyraźnie, że odrywanie się struktur wirowych za przeszkodą zaczyna występować pomiędzy liczbą Re = 50, a Re =



Re = 120

Rysunek 32: Ścieżka wirowa Karmana dla różnych liczb Reynoldsa. T = 20, siatka 160×40 .

75. Dla małych liczb, np. Re = 20 na rysunku, otrzymujemy nawet przepływ stacjonarny. Podkreślić należy, że otrzymane wyniki zgadzają się doskonale z wynikami innych obliczeń numerycznych oraz danymi eksperymentalnymi [13, 15].

Dla przypadków ścieżki wirowej oraz przepływu przez pęk rur, w dodatku A przedstawiona została również wizualizacja kolorowa, gdzie odpowiednie składowe kolorów odpowiadają prędkości cieczy. Natężenie składowej czerwonej koloru odpowiada wielkości bezwzględnej wektora pola prędkości w kierunku x, odpowiednio składowa zielona odnosi się do prędkości w kierunku osi y.

6.4 Kropla cieczy

Jednym z głównych celów niniejszej pracy jest symulacja zjawiska kropli spadającej na płaską powierzchnię oraz do płytkiego i głębokiego zbiornika. W roku 1967, w dwa lata po wprowadzeniu metody cząstek znaczonych [21, 48], Harlow i Shannon z laboratoriów w Los Alamos opublikowali wyniki działania klasycznej metody cząstek znaczonych w zastosowaniu do zjawiska kropli spadającej do płytkiego i głębokiego zbiornika [19, 20].

Po zaimplementowaniu dokładnej kopii kodu obliczeniowego opartego o klasyczną metodę cząstek znaczonych [21, 48] okazało się, że symulacja dla zadanych w [21] warunków nie daje dobrych rezultatów i w żaden sposób nie można powtórzyć przeprowadzonych badań. Niestety, dość stare już prace [19, 20] nie zawierają wielu informacji, potrzebnych do powtórzenia pokazanych w nich wyników. Brak informacji o charakterystycznych rozmiarach przyjętych w przygotowaniu symulacji numerycznej przy zaniedbaniu lepkości praktycznie uniemożliwia sprawne i dokładne powtórzenie tych wyników, co pozwoliłoby w konsekwencji dokładniej przeanalizować obserwowane zjawiska. Jedną z cech otrzymywanych wyników symulacji metodą cząstek znaczonych dla założeń przyjętych w [20, 19] było, że praktycznie niemożliwe okazało się zaobserwowanie jakichkolwiek zjawisk dla cieczy z powierzchnią swobodną dla więcej niż kilku początkowych chwil czasu. Ze względu na jedno z najważniejszych założeń - pominięcia członu lepkościowego w równaniach Naviera–Stokesa - metoda MAC okazała się bezwarunkowo niestabilna, bez względu na przyjęty krok czasowy, czy rozmiar siatki obliczeniowej.

Z korespondencji z jednym z autorów tych prac [18], dowiedzieliśmy się, że faktycznie klasyczna metoda MAC nie miała prawa działać dla sytuacji opisanych w [19, 20]. Okazało się, że autorzy tych prac użyli w rozwiązaniu problemów o lepkości równej zero schematów stabilizujących człony konwekcyjne w równaniach Naviera–Stokesa. Schematem, którego użyli, była metoda *Upwind* pierwszego rzędu [18] (patrz rozdział 3.4). Na uwagę zasługuje fakt, że w wymienionych pracach nie ma żadnych informacji na ten temat, co praktycznie uniemożliwiało otrzymanie podobnych wyników. Do stabilizacji członów konwekcyjnych użyjemy hybrydy metod *Upwind* pierwszego rzędu [18] z metodą centralną poprzez wagowe współczynniki, przyjmując w symulacjach wagę 0.2 dla metody centralnej oraz 0.8 dla metody *Upwind*. Pozwoli to na wyeliminowanie przynajmniej części dyfuzji numerycznej wprowadzanej przez prosty schemat pierwszego rzędu, bez czego otrzymywane rezultaty nie wykazywały żadnych interesujących cech.

Niestety nie udało się uzyskać informacji na temat rozmiarów i przyjętych wielkości siatek obliczeniowych, stąd utrudnione będzie otrzymanie rezultatów dokładnie odpowiadających literaturowym.

W dalszej części pracy w ślad za [19, 20] przyjmiemy, że ciecz posiada zerową lepkość ($\mu = 0$) i nie występuje napięcie powierzchniowe. Dotychczas nie udało się (lub nie są nam znane) symulacje numeryczne, dla takich założeń, potwierdzające wyniki z 1967 roku otrzymane w Los Alamos. Ich potwierdzenie jest o tyle ważne, że zaniedbując dwie bardzo ważne cechy cieczy nieściśliwej (lepkość i napięcie powierzchniowe) udało się uzyskać wyniki, które wskazują, że szereg interesujących zjawisk występuje bez nich.

6.5 Kropla spadająca na płaską powierzchnię

Analizę efektów fizycznych związanych z kroplą cieczy rozpoczniemy od przypadku kropli spadającej na płaską powierzchnię. Rozpatrzmy kroplę cieczy o promieniu R = 10, znajdującą się w próżni. Za prędkość kropli tuż przy powierzchni przyjmiemy v = -1.0. Na rysunku 33 pokazanych zostało kilka kolejnych chwil czasowych symulacji przeprowadzonej dla tak zadanych warunków. Widać wyraźnie charakterystyczne spłaszczenie się kropli przy uderzeniu



oraz rozbryzg cieczy w kierunku równoległym do powierzchni.



Rysunek 33: Symulacja kropli spadającej na płaską powierzchnię dla prędkości początkowej v=-1.0w momencie uderzenia.

Na rysunku 34 porównujemy maksymalną wysokość kropli w trakcie przebiegu symulacji z dostępnymu danymi. Osiągnięta zgodność z eksperymentem [49] oraz symulacją przeprowadzoną w Los Alamos [20] jest bardzo dobra.

6.6 Kropla wpadająca do głębokiego zbiornika

Kropli wpadającej do głębokiego zbiornika towarzyszy szereg bardzo interesujących zjawisk fizycznych. Rozpatrzmy kroplę o promieniu R = 10, uderzającą w powierzchnię cieczy o głę-



Rysunek 34: Porównanie pomiaru maksymalnej wysokości kropli w trakcie uderzenia o płaską powierzchnię z eksperymentem [49] oraz wynikami z [20].

bokości $h = 4 \cdot R$ spadając z różnych wysokości. Dla różnych prędkości kropli przy samej powierzchni cieczy (co jest równoznaczne z różnymi wysokościami początkowymi spadającej kropli) obserwujemy odmienne zachowanie się powierzchni swobodnej. Do obliczeń przyjmiemy siatkę o rozdzielczości 80×80 .

Na rysunku 35 przedstawione zostały wyniki dla kropli z prędkością początkową v = -1.0dla zerowej lepkości oraz grawitacji $g_y = -1.0$. Proces wpadania kropli do zbiornika podzielić można na kilka etapów: (I) rozpędzenie się kropli przy spadku swobodnym, (II) formowanie się zagłębienia na powierzchni w miejscu uderzenia, (III) po osiągnięciu minimum, powrót powierzchni swobodnej w kierunku ku górze, (IV) formowanie się pionowej kolumny cieczy, (V) oderwanie się kropli na szczycie kolumny, (VI) obniżanie kolumny i oscylacje powierzchni swobodnej. W zasadzie etapy I i VI nie są interesujące z pounktu widzenia omawianego zjawiska. Na przedstawionym rysunku widać ewolucję czasową konfiguracji powierzchni swobodnej cieczy (oraz jej części wewnętrznej w zbiorniku) reprezentowanej przez cząstki znaczone, gdzie piksel rysunku reprezentuje pojedynczą cząstkę. Otrzymany wynik zgadza się dość dobrze ze znanym z literatury [19]. Dla prędkości v = -1.0 nie nastąpiło oderwanie kropli w końcowej fazie symulacji, a opierając się na [19, 20] efekt ten zależy m.in. od prędkości włotu kropli do zbiornika. Na rysunku 36 przedstawione zostało porównanie wyników otrzymanych dla dwóch różnych wysokości początkowych kropli dla których prędkości przy powierzchni cieczy w zbiorniku wynosiły odpowiednio v = -2 oraz v = -6.

W przypadku porównania pokazanego na rysunku 36 widać, że dynamika zjawisk w obu przypadkach różni się, ale nieznacznie. Na pewno nie da się zauważyć tak dużych różnic, jak przedstawione przez Harlowa z Los Alamos. Różnice te byłyby o wiele mniejsze w przypadku całkowitej stabilizacji członu konwekcyjnego metodą *Upwind* pierwszego rzędu, stąd potrzeba wprowadzenia modyfikacji polegających na wagowym uwzględnieniu rozwiązania przy pomocy schematu centralnego (patrz wstęp).

Na rysunku 38 przedstawione zostały wysokości szczytu kropli nad powierzchnią swobodną (pozioma, kreskowana linia), w czasie trwania zjawiska jej wpadania do zbiornika, dla różnych prędkości początkowych kropli. Widać wyraźnie, że zwiększanie prędkości początkowej kropli powoduje obniżenie minimalnej wysokości powierzchni swobodnej, co z powodu większych



Rysunek 35: Symulacja kropli wpadającej do głębokiego zbiornika dla prędkości v=-1.0 kropli w momencie uderzenia.

ciśnień na dnie zbiornika prowadzi do utworzenia wyższej kolumny cieczy w fazie IV symulacji. Na rysunku 37 pokazany został wykres ciśnienia na dnie zbiornika (pod kroplą, przy



Rysunek 36: Symulacja dla prędkości v = -2.0 (po lewej) oraz v = -6 (po prawej)

ściance dolnej) pokazujący widoczną korelację między ciśnieniem w zbiorniku, a zjawiskami zachodzącymi na powierzchni cieczy swobodnej.

Patrząc na przypadek prędkości v = -6, widać, że początkowy wzrost ciśnienia związany z uderzeniem i wstępnym oddaniem energii kinetycznej przez kroplę osiąga maksimum w okolicy czasu T = 2. Następnie w miarę obniżania się powierzchni cieczy w punkcie uderzenia kropli (rysunek 38) ciśnienie maleje, co wytłumaczyć można wypychaniem cieczy na boki (wzrost wysokości powierzchni swobodnej przy ściankach naczynia, patrz rysunek 35). Następnie dla T = 9 widać, że wysokość cieczy w punkcie wlotu kropli (rysunek 38) oraz ciśnienie na dnie naczynia osiąga minimum po którym następuje szybki wzrost obu wartości. W okolicy punktu



Rysunek 37: Ciśnienie na dnie zbiornika, pod kroplą dla dwóch różnych prędkości początkowych kropli.





T = 13 następuje najbardziej interesująca część zachowania się ciśnienia: przy stale wzrastającej wysokości kropli nad powierzchnią swobodną, ciśnienie zaczyna maleć, co tłumaczy powstanie pionowej kolumny cieczy (rysunek 35). Na pokazanym wykresie widać oscylacyjne zachowanie się wartości ciśnienia dla prędkości v = -6, które być może są jednym z powodów tego, iż w przeprowadzonej symulacji nie następuje faza V zjawiska - oderwanie kropli na szczycie kolumny powstającej w fazie IV.

Niestety użycie prędkości wlotowych kropli v > 6 powoduje kompletną zmianę obserwowanego zjawiska ze względu na zbyt szybkie i dynamiczne wyrzucenie cieczy w kierunkach poziomych po fazie I.

Otrzymane wyżej rozwiązania są symetryczne, co potwierdza że kod numeryczny nie wprowadza niedokładności (związanych z kierunkiem obliczeń przyjętych w procedurach iteracyjnych na ciśnienie oraz w procedurach liczących pola prędkości) do rozwiązania. Symetrię tę uzyskaliśmy po wnikliwej i dokładnej analizie każdego z elementów kodu obliczeniowego, gdyż początkowo otrzymywane rezultaty nie wykazywały tej cechy. Szczególnie ważna, ze względu na symetrię rozwiązania okazała się pętla iteracyjna na ciśnienie, gdzie ściśle określony kierunek przejścia siatki przy cyklicznym wyliczaniu pola ciśnienia metodą sukcesywnej nad-relaksacji wprowadza sztuczne gradienty ciśnienia w danym kierunku. Ze względu na tę cechę wprowadziliśmy do istniejącego kodu modyfikację polegającą na naprzemiennym przejściu siat-ki obliczeniowej: dla kroków parzystych ze strony lewej w górę, dla kroków nieparzystych - ze strony prawej w dół.

7 Wnioski

Główny cel niniejszej pracy magisterskiej, czyli stworzenie od podstaw kompletnego kodu do symulacji szerokiego zakresu zjawisk zachodzących w cieczach nieściśliwych, został zrealizowany. Wyniki standardowych testowych przypadków przepływu przez zamknięty kanał (*ang. Couette Flow*) [3, 33] oraz jaskinię (*ang. Lid-Driven Cavity Flow*) [6, 34, 50] pokazały, że kod numeryczny doskonale rozwiązuje przypadki przepływów w obszarach zamkniętych (obszar symulacji w całości wypełniony cieczą, bez powierzchni swobodnej). Dla przypadku cieczy znajdującej się w zbiorniku z próżnią (problem ruchomych warunków brzegowych na powierzchni swobodnej) przeprowadzony został test zerwanej tamy (*ang. Broken Dam Problem*) [14, 24]. Otrzymane wyniki porównaliśmy do prac opierających się o inne metody rozwiązania oraz do danych eksperymentalnych. Uzyskana została bardzo dobra zgodność z obliczeniami [14] oraz z danymi doświadczalnymi [24].

Po przeprowadzeniu testów walidacyjnych, potwierdzających prawidłowe działanie kodu numerycznego, rozwiązanych zostało kilka problemów przepływu cieczy w kanałach zamkniętych oraz otwartych. Oprócz rozwiązania dwóch klasycznych problemów: przepływu przez zakrzywione kolano i powstawania wirów przy ścianach, oraz ścieżki wirowe von Karmana, podjęliśmy próbę dokładnej wizualizacji przepływu przez pęk rur zawieszonych w poruszającej się cieczy. Otrzymane wyniki pozwoliły dokładnie przeanalizować to zjawisko. Porównanie wyników do danych doświadczalnych [46, 43], dało z jednej strony na kolejny dowód poprawnego działania kodu, z drugiej zaś - na dokładniejszy obraz zachowania cieczy w miejscach trudno pokazanych przez eksperyment (obszar wirowy tuż za pojedynczą rurą).

W przypadku powierzchni swobodnej, zagadnieniem jakie chcieliśmy rozwiązać, była sferyczna kropla cieczy spadająca na płaską powierzchnię oraz do głębokiego zbiornika. Dla przypadku pierwszego, otrzymane wyniki porównane zostały z eksperymentem [19]. Towarzyszy temu zjawisku szereg interesujących, z punktu widzenia fizyki, efektów: formowanie się zagłębienia w cieczy w chwili uderzenia kropli o powierzchnię, powstawanie korony wokół tego zagłębienia, formowanie się pionowej kolumny cieczy (*ang. Worthington Jet*) oraz oderwanie kropli w końcowej fazie symulacji. W przypadku płaskiej powierzchni otrzymane wyniki porównaliśmy do dostępnych danych doświadczalnych [49] i innych obliczeń numerycznych [20] otrzymując bardzo dobrą zgodność. Również w przypadku kropli wpadającej do głębokiego zbiornika, wiele efektów towarzyszących wystąpiło, jak oczekiwaliśmy. Nie udało się jednak uzyskać ostatniej fazy w symulacji kropli wpadającej do głębokiego zbiornika - oderwania kropli od pionowej kolumny *ang. Worthington Jet*.

Próba wytłumaczenia powodu braku efektu oderwania kropli w końcowej fazie symulacji przeprowadzonej w poprzednim rozdziale prowadzi do szeregu wniosków i pokazuje możliwe kierunki rozwoju kodu obliczeniowego w celu uzyskania tego efektu. Pierwszym krokiem poprawy działania kodu powinna być dokładna analiza wpływu wybranego schematu stabilizacji członu konwekcyjnego na otrzymywane wyniki. Zastosowanie schematu *Upwind* pierwszego rzędu wprowadza bardzo znaczną dyfuzję numeryczną do otrzymywanych rozwiązań (notabene dzięki temu możliwe było przeprowadzenie symulacji dla $\mu = 0$), co wygładza znacznie otrzymywane rezultaty powodując, że pomimo braku lepkości ciecz zachowuje się, jak gdyby posiadała dość znaczną lepkość. Zupełnie nie zgadza się to z wynikami z literatury, co wskazuje, że warto byłoby stabilizować człony konwekcyjne metodami wyższych rzędów *SMART*, *VONOS*, *UTOPIA itd.* [10, 47].

Dość zastanawiającym jest również założenie przez Harlowa i Shannona kompletnego braku napięcia powierzchniowego w cieczy [19, 20]. Z jednej strony dość duża skala opisywanych zjawisk sugeruje, że napięcie powierzchniowe nie odegra znacznej roli, z drugiej zaś niewielkie rozmiary kolumn cieczy w końcowych stadiach symulacji sugerować mogą, że napięcie powierzchniowe poprawi wynik. Poprzez tendencję do zmniejszania objętości zajmowanej przez ciecz, obserwowane w kolumnie cieczy przewężenia mogą przez napięcie powierzchniowe zostać oderwane.

Następnym krokiem byłaby próba przepisania kodu obliczeniowego tak, by działał i rozwiązywał dwuwymiarowe zagadnienie we współrzędnych cylindrycznych. Nie jest jasne, czy redukcja wymiaru w przypadku nieliniowych równań Naviera–Stokesa nie wprowadza do rozwiązania zbyt znacznych uproszczeń. Ostatnie wyniki literaturowe [35] symulacji kropli cieczy przeprowadzonej w przypadku trójwymiarowym również nie wykazują jednak efektu oderwania. Postawić można więc pytanie, czy redukcja wymiaru w przypadku silnie nieliniowych, trójwymiarowych równań różniczkowych, nie spowoduje różnic w rozwiązaniach przy opisie w różnych układach odniesienia?

A Dodatek: Wizualizacje zjawisk przepływu

Aby podkreślić walory estetyczne uzyskanych wyników, w niniejszym dodatku zamieszczone zostały kolorowe wizualizacje dwóch zjawisk przepływu omawianych w rozdziale 7.



Rysunek 39: Przepływ przez pęk gęsto upakowanych rur dla Re=50,siatka różnicowa o rozdzielczości $80\times80.$



Rysunek 40: Ścieżka wirowa von Karmana dla T=20ora
zRe=220na siatce o rozdzielczości $200\times70.$

Literatura

- A.A.Amsden and F.H. Harlow. The smac method: A numerical technique for calculating incompressible fluid flows. Technical Report LA-4370, Los Alamos Scientific Laboratory, 1970.
- [2] M.G. Ancona. Computational Methods for Applied Science and Engineering: An Interactive Approach. Rinton Press, USA, 2002.
- [3] J.D. Anderson. Computational Fluid Dynamics The Basics With Applications. McGraw-Hill, USA, 1995.
- [4] V. Armenio. An improved mac method (simac) for unsteady high-reynolds free surface flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 24:185–214, 1997.
- [5] T. Bednarz. Analiza numeryczna procesu mieszania się płynów. Technical report, Akademia Górniczo Hutnicza, 2002.
- [6] A. Brüger, B. Gustafsson, P. Lotstedt, and J. Nilsson. High order accurate solution of the incompressible navierstokes equations. *Journal of Computational Physics (in press)*, 2004.
- [7] L. Brzozowska and K. Brzozowski. Komputerowe modelowanie emisji i rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń. Śląsk, Katowice–Warszawa, 2003.
- [8] S. Chen, D.B. Johnson, P.E. Raad, and D. Fadda. The surface marker and micro cell method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 25:749–778, 1997.
- [9] M.V. Dyke. An Album of Fluid Motion. Parabolic Press, USA, 1982.
- [10] V.G. Fereira, M.F. Tomé, N. Mangiavacchi, A. Castelo, J.A. Cuminato, A.O. Fortuna, and S. McKee. High-order upwinding and the hydraulic jump. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 39:549–583, 2002.
- [11] N. Foster and R. Fedkiw. Practical animation of liquids. Proc. of SIGGRAPH, pages 15–22, 2001.
- [12] N. Foster and D. Metaxas. Realistic animation of liquids. Graphical Models and Image Processing, 58:471–483, 1996.
- [13] J.E. Fromm and F.H. Harlow. Numerical solution of the problem of vortex street development. The Physics of Fluids, 6:975–983, 1963.
- [14] Deborah Greaves. Simulation of interface and free surface flows in a viscous fluid using adapting quadtree grids. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 44:1093– 1117, 2004.
- [15] M. Griebel, T. Dornseifer, and T. Neunhoeffer. Numerical Simulation in Fluid Dynamics: A Practical Introduction. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1998.
- [16] R. Gryboś. Podstawy mechaniki płynów (tom 1 i 2). PWN, Warszawa, 1998.

- [17] F.H. Harlow. Fluid dynamics in group t-3 los alamos national laboratory. Journal of Computational Physics, 195:414–433, 2004.
- [18] F.H. Harlow. Korespondencja własna. 2004.
- [19] F.H. Harlow and J.P. Shannon. Distortion of splashing liquid drop. Science, 157:547–550, 1967.
- [20] F.H. Harlow and J.P. Shannon. The splash of liquid drop. Journal of Applied Physics, 38:3855–3866, 1967.
- [21] F.H. Harlow and J.E. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible. The Physics of Fluids, 8:2182–2189, 1965.
- [22] C.W. Hirt and B.D. Nichols. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, 39:201, 1981.
- [23] J.M. Hyman. Numerical methods for tracking interfaces. Technical Report LA-9917, Los Alamos Scientific Laboratory, 1984.
- [24] J.H. Jeong and D.Y. Yang. An experimental study of the collapse of liquid columns on a rigid horizontal plane. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, A244:312–324, 1952.
- [25] J.H. Jeong and D.Y. Yang. Finite element analysis of transient fluid flow with free surface using vof (volume of fluid) method and adaptive grid. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 26:1127–1154, 2004.
- [26] H. Jiang, C. Meneveau, and R.T. Osborn. The flow field around a freely swimming copepod in steady motion. part ii: Numerical simulation. *Journal of Plankton Research*, 24:191–213, 2002.
- [27] S. Kirpekar. A two dimensional simple solver based on the finite volume method. Technical report, University of California, Department of Mechanical Engineering, 2004.
- [28] L. Landau. Course of Theoretical Physics 6. Fluid Mechanics. Pergamon Press, Oxford, 1959.
- [29] H. Liu, R.J. Wassersug, and K. Kawachi. A computational fluid dynamics study of tadpole swimming. The Journal of Experimental Biology, 199:1245–1260, 1996.
- [30] F. Losasso, F. Gibou, and R. Fedkiw. Simulating water and smoke with an octree data structure. *ACM Trans. Graph.*, 23(3):457–462, 2004.
- [31] M. Matyka. Symulacja cieczy nieściśliwej. *Linux+*, 11:44–47, 2001.
- [32] M. Matyka. Symulacje Komputerowe w Fizyce. Helion, Gliwice, 2002.
- [33] M. Matyka. Incompressible couette problem. Technical Report TMM53-1, University of Linköping, 2003.
- [34] M. Matyka. Solution to two-dimensional incompressible navier-stokes equations with simple, simpler and vorticity-stream function approaches. driven-lid cavity problem: Solution and visualization. Technical Report TMM53-3, University of Linköping, 2003.

- [35] S. McKee, M.F. Tomé, J.A. Cuminato, A. Castelo, and V.G. Fereira. Recent advances in the marker and cell method. Arch. Comput. Meth. Engng., 11:107–142, 2004.
- [36] M. Mueller, S. Schirm, and M. Teschner. Interactive blood simulation for virtual surgery based on smoothed particle hydrodynamics. *Journal of Technology and Health Care*, 12:25–32, 2004.
- [37] B.D. Nichols, C.W. Hirt, and R.S. Hotchkiss. Sola-vof: a solution algorithm for transient fluid flow with multiple boundaries. Technical Report LA-8355, Los Alamos Scientific Laboratory, 1980.
- [38] Suchas V. Patankar. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Hemisphere Publishing Corporation, USA, 1980.
- [39] S.V. Patankar and D.B. Spalding. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *International Journal Heat Mass Transfer*, 15:1787–1806, 1972.
- [40] D. Potter. Metody obliczeniowe fizyki. PWN, Warszawa, 1982.
- [41] L. Prandtl. Dynamika przepływów. PWN, Warszawa, 1956.
- [42] W. Suchecki and S. Alabrudziński. Metoda korekty wykresów pól prędkości w cyfrowej anemometrii obrazowej. Technical report, XV Krajowa Konferencja Mechaniki Płynów, Augustów, 2002.
- [43] W. Suchecki and K. Wołosz. Weryfikacja kodu cfd dla symulacji przepływu cieczy wokół pęku rur przy użyciu metody dpiv. Technical report, XVI Krajowa Konferencja Mechaniki Płynów, Waplewo, 2004.
- [44] R. Szymkiewicz. Modelowanie matematyczne przepływów w rzekach i kanałach. PWN, Warszawa, 2000.
- [45] M.F. Tome, A. Castelo, J. Murakami, J.A. Cuminato, R. Minghim, M.C.F. Oliveira, N.Mangiavacchi, and S. McKee. Numerical simulation of axisymmetric free surface flows. *Journal of Computational Physics*, 157:441–472, 2000.
- [46] S. Umeda and W.J. Yang. Interaction of von karman vortices and intersecting main streams in staggered tube bundles. *Experiments in Fluids*, 26:389–396, 1999.
- [47] A. Varonos and G. Bergeles. Development and assessment of a variable-order nonoscillatory scheme for convection term discretization. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 26:1–16, 1998.
- [48] J.E. Welch, F.H. Harlow, J.P. Shannon, and B.J. Daly. The mac method. a computing technique for solving viscous, incompressible, transient fluid-flow problems involving free surface. Technical Report LA-3425, Los Alamos Scientific Laboratory, 1965.
- [49] A.M. Worthington. A Study on Splashes. The MacMillian Company, New York, 1963.
- [50] J.S. Wu. and Y.L. Shao. Simulation of lid-driven cavity flows by parallel lattice boltzmann method using multi-relaxation-time scheme. *International Journal for Numerical Methods* in Fluids, 46:921–937, 2004.