Západočeská univerzita v Plzni Fakulta aplikovaných věd Katedra matematiky

Diplomová práce

Využití metod s vysokým rozlišením pro modelování turbulence

Jan Šourek

Vedoucí práce: doc. Ing. Marek Brandner, Ph.D. Studijní program: Aplikované vědy a informatika Obor: Matematické inženýrství

19. května 2015

Poděkování

Děkuji doc. Ing. Marku Brandnerovi, Ph.D. za vedení této diplomové práce a za naši dlouhodobou spolupráci. Dále děkuji Ing. Jiřímu Egermaierovi, Ph.D. za uvedení do programu OpenFOAM a Ing. Davidovi Kolenatému za poskytnutí výpočetní kapacity.

Děkuji svým rodičům za podporu během celých mých studií.

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem práci vypracoval samostatně a použil jsem pouze podklady uvedené v přiloženém seznamu literatury.

V Plzni dne $19.\,5.\,2015$

.....

Abstrakt

Diplomová práce se zabývá využitím třídy metod s vysokým rozlišením v poměrně novém přístupu k modelování turbulence, nazývaném ILES (implicit large eddy simulation). Tento přístup je v práci prezentován v kontextu obvyklých metod modelování turbulentního proudění, kterými jsou RANS, LES a DNS. Při simulaci pomocí ILES diskretizační chyba numerického schématu zastupuje roli explicitního SGS modelu využívaného při LES modelování. V této práci využíváme centrální schéma s vysokým rozlišením založené na přístupu Kurganova a Tadmora a rekonstrukci typu MUSCL. Tímto schématem je provedena diskretizace Burgersovy rovnice v jedné prostorové dimenzi a diskretizace soustavy rovnic proudění nestlačitelné newtonovské tekutiny ve dvou prostorových dimenzích. Navierovy-Stokesovy rovnice jsou s rovnicí kontinuity propojeny využitím metody postupných kroků (fractional-step method) a posunuté (staggered) kartézské sítě. Nakonec jsou provedeny numerické experimenty na jednodimenzionální úloze pro Burgersovu rovnici s náhodně generovanou počáteční podmínkou a dvoudimenzionálních úlohách proudění přes zpětný schod a obtékání překážky.

Klíčová slova: výpočetní dynamika tekutin, modelování turbulence, ILES, LES, RANS, DNS, proudění nestlačitelné newtonovské tekutiny, Navierovy-Stokesovy rovnice, Burgersova rovnice, metoda konečných objemů, metody s vysokým rozlišením, rekonstrukce MUSCL, metoda postupných kroků (fractional-step method), posunutá (staggered) síť.

Abstract

The thesis deals with the application of a class of high-resolution methods in a relatively new turbulence modelling approach called ILES (implicit large eddy simulation). This approach is presented in the context of common methods for turbulent flow modelling - RANS, LES and DNS. In ILES, the truncation error of a discretization scheme is exploited to substitute an explicit SGS model used in LES. In the thesis, a central high-resolution scheme based on the approach of Kurganov and Tadmor employing a MUSCL-type reconstruction is used for discretizing the Burgers' equation in one space dimension and the incompressible Newtonian fluid flow governing equations in two space dimensions. The Navier-Stokes equations and the continuity equation are coupled utilizing a fractional-step method and a staggered Cartesian grid. Finally, numerical experiments on one-dimensional problem for the Burgers' equation with a randomly generated initial condition and two-dimensional problems of flow over a backward facing step and flow over an obstacle are performed.

Keywords: CFD, turbulence modelling, ILES, LES, RANS, DNS, incompressible Newtonian fluid flow, Navier-Stokes equations, Burgers' equation, finite volume method, high-resolution methods, MUSCL reconstruction, fractional-step method, staggered grid.

Obsah

Úvod			1	
1	Met	toda konečných objemů pro zákony zachování	3	
	1.1	Obecný tvar zákona zachování	3	
	1.2	Skalární rovnice v jedné prostorové dimenzi a vlastnosti jejího řešení	3	
	1.3	Metoda konečných objemů pro skalární problém v jedné prostorové dimenzi .	5	
		1.3.1 Diskretizace úlohy	5	
		1.3.2 Řád metody a modifikovaná rovnice	9	
		1.3.3 Metody s vysokým rozlišením	11	
	1.4	Metoda konečných objemů pro nelineární soustavy rovnic v jedné prostorové		
		dimenzi	12	
	1.5	Metoda konečných objemů pro nelineární soustavy rovnic ve více prostorových		
		dimenzích	13	
2	Mat	tematický model proudění	15	
	2.1	Soustava rovnic popisující proudění nestlačitelné newtonovské tekutiny	15	
	2.2	Reynoldsovo číslo	16	
	2.3	Turbulence	17	
	2.4	Energetická kaskáda a škály turbulentního proudění	18	
	2.5	Proudění v blízkosti pevné stěny	19	
	2.6	Eulerovy rovnice	19	
3	Met	tody modelování turbulence	21	
	3.1	DNS	22	
	3.2	RANS	23	
		3.2.1 Modely založené na turbulentní viskozitě	25	
		3.2.2 Komplexnější modely turbulence	27	
		3.2.3 Problémy modelů RANS	27	
		3.2.4 Shrnutí RANS	28	
	3.3	LES	28	
		3.3.1 Energetická analýza	30	
		3.3.2 Modely založené na SGS turbulentní viskozitě	31	
		3.3.3 Modely typu scale-similarity a smíšené modely	34	
		3.3.4 Modelování v blízkosti stěny	35	
		3.3.5 Shrnutí LES	36	

	3.4	ILES	36			
		3.4.1 Porovnání klasického přístupu LES a přístupu ILES	38			
		3.4.2 Historická perspektiva	39			
		3.4.3 Zachycení fyziky pomocí numerické metody	40			
		3.4.4 Metody vhodné pro ILES	41			
		3.4.5 Shrnutí ILES	42			
4	Рор	is zvoleného diskretizačního schématu 4	43			
	4.1^{-}	Diskretizace Burgersovy rovnice v jedné prostorové dimenzi	43			
	4.2	Diskretizace soustavy rovnic proudění nestlačitelné newtonovské tekutiny ve				
		dvou prostorových dimenzích	44			
		4.2.1 Diskretizační síť	45			
		4.2.2 Schéma časové diskretizace a metody postupných kroků	46			
		4.2.3 Aproximace konvektivních toků	46			
		$4.2.4 {\rm Aproximace\ Laplaceova\ operátoru,\ gradientu\ tlaku\ a\ divergence\ rychlosti} \ 4.2.4$	47			
		4.2.5 Okrajové podmínky	48			
		4.2.6 Řešení algebraických soustav rovnic	49			
5	Numerické experimenty 51					
	5.1	Burgersova rovnice	51			
		5.1.1 Parametry experimentů	51			
		5.1.2 Výsledky experimentů pro $\nu = 0$ a $\nu = 10^{-3}$	53			
	5.2	Proudění nestlačitelné tekutiny ve dvou prostorových dimenzích	56			
		5.2.1 Popis testovacích úloh	56			
		5.2.2 Parametry diskretizace	57			
		5.2.3 Referenční řešení	58			
		5.2.4 Výsledky experimentů	58			
		5.2.4.1 Proudění přes zpětný schod	58			
		5.2.4.2 Obtékání překážky	61			
	5.3	Shrnutí výsledků experimentů	64			
Zź	ivěr	f	65			

Úvod

Turbulence je fascinujícím jevem, který můžeme běžně pozorovat v podobě proudění vody v řece, kouře nad hořícím předmětem nebo tvorby mraků na obloze. Turbulentní proudění bývá charakterizováno jako vířivé, chaotické chování tekutiny se zdánlivě náhodnými změnami okamžitých veličin.

Základ matematického modelu, který je dodnes všeobecně považován za platný model proudění, a to včetně proudění turbulentního, tvoří soustava Navierových-Stokesových rovnic, formulovaných již před téměř 200 lety. Tato soustava nelineárních parciálních diferenciálních rovnic byla formulována spojením druhého Newtonova zákona a projevů molekulární viskozity tekutin na makroskopických škálách za pomocí představy kontinua - spojitého prostředí se spojitým rozložením hmotnosti látek [1].

Navierovy-Stokesovy rovnice nám některé zákonitosti turbulentního proudění pomohly odhalit, nicméně k úplnému pochopení turbulence stále nedochází [26]. Extrémní složitost a rozsah časových a délkových škál nám znemožňují analytický popis řešení pomocí běžných funkcí. Otázka existence a jednoznačnosti hladkého řešení počáteční úlohy pro Navierovy-Stokesovy rovnice po neomezenou dobu od počátečního času není dodnes vyřešena [10]. Pokud se ukáže, že existenci a jednoznačnost řešení nelze obecně zaručit, je možné, že nějaký fyzikální princip stojící za turbulentním prouděním nám zatím uniká [26][28]. Slavný fyzik Richard Feynman označil problém turbulence za nejdůležitější nevyřešený problém klasické fyziky [26].

Výpočetní dynamika tekutin (CFD) jako obor, objevující se v důsledku rozvoje výpočetní techniky, řeší rovnice proudění tekutiny za pomocí numerických metod. Obtékání křídel letadla, proudění v cévách v lidském těle při snížené viskozitě krve nebo proudění vzduchu v atmosféře a meteorologické jevy jsou některé příklady turbulentního proudění, které se takto pomocí výpočetních systémů snažíme simulovat. Zdánlivě chaotické chování tekutin a vlastnosti turbulentního proudění na větších délkových škálách jsou důsledkem komplexity pohybů na malých škálách. Zachycení správných fyzikálních vlastností při numerickém řešení rovnic tak nemáme zaručeno, pokud na nejmenších škálách proudění přímo nevyřešíme. Takový přístup s sebou ale přináší neskutečnou výpočetní náročnost. V důsledku toho se využívají tzv. modely turbulence. Jedná se o modely, pomocí kterých se snažíme popsat chování turbulentního proudění na větších délkových škálách bez toho, aniž bychom přímo řešili proudění na malých škálách.

Modelování turbulentního proudění je obvykle založeno na řešení upraveného systému rovnic pro jisté průměrované hodnoty veličin. Hlavní směry modelování turbulentního proudění zahrnují přístup RANS (*Reynolds-averaged Navier-Stokes*), využívající jisté statistické středování Navierových-Stokesových rovnic, a přístup LES (*large eddy simulation*), jenž využívá filtrovaní Navierových-Stokesových rovnic v prostoru. V takto upravených soustavách rovnic se vyskytují oproti původnímu systému Navierových-Stokesových rovnic dodatečné členy, které reprezentují efekty fluktuací na hodnoty průměrovaných veličin. Tyto členy jsou aproximovány pomocí modelů turbulence. Nicméně přesnost doposud vyvinutých modelů turbulence je diskutabilní a jejich aplikovatelnost často omezená [8]. Existence obecného modelu turbulence je jedním z otevřených problémů fyziky [4].

V poslední době se ukazuje, že jistá schémata spadající do třídy metody konečných objemů, tzv. metody s vysokým rozlišením, při aplikaci na původní systém Navierových-Stokesových rovnic tvarem diskretizační chyby připomínají některé modely turbulence typu LES. To lze zdůvodnit mimo jiné tím, že metoda konečných objemů je odvozena na základě obecnější integrální formulace zákonů zachování a je pro vyvinuta pro aproximaci integrálních průměrů veličin, což je velice podobný přístup jako hledání filtrovaného řešení při modelování pomocí LES. Modelování turbulence pomocí těchto metod je proto označováno jako ILES (*implicit large eddy simulation*) [13].

Přístup ILES s sebou přináší určité výhody. Jednou z nich je zjednodušení procesu modelování turbulence díky všeobecné rozšířenosti algoritmů metody konečných objemů v existujících výpočetních softwarových balících. Metody s implicitním modelem turbulence navíc můžeme aplikovat na libovolnou úlohu proudění, aniž bychom předem věděli, zda se bude jednat o proudění turbulentní nebo ne. Nicméně přístup ILES nebyl po dlouho dobu CFD komunitou uznáván [13].

Tato práce je strukturována následujícím způsobem. První kapitola je koncipována jako přehled základních pojmů a principů týkajících se problémů se zákony zachování a metody konečných objemů pro jejich řešení. Zaměřujeme se zejména na vlastnosti entropického řešení skalární hyperbolické rovnice v jedné prostorové dimenzi a na vlastnosti metod pro hledání jeho aproximace. Na rozšíření uvedených principů jsou pak založené metody konečných objemů pro úlohy ve více prostorových dimenzích.

Ve druhé kapitole je uveden matematický model proudění nestlačitelné newtonovské tekutiny tvořený soustavou Navierových-Stokesových rovnic, reprezentující bilanci hybnosti, a rovnicí kontinuity, představující zákon zachování hmotnosti. Jsou uvedeny základní charakteristiky turbulentního proudění a směry jeho studia. Ve třetí kapitole jsou pak představeny klasické metody modelování turbulentního proudění, a to přístupy DNS, RANS a LES. V jejich kontextu je následně uveden přístup ILES.

Čtvrtá kapitola této práce pak popisuje vybrané schéma ze třídy metod s vysokým rozlišením, a to schéma Kurganova a Tadmora založené na po částech lineární MUSCL rekonstrukci s použitím limiterů. Toto schéma spadá pod metody potenciálně vhodné pro simulace pomocí přístupu ILES. Popisujeme aplikaci tohoto schématu na nelineární Burgersovu rovnici v jedné prostorové dimenzi a soustavu rovnic popisující proudění nestlačitelné tekutiny ve dvou prostorových dimenzích. V páté kapitole jsou pak provedeny numerické experimenty na úlohách, v jejichž řešení se vyskytují fluktuace pod úrovní rozlišení diskretizační sítě.

Kapitola 1

Metoda konečných objemů pro řešení problémů se zákony zachování

1.1 Obecný tvar zákona zachování

Uvažujme vektor konzervativních veličin q, jehož hodnoty jsou v prostoru a čase vyjádřeny jako vektorová funkce $q(x,t), q : \Omega \subset \mathbb{R}^n \times [0,\infty) \to \mathbb{R}^m$. Složky vektorové funkce qoznačíme $q_p, p = 1, 2, ..., m$. Zákon zachování konzervativních veličin q vyjádříme v integrálním tvaru jako rovnost¹

$$\int_{\Omega_0} q_p(x, t_2) \,\mathrm{d}x - \int_{\Omega_0} q_p(x, t_1) \,\mathrm{d}x + \int_{t_1}^{t_2} \int_{\partial\Omega_0} f_p^r(q) n_r(x) \,\mathrm{d}S \,\mathrm{d}t = 0, \quad p = 1, 2, ..., m, \quad (1.1)$$

pro libovolnou kontrolní oblast $\Omega_0 \subset \Omega$ a libovolné hodnoty $t_1, t_2 \in [0, \infty)$, přičemž r nabývá hodnot od 1 do n. Funkce $f : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ je toková funkce veličiny a n(x) je vektor vnější normály k hranici kontrolní oblasti Ω_0 .

Za předpokladů existence derivací funkcí lze přejít k diferenciálnímu tvaru zákona zachování ve tvaru rovnosti

$$\frac{\partial q_p}{\partial t} + \frac{\partial f_p^r(q)}{\partial x_r} = 0, \quad p = 1, 2, ..., m$$
(1.2)

pro libovolné $x \in \Omega$ a $t \in (0, \infty)$ [6].

1.2 Skalární rovnice v jedné prostorové dimenzi a vlastnosti jejího řešení

Základní pojmy zavedeme na úloze v jedné prostorové dimenzi pro skalární veličinu $q = q(x, t), q : \mathbb{R} \times [0, \infty) \to \mathbb{R}$ s tokovou funkcí $f(q), f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.

Zákon zachování skalární veličiny qv integrálním tvaru vyjádříme jako rovnost

$$\int_{x_1}^{x_2} q(x,t_2) \,\mathrm{d}x - \int_{x_1}^{x_2} q(x,t_1) \,\mathrm{d}x + \int_{t_1}^{t_2} f(q(x_2,t)) \,\mathrm{d}t - \int_{t_1}^{t_2} f(q(x_1,t)) \,\mathrm{d}t = 0 \tag{1.3}$$

 $^{^{1}\}mathrm{V}$ zápisech se využívá Einsteinova sumační konvence, tedy sčítáme přes všechny indexy, které se v daném výrazu vyskytují právě dvakrát.

pro libovolné $x_1, x_2 \in \mathbb{R}$ a $t_1, t_2 \in [0, \infty)$. Diferenciální tvar zákona zachování veličiny q pak za předpokladu existence derivací funkcí q a f zapíšeme jako rovnost

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial f(q)}{\partial x} = 0 \tag{1.4}$$

pro libovolné $x \in \mathbb{R}$ a $t \in (0, \infty)$.

Zabývejme se počáteční úlohou

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial f(q)}{\partial x} = 0, \qquad x \in \mathbb{R}, \ t \in (0, \infty),$$

$$q(x, 0) = q_0(x), \qquad x \in \mathbb{R}.$$
(1.5)

Definice 1 (klasické řešení). [7] Klasickým řešením úlohy (1.5) nazveme q(x,t) takové, že $q(x,t) \in C(\mathbb{R} \times [0,\infty))$ má všechny derivace obsažené v rovnici (1.5) spojité na $\mathbb{R} \times (0,\infty)$ a splňuje rovnici (1.5) na $\mathbb{R} \times (0,\infty)$ a počáteční podmínku na \mathbb{R} .²

Jelikož i pro hladkou počáteční podmínku se v řešení nelineární rovnice mohou objevit nespojitosti, je nutné zavést koncept zobecněného řešení.

Definice 2 (slabé řešení). [7] Slabým řešením úlohy (1.5) nazveme q(x,t) takové, že $q(x,t) \in L^{\infty}_{loc}(\mathbb{R} \times [0,\infty)), q_0(x,t) \in L^{\infty}_{loc}(\mathbb{R}), f(q) \in C^1(\mathbb{R})$ a pro libovolné $\varphi \in C^{\infty}_0(\mathbb{R} \times [0,\infty))$ platí rovnost ³

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \left(\frac{\partial\varphi}{\partial t}q + \frac{\partial\varphi}{\partial x}f(q)\right) \mathrm{d}x \,\mathrm{d}t = -\int_{-\infty}^\infty \varphi(x,0)q_0(x)\,\mathrm{d}x.$$
 (1.6)

Má-li úloha klasické řešení, je toto řešení i slabým řešením. Slabé řešení úlohy (1.5) ale obecně není dáno jednoznačně. Kdybychom ovšem uvažovali úlohu

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial f(q)}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} \quad x \in \mathbb{R}, \ t \in (0, \infty),
q(x, 0) = q_0(x), \qquad x \in \mathbb{R}$$
(1.7)

pro $\nu > 0$, lze ukázat, že tato úloha má jednoznačné klasické řešení [7]. Uvažujeme tedy, že "fyzikálně smysluplné" řešení úlohy (1.5) lze vyjádřit jako limitní řešení úlohy (1.7) pro $\nu \to 0_+$. Tyto úvahy vedly k následující definici.

Definice 3 (entropické řešení). [7] Slabé řešením úlohy (1.5) nazveme entropické, pokud pro libovolné $\varphi \in C_0^1(\mathbb{R} \times \mathbb{R}), \varphi \ge 0$ a pro každou konvexní a spojitou entropii E s entropickým tokem F toto řešení splňuje nerovnost ⁴

$$\int_{0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial\varphi}{\partial t} E(q) + \frac{\partial\varphi}{\partial x} F(q)\right) dx dt + \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x,0) E(q_0(x)) dx \ge 0.$$
(1.8)

 $^{^{2}}C(\Omega)$ značí prostor funkcí spojitých na Ω .

 $^{{}^{3}}L^{\infty}_{loc}(\Omega)$ značí Lebesgueův prostor funkcí esenciálně omezených na všech kompaktních podmnožinách Ω . $C^{1}(\Omega)$ značí prostor funkcí jednou spojitě diferencovatelných na Ω . $C^{\infty}_{0}(\Omega)$ značí prostor funkcí nekonečněkrát spojitě diferencovatelných na Ω majících kompaktní nosič.

 $^{{}^{4}}C_{0}^{1}(\Omega)$ značí prostor funkcí jednou spojitě diferencovatelných na Ω s kompaktním nosičem.

Jako *Riemannův problém* pro skalární nelineární rovnici budeme označovat úlohu s ne-spojitou počáteční podmínkou ve tvaru

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial f(q)}{\partial x} = 0, \ x \in \mathbb{R}, \ t \in (0, \infty),$$

$$q(x, 0) = q_0(x) = \begin{cases} q_l & \text{pro } x < 0, \\ q_r & \text{pro } x > 0, \end{cases}$$
(1.9)

kde $q_l, q_r \in \mathbb{R}$.

Dále uvedeme důležitou existenční větu.

Věta 1. [7][24] Skalární počáteční úloha (1.5), kde $f \in C^1(\mathbb{R})$ a $q_0 \in L^{\infty}_{loc}(\mathbb{R})$, má jednoznačné entropické řešení $q(x,t) \in L^{\infty}(\mathbb{R} \times (0,\infty))$.⁵

Entropické řešení úlohy (1.5) má následující vlastnosti [7][24]:

- stabilita, tj. platí $||q||_{L^{\infty}(\mathbb{R}\times(0,\infty))} \leq ||q_0||_{L^{\infty}(\mathbb{R})}$, ⁶
- *konzervativita*, tj. pokud $\int_{\mathbb{R}} |q_o(x)| \, dx < \infty$, potom $\int_{\mathbb{R}} q(x,t) \, dx = \int_{\mathbb{R}} q_o(x) \, dx$ pro všechna $t \in (0, \infty)$,
- konečná oblast závislosti (princip kauzality), tj. řešení v libovolném bodě (x, t) je závislé pouze na restrikci počáteční podmínky $q_0(x)$ na interval [x Mt, x + Mt], kde $M = \sup\{|f'(q)|; q \in [\inf_{x \in \mathbb{R}}(q_0(x)), \sup_{x \in \mathbb{R}}(q_0(x))]\},$
- monotonie, tj. pokud pro dvě počáteční podmínky $a_0(x)$ a $b_0(x)$ platí $a_0(x) \leq b_0(x)$ pro skoro všechna x, potom pro příslušná řešení platí $a(x,t) \leq b(x,t)$ pro skoro všechna $x \in \mathbb{R}$ a všechna $t \in (0, \infty)$,
- nerostoucí totální variace (TVD vlastnost) ⁷, tj. pokud $TV(q_0(.)) < \infty$, potom $TV(q(.,t)) < TV(q_0(.))$ pro všechna $t \in (0,\infty)$,
- zachování monotonie, tj. pokud je $q_0(x)$ monotónní funkce, je řešení q(x,t) také monotónní funkce vzhledem k x pro všechna $t \in (0, \infty)$.

1.3 Metoda konečných objemů pro skalární problém v jedné prostorové dimenzi

1.3.1 Diskretizace úlohy

Diskretizace úlohy metodou konečných objemů (podrobnosti lze nalézt v [19]) vychází z tvaru zákona zachování (1.3). Zavedeme dělení prostoru $x_{1/2} < ... < x_{i-1/2} < x_{i+1/2} < ... < x_{N+1/2}$ pro $i = 1, ..., N, N \in \mathbb{N}$. Tímto dělením výpočetní oblast rozdělíme na N

 $^{{}^{5}}L^{\infty}(\Omega)$ značí Lebesgueův prostor funkcí esenciálně omezených na Ω .

 $^{^6 \}mathrm{Norma}$ na prostoru $L^\infty(\Omega)$ je definována jako $||q|| = \mathrm{es} \sup_{x \in \Omega} |q(x)|$

⁷Totální variace funkce q(x) je definována jako $TV(q(.)) = \sup_{\mathcal{D}} \sum_{j=1}^{N} |q(\xi_j) - q(\xi_{j-1})|$, kde \mathcal{D} je dělení $-\infty = \xi_0 < \xi_1 < \ldots < \xi_{N-1} < \xi_N = \infty, \ N \in \mathbb{N}$

intervalů (obecně konečných objemů, ty v jedné dimenzi představují interval). Buňka C_i je pak dána jako interval

$$C_i = (x_{i-1/2}, x_{i+1/2}). \tag{1.10}$$

Za předpokladu existence parciálních derivací podle času zákon zachování (1.3) přechází do tvaru

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{C}_i} q(x,t) \,\mathrm{d}x = (f(q(x_{i-1/2},t)) - f(q(x_{i+1/2},t))), \quad i = 1, \dots, N.$$
(1.11)

Zavedeme-li aproximaci integrálního průměru veličiny q v buňce C_i jako

$$Q_i(t) \approx \frac{1}{\Delta x} \int_{\mathcal{C}_i} q(x, t) \,\mathrm{d}x \tag{1.12}$$

a aproximace toku $f(q(x_{i+1/2}, t))$ hraničním bodem $x_{i+1/2}$ buňky C_i pomocí numerické tokové funkce \mathcal{F} jako

$$F_{i+1/2}(t) = \mathcal{F}(Q_{i-k}(t), ..., Q_{i+l}(t)) \approx f(q(x_{i+1/2}, t)),$$
(1.13)

zapíšeme tzv. semidiskrétní schéma metody konečných objemů jako

$$\frac{\mathrm{d}Q_i(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{\Delta x} (F_{i+1/2}(t) - F_{i-1/2}(t)), \quad i = 1, \dots, N.$$
(1.14)

Pro numerickou tokovou funkci $F_{i+1/2}(t) = \mathcal{F}(Q_i(t), Q_{i+1}(t))$ je celkový numerický tok $-(F_{i+1/2}(t) - F_{i-1/2}(t))$ do buňky C_i závislý na třech hodnotách $Q_{i-1}(t), Q_i(t), Q_{i+1}(t),$ tedy říkáme, že se jedná o *tříbodové schéma*.

Zavedeme-li označení

$$Q_i^n = Q_i(t_n), \qquad F_{i+1/2}^n = \mathcal{F}(Q_i^n, Q_i^{n+1}),$$
(1.15)

vektor

$$Q^{n} = (Q_{1}^{n}, ..., Q_{i}^{n}, ..., Q_{N}^{n})$$
(1.16)

a operátor \mathcal{N} jako operátor přechodu od časové vrstvy t_n k časové vrstvě t_{n+1} pomocí explicitního schématu pro aproximaci časové derivace, schéma můžeme obecně zapsat jako

$$Q^{n+1} = \mathcal{N}(Q^n). \tag{1.17}$$

Pokud je \mathcal{N} lineární operátor, řekneme že *metoda je lineární*.

Při aproximaci časové derivace pomocí explicitní Eulerovy metody přechází schéma do tzv. divergentního tvaru

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i+1/2}^n - F_{i-1/2}^n), \quad i = 1, ..., N,$$
(1.18)

kde $\Delta t = t_{n+1} - t_n$. Jedná-li se o tříbodové schéma, označíme x_{i-1}, x_i, x_{i+1} jako numerickou oblast závislosti bodu x_i v jednom kroku metody.

Numerickou tokovou funkci $\mathcal{F}(Q_i^n, Q_i^{n+1})$ závislou pouze na dvou hodnotách Q_i^n, Q_i^{n+1} , můžeme interpretovat jako řešič lokálního Riemannova problému (1.9) s hodnotami $q_l = Q_i^n$ a $q_r = Q_{i+1}^n$ (rovnice je autonomní, řešení problému je tedy nezávislé na poloze x). Řešení Riemannova problému je obecně konstantní na paprscích x/t = konstanta a hodnotu řešení na paprsku x/t = 0, tj. pro x = 0, označíme jako $\hat{q} = q(0, t)$. Numerický řešič Riemannova problému pak aproximuje přesné řešení Riemannova problému, tedy $\mathcal{F}(Q_i^n, Q_i^{n+1}) \approx f(\hat{q})$.

Uvedeme dále definice některých důležitých pojmů.

Definice 4 (konzistence). [6][7] Řekneme, že numerická toková funkce \mathcal{F} je konzistentní s rovnicí (1.5), jestliže jsou splněny následující dvě podmínky

- $\mathcal{F}(q, q, ..., q) = f(q)$ pro libovolné $q \in \mathbb{R}$,
- $\exists K > 0 : |\mathcal{F}(q_1, q_2, ..., q_k) f(q)| \le K \max(|q_1 q|, ..., |q_k q|)$ pro libovolné $q_1, q_2, ..., q_k \in \mathbb{R}$ a $q \in \mathbb{R}$.

Pro potřeby následující definice zavedeme vektor hodnot přesného řešení q(x,t) v časové hladině t_n ve středech buněk C_i , tj. v bodech $x_i = \frac{x_{i+1/2} + x_{i-1/2}}{2}$, jako

$$q^{n} = (q(x_{1}, t_{n}), ..., q(x_{i}, t_{n}), ..., q(x_{i}, t_{n})).$$
(1.19)

Definice 5 (lokální diskretizační chyba). [7][19] Lokální diskretizační chybu τ^n metody definujeme vztahem

$$\tau^n = \frac{1}{\Delta t} (\mathcal{N}(q^n) - q^{n+1}). \tag{1.20}$$

Definice 6 (řád metody). [7][16] Řekneme, že metoda je řádu p, pokud pro lokální diskretizační chybu τ^n při konstantním poměru $\frac{\Delta t}{\Delta x}$ platí

$$\tau^n = \mathcal{O}(\Delta t^p) \quad (= \mathcal{O}(\Delta x^p)). \tag{1.21}$$

Řekneme, že metoda je řádu q v prostoru a řádu r v čase, pokud pro lokální diskretizační chybu τ^n platí

$$\tau^n = \mathcal{O}(\Delta x^q + \Delta t^r). \tag{1.22}$$

Předchozí definici uvažujeme, že přesné řešení lze rozvinout do Taylorova rozvoje. To však nelze provést, pokud se v přesném řešení objevují nespojitosti. Proto obvykle hovoříme pouze o *formálním* řádu metody.

Definice 7 (globální diskretizační chyba metody). [7] *Globální diskretizační chybu* $\varepsilon_j^n v \text{ bodě} x_i a \text{ čase } t_n \text{ definujeme vztahem}$

$$\varepsilon_i^n = Q_i^n - q(x_i, t_n). \tag{1.23}$$

Definice 8 (konvergentní metoda). [7] Metoda označíme jako konvergentní, jestliže pro libovolné $T \in (0, \infty)$ a všechna $i \in \{1, ..., N\}$ a n taková, že $n \leq \frac{T}{\Delta t}$, platí

$$\varepsilon_i^n \to 0 \quad pro \quad \Delta t \to 0 \tag{1.24}$$

při konstantním poměru $\frac{\Delta t}{\Delta x}$.

Nutnou podmínkou konvergence metody je tzv. *CFL podmínka (Courant – Friedrichs – Lewy)* [7][19]. Tato podmínka hovoří o tom, že metoda může být konvergentní pouze pokud oblast závislosti libovolného bodu diskretizační sítě vzhledem k příslušné rovnici je podmnožinou numerické oblasti závislosti tohoto bodu pro Δt a Δx jdoucí k nule při konstantním poměru $\frac{\Delta t}{\Delta x}$. Pro tříbodové schéma má podmínka tvar

$$CFL \equiv \max_{q} |f'(q)| \frac{\Delta t}{\Delta x} \le 1,$$
 (1.25)

7

přičemž maximum uvažujeme přes všechny hodnoty veličiny q objevující se v řešení úlohy a číslo CFL nazýváme Courantovo číslo.

Nyní uvedeme definice některých vlastností numerických metod analogických k vlastnostem entropického řešení úlohy (1.5).

Definice 9 (konzervativní metoda). [7] Metoda se nazývá konzervativní, pokud pro přibližné řešení Q^n úlohy platí pro všechna $n \in \mathbb{N}$

$$\sum_{i=1}^{N} Q_i^{n+1} = \sum_{i=1}^{N} Q_i^n.$$
(1.26)

Poznamenejme, že metody v divergentním tvaru (1.18) jsou vždy konzervativní.

Definice 10 (monotónní metoda). [7] Metoda se nazývá monotónní, pokud pro každá dvě přibližná řešení U^n a V^n dané úlohy s počátečními podmínkami u_0 a v_0 pro všechna $n \in \mathbb{N}$ platí

$$(V_i^n \ge U_i^n \quad \forall i \in \{1, ..., N\}) \implies (V_i^{n+1} \ge U_i^{n+1} \quad \forall i \in \{1, ..., N\}).$$
(1.27)

Definice 11 (pozitivní metoda). [6] Metoda se nazývá pozitivní, pokud pro přibližné řešení Q^n dané úlohy platí

$$Q_i^{n+1} \in [\min_i(Q_i^n), \max_i(Q_i^n)]$$
(1.28)

pro všechna $n \in \mathbb{N}$ a $i \in \{1, ..., N\}$).

Definice 12 (TVD vlastnost). [7] Metoda má vlastnost TVD (total variation diminishing), pokud pro přibližné řešení Q^n pro všechna $n \in \mathbb{N}$ platí

$$TV(Q^{n+1}) \le TV(Q^n), \tag{1.29}$$

kde totální variace přibližného řešení $TV(Q^n)$ je definována jako

$$TV(Q^n) = \sum_{i=1}^{N-1} |Q_{i+1}^n - Q_i^n|.$$
(1.30)

Definice 13 (zachování monotonie). [7] Řekneme, že metoda zachovává monotonii, pokud pro monotónní počáteční podmínku $q_0(x)$ úlohy je přibližné řešení Q^n úlohy také monotónní.

Nyní uvedeme důležité věty týkající se vlastností numerických metod.

Věta 2. [7] Každá monotónní metoda má vlastnost TVD.

Věta 3. [6] Každá pozitivní metoda má vlastnost TVD.

Věta 4. [7] Každá TVD metoda zachovává monotonii.

Věta 5. [7] Numerické řešení získané konzistentní monotónní metodou konverguje k entropickému řešení.

Věta 6 (Godunovova). [7][16] Lineární metoda zachovávající monotonii je (až na speciální výjimky) prvního řádu.

1.3.2 Rád metody a modifikovaná rovnice

K základním charakteristikám metody patří její řád, který je určen tvarem lokální diskretizační chyby. S tou pak úzce souvisí tzv. modifikovaná rovnice. Jedná se o parciální diferenciální rovnici sestavenou tak, aby hodnoty jejího přesného řešení v příslušných bodech odpovídaly hodnotám získaným z diferenčního schématu numerické metody. Tato rovnice tedy umožňuje vyšetřování chování diskrétního numerického schématu metodami analýzy funkcí na spojitém prostoru [19].

Způsob odvození řádu metody a modifikované rovnice uvedeme na jednoduché úloze pro lineární metodu typu *upwind*. Uvažujme lineární advekční rovnici ve tvaru

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial \overline{a}q}{\partial x} = 0, \qquad (1.31)$$

kde \overline{a} je reálná konstanta a toková funkce je vyjádřena jako $f(q) = \overline{a}q$. Rovnice reprezentuje jednoduchý transport počáteční podmínky konstantní rychlostí \overline{a} ve směru osy x. Jednou ze základních numerických metod typu metody konečných objemů je metoda *upwind*, jejíž schéma lze zapsat v divergetním tvaru (1.18) s numerickým tokem pro $\overline{a} > 0$ vyjádřeným jako

$$F_{i+1/2}^n = \mathcal{F}(Q_i^n, Q_{i+1}^n) = f(Q_i^n) = \overline{a}Q_i^n.$$
(1.32)

Diferenční schéma metody pro řešení této rovnice tak dostává tvar

$$Q_{i}^{n+1} = Q_{i}^{n} - \overline{a} \frac{\Delta t}{\Delta x} (Q_{i}^{n} - Q_{i-1}^{n}).$$
(1.33)

Aplikujme toto schéma na přesné řešení rovnice q(x,t) v čase t_n . Pro lokální diskretizační chybu dostáváme vztah

$$\tau_i^n = \frac{1}{\Delta t} \bigg(q(x_i, t_n) - \overline{a} \frac{\Delta t}{\Delta x} (q(x_i, t_n) - q(x_{i-1}, t_n)) - q(x_i, t_{n+1}) \bigg).$$
(1.34)

Předpokládejme, že q(x,t) je hladká funkce a můžeme ji rozvinout to Taylorova rozvoje

$$q(x_i, t_{n+1}) = q(x_i, t_n) + \Delta t \frac{\partial q(x_i, t_n)}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 q(x_i, t_n)}{\partial t^2} + \dots,$$
(1.35)

$$q(x_{i-1}, t_n) = q(x_i, t_n) - \Delta x \frac{\partial q(x_i, t_n)}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 q(x_i, t_n)}{\partial x^2} + \dots$$
(1.36)

Dosazením dostáváme vztah

$$\tau_i^n = -\left[\frac{\partial q(x_i, t_n)}{\partial t} + \overline{a}\frac{\partial q(x_i, t_n)}{\partial x}\right] + \frac{1}{2}\overline{a}\Delta x\frac{\partial^2 q(x_i, t_n)}{\partial x^2} - \frac{1}{2}\Delta t\frac{\partial^2 q(x_i, t_n)}{\partial t^2} + \dots$$
(1.37)

Jelikož uvažujeme, že q(x,t) je řešením rovnice (1.31), člen v hranaté závorce je roven nule a diskretizační chyba má tak tvar

$$\tau_i^n = \frac{1}{2}\overline{a}\Delta x \frac{\partial^2 q(x_i, t_n)}{\partial x^2} - \frac{1}{2}\Delta t \frac{\partial^2 q(x_i, t_n)}{\partial t^2} + \dots$$
(1.38)

Toto schéma je tedy prvního řádu v prostoru i čase.

Uvažujme nyní odlišně. Nechť q(x,t) je přesným řešením rovnice

$$\frac{\partial q(x,t)}{\partial t} + \overline{a}\frac{\partial q(x,t)}{\partial x} = \frac{1}{2}\overline{a}\Delta x\frac{\partial^2 q(x,t)}{\partial x^2} - \frac{1}{2}\Delta t\frac{\partial^2 q(x,t)}{\partial t^2} + \dots$$
(1.39)

V tom případě by lokální diskretizační chyba schématu byla nulová pro všechna $i \in \{1, ..., N\}$, a tedy schéma přesně aproximuje hodnoty řešení této rovnice. Tato rovnice se nazývá modifikovaná rovnice schématu.

Z rovnice (1.39) lze při uvažování konstantního poměru $\frac{\Delta t}{\Delta x}$ odvodit vztah

$$\frac{\partial^2 q}{\partial t^2} = \overline{a} \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} + \mathcal{O}(\Delta t), \qquad (1.40)$$

tedy modifikovanou rovnici lze při zanedbání členů $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ upravit na tvar

$$\frac{\partial q(x,t)}{\partial t} + \overline{a}\frac{\partial q(x,t)}{\partial x} = \frac{1}{2}\overline{a}\Delta x \left(1 - \frac{\overline{a}\Delta t}{\Delta x}\right)\frac{\partial^2 q(x,t)}{\partial x^2}.$$
(1.41)

Tedy schéma přesněji řeší advekčně-difuzní rovnici s difuzním koeficientem

$$\nu_{upw} = \frac{1}{2}\overline{a}\Delta x \left(1 - \frac{\overline{a}\Delta t}{\Delta x}\right) = \frac{1}{2}\overline{a}\Delta x (1 - CFL).$$
(1.42)

Tuto hodnotu nazýváme numerická difuze. Z nutné podmínky konvergence plyne, že $CFL \leq 1$, tedy difuzní koeficient je kladný. Dominantní část diskretizační chyby schémat prvního řádu tedy přidá do úlohy jisté množství numerické difuze, která způsobuje "vyhlazení" přibližného řešení [16].

Definujeme-li energii jako

$$\int \frac{q(x,t)^2}{2} \,\mathrm{d}x,\tag{1.43}$$

lze pro advekčně-difuzní rovnici s difuzním koeficientem $\nu > 0$ odvodit vztah [16]

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int \frac{q(x,t)^2}{2} dx = \nu \int \left(\frac{\partial q(x,t)}{\partial x}\right)^2 \mathrm{d}x < 0, \tag{1.44}$$

tedy dochází k disipaci energie a v důsledku toho vyhlazení řešení a stabilizace schématu. Schéma, jehož diskretizační chyba způsobuje disipaci energie, pak označujeme jako *disipativní* schéma. Schémata prvního řádu jsou disipativní.

Uvažujme nyní lineární Laxovo-Wendroffovo schéma druhého řádu [19] pro řešení lineární advekční rovnice (1.31). Pro lokální diskretizační chybu bychom při uvažování konstantního poměru $\frac{\Delta t}{\Delta x}$ v tomto případě odvodili vztah [19]

$$\tau_i^n = -\frac{1}{6}\overline{a}\Delta x^2 \left(1 - \left(\frac{\overline{a}\Delta t}{\Delta x}\right)^2\right) \frac{\partial^3 q(x_i, t_n)}{\partial x^3} + \mathcal{O}(\Delta t^3).$$
(1.45)

Modifikovaná rovnice schématu odpovídá při zanedbání členů $\mathcal{O}(\Delta x^3)$ rovnici

$$\frac{\partial q(x,t)}{\partial t} + \overline{a} \frac{\partial q(x,t)}{\partial x} = \gamma \frac{\partial^3 q(x,t)}{\partial x^3}, \qquad (1.46)$$

10

kde tzv. disperzní koeficient γ je vyjádřen jako

$$\gamma = -\frac{1}{6}\overline{a}\Delta x^2 \left(1 - \left(\frac{\overline{a}\Delta t}{\Delta x}\right)^2\right). \tag{1.47}$$

Jedná se o tzv. advekčně-disperzní rovnici. Při uvažování rozkladu řešení do frekvenčního spektra disperze způsobuje rozdílnou rychlost šíření vln s různým vlnovým číslem, což má za následek vznik nefyzikálních oscilací v okolí nespojitosti v řešení.

Lze ukázat, že pro advekčně-disperzní rovnici platí [16]

$$\frac{d}{dt} \int \frac{q(x,t)^2}{2} dx = 0,$$
(1.48)

tedy disperzní člen, jenž tvoří dominantní část diskretizační chyby Laxova-Wendroffova schématu, nezpůsobuje disipaci energie. V okolí nesposjitosti v řešení se v důsledku disperze objevují oscilace, nicméně jejich velikost je omezená a tyto oscilace nezpůsobují nestabilitu schématu. Schémata, jejichž diskretizační chyba nezpůsobuje disipaci energie označujeme jako *nedisipativní*.

1.3.3 Metody s vysokým rozlišením

V entropickém řešení nelineární transportní rovnici ve tvaru (1.5) se objevují nespojitosti - rázové vlny. Metody prvního řádu přidávají do úlohy jisté množství numerické difuze, která způsobí přílišné "vyhlazení" řešení v okolí rázové vlny. Lineární metody druhého řádu, vycházející ve svém odvození z Taylorova rozvoje řešení, pak vytvářejí v okolí rázové vlny oscilace. Jako *metody s vysokým rozlišením* nebo *neoscilativní metody* označujeme nelineární metody, které byly vyvinuty za účelem správného zachycení rázových vln při současném zachování některých nutných vlastností entropického řešení úlohy, jako je zachování monotonie, TVD vlastnost, nebo některé slabší varianty těchto podmínek. Popis některých metod lze nalézt v [19]. Metodami se také zabývá bakalářská práce [22].

Jako metody s vysokým rozlišením jsou označovány metody s následujícími vlastnostmi:

- metoda negeneruje umělé oscilace,
- metoda negeneruje řešení s velkou numerickou difuzí,
- metoda korektně aproximuje entropické řešení,
- metoda je formálně vyššího řádu v bodech, ve kterých je řešení hladké.

Mezi metody s vysokým rozlišením se řádí schémata MUSCL, ENO, WENO a další.

Tyto algoritmy obvykle využívají tzv. rekonstrukci řešení v jednotlivých časových vrstvách, kdy na několika sousedních buňkách sestrojíme funkci, jejíž integrální průměry na buňkách C_i odpovídají příslušným integrálním průměrům Q_i^n . Na hranicích buněk pak využíváme hodnoty rekonstruovaného řešení pro určení toku $F_{i+1/2}^n$. Tím můžeme dosáhnout vyššího řádu přesnosti v prostoru v místech, kde je řešení hladké. Pro zachování některých požadovaných vlastností přibližného řešení (např. TVD vlastnost) se často využívají tzv. *limitery*. Limitery jsou závislé na tvaru samotného řešení a můžeme je interpretovat buď jako limitery rekonstrukce řešení, nebo jako limitery tokové funkce. Efekt limiterů se obvykle projevuje hlavně v okolí nespojitostí a extrémů řešení, kde v důsledku jejich použití dochází ke snížení formálního řád metody. Proto o těchto metodách hovoříme jako o metodách s *adaptivním řádem*.

Metody s vysokým rozlišením jsou často vyjádřeny pomocí semidiskrétní formulace a pro časovou integraci pak využíváme řešič obyčejných diferenciálních rovnic.

1.4 Metoda konečných objemů pro nelineární soustavy rovnic v jedné prostorové dimenzi

Počáteční úlohu pro nelineární hyperbolickou soustav
umrovnic v jedné prostorové dimenzi má tvar

$$\frac{\partial q_p}{\partial t} + \frac{\partial f_p(q)}{\partial x} = 0, \qquad x \in \mathbb{R}, \ t \in (0, \infty), \ p = 1, ..., m,$$

$$q_p(x, 0) = q_0^p(x), \qquad x \in \mathbb{R}, \ p = 1, ..., m.$$
(1.49)

Entropické řešení soustavy rovnic již kvůli provázanosti jednotlivých proměnných nemá vlastnosti jako je TVD, monotonie, zachování monotonie a další. Nicméně metody odvozené pro na základě těchto vlastností pro řešení skalární rovnice lze úspěšně použít i pro řešení soustav rovnic.

Metody lze zapsat v semidiskrétním tvaru

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{Q}_{i}(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{\Delta x} (\mathbf{F}_{i+1/2}(t) - \mathbf{F}_{i-1/2}(t)), \quad i = 1, ..., N,$$
(1.50)

kde $\mathbf{Q}_i(t) = (Q_i^1(t), ..., Q_i^m(t))$ a $\mathbf{F}_{i+1/2}(t) = (F_{i+1/2}^1(t), ..., F_{i+1/2}^m(t)).$

Rekonstrukci řešení a aplikaci limiterů je možné provádět v jednotlivých složkách řešení. V hraničních bodech buněk se pak řeší Riemannův problém pro soustavu rovnic.

Pro skalární úlohy v jedné prostorové dimenzi lze obecně analyticky odvodit přesné entropické řešení Riemannova problému a využít ho pro numerický řešič. Pro nelineární soustavy rovnic je situace obvykle složitější. Zde se častěji využívají přibližné řešiče Riemannova problému, jelikož kvůli provázanosti proměnných je entropické řešení obvykle obtížné analyticky odvodit. Některé řešiče využívají řešení Riemannova problému lokálně linearizované verze soustavy rovnic. Řešení je pak závislé na struktuře vlastních čísel a vektorů Jacobiho matice linearizované vektorové tokové funkce f (Roeův řešič [7]), nicméně je třeba zajistit aproximaci správného entropického řešení (entropy fix). Další třídou jsou tzv. centrální schémata, aproximující entropické řešení Riemannova problému nezávisle na struktuře vlastních vektorů Jacobiho matice vektorové tokové funkce, a lze je tak využít univerzálně za cenu o něco nižší přesnosti. Mezi centrální schémata patří např. lokální Laxova-Friedrichsova metoda, jejíž numerický tok pro rovnici s vektorovu tokovou funkcí f(q) vyjádříme jako [7][22]

$$\mathcal{F}^{LLF}(\mathbf{Q}_i, \mathbf{Q}_{i+1}) = \frac{1}{2} (f(\mathbf{Q}_i) + f(\mathbf{Q}_{i+1})) - \frac{1}{2} a_{i+1/2} (\mathbf{Q}_{i+1} - \mathbf{Q}_i), \qquad (1.51)$$

pro $a_{i+1/2}$ definované jako

$$a_{i+1/2} = \max(|\lambda_1(\mathbf{Q}_i)|, |\lambda_1(\mathbf{Q}_{i+1})|, ..., |\lambda_m(\mathbf{Q}_i)|, |\lambda_m(\mathbf{Q}_{i+1})|),$$
(1.52)

kde $\lambda_p(q)$ je *p*-té vlastní číslo Jacobiho matice tokové funkce f'(q).

1.5 Metoda konečných objemů pro nelineární soustavy rovnic ve více prostorových dimenzích

Problém existence a jednoznačnosti řešení a jeho vlastností není obecně pro nelineární hyperbolickou soustavu rovnic ve více prostorových dimenzích vyřešen. Zobecnění metod odvozených na základě skalární úlohy v jedné prostorové dimenzi se navíc potýká s řadou problémů, nicméně i tak lze pomocí nich sestavit až překvapivě úspěšná numerická schémata.

Schéma metody konečných objemů pro hyperbolickou soustavu ve více prostorových dimenzích vychází z obecného tvaru zákona zachování (1.1). Schéma lze sestavit pro libovolný tvar diskretizační sítě.

Pro hyperbolickou soustavu m rovnic ve dvou prostorových dimenzích ve tvaru

$$\frac{\partial q_p}{\partial t} + \frac{\partial f_p(q)}{\partial x} + \frac{\partial g_p(q)}{\partial y} = 0, \qquad x \in \mathbb{R}, \ y \in \mathbb{R}, \ t \in (0, \infty), \ p = 1, ..., m,$$

$$q_p(x, y, 0) = q_0^p(x, y), \qquad x \in \mathbb{R}, \ y \in \mathbb{R}, \ p = 1, ..., m,$$
(1.53)

lze jednoduché semidiskrétní schéma metody konečných objemů na kartézské síti zapsat jako

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{Q}_{ij}(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{\Delta x} (\mathbf{F}_{i, j+1/2}(t) - \mathbf{F}_{i, j-1/2}(t)) - \frac{1}{\Delta y} (\mathbf{G}_{i+1/2, j}(t) - \mathbf{G}_{i-1/2, j}(t)), \quad (1.54)$$

kde

$$\mathbf{Q}_{ij}(t) = (Q_{ij}^{1}(t), ..., Q_{ij}^{m}(t)),$$

$$\mathbf{F}_{i, j+1/2}(t) = (F_{i, j+1/2}^{1}(t), ..., F_{i, j+1/2}^{m}(t)),$$

$$\mathbf{G}_{i+1/2, j}(t) = (G_{i+1/2, j}^{1}(t), ..., G_{i+1/2, j}^{m}(t)).$$
(1.55)

Rekonstrukce řešení ve více dimenzích je již složitější úloha, zejména na nepravidelných sítích. Ve více dimenzích je tak obecně obtížné formulovat schémata vyšších řádů přesnosti.

Riemannův problém, na jehož řešení jsou metody založeny, je ze své podstaty jednodimenzionální, a metody tak na hranicích buněk využívají zjednodušení vícedimenzionálního problému do jedné dimenze.

Kapitola 2

Matematický model proudění

Matematický model proudění vychází z hypotetické představy kontinua, tedy spojitého prostředí. Hmotnost látek v kontinuu je rozprostřena spojitě, nicméně skutečné látky se skládají z jednotlivých částic. Bodové hodnoty veličin v představě kontinua tak fyzikálně odpovídají jistému průměru hodnot veličin přes částice v okolí bodu. Díky této představě můžeme zavést matematický model proudění založený na analýze funkcí na spojitém prostoru. Taková představa je relevantní, jelikož odchylky od těchto průměrných veličin spojené s molekulárním charakterem látek se projevují na délkových škálách až mnohem menších, než jsou nejmenší škály proudění popsaného pomocí představy kontinua, a to včetně proudění turbulentního [23].

Základem modelu je systém Navierových-Stokesových rovnic formulovaných již v první polovině 19. století, které jsou považovány za obecně platný fyzikální model proudění v rámci platnosti hypotézy kontinua [8]. V této práci se budeme zabývat modelem proudění nestlačitelné newtonovské tekutiny.

2.1 Soustava rovnic popisující proudění nestlačitelné newtonovské tekutiny

Matematický model proudění nestlačitelné newtonovské tekutiny je tvořen Navierovými-Stokesovými rovnicemi a rovnicí kontinuity.

Navierovy-Stokesovy rovnice jsou nelineární soustavou parciálních diferenciálních rovnic reprezentují bilanci hybnosti tekutiny vycházející z druhého Newtonova pohybového zákona. Pro nestlačitelnou tekutinu ve třech prostorových dimenzích lze bilance hybnosti (vztažené na jednotku hmotnosti) zapsat v diferenciálním tvaru jako

$$\frac{\partial u_j}{\partial t} + \frac{\partial u_i u_j}{\partial x_i} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_j} + \nu \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i \partial x_i}, \quad j = 1, 2, 3,$$
(2.1)

kde $u_j = u_j(x,t)$ jsou složky rychlosti proudění tekutiny, p = p(x,t) vyjadřuje tlak, ρ hustotu tekutiny (pro nestlačitelnou tekutinu konstantní v čase i prostoru) a ν je tzv. kinematická viskozita tekutiny (uvažujeme také konstantní v prostoru a čase).

Druhý člen na levé straně rovnice reprezentuje makroskopický transport hybnosti a označujeme ho jako nelineární konvektivní člen.

Druhý člen na pravé straně rovnice pak reprezentuje difuzi hybnosti v důsledku interakce částic na molekulární úrovni a vychází z kinetické teorie látek. Koeficient této difuze, kinematická viskozita ν , tedy vyjadřuje míru jistého vnitřního tření tekutiny způsobujícího disipaci kinetické energie proudění. Z fyzikálního hlediska se jedná o přeměnu kinetické energie proudění na vnitřní energii látky. Jelikož se jedná o difuzní člen, intuitivně ho chápeme tak, že "vyhlazuje" rychlostní pole.

Další rovnicí v systému je pak rovnice kontinuity reprezentující zákon zachování hmotnosti. V diferenciálním tvaru lze tuto rovnici zapsat jako

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0.$$
(2.2)

Jelikož uvažujeme hustotu tekutiny konstantní v čase i prostoru, rovnice kontinuity přechází na tvar

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0. \tag{2.3}$$

Soustava parciálních diferenciálních rovnic popisujících proudění nestlačitelné newtonovské tekutiny ve třech prostorových dimenzích je tedy dána jako

$$\frac{\partial u_j}{\partial t} + \frac{\partial u_i u_j}{\partial x_i} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_j} + \nu \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i \partial x_i}, \quad j = 1, 2, 3,
\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0.$$
(2.4)

Uvažujeme-li počáteční úlohu pro soustavu (2.4) s hladkou počáteční podmínkou, problém existence, jednoznačnosti a vlastností jejího řešení není plně vyřešen. Obecně je dokázána existence a jednoznačnost hladkého řešení úlohy pouze po jistou krátkou dobu Tzávislou na počáteční podmínce [10]. Dále je dokázána existence slabého řešení úlohy po libovolně dlouhou dobu, nicméně není dokázána jeho jednoznačnost (na slabé řešení jsou kladeny slabší požadavky z hlediska diferencovatelnosti) [10]. Otázka ohledně existence hladkého řešení Navierových-Stokesových rovnic pro libovolný čas je jedním z problémů tisíciletí vyhlášených Clayovým matematickým institutem [10]. Tento problém úzce souvisí s pochopením jevu turbulence.

2.2 Reynoldsovo číslo

Zavedením novým proměnných a veličin dle vztahů

$$\hat{x} = \frac{x}{L}, \quad \hat{t} = \frac{tU}{L},
\hat{u}(\hat{x}, \hat{t}) = \frac{u(x, t)}{U}, \quad \hat{p}(\hat{x}, \hat{t}) = \frac{p(x, t)}{\rho U^2},$$
(2.5)

pro jistou charakteristickou délku L a charakteristickou rychlost U můžeme soustavu rovnic (2.4) převést do tzv. bezrozměrného tvaru [23]

$$\frac{\partial \hat{u}_j}{\partial \hat{t}} + \frac{\partial \hat{u}_i \hat{u}_j}{\partial \hat{x}_i} = -\frac{\partial \hat{p}}{\partial \hat{x}_j} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 \hat{u}_j}{\partial \hat{x}_i \partial \hat{x}_i}, \quad j = 1, 2, 3,
\frac{\partial \hat{u}_i}{\partial \hat{x}_i} = 0,$$
(2.6)

kde bezrozměrný parametr Re označujeme jako Reynoldsovo číslo. To je vyjádřené jako

$$Re = \frac{UL}{\nu}.$$
(2.7)

Reynoldsovo číslo je důležitým podobnostním číslem. Je jediným parametrem v soustavě rovnic (2.6). Všechny úlohy, které jsou shodné v bezrozměrné formulaci, tedy budou mít stejnou strukturu řešení, pouze se budou lišit škálou svých proměnných a veličin dle vztahů (2.5). Reynoldsovo číslo je proto často využíváno k charakterizaci řešené úlohy. Jako charakteristická délka L se obvykle volí průměr kanálu či obtékaného tělesa a jako charakteristická rychlost U se volí střední hodnota rychlosti proudění.

2.3 Turbulence

Pro dostatečně malá Reynoldsova čísla (proudění na malé oblasti při velké hodnotě kinematické viskozity a malé rychlosti) má proudění tzv. *laminární* charakter. Překročením jisté kritické hodnoty Reynoldsova čísla pak proudění přechází na proudění *turbulentní*. To je charakterizováno mj. následujícími vlastnostmi: [8]

- zdánlivě chaotické, náhodné chování,
- extrémně citlivé na počáteční podmínky,
- velký rozsah délkových a časových škál,
- zvýšená míra difuzivity (mísení transportovaných veličin) a disipace energie,
- vířivé a třídimenzionální.

Je důležité si uvědomit, že za turbulentní proudění může být považováno pouze proudění třídimenzionální, jelikož některé důležité turbulentní jevy nemají analogii ve dvou nebo v jedné prostorové dimenzi, a dochází tak ke kvalitativním rozdílům v chování [8]. Jedním z těchto jevů je tzv. "protahování vírů" (z anglického *vortex stretching*).

Kvůli náročnosti řešení základního systému rovnic bylo původně turbulentní proudění zkoumáno především experimentálně. Komplexní teorie turbulence dodnes neexistuje, zejména kvůli nejasnostem ohledně existence a vlastností řešení Navierových-Stokesových rovnic. Proto neexistuje ani přesná definice turbulence. Historicky se vyvinulo několik odlišných pohledů na její studium [8].

Nejstarší je směr *statistický* (Reynolds, Prandtl, Kolmogorov a další). Chování veličin při turbulentním proudění je považováno za náhodné a je analyzováno metodami teorie statistiky a pravděpodobnosti. Jedná se o analogii ke kinetické teorii látek propojující makroskopicky pozorované veličiny s mikroskopickou částicovou strukturou látek. Statistický přístup přináší velké množství výsledků a konstitutivních vztahů, které jsou využívány v modelech turbulence.

S rozvojem měřící techniky v 50. letech 20. století se začalo ukazovat, že teorie turbulence založená na statistickém popisu není plně obhajitelná. Nový *strukturální* směr analyzoval turbulence na základě koherentní struktury vírů odhalené při experimentech.

Nejmladší deterministický směr (Lorenz a další) pak zkoumá turbulentní proudění z hlediska teorie dynamických systémů a chaosu. Objevil se v 60. letech 20. století s rozvojem výpočetní techniky a analytických matematických metod. Je zdůrazňován deterministický charakter Navierových-Stokesových rovnic a rozpor při popisu jejich řešení pomocí náhodných veličin. Jedním z úspěchů deterministického směru je popis posloupnosti přechodů mezi různými stavy proudění

stacionární \rightarrow periodický \rightarrow kvaziperiodický \rightarrow turbulentní,

jejichž existence je potvrzena i experimentálně [8].

2.4 Energetická kaskáda a škály turbulentního proudění

Na základě Kolmogorových hypotéz (1941) ohledně statistické izotropie proudění na dostatečně malých škálách byly odvozeny některé důležité charakteristiky turbulence [8][23].

Jednou z těchto důležitých charakteristik je existence jisté *energetické kaskády*. Energie největších vírů je postupně přenášena na víry menší a menší při zvyšující se míře disipace energie v důsledku molekulární viskozity tekutiny. U nejmenších vírů pak dochází kvůli vyšší míře disipace a malému množství energie těchto vírů k jejich zániku [8][23].

Délkové škály turbulence lze v rámci této kaskády rozdělit na několik pásem [23]:

- integrální pásmo, které souvisí s geometrií problému a zahrnuje velké víry,
- inerciální pásmo, ve kterém dochází k transportu energie na menší škály,
- disipační pásmo, kde dochází k zániku nejmenších vírů v důsledku disipace energie.

Při prostorové analýze rychlostního pole ve Fourierově frekvenčním spektru lze v inerciálním pásmu popsat závislost množství energie na vlnovém čísle jako

$$E(\kappa) = C\varepsilon^{2/3}\kappa^{-5/3},\tag{2.8}$$

přičemž pohybům na škálách l odpovídá vlnové číslo $\kappa = \frac{2\pi}{l}$ [23] a ε značí rychlost disipace turbulentní kinetické energie vyjádřenou jako

$$\varepsilon = 2\nu \langle S_{ij} S_{ij} \rangle. \tag{2.9}$$

Tzv. tenzor rychlosti deformace S_{ij} je vyjádřen jako

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$
(2.10)

Rozměry nejmenších vírů vyskytujících se v řešení jsou charakterizovány pomocí tzv. Kolmogorovy délky [23]

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{4}}.$$
(2.11)

Nejkratší časová škála je pak charakterizována dobou

$$\tau_{\eta} = \left(\frac{\nu}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{2.12}$$

a charakteristickou rychlostí

$$u_{\eta} = (\nu \varepsilon)^{\frac{1}{4}} \,. \tag{2.13}$$

2.5 Proudění v blízkosti pevné stěny

Uvažujme úlohu s přítomností pevných stěn. Pro vazkou tekutinu na stěnách volíme tzv. no-slip okrajovou podmínku $u_j = 0, j = 1, 2, 3$. Pro malou hodnotu kinematické viskozity tekutiny pak vzniká tenká tzv. mezní vrstva s vysokou hodnotou gradientu rychlosti.

Pro popis mezní vrstvy se zavádí relativní vzdálenost od stěny pomocí vztahu [23]

$$y^+ = \frac{y}{\delta_\nu},\tag{2.14}$$

kde y je normálová vzdálenost od stěny
a δ_v je tzv. viskózní délka definovaná jako

$$\delta_{\nu} \equiv \nu^{1/2} \left(\frac{\mathrm{d}\langle u \rangle}{\mathrm{d}y} \Big|_{y=0} \right)^{-1/2}.$$
(2.15)

Pro popis chování proudových veličin v mezní vrstvě pro $y^+ < 50$ jsou empiricky odvozeny důležité vztahy často využívané v modelech turbulence.

2.6 Eulerovy rovnice

Pokud se hodnota kinematické viskozity blíží nule, nabízí se otázka, co se stane, kdybychom uvažovali přímo $\nu = 0$, tedy *ideální* nevazkou tekutinu. Systém rovnic popisující její proudění ve tvaru

$$\frac{\partial u_j}{\partial t} + \frac{\partial u_i u_j}{\partial x_i} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_j}, \quad j = 1, 2, 3,
\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0,$$
(2.16)

nazýváme *Eulerovy rovnice* nestlačitelného proudění. Stejně jako u Navier-Stokesových rovnic je problém existence a jednoznačnosti řešení a jeho vlastností nevyřešen. Eulerovy rovnice dále trpí některými zásadními fyzikálními nedostatky.

Lze ukázat, že rovnice jsou časově reverzibilní, což odporuje 2. termodynamickému zákonu a umožňuje existenci perpetum mobile [15][23].

Lze ukázat, že Eulerovy rovnice pro úlohy obtékání těles umožňují tzv. potenciální řešení, které je stacionární a nevířivé [15]. Nevazká tekutina nepřilne k povrchu tělesa (namísto okrajové podmínky no-slip uvažujeme tzv. slip okrajovou podmínku $u_j n_j = 0$). To umožňuje pohyb tělesa proudovým polem s nulovým odporem. To však není nikdy v reálných situacích pozorováno. Tento jev se nazývá d'Alembertův paradox.

Za standardní vysvětlení paradoxu je považované to, které podal v roce 1904 Prandtl. Dle něho je klíčovým faktem, že reálná tekutina je vždy alespoň mírně vazká. Vazká tekutina přilne k tělesu a její rychlost se v bezprostřední blízkosti stěny blíží nule. Kolem tělesa se tak vytváří tenká mezní vrstva. Odtržením proudu (tzv. *odtržení mezní vrstvy*) přechází proudění na turbulentní, které způsobí pokles tlaku za tělesem a tedy vznik odporu [15].

Nicméně ukazuje se, že lze podat i alternativní vysvětlení v rámci Eulerových rovnic bez uvažování mezní vrstvy. Při uvažování okrajové podmínky *slip* potenciální řešení Eulerových rovnic vykazuje v bodě setkání proudu za tělesem nestabilitu. V důsledku malé odchylky v řešení (např. při numerických výpočtech) pak potenciální obtékání přechází na proudění "turbulentní", které způsobí pokles tlaku za tělesem [15]. Numerickými experimenty bylo ukázáno, že takové řešení je velice podobné numerickému řešení získanému pomocí Navierových-Stokesových rovnic s *no-slip* podmínkou a nízkou hodnotou kinematické viskozity [15].

Jelikož Eulerovy rovnice odpovídají situaci, kdy $\nu \to 0$, a tedy $Re \to \infty$, velikost nejmenších délkových a časových škál není při uvažování Kolmogorovy teorie nějak omezena. Nejkratší škály tak již jsou mimo rámec platnosti představy kontinua. Nicméně při numerických výpočtech vždy uvažujeme nějakou diskretizační síť s konečným krokem, a řešení Eulerových rovnic tak mohou při správné interpretaci dávat fyzikálně smysluplné výsledky [15].

Kapitola 3

Metody modelování turbulence

V této kapitole se budeme věnovat obvyklým přístupům k modelování turbulence, založených na soustavě Navierových-Stokesových rovnic, abychom nakonec mohli uvést přístup ILES do širších souvislostí s ostatními metodami.

Rozsah délkových a časových škál turbulentního proudění je značný a jeho modelování je tedy extrémně náročný problém. Pokud bychom řešili úlohu turbulentního proudění přímo diskretizací soustavy rovnic proudění tekutiny, ovšem na příliš hrubé síti, nelze automaticky předpokládat, že řešení bude popisovat správnou dynamiku problému, jakou bychom získali v případě přesného řešení úlohy. Řešení úlohy turbulentního proudění je citlivé na jakékoliv chyby a zanedbáním fluktuací pod úrovní rozlišení prostorové nebo časové diskretizační sítě ho zásadním způsobem ovlivníme a dostáváme kvalitativně rozdílné výsledky.

Metoda, která řeší úlohu turbulentního proudění diskretizací rovnic proudění tekutiny na velmi jemné prostorové i časové síti tak, aby byly zachyceny fluktuace řešení i na nejkratších délkových a časových škálách, se nazývá DNS - *direct numerical simulation*. Tento přístup je z hlediska směrů studia turbulence čistě deterministický.

Rozdílným přístupem k řešení turbulentních úloh je pak modelování pomocí RANS (*Reynolds-averaged Navier-Stokes*), kdy úpravou soustavy rovnic proudění tekutiny problém převedeme na hledání pouze jisté statistické střední hodnoty řešení. Veškeré fluktuace řešení od této střední hodnoty (a jejich efekty na samotné střední hodnoty) modelujeme pomocí modelů turbulence, které nemusejí přímo vycházet z Navierových-Stokesových rovnic, ale třeba z empirických znalostí turbulence. V této souvislosti obvykle hovoříme o tom, že při DNS jsou veškeré škály problému řešeny přímo (v anglicky psané literatuře se užívá výraz *resolved*), zatímco při RANS jsou veškeré škály modelované (*modelled*) [8]. RANS přístup lze označit jako přístup statistický.

Kombinací obou předcházejících přístupů je metoda LES - *large eddy simulation*, kde dynamika velkých vírů je řešena přímo pomocí Navierových-Stokesových rovnic, ale efekty prostorových fluktuací na škálách pod úrovní rozlišení diskretizační sítě jsou modelovány pomocí modelů turbulence. Jedná se tak o deterministický přístup s prvky statistického přístupu při modelování fluktuací pod pod úrovní diskretizační sítě.

Při simulaci je nutné si uvědomit, jaké jsou naše cíle a co jednotlivé metody modelují. Pro inženýrské úlohy často není důležité znát časový průběh okamžitých hodnot veličin, ale je potřeba získat jejich globální statistiky. S tímto záměrem jsou vyvíjeny RANS modely. V některých aplikacích ale může být nutné detailněji zjistit dynamiku větších vírů nebo zachytit jevy, jako je přechod od laminárního k turbulentnímu proudění. Pro tyto účely metoda RANS vhodná není [8] a vhodnější volbou je metoda LES. Další otázkou je, nakolik jsou námi hledané veličiny závislé na malých chybách v počáteční a okrajové podmínce. Pokud by bylo naším cílem například modelovat časový průběh okamžité rychlosti v jistém bodě prostoru, jsou jakékoliv pokusy o toto modelování pro turbulentní proudění irelevantní, neboť hodnoty budou extrémně závislé na jakékoliv odchylce v parametrech i řešení úlohy.

3.1 DNS

Jak již bylo zmíněno v úvodu kapitoly, metoda DNS (*direct numerical simulation*) je metodou přímé simulace turbulentního proudění tak, aby byly v řešení získané touto metodou zachyceny veškeré fluktuace na všech časových i délkových škálách. Při diskretizaci úlohy turbulentního proudění metodou DNS je nutné použít velice jemnou síť.

Rozměry nejmenších vírů vyskytujících se v řešení jsou charakterizovány pomocí Kolmogorovy délky (2.11). Rychlost disipace turbulentní kinetické energie lze řádově odhadnout jako

$$\varepsilon \sim \frac{|\tilde{u}|^3}{L},$$
(3.1)

kde $|\tilde{u}|$ značí velikost fluktu
ační části rychlosti od své střední hodnoty proudění (přesněji definováno v sekci 3.2)
a L je charakteristická délka úlohy. Pro poměr nejdelších a nejkratších rozměrových škál dostáváme od
had

$$\frac{L}{\eta} \sim Re^{\frac{3}{4}}.$$
(3.2)

Pro poměr nejdelších a nejkratších časových škál pak z (2.12) dostáváme odhad

$$\frac{T}{\tau_{\eta}} \sim Re^{\frac{1}{4}}.\tag{3.3}$$

Abychom tedy pomocí DNS vyřešily úlohu pro dané Re, je nutné pro třídimenzionální prostor použít řádově $Re^{\frac{9}{4}}$ diskretizačních bodů. Jako efektivní metody řešení se jeví takzvané pseudospektrální metody založené na Fourierovu rozkladu řešení [23]. Bereme-li v úvahu navíc i složitost tohoto algoritmu, lze odhadnout složitost takové úlohy turbulentního proudění jako $\mathcal{O}(Re^3)$ [23]. Vzhledem k současném trendu rychlosti růstu výpočetního výkonu počítačů, kdy se výkon zdvojnásobí přibližně každé dva roky, lze tak odhadnout, že každých 5 let bude možné zdvojnásobit Reynoldsovo číslo úlohy při zachování stejného výpočetního času.

Pravděpodobně zatím největší DNS simulace turbulentního proudění nestlačitelné tekutiny byla provedena pro úlohu proudění v kanálu obdélníkového průřezu, a to v roce 2013 na superpočítači Mira o rychlosti 10 petaflopů. Při výpočtech bylo využito 786 tisíc výpočetních jader a simulace vygenerovala 140 terabytů dat. Dosažená hodnota integrálního Reynoldsova čísla byla $4 \cdot 10^6$ [18]. Je tedy zřejmé, že pro praktické úlohy inženýrské praxe stále není a v blízké budoucnosti ani nebude efektivní DNS využít. Uveďme ale, že v 60. a 70. letech 20. století bylo odhadováno, že DNS nebude *nikdy* možné využít pro úlohy relevantní v inženýrské praxi [27]. To se nyní ukazuje jako odhad až příliš pesimistický. I přes tyto extrémní výpočetní nároky je v současné době DNS mimořádně důležitým nástrojem výzkumu turbulence. Ze získaných výsledků lze vyextrahovat data potřebná k popsání zákonitostí turbulentního proudění, která bychom nebyli schopni získat ani experimentálně. Data lze také využít k apriorním a aposteriorním odhadům chyb modelů turbulence a k návrhům nových modelů.

3.2 RANS

Počátky modelování turbulence pomocí přístupu RANS (*Reynolds-averaged Navier-Stokes*) sahají až do konce 19. století. Získané experimentální výsledky byly v dobré shodě s odvozenými řešeními Navierových-Stokesových rovnic, a ty tak byly považovány za platný model proudění. Nicméně chování okamžitých hodnot veličin v turbulentním proudění se při experimentech jevilo jako náhodné, za jediný možný přístup analýzy byl tedy považován přístup statistický. Reynolds ve svém článku v roce 1895 použil myšlenku průměrování veličin v Navierových-Stokesových rovnicích a v průběhu 20. století se s vývojem teoretických znalostí o turbulentním proudění a řešení Navierových-Stokesových rovnic objevily různé další varianty a interpretace tohoto přístupu. Pro přehled uvedeme některé z nich.

Všechny přístupy vycházejí ze základní představy, že uvažované veličiny rozložíme na jejich jistou střední hodnotu a fluktuační část, tedy rychlost a tlak rozložíme jako

$$u(x,t) = \langle u \rangle(x,t) + \tilde{u}(x,t), \qquad (3.4)$$

$$p(x,t) = \langle p \rangle(x,t) + \tilde{p}(x,t), \qquad (3.5)$$

přičemž jako $\langle . \rangle$ je označena střední hodnota a vlnovkou je značena fluktuační část. Přesné definice těchto pojmů se ale v literatuře liší a pro přehled tedy uvedeme některé z nich.

Střední hodnota v čase Tento popis nalezneme například v [27]. Střední hodnotu sledované veličiny ϕ stanovíme jako

$$\langle \phi \rangle(x) = \frac{1}{T} \int_0^T \phi(x, t) \,\mathrm{d}t, \qquad (3.6)$$

přičemž T uvažujeme dostatečně velké, případně uvažujeme, že se T limitně blíží nekonečnu. Tuto definici lze dle [27] použít, pokud je střední hodnota veličiny stacionární. Takto získaná hodnota $\langle \phi \rangle$ není proměnnou v čase.

Další možný přístup ke středování v čase je uveden v [21][23], kdy je střední hodnota definována jako

$$\langle \phi \rangle(x,t) = \frac{1}{T} \int_{t}^{t+T} \phi(x,\tau) \,\mathrm{d}\tau.$$
(3.7)

Takto definovaná hodnota je proměnná v čase i prostoru. Uvádí se, že hodnota T se v tomto případě volí mezi nejkratší a nejdelší časovou škálou proudění [21].

Průměr přes realizace V některých publikacích, mj. [11][27], je uvažován tzv. průměr přes realizace. Ten je charakterizován jako průměr okamžitých hodnot hodnot dané veličiny, pokud by bylo realizováno N identických experimentů, tj.

$$\langle \phi \rangle(x,t) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \phi^{(n)}(x,t),$$
 (3.8)

tedy tato hodnota je proměnná v čase i prostoru. Teoreticky uvažujeme, že hodnota N se blíží nekonečnu.

Střední hodnota náhodné veličiny Tento přístup je využit v [23]. Uvažujeme, že sledované veličiny jsou náhodné ve smyslu teorie pravděpodobnosti. Tyto veličiny jsou tedy popsány funkcí hustoty pravděpodobnosti. Okamžité hodnoty veličiny, které změříme při experimentu, se považují jen za jednu realizaci náhodné veličiny. Střední hodnotu veličiny pak uvažujeme jako střední hodnotu náhodné veličiny, tj.

$$\langle \phi \rangle(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} V f(V;x,t) \,\mathrm{d}V, \tag{3.9}$$

tedy střední hodnota je proměnná v čase i prostoru.

Pro libovolnou z těchto definic platí, že střední hodnota fluktu
ační části veličiny je nulová, tj. $\tilde{\ }$

$$\langle \tilde{\phi} \rangle(x,t) = 0. \tag{3.10}$$

Středováním Navierových-Stokesových rovnic, záměnou derivace a středování, dosazením rozkladu (3.4) do nelineárního konvektivního členu a využitím vztahu (3.10) dostáváme tzv. RANS rovnice

$$\frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial t} + \frac{\partial \langle u_i \rangle \langle u_j \rangle}{\partial x_i} = \nu \frac{\partial^2 \langle u_j \rangle}{\partial x_i \partial x_i} - \frac{\partial \langle \tilde{u}_i \tilde{u}_j \rangle}{\partial x_i} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_j}.$$
(3.11)

Středováním rovnice kontinuity a záměnou derivace a středování pak dostáváme vztah analogický rovnici kontinuity i pro středované hodnoty veličin

$$\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_i} = 0. \tag{3.12}$$

Pokud uvažujeme že střední hodnota byla zavedena pomocí vztahu (3.6), tedy že $\langle u \rangle = \langle u \rangle(x)$, vypadne z RANS rovnic časová derivace a dostáváme tvar rovnic

$$\frac{\partial \langle u_i \rangle \langle u_j \rangle}{\partial x_i} = \nu \frac{\partial^2 \langle u_j \rangle}{\partial x_i \partial x_i} - \frac{\partial \langle \tilde{u}_i \tilde{u}_j \rangle}{\partial x_i} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_j}.$$
(3.13)

Ačkoliv se středování (3.6) objevuje často v literatuře, tvar rovnic bez časové derivace (3.13) není obvyklý a místo nich se obvykle uvažují rovnice s časovou derivací ve tvaru (3.11). Toto je zmíněno v [8].

Rovnice (3.11) se od původních Navierových-Stokesových rovnic liší pouze o výraz se členem $\langle \tilde{u}_i \tilde{u}_j \rangle$. Tento člen se označuje jako Reynoldsův tenzor napětí a je vyjádřen jako

$$\langle \tilde{u}_i \tilde{u}_j \rangle = \langle u_i u_j \rangle - \langle u_i \rangle \langle u_j \rangle. \tag{3.14}$$

Jelikož pro stanovení tohoto rozdílu bychom museli znát veličiny před středováním, RANS rovnice (3.11) s rovnicí kontinuity (3.12) netvoří uzavřenou soustavu. Abychom soustavu uzavřeli, je nutné Reynoldsova napětí nějakým způsobem aproximovat (pomocí modelů turbulence). Tato aproximace je tedy klíčovým prvkem modelování turbulence pomocí přístupu RANS. Modely turbulence se snaží tento člen co nejlépe aproximovat na základě různých matematických a fyzikálních úvah a znalostí výsledků experimentů, a to jak fyzikálních, tak DNS simulací.

3.2.1 Modely založené na turbulentní viskozitě

Jedná se o největší třídu modelů turbulence, která zahrnuje většinu modelů nyní využívaných v technické praxi. Popis metod lze nalézt v knize [23].

Modely jsou založené na dvou předpokladech [23]. Prvním předpokladem je, že anizotropní část Reynoldsova tenzoru napětí, tj.

$$\langle \tilde{u}_i \tilde{u}_j \rangle - \frac{2}{3} k \delta_{ij}, \qquad (3.15)$$

lze vyjádřit v závislosti na prostorových derivacích středních hodnot rychlosti $\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j}$. Symbol δ_{ij} označuje Kroneckerovo delta. Hodnota k značí turbulentní kinetickou energii definovanou jako $k \equiv \frac{1}{2} \langle \tilde{u}_i \tilde{u}_i \rangle$.

Druhým předpokladem je, že tato anizotropní část Reynoldsova tenzoru napětí lze aproximovat pomocí Boussinesquovy hypotézy (1877) jako

$$\langle \tilde{u}_i \tilde{u}_j \rangle - \frac{2}{3} k \delta_{ij} = -\nu_T \left(\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_i} \right).$$
(3.16)

Hodnotu ν_T označujeme jako *turbulentní viskozita*. Vztah je přímou analogií ke vztahu pro vazká napětí v newtonovské tekutině objevující se v důsledku molekulární viskozity. Dosazením tohoto vztahu do RANS rovnic (3.11) a předefinováním tlakového pole na $p \equiv p + \frac{2}{3}k$ dostáváme

$$\frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial t} + \frac{\partial \langle u_i \rangle \langle u_j \rangle}{\partial x_i} = (\nu + \nu_T) \frac{\partial^2 \langle u_j \rangle}{\partial x_i \partial x_i} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_j}.$$
(3.17)

Těmito modely tedy v podstatě řešíme úlohu pro Navierovy-Stokesovy rovnice s prostorově a časově proměnnou efektivní viskozitou $\nu_{ef}(x,t) = \nu + \nu_T(x,t)$.

V [23] je popsána řada úloh, pro kterou je první, druhý nebo oba popsané předpoklady naprosto nesprávné. Ukazuje se, že předpoklad analogie s molekulární viskozitou je velmi slabě teoreticky podložen. Předpoklady nemají obecnou platnost, a to má velký vliv na použitelnost těchto modelů.

Modely tohoto typu se obvykle třídí podle způsobu stanovení turbulentní viskozity ν_T na algebraické, jednorovnicové a dvourovnicové. Pro přehled uvedeme některé nejznámější z nich.

Baldwinův-Lomaxův algebraický model Jedná se o jeden z nejjednodušších využívaných modelů turbulence. Turbulentní viskozita je stanovena na základě algebraického vztahu. V modelu je její výpočet odděleně uvažován pro tvz. vnitřní oblast a tzv. vnější oblast (blízko hranice oblasti). Turbulentní viskozita na vnitřní oblasti se stanoví na základě vztahu

$$\nu_T = l_m^2 |\overline{\Omega}| = l_m^2 \sqrt{(2\overline{\Omega}_{ij}\overline{\Omega}_{ij})}, \qquad (3.18)$$

kde $\overline{\Omega}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} - \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_i} \right)$ a hodnota $l_m = l_m(x)$ označuje tzv. směšovací délku z Prandtlovy hypotézy (1925), jejíž rozložení v prostoru je třeba dále specifikovat. Model je kompletně popsán v [1].

Pro určování směšovací délky na složitějších oblastech je zapotřebí mnoho odhadů [23], což limituje aplikovatelnost a snižuje věrohodnost výsledků. Na druhou stranu pro velkou třídu inženýrských úloh na jednoduchých oblastech je vhodné rozložení směšovací délky známé a model lze využít.

Dvourovnicový $k - \varepsilon$ model Dvourovnicové modely jsou nejčastěji využívané modely turbulence v současné technické praxi. Popíšeme standardní $k - \varepsilon$ model, jehož varianty jsou implementovány ve velkém množství komerčních programů pro simulaci proudění. Model je založený na transportních rovnicích pro turbulentní kinetickou energii k a rychlost disipace turbulentní kinetické energie ε . Tento model zohledňuje historii proudění.

Rovnice pro k je odvozena přímo z RANS rovnic, přičemž na jednotlivé členy jsou aplikovány aproximace. Rovnici pro ε je rovněž možné odvodit, nicméně členy v této rovnici nelze úspěšně aproximovat za základě středních hodnot veličin, a využívá se tak rovnice empirická, odvozená na základě tvaru energetického spektra [23]. Soustava pro k a ε má tvar [8]

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \langle u_i \rangle \frac{\partial k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P - \varepsilon, \qquad (3.19)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \langle u_i \rangle \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_{\varepsilon}} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k}$$
(3.20)

se zdrojovým členem

$$P = -\langle \tilde{u}_i \tilde{u}_j \rangle \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j},\tag{3.21}$$

ve kterém výraz $\langle \tilde{u}_i \tilde{u}_j \rangle$ aproximujeme pomocí Boussinesquovy hypotézy (3.16). Vztah pro turbulentní viskozitu ν_T je odvozen z rozměrové analýzy [8] a má tvar

$$\nu_T = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}.\tag{3.22}$$

Standardní hodnoty konstant jsou [8][23]

$$C_{\mu} = 0,09, \quad C_{\varepsilon 1} = 1,44, \quad C_{\varepsilon 2} = 1,92, \quad \sigma_k = 1,0, \quad \sigma_{\varepsilon} = 1,3.$$
 (3.23)

Rovnice jsou silně nelineární. V úloze je pak třeba navíc specifikovat okrajové a počáteční podmínky. Pro získání fyzikálně přesnějšího řešení v blízkosti pevných stěn je pak možné zahrnout do rovnic takzvané stěnové funkce.

V kategorii dvourovnicových modelů bychom dále nalezli často využívaný $k - \omega$ model, který je založený na podobném principu jako uvedený $k - \varepsilon$ model, ale druhá uvažovaná transportní rovnice je pro tzv. rychlost specifické turbulentní disipace ω .

Modely jsou značně složité, jejich aplikovatelnost je ale omezená. Nicméně lze je využít pro třídu úloh technické praxe, pro které jsou modely kalibrovány.

3.2.2 Komplexnější modely turbulence

Kvůli nedostatečné obecnosti modelů založených na aproximaci Reynoldsových napětí pomocí lineárního vztahu s turbulentní viskozitou bylo odvozeno mnoho modelů turbulence, které se pokouší o komplexnější přístup, buď za použití vztahu nelineárního, nebo o aproximaci přímou - bez použití konceptu turbulentní viskozity. Některé modely jsou popsány v [1]. Jedním z nejkomplexnějších modelů je RSM (*Reynolds stress model*). Tento model je analyzován v [8]. Ukazuje se, že v modelu je nutné aproximovat 22 neznámých vztahů. Výsledky modelu jsou jen mírně lepší než výsledky z modelů dvourovnicových, ovšem implementační i výpočetní náročnost je navýšena výrazně.

3.2.3 Problémy modelů RANS

V teorii RANS modelování lze nalézt jisté nedostatky, o kterých je mj. pojednáváno v textu [8]. Uvedeme některé úvahy.

Ačkoliv přístup k definicím středním hodnoty se u různých autorů liší, turbulentní modely se využívají obvykle stejné a nejsou závislé na uvažovaném středování. Z modelů tedy dostáváme vždy stejné výsledky, jejich interpretace se ale u různých autorů liší. Porovnávání výsledků modelu s výsledky experimentů je ale závislé na tom, jakou interpretaci výsledků zvolíme. Pokud bychom chtěli porovnat výsledku RANS modelu s výsledkem jednoho konkrétního DNS nebo fyzikálního experimentu, můžeme tak korektně učinit, pouze pokud uvažujeme středování v čase dle definice (3.6) nebo (3.7). Porovnání výsledků interpretovaných pomocí průměru přes realizace vyžaduje další fyzikální zjednodušení (hypotéza o ergodicitě [8]), které vede k jistým logickým sporům [8].

Dále, v odvození modelů RANS je často definováno, že veličiny mají charakter náhodných veličin a automaticky je uvažován pojem fyzikálního experimentu - mj. v [23]. Ovšem Navierovy-Stokesovy rovnice a rovnice kontinuity jsou soustava deterministických rovnic. Jedná se o systém, který je za určitých okolností citlivý na infinitezimální poruchy počátečních nebo okrajových podmínek. Není ale jasné, jakým způsobem chápat, že řešení těchto deterministických rovnic je vyjádřeno jako náhodná veličina. Pokud je v řešení náhodnost, měl by takový systém být spíše popsán stochastickými rovnicemi namísto deterministických. Představa náhodných veličin se zdá nyní být matematicky nedostatečně odůvodněná.

Dále kdybychom předpokládali jednoznačnost řešení úlohy pro Navierovy-Stokesovy rovnice, není jasné, jakým způsobem bychom měli měnit počáteční nebo okrajovou podmínku nebo jiný parametr úlohy, abychom dostávali různá řešení přes realizace stejného experimentu. Takový průměr bychom bez použití pojmu fyzikálního experimentu mohli možná chápat jako průměr řešení rovnic při všech možných infinitezimálních změnách v parametrech úlohy. Exaktnější definice a teorii by mohla poskytnout teorie deterministického chaosu. Přeneseme-li se přes tento teoretický nedostatek, dále uvažujme čistě prakticky. Reynoldsův tenzor napětí $\langle \tilde{u}_i \tilde{u}_j \rangle$ vyjadřuje střední hodnotu součinu fluktuačních částí složek rychlosti a jeho aproximace je klíčovým prvkem turbulentních modelů. Při modelování se ze středních hodnot složek rychlosti snažíme odhadnout, jaké jsou fluktuační části složek rychlosti. Tedy na základě znalosti rozložení středních hodnot rychlosti v prostoru (a případně jejich historie) modelujeme v každém bodě tvar funkce hustoty pravděpodobnosti rychlosti, tedy musíme rozhodnout, zda je v daném místě proudění turbulentní a v jaké míře.

Kvůli absenci obecného modelu turbulence je přirozené, že modely, které se o toto snaží, nemohou být použitelné univerzálně. V těchto modelech turbulence je vždy větší množství empirických vztahů (často bez obecné platnosti) a parametrů, které je nutné upravit pro konkrétní úlohu. Hodnoty parametrů se pro daný typ úlohy stanovují obvykle tak, aby výsledky modelování byly v souladu s experimentem. Proto se u složitějších úloh, než pro jaké jsou modely kalibrované, předpovědi získané RANS modely značně liší od experimentálních výsledků [8]. RANS modely také mohou jen těžko zachytit složitější jevy, jako je přechod od laminárního k turbulentnímu proudění, kvaziperiodické nebo periodické chování.

3.2.4 Shrnutí RANS

I přes všechny své nedostatky se v technické praxi využívá téměř výhradně RANS modelování pomocí dvourovnicových modelů. Je to díky relativně velmi nízké výpočetní náročnosti, která navíc není závislá na hodnotě Reynoldsova čísla. RANS modely jsou již dlouhou dobu využívané a validované pro velké množství úloh. Hodnoty získané z RANS modelů bývají dostatečným výstupem pro technické potřeby. Díky tomu, že proudění lze často uvažovat jako statisticky dvoudimenzionální, lze dokonce modelovat turbulence (třídimenzionální jev) na 2D oblastech. To žádná z metod LES a DNS neumožňuje.

3.3 LES

Modelování pomocí Large Eddy Simulation (LES) je jistým kompromisem mezi čistě statistickým přístupem RANS, při kterém se snažíme z mála informací modelovat až příliš mnoho, a čistě deterministickým přístupem při DNS, kde je limitem nesmírná výpočetní náročnost.

Přístup LES je založen na myšlence, že makroskopické turbulentní pohyby jsou charakterizovatelné "makroskopickými" veličinami (jako je rychlost pohybu jistého objemu tekutiny) a tyto pohyby lze pak simulovat pomocí běžných metod, zatímco turbulentní pohyby na malých škálách lze považovat za lokálně statisticky izotropní a jejich vliv na makroskopické veličiny lze modelovat pomocí *SGS* (*subgrid-scale*) modelů. Jedná se tedy o kombinaci deterministického a statistického přístupu.

LES využívá tzv. filtrování rovnic proudění tekutiny v prostoru. Operace filtrování funkce $\phi(x,t)$ je dle [23] definována jako konvoluce

$$\overline{\phi}(x,t) = \int G(r,x)\phi(x-r,t)\,\mathrm{d}r,\tag{3.24}$$

kde integrace se provádí přes celou výpočetní oblast a filtrační jádro G splňuje vlastnost

$$\int G(r,x) \,\mathrm{d}r = 1 \tag{3.25}$$

pro libovolné x. Filtrace tedy provádí jistou formu "průměrování" hodnot na okolí bodu x. V nejjednodušším případě se filtrační jádro G uvažuje homogenní, tedy nezávislé na prostorové souřadnici x.

Přehled možných voleb filtračního jádra lze nalézt v [23]. Jednou z nich je (ve své jednodimenzionální verzi) tzv. *box filter*

$$G(r) = \frac{1}{\Delta} H\left(\frac{1}{2}\Delta - |r|\right), \qquad (3.26)$$

kde funkce H je Heavisideova funkce (jednotkový skok) a parametr Δ nazýváme charakteristická délka. Tato funkce G(r) pak má konstantní hodnotu $\frac{1}{\Delta}$ na intervalu $[-\frac{1}{2}\Delta, \frac{1}{2}\Delta]$. Hodnoty funkce $\overline{\phi}(x)$ jsou pak integrálním průměrem hodnot původní funkce ϕ na $\frac{\Delta}{2}$ -okolí bodů x. Rozšíření jádra do dvou nebo tří dimenzí lze provést buď izotropně, kdy funkce G(r) bude mít konstantní hodnotu na sféře se středem v bodě x, nebo anizotropně například tak, že funkce G(r) bude mít konstantní hodnotu na obdélníku, nebo kvádru, o rozměrech h_x , h_y (a h_z). Mezi další možné volby filtračního jádra patří Gaussova funkce (tzv. *Gaussian filter*), která narozdíl od filtru typu *box* vykazuje lepší vlastnosti při frekvenční analýze řešení a následné analýze energetických procesů [23].

Použijme nyní operaci filtrování na soustavu rovnic proudění nestlačitelné newtonovské tekutiny. Pro homogenní filtr dostáváme vztahy

$$\frac{\partial \overline{u}_j}{\mathrm{d}t} + \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_i} = \nu \frac{\partial^2 \overline{u}_j}{\partial x_i \partial x_i} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j}, \qquad (3.27)$$

$$\frac{\partial \overline{u}_i}{x_i} = 0. \tag{3.28}$$

Rozdíl oproti původní soustavě rovnic se nachází ve druhém členu v první rovnici, jelikož obecně platí

$$\overline{u_i u_j} \neq \overline{u}_i \overline{u}_j. \tag{3.29}$$

Soustava (3.27), (3.28) tak není uzavřená, protože pro získání hodnoty $\overline{u_i u_j}$ potřebujeme znát původní nefiltrovanou funkci *u*. Zavedeme tzv. *tenzor reziduálních napětí* τ_{ij}^R ve tvaru

$$\tau_{ij}^R = \overline{u_i u_j} - \overline{u}_i \overline{u}_j. \tag{3.30}$$

Tento tenzor je analogií s Reynoldsovým tenzorem napětí v RANS (3.14).

Tenzor dále rozložíme jako

$$\tau_{ij}^R = \tau_{ij}^r + \frac{2}{3}k_r \delta_{ij}, \qquad (3.31)$$

kde hodnotu k_r definovanou jako $k_r \equiv \frac{1}{2}\tau_{ii}^R = \frac{1}{2}(\overline{u_iu_i} - \overline{u}_i\overline{u}_i)$ nazveme reziduální kinetická energie a člen τ_{ij}^r je pak anizotropní část tenzoru reziduálních napětí. Předefinováním filtrovaného tlakového pole na

$$\overline{p} \equiv \overline{p} + \frac{2}{3}k_r \tag{3.32}$$
a po dosazení těchto vztahů do (3.27) dostáváme neuzavřenou soustavu

$$\frac{\partial \overline{u}_j}{\partial t} + \frac{\partial \overline{u}_i \overline{u}_j}{\partial x_i} = \nu \frac{\partial^2 \overline{u}_j}{\partial x_i \partial x_i} - \frac{\partial \tau_{ij}^r}{\partial x_i} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j}, \qquad (3.33)$$

$$\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_i} = 0. \tag{3.34}$$

Abychom docílili uzavřenosti této soustavy, člen τ_{ij}^r vhodně aproximujeme (modelujeme) na základě ostatních veličin v soustavě. Modely pro aproximaci tohoto členu se nazývají SGS modely (*subgrid-scale models*) a jsou klíčovým prvkem LES.

3.3.1 Energetická analýza

Analýza kinetické energie proudění nám pomáhá pochopit vlastnosti SGS modelů pro reziduální napětí τ_{ii}^r a lze ji nalézt v [23].

Na pole kinetické energie (vztažené na jednotku hmotnosti) původního nefiltrovaného rychlostního pole $E(x,t) = \frac{1}{2}u_i(x,t)u_i(x,t)$ aplikujeme operaci filtrování a dostáváme filtrované pole kinetické energie

$$\overline{E}(x,t) = \frac{1}{2} \overline{u_i(x,t)u_i(x,t)}.$$
(3.35)

Kinetická energie obsažená ve filtrovaném rychlostním poli je ale dáno jako

$$E_f(x,t) = \frac{1}{2}\overline{u}_i(x,t)\overline{u}_i(x,t).$$
(3.36)

Rozdíl těchto dvou hodnot tvoří reziduální kinetická energie, tj. energie obsažená ve fluktuacích rychlosti pod charakteristickou délkou filtru, tedy píšeme

$$\overline{E} = E_f + k_r = \frac{1}{2}\overline{u}_i\overline{u}_i + \frac{1}{2}\tau_{ii}^R = \frac{1}{2}\overline{u}_i\overline{u}_i + \frac{1}{2}\left(\overline{u_iu_i} - \overline{u}_i\overline{u}_i\right).$$
(3.37)

Pro další analýzu zavedeme filtrovaný tenzor rychlosti deformace \overline{S}_{ij} daný vztahem

$$\overline{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i} \right)$$
(3.38)

a jeho charakteristickou hodnotu \overline{S} definovanou jako

$$\overline{S} = \sqrt{2\overline{S}_{ij}\overline{S}_{ij}}.$$
(3.39)

Přenásobením filtrované soustavy Navierových-Stokesových rovnic vektorem rychlosti $\overline{u_j}$ a úpravou získané rovnice dostaneme bilanci kinetické energie obsažené ve filtrovaném rychlostním poli. Po úpravě má bilance tvar [23]

$$\frac{\partial E_f}{\partial t} + \overline{u}_j \frac{\partial E_f}{\partial x_j} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{u}_j \overline{p}}{\partial x_j} - 2\nu \frac{\partial \overline{u}_i \overline{S}_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u}_i \tau_{ij}^r}{\partial x_j} = -\varepsilon_f - P_r, \qquad (3.40)$$

kde levá strana rovnice reprezentuje transport kinetické energie a na pravé straně jsou zdrojové členy. Člen ε_f má tvar

$$\varepsilon_f = 2\nu \overline{S}_{ij} \overline{S}_{ij} \tag{3.41}$$

a vyjadřuje disipaci kinetické energie filtrovaného rychlostního pole vlivem vazkých napětí. Člen P_r , vyjádřený jako

$$P_r = -\tau_{ij}^r \overline{S}_{ij},\tag{3.42}$$

reprezentuje produkci reziduální kinetické energie, tedy disipaci kinetické energie filtrovaného pole rychlosti vlivem přenosu energie na fluktuace rychlosti pod charakteristickou délkou filtru [23]. Při turbulentním proudění je v rovnici dominantním zdrojovým členem P_r , zatímco hodnota disipace kinetické energie vlivem vazkých napětí je malá.

Z Kolmogorovy teorie turbulence plyne, že v průměru je energie přenášena z velkých škál na malé škály, tedy $\langle P_r \rangle > 0$, nicméně lokálně dochází i k tomu, že energie z malých škál se vrací do pohybů na velkých škálách. Potom platí $P_r < 0$ a tento jev se v angličtině označuje jako *backscatter*.

3.3.2 Modely založené na SGS turbulentní viskozitě

Těmito modely aproximujeme anizotropní část tenzoru reziduálních napětí τ_{ij}^r pomocí analogie s Boussinesquovou hypotézou (3.16) jako

$$\tau_{ij}^r = -2\nu_{sgs}\overline{S}_{ij} = -\nu_{sgs}\left(\frac{\partial\overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\overline{u}_j}{\partial x_i}\right).$$
(3.43)

Filtrovanou soustavu rovnic LES lze díky této aproximaci převést na tvar [23]

$$\frac{\partial \overline{u}_j}{\partial t} + \frac{\partial \overline{u}_i \overline{u}_j}{\partial x_i} = (\nu + \nu_{sgs}) \frac{\partial^2 \overline{u}_j}{\partial x_i \partial x_i} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j}, \qquad (3.44)$$

$$\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_i} = 0, \tag{3.45}$$

přičemž SGS turbulentní viskozita je proměnná v prostoru a času. S těmito modely tedy vlastně úlohu pro Navierovy-Stokesovy rovnice s efektivní viskozitou $\nu_{ef}(x,t) = \nu + \nu_{sgs}(x,t)$ proměnnou v čase i prostoru a závislou na zvolených parametrech filtrační funkce a SGS modelu.

Smagorinského SGS model [1][8][21][23][27]

Tento model uvedl ve svém článku v roce 1963 J. Smagorinsky a jedná se o pravděpodobně nejjednodušší a nejznámější SGS model. Model je analogií k algebraickým modelům RANS.

SGS turbulentní viskozitu ν_{sqs} stanovíme jako

$$\nu_{sgs} = l_s^2 \overline{S} = C_S^2 \Delta^2 \overline{S} = C_S^2 \Delta^2 \sqrt{2\overline{S}_{ij}\overline{S}_{ij}}.$$
(3.46)

Konstanta Δ je charakteristická délka filtru. Konkrétní tvar filtru nemusí být přímo specifikován. Parametr l_s se nazývá Smagorinského směšovací délka a parametr C_S je tzv. Smagorinského koeficient vztahující se k uvažované filtrační funkci a jehož hodnota je stanovena empiricky.

Produkce reziduální kinetické energie dle vztahu (3.42) stanovíme jako

$$P_r = -\tau_{ij}^r \overline{S}_{ij} = 2\nu_{sgs} \overline{S}_{ij} \overline{S}_{ij} = \nu_{sgs} \overline{S}^2 = C_S^2 \Delta^2 \overline{S}^3.$$
(3.47)

Tedy produkce reziduální kinetická energie je vždy kladná a není umožněn backscatter.

Původní hodnota konstanty C_S byla stanovena jako $C_S = 0.17$ [23]. Tato hodnota byla odvozena na základě analýzy energetického spektra turbulentního proudění za předpokladu, že charakteristická délka filtru Δ leží v přechodovém pásmu. Nicméně pro laminární proudění v případě, kdy jsou mimodiagonální složky tenzoru reziduálních napětí nulové, nemá reziduální tenzor napětí vliv na přenos hustoty hybnosti v prostoru, a správná hodnota konstant l_s a C_S by tak měla být nulová [23]. Porovnáním s výsledky DNS simulací se skutečně prokázalo, že při laminárním proudění je původní hodnota C_S příliš vysoká a model je tedy příliš disipativní, zatímco v některých případech je pro lepší výsledky nutné hodnotu C_S naopak zvýšit [23][27]. Obvykle se tak volí C_S v rozsahu 0.1 - 0.2 dle typu úlohy [1][27]. Dále také platí, že v blízkosti stěn by hodnoty l_s a C_S měly klesat k nule. To se obvykle zajistí využitím van Driestovy tlumicí funkce pro hodnotu l_s

$$l_s = C_S \Delta [1 - \exp(\frac{y^+}{A^+})], \qquad (3.48)$$

kde konstanta $A^+ = 26$ [23].

Modely s transportní rovnicí [1][21][23][27]

Modely s transportní rovnicí jsou analogií k jednorovnicovým modelům RANS. Původní model navrhl v roce 1974 Deardoff a později se objevily jeho různé další varianty. V těchto modelech se využívá odvozená transportní rovnice pro reziduální kinetickou energii s některými členy dodanými empiricky. Pro aproximaci anizotropní části tenzoru reziduálních napětí τ_{ij}^r se obvykle využívá analogie s Boussinesqovou hypotézou (3.43) a SGS turbulentní viskozity ν_{sqs} vyjádřené jako

$$\nu_{sgs} = C_{\nu} \Delta \sqrt{k_r(x, t)}. \tag{3.49}$$

Transportní rovnice pro k_r má tvar

$$\frac{\partial k_r}{\partial t} + \overline{u}_j \frac{\partial k_r}{\partial x_j} = C_\nu \Delta \sqrt{k_r} \overline{S}_{ij} \overline{S}_{ij} - C_\varepsilon \frac{k_r^2}{\Delta} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{C_\nu}{\sigma_T} \Delta \sqrt{k_r} \right) \frac{\partial k_r}{\partial x_j} \right]$$
(3.50)

a v modelu jsou empirické konstanty, jejichž obvyklé hodnoty jsou $C_{\varepsilon} = 0, 7, C_{\nu} = 0, 1$ a $\sigma_T = 0, 7$ [23].

Jelikož modely tohoto typu zohledňují historii proudění, uplatňují se především v některých speciálních aplikacích (meteorologie, reaktivní procesy). Kromě těchto speciálních případů však výrazně zvýšená výpočetní náročnost a složitost algoritmu obvykle nepřináší dostatečné zpřesnění výsledků, a použití těchto modelů tak často není efektivní.

Dynamický SGS model [1][8][21][23][27]

Tento model vychází z původního Smagorinského SGS modelu. Na základě úvahy, že Smagorinského koeficient C_S by bylo vhodné uvažovat jako proměnnou v prostoru a čase $C_S(x,t)$, vyvinuli Germano et al v roce 1991 tzv. dynamický SGS model.

Model pro stanovení rozložení C_S v prostoru využívá dva filtry s různými charakteristickými délkami $\overline{\Delta}$ a $\tilde{\Delta}$, přičemž obvykle $\tilde{\Delta} = 2\overline{\Delta}$. Aplikací druhého filtrování na \overline{u} dostáváme [23]

$$\widetilde{\overline{u}}(x,t) = \int G_{\widetilde{\Delta}}(r)\overline{u}(x-r,t)\,\mathrm{d}r = \int G_{\widetilde{\Delta}}(r)u(x-r,t)\,\mathrm{d}r,\tag{3.51}$$

kde $\widetilde{\overline{\Delta}}$ je tzv. efektivní délka filtru, jejíž hodnota lze pro konkrétní typ filtru stanovit na základě frekvenční analýzy a pro gaussovský filtr platí $\widetilde{\overline{\Delta}} = \sqrt{\overline{\Delta}^2 + \widetilde{\Delta}^2}$.

Kromě standardního tenzoru reziduálních napětí τ_{ij}^R dále zavedeme tenzor reziduálních napětí po dvojitém filtrování T_{ij}^R , tedy máme vztahy

$$\tau_{ij}^R = \overline{u_i u_j} - \overline{u}_i \overline{u}_j, \qquad (3.52)$$

$$\Gamma_{ij}^R = \widetilde{\overline{u_i u_j}} - \widetilde{\overline{u}_i} \widetilde{\overline{u}_j}.$$
(3.53)

Aplikujeme-li operaci druhého filtrování na tenzor reziduálních napětí τ_{ij}^R a vztahy od sebe odečteme, dostáváme tzv. Germanovu identitu

$$L_{ij} \equiv T_{ij}^R - \widetilde{\tau}_{ij}^R = \widetilde{\overline{u}_i \overline{u}_j} - \widetilde{\overline{u}}_i \widetilde{\overline{u}}_j.$$
(3.54)

Tento výraz jsme schopni vyjádřit přímo na základě znalosti \overline{u} a můžeme ho interpretovat jako příspěvek prostorových fluktuací na škálách mezi $\overline{\Delta}$ a $\tilde{\Delta}$ k tenzoru reziduálních napětí z hlediska filtru $\tilde{\Delta}$ a pomocí toho následně lokálně odhadnout vhodnou volbu konstanty C_S .

Pokud bychom anizotropní části tenzorů τ_{ij}^R a T_{ij}^R aproximovali pomocí Smagorinského SGS aproximace (3.43), dostáváme vztahy

$$\tau_{ij}^r = -2C_S^2 \overline{\Delta}^2 \overline{S} \ \overline{S}_{ij}, \tag{3.55}$$

$$T_{ij}^r = -2C_S^2 \widetilde{\Delta}^2 \widetilde{\overline{S}} \, \widetilde{\overline{S}}_{ij}. \tag{3.56}$$

Jelikož L_{ij} je vyjádřeno jako $L_{ij} \equiv T_{ij}^R - \tilde{\tau}_{ij}^R$, dostáváme tak aproximaci L_{ij} pomocí Smagorinského modelu jako

$$L_{ij}^{SGS} - \frac{1}{3} L_{kk}^{SGS} \delta_{ij} = 2C_S^2 \ \overline{\Delta}^2 \overline{\overline{S}} \ \overline{\overline{S}}_{ij} - 2C_S^2 \ \overline{\overline{\Delta}}^2 \overline{\overline{S}} \ \overline{\overline{S}}_{ij}, \tag{3.57}$$

přičemž pro zjednodušení jsme uvažovali koeficient C_S konstantní v prostoru (ačkoliv cílem modelu je dostat hodnotu koeficientu proměnnou v prostoru). Definujeme-li výraz

$$M_{ij} = 2 \,\overline{\Delta}^2 \widetilde{\overline{S}} \,\overline{\overline{S}}_{ij} - 2 \,\overline{\overline{\Delta}}^2 \overline{\overline{S}} \,\overline{\overline{S}}_{ij}, \qquad (3.58)$$

můžeme tuto aproximaci zapsat jako

$$L_{ij}^{SGS} - \frac{1}{3} L_{kk}^{SGS} \delta_{ij} = C_S^2 M_{ij}.$$
(3.59)

Tuto aproximaci tenzoru L_{ij} jsme schopni přímo vyjádřit na základě znalosti \overline{u} . Jelikož jsme ale schopni vyjádřit i samotný tenzor L_{ij} přímo ze vztahu (3.54), můžeme se pokusit lokálně najít hodnotu C_S tak, aby se SGS aproximace anizotropní části L_{ij}^{SGS} co nejlépe přibližovala přímému vyjádření anizotropní části L_{ij} . Pomocí metody nejmenších čtverců byla autory metody stanovena jako nejlepší aproximace hodnota

$$C_S^2 = \frac{L_{ij} M_{ij}}{M_{kl} M_{kl}}.$$
(3.60)

Protože takto stanovené hodnoty vykazují vysokou míru fluktuace v prostoru, autoři navrhli upravené vyjádření

$$C_S^2 = \frac{\langle L_{ij} M_{ij} \rangle}{\langle M_{kl} M_{kl} \rangle},\tag{3.61}$$

kde operace $\langle . \rangle$ v tomto případě vyjadřuje jisté průměrování ve směru statistické homogenity proudění, případně v krátkém časovém intervalu. Jelikož výraz na pravé straně může nabývat záporné hodnoty, má označení C_S^2 pouze symbolický význam pro konzistenci značení s původním Smagorinského modelem (3.46).

Pokud koeficient C_S^2 lokálně nabývá záporné hodnoty, SGS turbulentní viskozita nebude kladná, a to může způsobit, že celková efektivní viskozita v rovnicích LES modelu (3.45) může být záporná. Taková situace pak vede na úlohu se záporným difuzním koeficientem, která je špatně podmíněná. Záporná hodnota efektivní viskozity nicméně umožňuje jev *backscatter* (přenos reziduální kinetické energie zpět do kinetické energie filtrovaného rychlostního pole), který se v reálných turbulentních prouděních skutečně vyskytuje. Kvůli špatné podmíněnosti úlohy ale někteří autoři zpochybňují korektnost toho modelu [8]. Při implementaci tohoto modelu je nutné zajistit stabilizaci schématu. V některých implementacích jsou záporné hodnoty předefinovány na nulu [23], čímž je *backscatter* znemožněn.

V aposteriorních porovnáních s DNS simulacemi model vykazuje dobré výsledky. Lze ho využít pro přechodné i turbulentní proudění. V oblastech laminárního proudění je hodnota C_S správně stanovena jako blízká nule a v blízkosti stěn není nutné uvažovat tlumicí funkci jako u klasického Smagorinského SGS modelu.

Shrnutí modelů založených na SGS viskozitě Přístup založený na konceptu SGS turbulentní viskozity je oblíbený díky relativní jednoduchosti implementace, robustnosti a nízké výpočetní náročnosti [21]. Nicméně i přes dobré výsledky dynamických modelů v aposteriorních porovnáních je nutné poznamenat, že základní předpoklady, ze kterých jsou modely odvozeny, tedy že lze použít aproximaci analogickou k Boussinesquově hypotéze (3.43), nejsou obecně platné. Dle výsledků DNS simulací se ukazuje, že rozložení složek tenzoru τ_{ij}^r , stanovených přesně, vykazuje velmi nízkou korelaci s uspořádáním složek \overline{S}_{ij} . Model tak nemůže dobře vystihnout vhodné uspořádání τ_{ij}^r a zároveň správné hodnoty produkce reziduální kinetické energie $P_r = \tau_{ij}^r \overline{S}_{ij}$ [23]. Uvádí se proto, že dobře výsledky v aposteriorních porovnáních nepramení z toho, že by model dokázal reprezentovat fyzikální procesy na nejmenších škálách [23]. Skutečná prediktivní schopnost a obecnost modelů založených na SGS turbulentní viskozitě je proto zpochybňována [8].

3.3.3 Modely typu scale-similarity a smíšené modely

Modely typu *scale-similarity* [8][21][23] opouštějí koncept SGS turbulentní viskozity. Model, který navrhli v roce 1980 Bardina et al., využívá dekompozici tenzoru reziduálních napětí τ_{ii}^{R} na

$$\tau_{ij}^R = L_{ij}^0 + C_{ij}^0 + R_{ij}^0, \qquad (3.62)$$

kde člen L_{ij}^0 nazýváme *Leonardova napětí* a dle Germanovy dekompozice platí [21][23]

$$L^{0}_{ij} = \overline{\overline{u}_i \overline{u}_j} - \overline{\overline{u}}_i \overline{\overline{u}}_j.$$
(3.63)

Tento tenzor můžeme pomocí filtrovaných veličin přímo vyjádřit, zatímco členy C_{ij}^0 a R_{ij}^0 ve svém vyjádření obsahují fluktuační části funkce rychlosti, které neznáme, a odhadujeme, že tyto členy lze zanedbat. V tomto modelu tak jako aproximaci τ_{ij}^r použijeme přímo anizotropní část L_{ij}^0 přenásobenou jistou konstantou C_{sim} , tedy [21]

$$\tau_{ij}^{r} = C_{sim} \left(L_{ij}^{0} - \frac{1}{3} L_{kk}^{0} \delta_{ij} \right).$$
(3.64)

Použijeme-li pro aproximaci Leonardových napětí L_{ij}^0 aproximaci založenou na jejich analytickém vyjádření a Taylorově rozvoji, dostáváme vztah [21]

$$L_{ij}^{0} \equiv \frac{\Delta^2}{12} \frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_k} \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_k}.$$
(3.65)

Model, který využívá tento vztah pro aproximaci τ_{ij}^r s dodatečnou konstantou ve tvaru

$$\tau_{ij}^{R} = C_{nl} \left(L_{ij}^{0} - \frac{1}{3} L_{kk}^{0} \delta_{ij} \right) = C_{nl} \frac{\Delta^{2}}{12} \left(\frac{\partial \overline{u}_{i}}{\partial x_{k}} \frac{\partial \overline{u}_{j}}{\partial x_{k}} - \frac{1}{3} \frac{\partial \overline{u}_{l}}{\partial x_{k}} \frac{\partial \overline{u}_{l}}{\partial x_{k}} \delta_{ij} \right)$$
(3.66)

se nazývá Clarkův model. Tento model byl uveden v roce 1979 [21].

Ačkoliv dle apriorních porovnání by tyto modely měly velmi dobře aproximovat τ_{ij}^r , při výpočtech vedou často k nerealistickým výsledkům, jelikož se ukazuje, že tyto modely nejsou při numerických výpočtech dostatečně disipativní. To je připisováno faktu, že kvůli diskretizaci úlohy dochází k jisté ztrátě informací o filtrovaných polích rychlostí, která v ideální aproximaci není uvažována [8]. Proto byly vyvinuty takzvané smíšené modely [8][21][23], kde je disipace přidána tím, že zkombinujeme aproximace modelu typu *scale-similarity* a aproximaci pomocí některého modelu SGS turbulentní viskozity buď jako jejich součet [23]

$$\tau_{ij}^R = \left(L_{ij}^0 - \frac{1}{3}L_{kk}^0\delta_{ij}\right) - 2\nu_{sgs}\overline{S}_i j,\tag{3.67}$$

nebo jako nějakou jejich kombinaci [8]. Turbulentní viskozitu v těchto modelech obvykle stanovujeme pomocí dynamického SGS modelu. Takovéto modely pak nazýváme dynamické smíšené modely.

3.3.4 Modelování v blízkosti stěny

Při simulaci turbulentního proudění ohraničeného stěnami nelze procesy v mezní vrstvě u stěn považovat za lokálně statisticky izotropní. Disipace kinetické energie a turbulentní kinetická energie dosahují při turbulentním proudění maxima ve vzdálenosti $y^+ < 20$, což je vzdálenost mnohem menší než je obvyklá charakteristická délka filtru a rozlišení diskretizační sítě nutné pro simulaci volného proudění mimo blízkosti stěn [23]. Proto je pro správnou simulaci procesů v mezní vrstvě nutné přistoupit k jednomu z následujících postupů.

Jednou z možností je výrazné zjemnění diskretizační sítě u stěn, ovšem tím se výpočet stává značně neefektivní pro praktické aplikace. Počet potřebných diskretizačních bodů v prostoru odhadem roste v závislosti na Reynoldsovu číslu úlohy rychlostí $Re^{1.76}$ [23]. Stejně tak je nutné u stěn zkrátit charakteristickou délku filtru ve směru normály ke stěně y, tím by se ale filtr stal nehomogenní v prostoru a operace prostorové derivace a filtrování by nekomutovaly, což by vedlo k tomu, že by se v rovnicích LES (3.33), (3.34) objevily dodatečné členy. Proto se místo toho obvykle používá pouze rovinný filtr v rovině x - z kolmé na směr y, který lze uvažovat homogenní v prostoru [23].

Alternativou je pak efekty procesů odehrávajících se v mezní vrstvě pouze modelovat pomocí stěnových funkcí nebo speciálních okrajových podmínek na smykové složky tenzoru reziduálních napětí. Některé postupy jsou zmíněny v [23]. Tento přístup nezvyšuje výpočetní náročnost úlohy v závislosti na Reynoldsově čísle, nicméně není vhodný pro simulace složitějších turbulentních procesů jako odtržení mezní vrstvy a další [23].

3.3.5 Shrnutí LES

V této podkapitole jsme představili nejznámější metody typu LES. Modely s SGS turbulentní viskozitou jsou založené na fyzikálně i matematicky nedostatečně podloženém předpokladu analogickém s Bousinessquovou hypotézou, z čehož plynou jejich nedostatky, a nelze je tak považovat za dostatečně obecný a fyzikálně správný model turbulence. Nicméně některé pokročilejší modely se ukazují jako úspěšné při praktických výpočtech a jsou proto často využívány pro široké spektrum úloh.

Teoreticky nadějně vypadající modely typu *scale-similarity* generují nestabilní numerické algoritmy a pro zajištění stability jsou tak kombinovány s metodami založenými na SGS turbulentní viskozitě.

Modelování pomocí LES se dále obecně potýká s několika dalšími praktickými problémy. Abychom z modelů LES dostali fyzikálně správné výsledky pro úlohy proudění ohraničeného stěnami, je nutné u stěn volit mimořádně jemnou síť, nebo se uchýlit k další aproximaci pomocí stěnových funkcí. Za tímto účelem jsou vyvíjeny také hybridní modely RANS/LES, DES.

Dalším problémem je samotné numerické řešení modelů LES. Modely LES předpokládají, že filtrované rovnice jsou řešeny přesně, což v praxi nelze zajistit. Aby diskretizační chyba numerického schématu neinterferovala se samotným SGS modelem, je obvykle nutné volit nedisipativní metody vyššího řádu přesnosti a dostatečně jemnou diskretizační síť. Nicméně i tak u některých úloh může docházet k situaci, kdy i při použití metod vyššího řádu je velikost diskretizační chyby numerické metody větší než velikost příspěvků SGS modelu [25].

Vývoj nových modelů turbulence typu LES je často založený fundamentálně odlišných přístupech. Mezi nově navrhovanými modely jsou mj. modely založené na teorii pravděpodobnosti, fraktálové analýze, teorii dynamických systémů nebo model založený na řešení jiné soustavy rovnic - *Lagrangian-averaged Navier-Stokes (LANS) alpha model* [21].

3.4 ILES

Poněkud odlišným přístupem je modelování metodou ILES (*implicit large eddy simulation*). Ačkoliv svým charakterem se řadí k metodám typu LES, v tomto textu mu bude věnována samostatná podkapitola. Při numerickém řešení filtrovaného systému rovnic LES (3.33), (3.34) je řešení zatíženo chybami, z nichž obvykle nejpodstatnější je prostorová diskretizační chyba [23]. Aplikujemeli metodu konečných objemů přímo na soustavu Navierových-Stokesových rovnic, prostorová diskretizační chyba se v modifikované rovnici numerického schématu projeví jako člen ve tvaru divergence [13]. Modifikovaná rovnice semidiskrétního schématu lze tak pro \overline{u}_j a \overline{p} vyjadřující integrální průměry veličin ve smyslu metody konečných objemů zapsat ve tvaru

$$\frac{\partial \overline{u}_j}{\partial t} + \frac{\partial \overline{u}_i \overline{u}_j}{\partial x_i} = \nu \frac{\partial^2 \overline{u}_j}{\partial x_i \partial x_i} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{u}}{\partial x_j}, \qquad (3.68)$$

kde člen τ_{ij} je dodatečným členem oproti původní soustavě Navierových-Stokesových rovnic objevující se v důsledku prostorové diskretizace. Tento člen je závislý na prostorovém diskretizačním kroku h.

V klasickém přístupu LES se snažíme řešit filtrované rovnice LES (3.33), (3.34) s explicitním modelem pro τ_{ij}^r a volíme takovou metodu a diskretizační krok, aby byla diskretizační chyba numerického schématu zanedbatelná oproti příspěvkům SGS modelu. U ILES je přístup rozdílný - numerickou metodu aplikujeme na původní soustavu rovnic proudění tekutiny (tedy explicitní model reziduálních napětí vynecháváme) a snažíme se numerickou metodu volit tak, aby se jako model reziduálních napětí choval člen τ_{ij} objevující se v důsledku diskretizace.

Ukazuje se, že některé neoscilativní numerické metody spadající pod metodu konečných objemů svým chováním a tvarem diskretizační chyby připomínají chování SGS modelů zmiňovaných v předchozí podkapitole [20][13]. Samotná numerická metoda tak implicitně plní roli filtru a SGS modelu a tím odpadá nutnost stanovovat aproximace tenzoru reziduálních napětí pomocí explicitního SGS modelu.

To, že právě tyto algoritmy fungují jako ILES, je zdůvodňováno mimo jiné faktem, že tyto metody aproximují řešení rovnic, jenž nejpřesněji vystihují dynamiku konečných objemů tekutiny [13]. Metoda konečných objemů je odvozena z obecnější integrální formulace a je navržena pro hledání integrálních průměrů veličin (namísto hledání bodových hodnot původních funkcí s vysokofrekvenčními fluktuacemi). Metodou konečných objemů tak aproximujeme řešení rovnic popisujících chování integrálních průměrů veličin, namísto bodových hodnot. Tedy metodou konečných objemů přímo hledáme řešení analogické s filtrovaným řešením v LES modelu.

Poprvé byla myšlenka algoritmů typu ILES formulována v textu [5] v roce 1990. V tomto textu J. Boris uvádí tezi, že monotónní algoritmy, navržené za účelem dodržení fyzikálních požadavků pozitivity a kauzality, obsahují v důsledku toho minimální LES filtr a jemu příslušný SGS model. Přístup byl proto označován jako MILES (monotone integrated LES) [12]. Až později se objevily publikace, ve kterých byly tyto vlastnosti exaktněji matematicky popsány a zdůvodněny, nicméně ještě v roce 2007 se v publikaci [13] uvádí, že napříč komunitou zabývající se turbulentním modelováním se tento přístup stále nesetkal se všeobecným přijetím. Od doby původní myšlenky se ukázalo, že monotonicita je až příliš přísná podmínka a úspěšné mohou být i algoritmy, které ji striktně nedodržují, proto se nyní častěji užívá označení ILES (implicit LES).

3.4.1 Porovnání klasického přístupu LES a přístupu ILES

LES Při klasickém LES modelování vycházíme z diferenciálního tvaru bilance hybnosti a zákona zachování hmotnosti. Předpokládáme, že numerická metoda nedokáže správným způsobem zohlednit fluktuace řešení pod úrovní diskretizační sítě. Proto provádíme filtraci soustavy rovnic proudění tekutiny a dostáváme novou neuzavřenou soustavu rovnic pro "vyhlazené" pole veličin. Soustavu musíme pro její uzavření doplnit o explicitní SGS model, pomocí kterého aproximujeme efekty fluktuací řešení původní soustavy rovnic pod charakteristickou délkou filtru na filtrované veličiny. Získanou soustavu rovnic pak vhodnou numerickou metodou diskretizujeme a dostáváme řešení pro pole filtrovaných veličin. Bodové hodnoty filtrovaných veličin pak vyjadřují jistou formu průměru přesného fluktuujícícho řešení původní soustavy rovnic na okolí daného bodu.



Výhoda tohoto přístupu spočívá zejména v tom, že filtr a SGS model můžeme zvolit prakticky libovolně, můžeme do něj zanést velké množství fyzikálních a matematických úvah.

Nevýhodou ovšem je, že SGS modely jsou přímo závislé na samotném filtrovaném řešení (obvykle na jeho prostorových derivacích), tedy aby se chovaly podle očekávání, musí být stanoveno filtrované řešení velmi přesně. V ideálním případě tak musíme volit metodu nedisipativní, vysokého řádu, na diskretizační síti s krokem menším než je charakteristická délka filtru. I tak může být obtížně vyhodnotit, nakolik diskretizační chyba numerické metody ovlivnila činnost SGS modelu.

ILES Při modelování pomocí ILES vycházíme z obecnějšího integrálního tvaru zákona zachování hybnosti a hmotnosti. Ten přímo diskretizujeme metodou konečných objemů, hledáme tak řešení pro integrální průměry veličin.



Je důležité si uvědomit, že samotná metoda konečných objemů je tedy založena na velice podobné myšlence jako LES modelování - nehledáme bodové hodnoty veličiny (protože ty jsou zatíženy fluktuacemi), ale jistou formu jejich průměru. Souvislost s klasickými LES modely je velmi zřejmá, pokud odvodíme soustavu diferenciálních rovnic, jejímž řešením je funkce, která ve svých bodech vyjadřuje integrální průměry hodnot přesného řešení původní soustavy rovnic proudění tekutiny v jistém okolí příslušného bodu. Jedná se tedy o obdobu filtrovaných rovnic LES. Odvození je pro případ ve dvou prostorových dimenzích provedeno v [13]. Funkce $\overline{u}_j(x, y, t)$, j = 1, 2, definovaná jako

$$\overline{u}_{j}(x,y,t) = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_{x-\Delta x/2}^{x+\Delta x/2} \int_{y-\Delta y/2}^{y+\Delta y/2} u_{j}(x',y',t) \,\mathrm{d}y' \,\mathrm{d}x', \quad j = 1, 2,$$
(3.69)

je řešením soustavy rovnic

$$\frac{\partial \overline{u}_j}{\partial t} + \frac{\partial \overline{u}_i \overline{u}_j}{\partial x_i} = \nu \frac{\partial^2 \overline{u}_j}{\partial x_i \partial x_i} - \frac{\partial \tau_{ij}^{FV}}{\partial x_i} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j}, \quad j = 1, 2,$$
(3.70)

$$\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_i} = 0, \tag{3.71}$$

kde

$$\tau_{11}^{FV} = \frac{1}{12} \left[\Delta x^2 \left(\frac{\partial \overline{u}_1}{\partial x} \right)^2 + \Delta y^2 \left(\frac{\partial \overline{u}_1}{\partial y} \right)^2 \right] + \mathcal{O}(\Delta x^3, \Delta y^3), \quad (3.72)$$

$$\tau_{12}^{FV} = \tau_{21}^{FV} = \frac{1}{12} \left[\Delta x^2 \left(\frac{\partial \overline{u}_1}{\partial x} \frac{\partial \overline{u}_2}{\partial y} \right) + \Delta y^2 \left(\frac{\partial \overline{u}_2}{\partial x} \frac{\partial \overline{u}_1}{\partial y} \right) \right] + \mathcal{O}(\Delta x^3, \Delta y^3), \quad (3.73)$$

$$\tau_{22}^{FV} = \frac{1}{12} \left[\Delta x^2 \left(\frac{\partial \overline{u}_2}{\partial x} \right)^2 + \Delta y^2 \left(\frac{\partial \overline{u}_2}{\partial y} \right)^2 \right] + \mathcal{O}(\Delta x^3, \Delta y^3).$$
(3.74)

Tato soustava rovnic má tedy stejný tvar jako filtrované LES rovnice a člen τ_{ij}^{FV} je téměř shodný s Clarkovým modelem (3.66). Řešením této rovnice je funkce $\overline{u}_j(x, y, t)$, j = 1, 2, jejíž bodové hodnoty vyjadřují integrální průměry přesného řešení původní soustavy rovnic proudění tekutiny na okolí příslušného bodu. Metodou konečných objemů hledáme hodnoty integrálních průměrů řešení původní soustavy rovnic, tedy hledáme výsledky právě takové, které by byly v souladu s hodnotami řešení této diferenciální rovnice pro integrální průměry. Tedy metoda konečných objemů aplikovaná na původní systém rovnic proudění tekutiny nám dává aproximaci řešení téměř stejné úlohy, jako je hledání řešení filtrované soustavy LES rovnic s Clarkovým SGS modelem.

Tvar členu τ_{ij}^{FV} (3.72 - 3.74) nám mj. dále podává vysvětlení, proč metody řádu striktně vyššího než druhého obvykle není možné použít jako ILES model. Diskretizační chyba metody τ by měla být druhého řádu v prostoru, tedy $\tau_{ij} = \mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta y^2)$, i, j = 1, 2. Analogicky lze tento výsledek dle [13] zobecnit do třech prostorových dimenzí, tedy $\tau_{ij} = \mathcal{O}(\Delta h_x^2, \Delta h_y^2, \Delta h_z^2)$, i, j = 1, 2, 3. Lineární metoda druhého řádu není dostatečně disipativní a v řešení vznikají oscilace, proto se pro ILES dobře uplatňují neoscilativní metody, zejména takové, které k metodě druhého řádu nelineárně přidávají disipativní členy.

3.4.2 Historická perspektiva

Vývoj a analýza pokročilejších metod konečných objemů byla prováděna především na úlohách v jedné prostorové dimenzi pro parciální diferenciální rovnice hyperbolického typu. V řešení těchto rovnic se vyskytují nespojitosti. Slabé řešení těchto rovnic ale není jednoznačné, a proto byl zaveden koncept entropického (fyzikálně přípustného) řešení které je analogií s limitou řešení rovnice s dodatečným difuzním členem s koeficientem $\nu \to 0$.

Cílem bylo vyvinout takovou metodu, která by dokázala nespojitosti vyskytující se v řešení těchto úloh zachytit co nejkvalitněji, bez ohledu na formální řád metody [13]. Již u nejjednodušších metod se ukázalo, že vneseme-li do úlohy metodou jisté množství numerické viskozity, můžeme tím zajistit stabilitu schématu a konvergenci k entropickému řešení. Metody prvního řádu přesnosti ale do úlohy vnáší numerické viskozity příliš, ta pak řešení zejména v okolí rázových vln příliš vyhlazuje. Naopak lineární metody druhého řádu kvůli absenci numerické viskozity a nedostatečné disipaci energie vytvářejí v řešení nefyzikální oscilace. Úspěšným přístupem se staly nelineární neoscilativní metody, které množství numerické viskozity přidané do úlohy stanovují lokálně na základě tvaru řešení.

Vývoj explicitních SGS modelů probíhal velice analogicky. Od Smagorinského modelu (1963), který vnáší do úlohy příliš velké množství turbulentní SGS viskozity (analogie s metodami prvního řádu), přes Clarkův model (1979), který je při numerických simulacích nedostatečně disipativní (analogie s metodami druhého řádu) až po smíšené modely, jenž jsou obvykle kombinací Clarkova modelu a nějakého modelu s turbulentní SGS viskozitou (analogie s neoscilativními metodami). Zdá se tak, že oba tyto směry se ve výsledku zabývají velice podobnou úlohou. Zatímco směr LES modelování ji analyzuje na úrovni spojitého matematického modelu, při paralelním vývoji metody konečných objemů jsme se jí zabývali z pohledu numerického řešení pomocí rozdělení úlohy na velké množství nespojitých úloh -Riemannových problémů.

3.4.3 Zachycení fyziky pomocí numerické metody

Pro fyzikálně přípustná (entropická) řešení rovnic hyperbolického typu v jednodimenzionálním případě platí mj. podmínka zachování monotonie, nezvyšující se totální variace (TVD vlastnost), konzervativity a konečné oblasti závislosti [7]. Metoda konečných objemů ve své obvyklé formulaci přirozeně splňuje podmínku konzervativity a konečné oblasti závislosti řešení. Metody s vysokým rozlišením byly vyvinuty tak, aby zachovávaly monotonii řešení a TVD vlastnost a zároveň řešení zachycovaly "co nejkvalitněji", bez striktního trvání na vysokém řádu metody [13].

Tento přístup je označován jako zachycení fyziky pomocí numerické metody [13]. Ve standardním vývojovém schématu fyzikální realita - matematický model - numerická metoda se tak přidává ještě jedno přímé spojení: fyzikální realita - numerická metoda. Numerickou metodu se snažíme navrhnout tak, aby řešení splňovalo nutné fyzikální podmínky. Metody s vysokým rozlišením byly navržené právě tak, aby generovaly co nejkvalitnější fyzikálně relevantní řešení.

Nicméně vzhledem k tomu, že byly tyto metody vyvíjeny a optimalizovány pro jednodimenzionální úlohu, nemáme automaticky zaručeno, že jejich zobecnění bude správně fungovat i ve více dimenzích. Implementace metod do více dimenzí nabízí navíc velké množství variací schémat a je těžké posoudit, která z nich budou úspěšná. Ukazuje se však, že přístup *zachycení fyziky pomocí numerické metody* má v tomto případě své důsledky i při aplikaci metody ve více dimenzích, kde některé metody dokáží samy o sobě popisovat jevy mnohem komplexnější, než se původně předpokládalo. Na množství provedených ILES simulací se ukazuje, že některé varianty metod lze využít jako model turbulence s výsledky srovnatelnými s LES simulacemi s explicitními SGS modely [13].

3.4.4 Metody vhodné pro ILES

Důležité prvky při návrhu ILES schématu jsou shrnuty v následujících bodech [13]:

- výběr schémat vyššího a nižšího řádu, kde schéma vyššího řádu je určené pro oblasti, kde je řešení hladké, a schéma nižšího řádu pro oblasti, kde se gradient řešení prudce mění,
- výběr limiteru, který lokálně stanovuje, jakou kombinaci schémat v daném místě prostoru volíme,
- analýza bilance mezi příspěvky disipačních a disperzních členů chyby těchto metod.

Mezi potenciálně vhodné varianty metody konečných objemů se dle [13] řadí mj. metoda flux-corrected transport (FCT), piecewise parabolic method (PPM), schéma MUSCL a TVD metody. Společným rysem metod vhodných pro ILES bývá adaptivní řád metody.

Modifikovaná rovnici schématu by se v ideálním případě měla co nejlépe shodovat s rovnicemi pro integrální průměry přesného řešení úlohy (3.70), (3.71), nicméně je potřeba brát v úvahu stabilitu algoritmu a při návrhu schématu zajistit dostatečnou disipaci energie.

Modifikovanou rovnice kompletního numerického schématu včetně časové diskretizace je kvůli rovnici kontinuity eliptického typu prakticky nemožné odvodit [14]. Obvykle se tak zabýváme pouze chybou prostorové diskretizace Navierových-Stokesových rovnic. I tak je ve více dimenzích chyba prostorové diskretizace značně závislá na konkrétní implementaci metody [13].

Ve zjednodušeném jednodimenzionálním případě je v [13] provedena analýza schématu s po částech lineární rekonstrukcí typu MUSCL (kapitola 4) s limiterem *minmod* pro jednodimenzionální nevazkou Burgersovu rovnici, jejíž toková funkce je analogická ke konvektivní tokové funkci v Navierových-Stokesových rovnicích. Burgersova rovnice má tvar

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial \left(\frac{1}{2}u^2\right)}{\partial x} = 0. \tag{3.75}$$

Modifikovaná rovnice odpovídající této prostorové diskretizaci je odvozena ve tvaru

$$\frac{\partial \overline{u}}{\partial t} + \frac{\partial \left(\frac{1}{2}\overline{u}^2\right)}{\partial x} = \frac{\partial \tau}{\partial x},\tag{3.76}$$

kde τ je vyjádřeno jako

$$\tau = -\Delta x^2 \left[\frac{1}{24} \left(\frac{\partial \overline{u}}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{12} \overline{u} \frac{\partial^2 \overline{u}}{\partial x^2} + \frac{1}{4} \frac{\left| \frac{\partial \overline{u}}{\partial x} \right|}{\left| \frac{\partial \overline{u}}{\partial x} \right|} \left| \frac{\partial^2 \overline{u}}{\partial x^2} \right| \right] + \mathcal{O}(\Delta x^3).$$
(3.77)

Tedy τ obsahuje člen ve tvaru Clarkova modelu. Nicméně z energetické analýzy provedené v [13] vyplývá, že toto schéma je příliš disipativní kvůli použitému limiteru typu *minmod* a je navrhováno použití limiteru *double minmod*, který je ekvivalentní s limiterem *MC*. Při numerických experimentech v kapitole 5 budeme analyzovat chování tohoto schématu ve dvou dimenzích s těmito dvěma typy limiterů.

3.4.5 Shrnutí ILES

V této podkapitole byla představena metoda ILES zejména v kontextu klasických LES modelů. Bylo uvedeno zdůvodnění, proč jsou metody s vysokým rozlišením svým chováním podobné explicitním SGS modelům.

Výhody přístupu ILES spočívají zejména v jeho jednoduchosti a obecnosti, kdy lze stejná numerická metoda použít pro laminární i turbulentní proudění a nemusíme předem rozhodovat, zda budeme uvažovat rovnice LES a SGS model či původní soustavu rovnic proudění tekutiny. Další podstatnou výhodou je jednoduchost implementace a všeobecná rozšířenost metody konečných objemů v mnoha softwarových balících pro simulace proudění. Výhodou je i relativně nízká výpočetní náročnost oproti standardním LES modelům, pro jejichž správnou funkci je nutné volit ideálně nedisipativní metody vyššího řádu a explicitně provádět výpočet aproximace tenzoru reziduálních napětí SGS modelem [20].

Jednou z nevýhod přístupu ILES je naopak naprosté provázání numerického schématu a SGS modelu, kdy teoreticky nemusíme být schopni (nebo velice obtížně) do implicitního SGS modelu zahrnout požadované vlastnosti (např. případné nové objevy ve studiu turbulence).

Metoda ILES dále sama o sobě neřeší problém modelování procesů v mezní vrstvě. Pro modelování mezní vrstvy tak musíme stejně jako u modelů LES bez stěnových funkcí volit velice jemnou síť u stěny, což výrazně zvyšuje výpočetní náročnost.

Stejně jako u všech LES modelů je i u ILES nutné provést validaci konkrétních metod vzhledem ke známým ověřeným výsledkům pro co největší množství úloh. ILES představuje relativně nový směr modelování turbulence a z tohoto důvodu jsou klasické LES modely v tomto ohledu nyní v jisté výhodě, jelikož jejich specifika jsou už obvykle známá.

V současné době se objevují práce, zabývají se validací některých metod typu ILES. V publikaci [13] se objevuje rozsáhlejší analýza více typů ILES metod pro řešení různých typů úloh. Jednou z uvedených metod je schéma MPDATA, které je prakticky využíváno v meteorologických aplikacích [13]. V práci [14] je pak analyzována adaptivní lokální dekonvoluční metoda (ALDM), v článku [30] schéma založené na metodě WENO a v práci [25] schéma založené na metodě DGFEM.

V této práci budeme testovat chování vybraného schématu ze třídy metod s vysokým rozlišením v jedné a dvou prostorových dimenzích, nicméně experimenty provedené v této práci zdaleka nemohou sloužit jako validace toho modelu pro turbulentní proudění. Pro validaci modelu by bylo nutné provést komplexní analýzu schématu a řádově složitější experimenty ve třech prostorových dimenzích, které jsou nad rámec této práce. Jelikož v jedné a dvou prostorových dimenzích nemůžeme považovat proudění za turbulentní, budeme v této práci pouze testovat chování metod při aproximaci řešení, jenž vykazuje prostorové fluktuace pod úrovní rozlišení diskretizační sítě.

Kapitola 4

Popis zvoleného diskretizačního schématu

Pro numerické experimenty bylo zvoleno semidiskrétní schéma Kurganova a Tadmora [17]. Jedná se o metodu s vysokým rozlišením využívající po částech lineární MUSCL rekonstrukci za použití limiteru. Jako centrální schéma pro řešení Riemannových problémů je použita lokální Laxova-Friedrichsova metoda. Pro časovou diskretizaci jsme zvolili metody druhého řádu, a to Adamsovu-Bashforthovu metodu pro konvektivní členy a metodu Cranka a Nicolsonové pro difuzní členy (při použití explicitní metody pro časovou diskretizaci difuzních členů by bylo pro zajištění stability schématu nutné splnění podmínky na délku časového kroku přísnější než je CFL podmínka).

Nejprve provedeme diskretizaci vazké Burgersovy rovnice v jedné prostorové dimenzi. Tato rovnice je považována za velmi zjednodušený model Navierových-Stokesových rovnic, jelikož v konvektivní tokové funkci Burgersovy rovnice se vyskytuje stejný typ nelinearity.

Dále provedeme diskretizaci soustavy rovnic popisujících proudění nestlačitelné newtonovské tekutiny ve dvou prostorových dimenzích. Oproti Burgersově rovnici je navíc nutné využít některou z metod propojení eliptické rovnice kontinuity s evolučními Navierovými-Stokesovými rovnicemi. V této práci využíváme metodu postupných kroků (*fractional-step method*) [3] ze třídy tzv. projekčních metod a posunutou (*staggered*) kartézskou diskretizační síť.

4.1 Diskretizace Burgersovy rovnice v jedné prostorové dimenzi

Popíšeme diskretizaci skalární konvekčně-difuzní Burgersovy rovnice s nelineárním konvektivním členem v jedné prostorové dimenzi na ekvidistantní diskretizační síti. Burgersova rovnice má tvar

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial (\frac{1}{2}u^2)}{\partial x} = \nu \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right). \tag{4.1}$$

Semidiskrétní schéma Kurganova a Tadmora [17] zapíšeme ve tvaru

$$\frac{\mathrm{d}U_{i}(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{\Delta x} (F_{i+1/2}(t) - F_{i-1/2}(t)) + \nu \frac{1}{\Delta x} (V_{i+1/2}(t) - V_{i-1/2}(t)). \tag{4.2}$$

Numerické konvektivní toky ${\cal F}_{i+1/2}$ jsou vyjádřeny jako

$$F_{i+1/2} = \mathcal{F}^{LLF}(u_{i+1/2}^L, u_{i+1/2}^R)$$
(4.3)

pomocí numerické tokové funkce lokální Laxovy-Friedrichsovy metody (1.51). Hodnoty $u_{i+1/2}^L$ a $u_{i+1/2}^R$ stanovíme pomocí po částech lineární rekonstrukce typu MUSCL ve jako [29]

$$u_{i+1/2}^{L} = U_{i} + \frac{1}{2}\theta(r_{i})(U_{i+1} - U_{i}),$$

$$u_{i+1/2}^{R} = U_{i+1} - \frac{1}{2}\theta(r_{i+1})(U_{i+2} - U_{i+1}),$$
(4.4)

kde r_i je dáno jako

$$r_i = \frac{U_i - U_{i-1}}{U_{i+1} - U_i} \tag{4.5}$$

a funkce $\theta(r)$ je *limiter*. V této práci budeme používat následující limitery:

$$minmod \qquad \theta(r_i) = \max(0, \min(1, r)), \tag{4.6}$$

monotonized central (MC)
$$\theta(r_i) = \max(0, \min(2r, \frac{1+r}{2}, 2)).$$
 (4.7)

Při použití funkce $\theta(r) \equiv 0$ se uvedená rekonstrukce redukuje na po částech konstantní.

Difuzní toky $V_{i+1/2}$ aproximujeme centrálně jako

$$V_{i+1/2} = \frac{U_{i+1} - U_i}{\Delta x}.$$
(4.8)

Časová diskretizace je realizována explicitní dvoukrokovou Adamsovou-Bashforthovou metodou druhého řádu pro konvektivní členy a semi-implicitní metodou Cranka a Nicolsonové pro difuzní členy. Schéma má tvar

$$U^{n+1} = U^n - \Delta t \left(\frac{3}{2} \mathcal{H}(U^n) - \frac{1}{2} \mathcal{H}(U^{n-1}) \right) + \Delta t \ \nu \ \mathcal{L} \left(\frac{1}{2} U^{n+1} + \frac{1}{2} U^n \right), \tag{4.9}$$

kde \mathcal{H} je nelineární diskrétní operátor konvekce a \mathcal{L} je lineární diskrétní operátor difuze,

$$\mathcal{H}(U) = \begin{pmatrix} \vdots \\ \frac{1}{\Delta x} (F_{i+1/2} - F_{i-1/2}) \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \mathcal{L}U = \begin{pmatrix} \vdots \\ \frac{1}{\Delta x} (V_{i+1/2} - V_{i-1/2}) \\ \vdots \end{pmatrix}.$$
(4.10)

4.2 Diskretizace soustavy rovnic proudění nestlačitelné newtonovské tekutiny ve dvou prostorových dimenzích

Diskretizujeme soustavu rovnic popisující proudění nestlačitelné tekutiny ve dvou prostorových dimenzích ve tvaru

$$\frac{\partial u_x}{\partial t} + \frac{\partial u_x^2}{\partial x} + \frac{\partial u_x u_y}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2}\right),$$

$$\frac{\partial u_y}{\partial t} + \frac{\partial u_x u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_y^2}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2}\right),$$

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} = 0.$$
(4.11)

Soustavu lze rovněž zapsat jako

$$\frac{\partial u_x}{\partial t} + \frac{\partial f_1(u)}{\partial x} + \frac{\partial g_1(u)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \nu \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x}\right) + \nu \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y}\right),$$

$$\frac{\partial u_y}{\partial t} + \frac{\partial f_2(u)}{\partial x} + \frac{\partial g_2(u)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \nu \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_y}{\partial x}\right) + \nu \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_y}{\partial y}\right),$$

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} = 0$$
(4.12)

 pro

$$u = \begin{pmatrix} u_x \\ u_y \end{pmatrix}, \quad f(u) = \begin{pmatrix} u_x^2 \\ u_x u_y \end{pmatrix}, \quad g(u) = \begin{pmatrix} u_x u_y \\ u_y^2 \end{pmatrix}.$$
(4.13)

Veličina p v těchto rovnicích označuje tzv. kinematický tlak, definovaný oproti tlaku v rovnicích (2.4) jako $p \equiv \frac{1}{\rho}p$. Takto definované tlakové pole umožňuje formulovat rovnice proudění nestlačitelné tekutiny bez explicitního vyjádření konstantní hustoty ρ . V kapitolách 4 a 5 budeme pod pojmem tlak vždy uvažovat tlak kinematický.

4.2.1 Diskretizační síť

Z důvodu vzniku šachovnicového efektu při propojení rovnice kontinuity s evolučními konvekčně-difuzními rovnicemi při použití běžné diskretizační sítě [27] provedeme diskretizaci na posunuté (*staggered*) síti. Pro diskretizaci použijeme nerovnoměrnou kartézskou síť. Struktura sítě je na obrázku 4.1.



Obrázek 4.1: Posunutá (staggered) nerovnoměrná kartézská síť a kontrolní objemy

4.2.2 Schéma časové diskretizace a metody postupných kroků

Casová diskretizace je realizována pomocí explicitní dvoukrokové Adamsovy-Bashforthovy metody druhého řádu pro konvektivní členy a semi-implicitní metody Cranka a Nicolsonové druhého řádu pro difuzní členy. Propojení eliptické rovnice kontinuity s evolučními konvekčně-difuzními rovnicemi je řešeno pomocí metody postupných kroků (*fractional-step method*), která je také druhého řádu [3].

Pro vektory integrálních průměrů složek rychlosti U, integrálních průměrů kinematického tlaku P a tlakových korekcí π ve tvaru

$$U = \begin{pmatrix} \vdots \\ U_{i, j+1/2}^{x} \\ U_{i+1/2, j}^{y} \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad P = \begin{pmatrix} \vdots \\ P_{i,j} \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \pi = \begin{pmatrix} \vdots \\ \pi_{i,j} \\ \vdots \end{pmatrix}$$
(4.14)

zapíšeme schéma metody jako

i.
$$U^* = U^n - \Delta t \left(\frac{3}{2} \mathcal{H}(U^n) - \frac{1}{2} \mathcal{H}(U^{n-1}) \right) - \Delta t \, \mathcal{G}P^n + \Delta t \, \nu \mathcal{L} \left(\frac{1}{2} U^* + \frac{1}{2} U^n \right),$$
 (4.15)

ii.
$$\mathcal{L}\pi = \frac{1}{\Delta t} \mathcal{D}U^*,$$
 (4.16)

$$iii. \quad U^{n+1} = U^* - \Delta t \ \mathcal{G}\pi, \tag{4.17}$$

$$P^{n+1} = P^n + \pi. (4.18)$$

Nelineární operátor \mathcal{H} je diskrétní operátor konvekce, lineární operátor \mathcal{L} je diskrétní Laplaceův operátor, lineární operátor \mathcal{G} je diskrétní operátor gradientu a \mathcal{D} je diskrétní operátor divergence.

V *i.* kroku schématu řešíme algebraickou soustavu rovnic pro získání vektoru složek přechodné rychlosti U^* . V *ii.* kroku řešíme algebraickou soustavu rovnic (diskretizovanou Poissonovu rovnici) pro vektor tlakových korekcí π . Ve *iii.* kroku pak na základě tlakových korekcí aktualizujeme vektor složek přechodné rychlosti a tlaku a dostáváme vektory U^{n+1} , P^{n+1} .

V prvním časovém kroku (pr
on=1)je časová diskretizace konvektivních členů realizována pomocí explicitní Eulerovy metody jako

$$U^* = U^n - \Delta t \ \mathcal{H}(U^n) - \Delta t \ \mathcal{G}P^n + \Delta t \ \nu \mathcal{L}\left(\frac{1}{2}U^* + \frac{1}{2}U^n\right).$$
(4.19)

4.2.3 Aproximace konvektivních toků

Konvektivní členy jsou aproximovány pomocí schématu Kurganova a Tadmora [17] s po částech lineární MUSCL rekonstrukcí prováděnou pro každý směr x a y a každou složku rychlosti u zvlášť. Riemannovy problémy na hranicích buněk jsou řešeny pomocí numerického toku lokální Laxovy-Friedrichsovy metody (1.51). Nelineární diskrétní operátor konvekce $\mathcal{H}(U)$ je vyjádřen jako

$$\mathcal{H}(U) = \begin{pmatrix} \vdots \\ \frac{1}{\Delta x_{j+1/2}} \left(F_{i, j+1}^1 - F_{i, j}^1 \right) + \frac{1}{\Delta y_i} \left(G_{i+1/2, j+1/2}^1 - G_{i-1/2, j+1/2}^1 \right) \\ \frac{1}{\Delta x_j} \left(F_{i+1/2, j+1/2}^2 - F_{i+1/2, j-1/2}^2 \right) + \frac{1}{\Delta y_{i+1/2}} \left(G_{i+1, j}^2 - G_{i, j}^2 \right) \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (4.20)$$

kde konvektivní toky jsou vyjádřené jako

$$F_{i, j}^{1} = \mathcal{F}_{1}^{LLF}(u_{i,j}^{L}, u_{i,j}^{R}),$$

$$F_{i+1/2, j+1/2}^{2} = \mathcal{F}_{2}^{LLF}(u_{i+1/2, j+1/2}^{L}, u_{i+1/2, j+1/2}^{R}),$$

$$G_{i+1/2, j+1/2}^{1} = \mathcal{G}_{1}^{LLF}(u_{i+1/2, j+1/2}^{D}, u_{i+1/2, j+1/2}^{U}),$$

$$G_{i, j}^{2} = \mathcal{G}_{2}^{LLF}(u_{i,j}^{D}, u_{i,j}^{U}).$$
(4.21)

Hodnoty $u_{i,j}^L = \begin{pmatrix} u_{i,j}^{xL} \\ u_{i,j}^{yL} \end{pmatrix}$, $u_{i,j}^R = \begin{pmatrix} u_{i,j}^{xR} \\ u_{i,j}^{yR} \end{pmatrix}$ získáme MUSCL rekonstrukcí (4.4) jednotlivých složek u ve směru x. Hodnoty $u_{i,j}^D = \begin{pmatrix} u_{i,j}^{xD} \\ u_{i,j}^{yD} \end{pmatrix}$, $u_{i,j}^U = \begin{pmatrix} u_{i,j}^{xU} \\ u_{i,j}^{yU} \end{pmatrix}$ stanovíme pomocí MUSCL rekonstrukce ve směru y.

Z důvodu použití staggered sítě nemáme hodnoty integrálních průměrů $U_{i,j+1/2}^x, U_{i+1/2,j}^y$ potřebné pro rekonstrukci k dispozici na stejných buňkách. Proto pro účely rekonstrukce zavedeme integrální průměry složky rychlosti u_x na buňkách $\mathcal{C}_{i+1/2,j}$ a integrální průměry u_y na buňkách $\mathcal{C}_{i,j+1/2}$ jako průměr čtyř sousedních hodnot integrálních průměrů, tedy

$$U_{i+1/2,j}^{x} = \frac{1}{4} \left(U_{i,j+1/2}^{x} + U_{i,j-1/2}^{x} + U_{i+1,j+1/2}^{x} + U_{i+1,j-1/2}^{x} \right),$$

$$U_{i,j+1/2}^{y} = \frac{1}{4} \left(U_{i+1/2,j}^{y} + U_{i-1/2,j}^{y} + U_{i+1/2,j+1}^{y} + U_{i-1/2,j+1}^{y} \right).$$
(4.22)

4.2.4 Aproximace Laplaceova operátoru, gradientu tlaku a divergence rychlosti

Difuzní členy, divergence rychlosti a gradient tlaku jsou aproximovány pomocí centrálních diferencí. Lineární diskrétní operátor difuze odpovídá diskrétnímu Laplaceovu operátoru a je

pomocí centrálních diferencí vyjádřen jako

$$\mathcal{L}U = \begin{pmatrix} \vdots \\ \frac{1}{\Delta x_{j+1/2}} \left(V_{i,j+1}^{1} - V_{i,j}^{1} \right) + \frac{1}{\Delta y_{i}} \left(W_{i+1/2,j+1/2}^{1} - W_{i-1/2,j+1/2}^{1} \right) \\ \frac{1}{\Delta x_{j}} \left(V_{i+1/2,j+1/2}^{2} - V_{i+1/2,j-1/2}^{2} \right) + \frac{1}{\Delta y_{i+1/2}} \left(W_{i+1,j}^{2} - W_{i,j}^{2} \right) \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vdots \\ \frac{U_{i,j+3/2}^{x} - U_{i,j+1/2}^{x}}{\Delta x_{j+1/2} \Delta x_{j+1}} + \frac{U_{i,j-1/2}^{x} - U_{i,j+1/2}^{x}}{\Delta x_{j+1/2} \Delta x_{j}} + \frac{U_{i+1,j+1/2}^{x} - U_{i,j+1/2}^{x}}{\Delta y_{i} \Delta y_{i+1/2}} + \frac{U_{i+1/2,j-1}^{x} - U_{i,j+1/2}^{y}}{\Delta y_{i} \Delta y_{i+1/2}} \\ \frac{U_{i+1/2,j+1}^{y} - U_{i+1/2,j}^{y}}{\Delta x_{j} \Delta x_{j+1/2}} + \frac{U_{i+1/2,j-1}^{y} - U_{i,j+1/2}^{y}}{\Delta y_{i+1/2} \Delta y_{i+1}} + \frac{U_{i-1/2,j}^{y} - U_{i,j+1/2,j}^{y}}{\Delta y_{i+1/2} \Delta y_{i}} \\ \vdots \end{pmatrix}$$
(4.23)

Aplikací operátoru ${\mathcal L}$ na vektor π pak dostáváme vztah

$$\mathcal{L}\pi = \begin{pmatrix} \vdots \\ \frac{\pi_{i,j+1} - \pi_{i,j}}{\Delta x_j \Delta x_{j+1/2}} + \frac{\pi_{i,j-1} - \pi_{i,j+1}}{\Delta x_j \Delta x_{j-1/2}} + \frac{\pi_{i+1,j} - \pi_{i,j}}{\Delta y_i \Delta y_{i+1/2}} + \frac{\pi_{i-1,j} - U_{i,j}^x}{\Delta y_i \Delta y_{i-1/2}} \\ \vdots \end{pmatrix}.$$
 (4.24)

Lineární diskrétní operátor gradientu tlaku je vyjádřen jako

$$\mathcal{G}P = \begin{pmatrix} \vdots \\ \frac{P_{i,j+1} - P_{i,j}}{\Delta x_{j+1/2}} \\ \frac{P_{i+1,j} - P_{i,j}}{\Delta y_{i+1/2}} \\ \vdots \end{pmatrix}.$$
(4.25)

Lineární diskrétní operátor divergence rychlosti má tvar

$$\mathcal{D}U = \begin{pmatrix} \vdots \\ \frac{U_{i,j+1/2}^x - U_{i,j-1/2}^x}{\Delta x_j} + \frac{U_{i+1/2,j}^y - U_{i-1/2,j}^y}{\Delta y_j} \\ \vdots \end{pmatrix}.$$
 (4.26)

4.2.5 Okrajové podmínky

Na pevné stěně používáme no-slip okrajovou podmínku $u = \begin{pmatrix} u_x \\ u_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$. Realizace této okrajové podmínky je znázorněna na obrázku 4.2. Pro konečné objemy, jejichž stěna leží na pevné stěně oblasti (na obrázku $U_{1,j+1/2}^x$), předepisujeme nulovou hodnotu příslušného konvektivního toku stěnou. Pro stanovení hodnoty difuzních toků je použita metoda fiktivních buněk, kdy na fiktivní sousední buňce předepíšeme hodnotu tak, aby při proložení hodnot integrálních průměrů lineární funkcí v normálovém směru ke stěně byla hodnota této



Obrázek 4.2: Realizace nulové Dirichletovy a Neumannovy okrajové podmínky

funkce na stěně nulová, tedy pro případ na obrázku jednoduše $U_{0,j+1/2}^x = -U_{1,j+1/2}^x$. Odlišný přístup používáme pro hodnoty na buňkách ležících "ve stěně" (na obrázku $U_{1/2,j}^y$), kdy přímo předepisujeme hodnotu integrálního průměru $U_{1/2,j}^y = 0$. Pro Dirichletovu okrajovou podmínku na vstupu oblasti používáme analogický přístup.

Pro homogenní Neumannovu podmínku používáme metodu fiktivních buněk s předepsanými hodnotami ze sousedních buněk (extrapolace nultého řádu). Tento přístup je znázorněn na obrázku 4.2.

4.2.6 Řešení algebraických soustav rovnic

V i. a ii. kroku schématu řešíme algebraické soustavy rovnic. Tyto soustavy lze obecně zapsat ve tvaru

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b},\tag{4.27}$$

přičemž matice A je vzhledem k použití neadaptivní diskretizační sítě konstantní v průběhu celého výpočtu. Pro efektivnější průběh výpočtu v prostředí MATLAB tedy v inicializačním kroku provádíme LU rozklad matic soustavy A pomocí příkazu [L, U] = lu(A) a v průběhu výpočtu soustavy řešíme pomocí příkazu *backslash* jako

$$\mathbf{x} = \mathbf{U} \backslash (\mathbf{L} \backslash \mathbf{b}). \tag{4.28}$$

Při použití adaptivní diskretizační sítě by matice A nebyla v průběhu výpočtu konstantní a vhodnou volbou by pak bylo využití některé z iteračních metod řešení [9].

Kapitola 5

Numerické experimenty

Pro numerické experimenty jsme zvolili úlohu pro vazkou Burgersovu rovnici v jedné prostorové dimenzi a úlohy pro rovnice proudění nestlačitelné newtonovské tekutiny ve dvou prostorových dimenzích.

Pro experimenty byla použita schémata popsaná v kapitole 4 implementovaná v prostředí MATLAB R2013a. Zdrojové kódy použitých metod jsou součástí přílohy práce na disku CD.

5.1 Burgersova rovnice

Testovací úloha pro Burgersovu rovnici má tvar

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial (\frac{1}{2}u^2)}{\partial x} = \nu \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right), \quad x \in [0, 2\pi], \ t \in (0, \infty),$$

$$u(x, 0) = u_0(x), \qquad x \in [0, 2\pi],$$

$$u(0, t) = u(2\pi, t), \qquad t \in (0, \infty).$$
(5.1)

5.1.1 Parametry experimentů

Počáteční podmínka byla náhodně vygenerována v prostředí MATLAB pomocí inverzní diskrétní Fourierovy transformace komplexní posloupnosti

$$F_{\xi} = \begin{cases} C \ 50^{-\frac{5}{3}} e^{i\omega} & \text{pro } \xi \in \{1, ..., 50\}, \\ C \ \xi^{-\frac{5}{3}} e^{i\omega} & \text{pro } \xi \in \{51, ..., 2000\} \end{cases}$$
(5.2)

pro parametry

$$C = 5 \cdot 10^5 \cdot \operatorname{rand}([0, 1]),$$

$$\omega = 2\pi \cdot \operatorname{rand}([0, 1]),$$
(5.3)

kde rand([0, 1]) je realizace náhodné veličiny s rovnoměrným rozdělením pravděpodobnosti na intervalu [0, 1] vygenerovaná zvlášť pro každé ξ . Inverzní diskrétní Fourierovou transformací posloupnosti F_{ξ} dostáváme komplexní posloupnost N hodnot f_n ve tvaru

$$f_n = \frac{1}{N} \sum_{\xi=0}^{N-1} F_{\xi} e^{i2\pi n\xi/N}, \quad n = \{0, ..., N-1\},$$
(5.4)

jejichž reálnou část pro $N = 10^4$ budeme považovat za bodové hodnoty počáteční podmínky $u_0(x_n)$ v N bodech x_n rovnoměrně rozložených na intervalu $[0, 2\pi]$. Vlnové číslo ξ pak odpovídá fluktuacím funkce $u_0(x)$ o periodě $l = \frac{2\pi}{\xi}$. Počáteční podmínka je znázorněná na obrázku 5.1.

Energetické spektrum takto vygenerované počáteční podmínky má analogický tvar jako spektrum turbulentního proudění popsané v části 2.4. Spektrum v "inerciálním pásmu" klesá s $\xi^{-\frac{5}{3}}$ v analogii ke vztahu (2.8). Fyzikální relevantnost této úlohy je diskutabilní, nicméně tato úloha bude sloužit pouze pro testování schopnosti metod zachytit vliv fluktuací na škálách pod úrovní diskretizační sítě na celkový tvar řešení. Porovnání hustoty diskretizačních bodů a tvaru je řešení je na obrázku 5.2.



Obrázek 5.1: Počáteční podmínka pro Burgersovu rovnici na intervalu $[0, 2\pi]$ je vykreslena v levém grafu. Napravo je amplitudové spektrum diskrétního Fourierova obrazu energie počáteční podmínky $E(x_n) = \frac{1}{2}u_0(x_n)^2$ pro $N = 10^4$.



Obrázek 5.2: Porovnání hustoty diskretizační sítě a tvaru počáteční podmínky na vybraném úseku osy x. Charakteristická délka implicitního filtru schématu v analogii s energetickým spektrem turbulence odpovídá pro počet bodů N = 50 ještě "integrálnímu pásmu", pro N = 100 a N = 200 pak počátku "inerciálního pásma". Pro všechna tato N pak hodnoty v grafu představují integrální průměry počáteční podmínky použité v numerickém schématu.

V experimentech je testováno schéma Kurganova a Tadmora popsané v kapitole 4 s po částech lineární MUSCL rekonstrukcí s limitery minmod a MC (tyto metody zkráceně označeny jako MUSCL minmod a MUSCL MC). Dále je použito toto schéma s po částech konstantní rekonstrukcí (označeno jako LLF) a s po částech lineární rekonstrukcí bez použití limiterů (označeno LW), které je analogické k Laxovu-Wendroffovu schématu. Další schémata porovnávaná v experimentech jsou metoda spektrálních objemů a metoda ENO, popsané v bakalářské práci [22]. Metoda spektrálních objemů s CVTVDM limiterem je označena jako SVk a metoda ENO jako ENOk, přičemž k - 1 označuje řád polynomiální rekonstrukce řešení při aproximaci konvektivních členů. Tyto metody využívají centrální diference 2. řádu přesnosti v prostoru pro aproximaci difuzních toků a časová diskretizace je provedena explicitní TVD Rungeovou-Kuttovou metodou 3. řádu pro konvektivní členy a semi-implicitní metodou Crank-Nicolson 2. řádu pro difuzní členy.

Referenční řešení dvou úloh pro difuzní koeficienty $\nu = 0$ a $\nu = 10^{-3}$ a výše popsanou počáteční podmínku byla stanovena pomocí simulace na rovnoměrné diskretizační síti s $N = 10^4$ body metodou *ENO3*, u které narozdíl od metod využívajících limitery nedochází k jevu snižovaní hodnot lokálních maxim.

U všech experimentů byl použit časový krok $dt=\frac{dx}{4},$ což pro tuto úlohu odpovídá hodnotě $CFL\approx 0.15.$

5.1.2 Výsledky experimentů pro $\nu = 0$ a $\nu = 10^{-3}$

Výsledky pro $\nu = 0$ jsou zaznamenané na obrázku 5.3 a pro $\nu = 10^{-3}$ na obrázku 5.4. Výsledky obou experimentů jsou podobné a budou tedy okomentovány současně.

Ukazuje se, že pro N = 50 není struktura řešení zachycena žádnou z metod přesně. Metody příliš "rozmázávají" rázové vlny v řešení, nicméně v rámci malé hustoty diskretizační sítě je znát zachycení jeho základních rysů.

Pro N = 100 je zachycena struktura řešení všemi metodami o něco přesněji, nicméně hustota sítě stále není dostatečná. Metody *ENO3* a *SV3* při $\nu = 0$ generují oproti metodám *MUSCL* v některých místech odlišnou strukturu řešení, nicméně výsledky metod jsou i tak srovnatelné.

Pro N = 200 je již řešení znatelně přesnější. Metody zachycují dobře strukturu řešení. Výsledky všech metod vhodných pro ILES jsou srovnatelné.

Metody, které jsou nejsou uváděné jako vhodné pro ILES, byly testovány pro $\nu = 10^{-3}$ a N = 100 a výsledky jsou na obrázku 5.5. Dle očekávání metoda *LW* generuje vyšší hodnoty maxim řešení a metoda *LLF* oproti ostatním metodám řešení více vyhlazuje. Výsledek metody *ENO6* s polynomiální rekonstrukcí 5. řádu bez použití limiterů je srovnatelný s výsledkem *ENO3* a výrazné zvýšení řádu metody tak nepřináší zlepšení přesnosti řešení.

V provedených experimentech je dominantním jevem tzv. jev *N*-wave decay [19], kdy se jednotlivé menší rázové vlny postupně spojují do většího celku a dochází ke ztrátě informace o tvaru počáteční podmínky. Pro získání reprezentativnějších výsledků by dalším vhodným experimentem bylo řešení Burgersovy rovnice se stochastickým zdrojovým členem a analýza energetického spektra získaného řešení [14].



Obrázek 5.3: Výsledky experimentů pro $N=50,\,N=100$
aN=200 pro parametr $\nu=0$ v časet=4.



Obrázek 5.4: Výsledky experimentů pro $N=50,\,N=100$
aN=200 pro parametr $\nu=10^{-3}$ v čas
et=4.



Obrázek 5.5: Výsledky experimentů pro metody "nevhodné pro ILES" přiN=100 a $\nu=10^{-3}$ v časet=4.

5.2 Proudění nestlačitelné tekutiny ve dvou prostorových dimenzích

Řešíme soustavu rovnic proudění nestlačitelné newtonovské tekutiny ve dvou prostorových dimenzích ve tvaru

$$\frac{\partial u_x}{\partial t} + \frac{\partial u_x^2}{\partial x} + \frac{\partial u_x u_y}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2}\right),$$

$$\frac{\partial u_y}{\partial t} + \frac{\partial u_x u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_y^2}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2}\right),$$

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} = 0.$$
(5.5)

Pro řešení je použito schéma popsané v části 4.2. Schéma využívají MUSCL rekonstrukci s limiterem minmod budeme označovat jako MUSCL minmod a schéma s limiterem MC označíme jako MUSCL MC. Schéma využívající po částech konstantní rekonstrukci označíme jako LLF.

5.2.1 Popis testovacích úloh

Byly zvoleny následující dvě testovací úlohy:

- proudění přes zpětný schod (geometrie problému znázorněna na obr. 5.6),
- obtékání překážky (obr. 5.7).



Obrázek 5.7: Úloha obtékání překážky

U obou úloh je pro rychlost na vstupu zadána Dirichletova okrajová podmínka ve tvaru parabolického profilu rychlosti u_x s maximem $u_{max} = 3$ a nulová hodnota rychlosti u_y , tedy $u_y = 0$. Na pevných stěnách je volena *no-slip* okrajová podmínka, tj. $u = (u_x, u_y) = (0, 0)$. Na výstupu je volena nulová Neumannova okrajová podmínka $\frac{\partial u}{\partial n} = 0$, tj. $\frac{\partial u_x}{\partial x} = 0$ a $\frac{\partial u_y}{\partial x} = 0$.

Pro tlak je na výstupu volena nulová Dirichletova okrajová podmínka a na vstupu a na stěnách nulová Neumannova okrajová podmínka.

Počáteční podmínka je pro rychlost i tlak je volena konstantní nulová, tj. $u_0(x, y) = (u_{x0}, u_{y0}) = (0, 0), p_0(x, y) = 0.$

Obě úlohy budeme řešit pro hodnotu kinematické viskozity $\nu = 5 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \text{s}^{-1}$. Pro určení Reynoldsova čísla úlohy dle vztahu (2.7) volíme jako charakteristickou rychlost U průměr rychlosti na vstupu, tedy $U = 2 \text{ ms}^{-1}$, a jako charakteristickou délku L výšku schodu h = 1 m, resp. šířku překážky $h_2 = 0,5$ m. Při této volbě úloha proudění přes zpětný schod odpovídá Reynoldsovu číslu Re = 4000 a úloha obtékání překážky Reynoldsovu číslu Re = 2000.

5.2.2 Parametry diskretizace

Pro prostorovou diskretizaci byla použita nerovnoměrná kartézská síť se zjemněním kroku v blízkosti stěn. Délky hran buněk u stěny v diskretizační síti použité pro výpočty odpovídají

hodnotě přibližně 0,01 v normálovém směru ke stěně. Délky hran největších buněk v oblasti jsou pak přibližně 0,05. Struktura zjemnění sítě pro úlohu obtékání překážky je pro menší počet prvků zobrazena na obrázku 5.8.



Obrázek 5.8: Struktura diskretizační sítě pro úlohu obtékání překážky. Diskretizační síť na obrázku má rozměr 53×26 prvků, tj. méně prvků než je později použito při výpočtech.

Pro diskretizaci časové derivace je volen konstantní časový krok. Délka kroku je pro zajištění stability výpočtu volena tak, aby číslo CFL nepřesahovalo hodnotu 0,9.

5.2.3 Referenční řešení

Výsledky testovacích úloh stanovené pomocí schématu z části 4.2 budeme srovnávat s řešeními stanovenými pomocí open-source balíku pro CFD výpočty OpenFOAM verze 2.3.0 [2] založeném na metodě konečných objemů. Řešení jsou stanovena použitím řešiče rovnic proudění nestlačitelné newtonovské tekutiny **icofoam** na velmi jemné diskretizační síti. Toto řešení budeme nazývat *referenční řešení*.

Kolmogorova délka pro testovací úlohy lze dle vztahů (2.11) a (3.1) při hodnotě |u'| = 3a L = 1 odhadnout jako $\eta \approx 0,0015$. Diskretizační síť pro výpočet referenčního řešení je pro obě úlohy volena s rovnoměrným krokem $\Delta x = \Delta y = 0,0031$.

Řešič icofoam využívá pro propojení rovnice s kontinuity s Navierovými-Stokesovými rovnicemi algoritmus PISO. Pro diskretizaci konvektivních členů jsme zvolili metodu rekonstrukce limitedLinearV phi 1.0. Pro ostatní členy v rovnicích je volena standardní rekonstrukce metodou linear, odpovídající použití centrálních diferencí. Pro diskretizaci časové derivace využíváme metodu Euler.

5.2.4 Výsledky experimentů

5.2.4.1 Proudění přes zpětný schod

Rešení úlohy proudění přes zpětný schod v čase t = 6 stanovená pomocí schémat MUSCL MC a MUSCL minmod jsou vizualizována na obrázku 5.9 pro pole velikosti rychlosti ||u|| a 5.11 pro pole kinematického tlaku p. Příslušná referenční řešení jsou na obrázcích 5.10 a 5.12.

Ukazuje se, že i přes vyšší hodnotu Reynoldsova čísla (Re = 4000) v této úloze nedochází k vytváření většího množství malých vírů. To lze zdůvodnit tím, že simulace je provedena ve dvou prostorových dimenzích, kde je proudění kvalitativně odlišné oproti proudění ve třech

prostorových dimenzích. Lze očekávat, že při řešení úlohy ve třech prostorových dimenzích by se vírové struktury vytvářely v podstatně větší míře.

V porovnání s referenčním řešením podávají metody $MUSCL \ MC$ a $MUSCL \ minmod$ v této úloze velice dobré výsledky. Struktura vírů v řešení je shodná s referenčním řešením. Metoda s MC limiterem ostřeji zachycuje extrémy rychlostního i tlakového pole.

Metoda LLF (obrázek 5.13) oproti tomu strukturu řešení nezachycuje dostatečně přesně. Potvrzuje se tak, že tato metoda je příliš disipativní.



Obrázek 5.9: Proudění přes zpětný schod v čase t = 6 na síti 198×76 prvků pro $\Delta t = 5 \cdot 10^{-4}$.



Obrázek 5.10: Referenční řešení v čase t = 6 na síti 2560×640 prvků pro $\Delta t = 2 \cdot 10^{-4}$.



Obrázek 5.11: Proudění přes zpětný schod v čase t = 6 na síti 198×76 prvků pro $\Delta t = 5 \cdot 10^{-4}$.



Obrázek 5.12: Referenční řešení v časet=6na síti 2560×640 prvků pro $\Delta t=2\cdot 10^{-4}.$



Obrázek 5.13: Proudění přes zpětný schod v čase t = 6 na síti 198×76 prvků pro $\Delta t = 5 \cdot 10^{-4}$.



Obrázek 5.14: Obtékání překážky v čase t = 4 na síti 214×106 prvků pro $\Delta t = 4 \cdot 10^{-4}$.

5.2.4.2 Obtékání překážky

Řešení úlohy obtékání překážky v čase t = 4 jsou zobrazena na obrázku 5.15 pro pole ||u|| a 5.17 pro pole p. Referenční řešení této úlohy jsou na obrázcích 5.16 a 5.18.

V tomto případě v referenčním řešení dochází k vytváření malých vírů. Rozlišení diskretizační sítě použité pro výpočty pomocí metod *MUSCL* již neumožňuje zachytit strukturu těchto malých vírů a výsledky schémat *MUSCL MC* a *MUSCL minmod* se tak od referenčního řešení i od sebe navzájem již značně liší. Nicméně metoda *MUSCL MC* zachycuje některé rysy referenčního řešení (vytvoření a odtržení prvního většího shluku vírů). Při použití metody *MUSCL minmod* pak dochází k vytváření vírů a odtržení proudu o něco později než v referenčním řešení a řešení metodou *MUSCL MC*. Ve struktuře řešení se projevuje vyšší míra disipativity schématu.

Schéma LLF (na obrázku 5.13) s ještě vyšší mírou disipativity pak strukturu řešení nevystihuje.



n

3 ||| N



Obrázek 5.15: Obtékání překážky v čase t = 4 na síti 214×106 prvků pro $\Delta t = 4 \cdot 10^{-4}$.



Obrázek 5.16: Referenční řešení v časet=4na síti 2400 × 880 prvků pro $\Delta t=2\cdot 10^{-4}.$



Obrázek 5.17: Obtékání překážky v čase t = 4 na síti 214×106 prvků pro $\Delta t = 4 \cdot 10^{-4}$.



Obrázek 5.18: Referenční řešení v časet=4na síti 2400 × 880 prvků pro $\Delta t=2\cdot 10^{-4}.$

5.3 Shrnutí výsledků experimentů

Numerické experimenty provedené v této kapitole dávají základní představu o chování testovaných schémat při výskytu fluktuací v řešení pod úrovní rozlišení diskretizační sítě.

Prokázalo se, že schéma $MUSCL \ MC$ je oproti schématu $MUSCL \ minmod$ o něco méně disipativní a v testovacích úlohách ostřeji zachycuje extrémy řešení. Obě tato schémata pak podávají výrazně kvalitnější výsledky oproti schématu s po částech konstantní rekonstrukcí LLF, které je více disipativní.

Dále se ukázalo, že větší víry v řešení dvoudimenzionální úlohy jsou testovanými schématy *MUSCL MC* a *MUSCL minmod* zachyceny dobře, nicméně při výskytu malých vírů, které nemohou být zachyceny v rámci rozlišení diskretizační sítě, je struktura přibližného řešení stanoveného pomocí testovaných schémat odlišná.

Provedené experimenty nicméně nemohou poskytnout obecnou odpověď na otázku, nakolik jsou testovaná schémata skutečně vhodná pro modelování turbulence. Pro získání vypovídajících výsledků by bylo nutné provést srovnání s ostatními modely LES a vykonat rozsáhlejší testování pro úlohy ve třech prostorových dimenzích a srovnání s výsledky DNS simulací a experimentů. Je nutné rovněž vyhodnotit, jaké veličiny nebo jevy mají být při konkrétní aplikaci modelovány a dle toho následně posoudit přesnost výsledků jednotlivých schémat.

Závěr

V práci jsme se zabývali metodou ILES jako relativně novým přístupem v oblasti modelování turbulentního proudění. Přístup ILES byl představen v širších souvislostech s modelováním problémů se zákony zachování pomocí metody konečných objemů a v kontextu SGS modelů turbulence využívaných v metodě LES. Byly přestaveny výhody přístupu ILES, spočívající především v jeho jednoduchosti a aplikovatelnosti na libovolné úlohy proudění nezávisle na tom, zda se jedná o proudění laminární, nebo turbulentní.

Byly shrnuty základní principy metody konečných objemů pro modelování transportních problémů a uvedeny základní charakteristiky metod s vysokým rozlišením. Tyto metody se řadí k metodám potenciálně vhodným pro modelování turbulence pomocí ILES. Vybrané schéma spadající do kategorie metod s vysokým rozlišením, schéma Kurganova a Tadmora, využívající po částech lineární rekonstrukci hodnot veličin, bylo v práci popsáno a implementováno v prostředí MATLAB. Byly provedeny numerické experimenty na úloze pro Burgersovu rovnici v jedné prostorové dimenzi a úlohách proudění nestlačitelné newtonovské tekutiny ve dvou prosotorových dimenzích, a to na úloze proudění přes zpětný schod a úloze obtékání překážky.

Rozsah experimentů provedený v této práci není dostatečný k posouzení reálné využitelnosti tohoto schématu pro modelovaní turbulence. To by vyžadovalo srovnání s ostatními existujícími LES modely turbulence a zejména rozsáhlejší testování schématu na úlohách ve třech prostorových dimenzích. Následně je nutné posuzovat přesnost schématu vzhledem k veličinám, které mají být modelovány. Vzhledem ke složitosti turbulentního proudění je pravděpodobné, že žádný z doposud vyvinutých modelů nemůže být univerzálně přesný vzhledem ke všem veličinám vyskytujícím se v daném problému.

Druhá a třetí kapitola práce mohou samostatně sloužit jako úvod do problematiky modelování turbulentního proudění. Ve druhé kapitole byl představen matematický model proudění založený na soustavě Navierových-Stokesových rovnic a rovnici kontinuity. Dále byly shrnuty základní charakteristiky a poznatky o turbulentním proudění. Ve třetí kapitole pak byly shrnuty nejběžnější přístupy k modelování turbulentního proudění, a to přístupy DNS, RANS a LES.

Modelování turbulentního proudění a studium turbulence obecně se ukázalo jako mimořádně zajímavá a náročná problematika vyzývající k dalšímu studiu. Turbulence je jedním z důkazů, že komplexita přírody výrazně převyšuje míru našeho poznání.
Literatura

- CFD online [online]. Dostupné z <http://www.cfd-online.com/Wiki/Turbulence_ modeling>.
- [2] OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox User Guide, February 2014. Version 2.3.0. Dostupné z <http://www.openfoam.org/docs/>.
- [3] ARMFIELD, S. STREET, R. The Fractional-Step Method for the Navier-Stokes Equations on Staggered Grids: The Accuracy of Three Variations. Journal of Computational Physics. 1999, 153, 2, s. 660 665. ISSN 0021-9991. doi: http://dx.doi.org/10.1006/jcph.1999.6275. Dostupné z: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999199962757>.
- [4] BAEZ, J. Open Questions in Physics [online]. Dostupné z: <http://math.ucr.edu/ home/baez/physics/General/open_questions.html>.
- BORIS, J. On large eddy simulation using subgrid turbulence models Comment
 In LUMLEY, J. (Ed.) Whither Turbulence? Turbulence at the Crossroads, 357
 / Lecture Notes in Physics. Springer Berlin Heidelberg, 1990. s. 344–353. doi: 10.1007/3-540-52535-1_53. ISBN 978-3-540-52535-6.
- [6] BRANDNER, M. MÍKA, S. Numerické metody pro řešení zákonů zachování. Přednáška na semináři "Programy a algoritmy numerické matematiky" PANM 11, MÚ AV ČR, Maxov, Jablonec nad Nisou, 2002.
- BRANDNER, M. EGERMAIER, J. KOPINCOVÁ, H. Numerické metody pro řešení evolučních parciálních diferenciálníc rovnic. 2012. Dostupné z <http://mi21.vsb.cz/sites/mi21.vsb.cz/files/unit/numericke_metody_pro_ reseni_evolucnich_pdr.pdf>.
- [8] DONOUGH, J. M. Introductory Lectures on Turbulence, 2007. Dostupné z <http: //www.engr.uky.edu/~acfd/lctr-notes634.pdf>.
- [9] ELMAN, H. SILVESTER, D. WATHEN, A. Finite Elements and Fast Iterative Solvers: with Applications in Incompressible Fluid Dynamics. Numerical Mathematics and Scientific Computation. OUP Oxford, 2014. ISBN 9780191667923.
- [10] FEFFERMAN, C. L. Existence and smoothness of the Navier-Stokes equation, 2006. Dostupné z: http://www.claymath.org/sites/default/files/navierstokes.pdf>.

- [11] GEORGE, W. K. Lectures in Turbulence for the 21st Century, 2013. Dostupné z http://turbulence-online.com/Publications/Lecture_Notes/Turbulence_ Lille/TB_16January2013.pdf>.
- [12] GRINSTEIN, F. F. FUREBY, C. From canonical to complex flows: Recent progress on monotonically integrated LES. *Computing in Science Engineering*. Mar 2004, 6, 2, s. 36–49. ISSN 1521-9615. doi: 10.1109/MCISE.2004.1267605.
- [13] GRINSTEIN, F. F. MARGOLIN, L. G. RIDER, W. J. Implicit Large Eddy Simulation Computing Turbulent Fluid Dynamics. Cambridge University Press, 2007. ISBN 9780511539749.
- [14] HICKEL, S. Implicit Turbulence Modeling for Large-Eddy Simulation. PhD thesis, Technische Universität München, Lehrstuhl für Aerodynamik, 2007.
- [15] HOFFMAN, J. JOHNSON, C. Computational Turbulent Incompressible Flow. Springer, 2006.
- [16] KHOUIDER, B. Finite difference and finite volume methods for transport and conservation laws. PIMS summer school on stochastic and probabilistic methods for athmosphere, ocean, and dynamics, July 2008.
- New [17] KURGANOV, A. TADMOR, High-Resolution Central Sche-E. mes for Nonlinear Conservation Laws and Convection–Diffusion Equati-Journal of Computational Physics. 2000, 160, 1, s. 241 – 282. ISSN ons. 0021-9991. http://dx.doi.org/10.1006/jcph.2000.6459. Dostupné doi: z: <www.cscamm.umd.edu/tadmor/pub/central-schemes/Kurganov-Tadmor.JCP-00I.pdf>.
- [18] LEE, M. et al. Experiences from Leadership Computing in Simulations of Turbulent Fluid Flows. Computing in Science Engineering. Sept 2014, 16, 5, s. 24–31. ISSN 1521-9615. doi: 10.1109/MCSE.2014.51.
- [19] LEVEQUE, R. Finite volume methods for hyperbolic problems. Cambridge University Press, 2002. ISBN 0511042191.
- [20] MARGOLIN, L. G. Modeling Turbulent Flow with Implicit LES. In Proceedings of the Joint Russian-American Five Laboratory Conference on Computational Mathematics/Physics, Vienna, Austria, June 2005.
- [21] MENEVEAU, C. Turbulence: Subgrid-scale Modeling. Scholarpedia. 2010, 5, 1, s. 9489. Revision 125869. Dostupné z <http://www.scholarpedia.org/article/Turbulence: _Subgrid-Scale_Modeling>.
- [22] SOUREK, J. Metody s vysokým rozlišením pro řešení transportních problémů a problémů se zákony zachování. Bakalářská práce, vedoucí práce doc. Ing. Marek Brandner, PhD. Fakulta aplikovaných věd, Západočeská univerzita v Plzni, 2013. Dostupné z <https://otik.uk.zcu.cz/handle/11025/7170>.
- [23] POPE, S. B. Turbulent Flows. Cambridge University Press, 2000. ISBN 9780521598866.

- [24] SERRE, D. Systems of conservation laws. Cambridge University Press, 1999. ISBN 0-511-00900-3.
- [25] URANGA, A. Investigation of transition to turbulence at low Reynolds numbers using Implicit Large Eddy Simulations with a Discontinuous Galerkin method. PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology. Dept. of Aeronautics and Astronautics., 2011.
- [26] VERGANO, D. Turbulence theory gets a bit choppy. USA TODAY. 9/10/2006. Dostupné z: http://usatoday30.usatoday.com/tech/science/columnist/vergano/ 2006-09-10-turbulence_x.htm>.
- [27] VERSTEEG, H. K. MALALASEKERA, W. An introduction to computational fluid dynamics : the finite volume method. Pearson Education Ltd, 2007. ISBN 9780131274983.
- [28] WOLFRAM, S. A New Kind of Science. Section: Fluid Flow, Notes for Chapter 8: Implications for Everyday Systems. Wolfram Media, 2002. Dostupné z: https://www.wolframscience.com/reference/notes/996d>.
- [29] ZENG, X. A general approach to enhance slope limiters on nonuniform rectilinear grids. ArXiv e-prints. January 2013. Dostupné z: http://arxiv.org/pdf/1301.0967v2.pdf.
- [30] ZHAO, S. LARDJANE, N. FEDIOUN, I. Comparison of improved finite-difference WENO schemes for the implicit large eddy simulation of turbulent non-reacting and reacting high-speed shear flows. Computers & Fluids. 2014, 95, s. 74 – 87.