TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

FAKULTA MECHATRONIKY A MEZIOBOROVÝCH INŽENÝRSKÝCH STUDIÍ

Studijní program: B 2612 – Elektrotechnika a informatika

Studijní obor: 2612R011 – Elektronické informační a řídicí systémy

Implementace explicitního modelu advekčního transportu škodlivin v plynu a testování numerické difúze

Bakalářská práce

Autor: Šárka Novotná

Vedoucí BP práce: Ing. Jan Šembera,Ph.D.

Konzultant: Ing. Milan Hokr,Ph.D

V Liberci 18. 5. 2006

Prohlášení:

Byla jsem seznámena s tím, že na mou bakalářskou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 o právu autorském, zejména § 60 (školní dílo).

Beru na vědomí, že TUL má právo na uzavření licenční smlouvy o užití mé BP a prohlašuji, že **s o u h l a s í m** s případným užitím mé bakalářské práce (prodej, zapůjčení apod.).

Jsem si vědoma toho, že užít své bakalářské práce či poskytnout licenci k jejímu využití mohu jen se souhlasem TUL, která má právo ode mne požadovat přiměřený příspěvek na úhradu nákladů, vynaložených univerzitou na vytvoření díla (až do jejich skutečné výše).

Bakalářskou práci jsem vypracovala samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím bakalářské práce a konzultantem.

Datum

Podpis

PODĚKOVÁNÍ

Za vedení bakalářské práce, rady a připomínky v průběhu její tvorby děkuji Ing. Janu Šemberovi, Ph.D

ANOTACE

Práce se zabývá numerickým řešením konvekčního transportu kontaminantu v plynu explicitní metodou konečných objemů. Při popisu transportu vychází z rovnice kontinuity. Na její integrální tvar je aplikovaná metoda konečných objemů používající kontrolní objemy ve tvaru čtverce. Hodnoty hustoty a koncentrace v oblasti jsou nahrazeny průměrnými hodnotami v kontrolních objemech, k vyjádření toků přes stěny objemů je použita upwind metoda. Rychlost proudového pole je převzata z výpočtu modelu proudění řešeného metodou konečných diferencí.

Model byl implementován v programovacím jazyce C. Testovací úlohy byly zaměřeny na posouzení vlivu numerické difúze v pravidelné čtvercové síti. Numerická difúze je chyba numerického řešení konvekčního transportu vznikající při použití upwind schématu. Při 1D úlohách lze její vliv vyjádřit jako řešení difúzní rovnice. Ve 2D vyjádřit chybu numerické difúze přímo difúzní rovnicí nelze. V této práci je však tato chyba analyzovaná za předpokladu, že určitá analogie mezi popisem rozptylu kontaminantu způsobeného numerickou a molekulární difúzí při 2D transportu existuje. Na jejím základě jsou pak z výsledků řešení konvekčního transportu vypočteného modelem spočítány koeficienty vyjadřující vliv numerické difúze ve směrech určených pravidelnou prostorovou diskretizací a jejich velikost je posuzována v závislosti na velikosti časového kroku a směru rychlosti proudění.

ANNOTATION

This thesis is focused on numerical solution of advective contaminant transport in gas using the Finite Volume Method. Continuity equation was used for mathematical description of the transport. The domain was divided into a number of square control volumes, numerical values of density and concentration were approximated as average value over the control volume. Upwind method was used to express the flux over sides of control volumes. The flow-field velocity was adopted from model calculation of flow solved by the Finite Difference Method.

Model was implemented and tested with focus on the influence of numerical diffusion in regular square grid. The numerical diffusion is the calculation error of numerical solution of advective transport using the upwind scheme. Solving 1D-task, its influence can be expressed as diffusion equation solution. It is not possible to express the numerical diffusion error by diffusion equation in 2D. However, this error is analysed on assumption that there is a certain analogy between description of contaminant diffusion caused by numerical and molecular diffusion during 2D-transport. On this basis, coefficients expressing the influence of numerical diffusion in the course determinated by regular space discretization are figured up from advective transport solution and their size is analysed in relation of time step and the course of the flow.

OBSAH

ÚVOD

Cílem této práce je navrhnout numerický model transportu kontaminantu ve vzduchu a na vhodných úlohách jej otestovat. Model navazuje na výpočet modelu nevazkého izotermického proudění stlačitelné tekutiny řešeného metodou konečných diferencí navrženého v rámci ročníkového projektu J. Plešingerem [2] na Katedře modelování procesů. Používá rychlostní pole vypočtené modelem proudění k výpočtu hustoty plynu a transportu kontaminantu metodou konečných objemů.

Model řeší transport pouze mechanismem konvekce, nezahrnuje difúzní část. Pro řešení reálných úloh by bylo nutné o jev difúze model rozšířit.

Práce obsahuje fyzikální model konvekčního a difúzního transportu popsaný rovnicí kontinuity, popis prostorové diskretizace metodou konečných objemů, aplikaci metody konečných objemů na konvekční část rovnice kontinuity a stručný popis implementace programu.

V další části jsou uvedeny výsledky testovacích úloh. Práce se zde zabývá chybou numerické difúze ve čtvercové síti. Vlivem numerické difúze dochází při numerickém výpočtu k rozptylu kontaminantu ve směrech daných geometrií sítě. Za předpokladu, že rozložení kontaminantu v těchto směrech lze vyjádřit vztahem pro koncentraci kontaminantu šířeného molekulární difúzí, jsou vypočítány koeficienty numerické difúze. Pomocí těchto koeficientů je pak posuzován vliv numerické difúze v závislosti na časovém kroku a směru rychlosti proudění.

1 FYZIKÁLNÍ MODEL

V této kapitole navrhneme fyzikální model úlohy transportu kontaminantu v proudícím vzduchu ve 2D oblasti Ω s hranicí ∂ Ω.

1.1 Koncentrace

Množství kontaminantu v každém bodě vyjadřujeme pomocí koncentrace, kterou definujeme jako podíl hustoty kontaminantu ρ_c k celkové hustotě plynu ρ

$$c = \frac{\rho_c}{\rho} \quad . \tag{1.1}$$

1.2 Rovnice transportu hmoty

Obecně je přenos kontaminantu v plynu způsoben dvěma jevy, konvekcí a difúzí. Při konvekci je kontaminant přenášen vlivem proudění. Každý dílčí element se pohybuje jako celek a koncentrace všech látek v něm zůstává konstantní. Difúze má na rozdíl od konvekce mikroskopický charakter. Dochází při ní k vyrovnávání koncentrace vlivem tepelného pohybu molekul a jejich srážek.

Při popisu transportu vyjdeme ze zákonu zachování hmoty. Časová změna hmotnosti látky v objemu, ve kterém se nenachází zdroje ani propady, odpovídá toku látky stěnou ohraničující tento objem. Matematicky vyjadřuje zákon zachování hmoty rovnice kontinuity

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div(\rho \vec{v}) = 0\,, \tag{1.2}$$

kde $\rho(\vec{x},t)$ je hustota a $\vec{v}(\vec{x},t)$ rychlost. Pokud nedochází k difúznímu transportu, zákon zachování hmoty látky, jejíž zastoupení v směsi určuje koncentrace $c(\vec{x},t)$, vyjadřuje rovnice

$$\frac{\partial (\rho c)}{\partial t} + div(\rho c \vec{v}) = 0\,. \tag{1.3}$$

Integrací této rovnice přes vybranou část objemu $V \subset \Omega$ získáme její integrální tvar

$$\frac{d}{dt}\int_V \rho c dV + \int_{\partial V} \rho c \vec{v}\vec{n} dS = 0\,, \tag{1.4}$$

kde $\vec{n}$ je jednotkový vektor vnější normály k ploše ∂V ohraničující objem V.

Dochází-li k difúzi, zavedeme na levou stranu rovnice tok charakterizovaný hustotou difúzního toku $\vec{j}$, který vyjadřuje množství kontaminantu transportovaného difúzí jednotkovou plochou za jednotku času. Při zahrnutí vlivu difúze bude mít rovnice kontinuity tvar

$$\frac{d}{dt}\int_V \rho c dV + \int_{\partial V} (\rho c\vec{v} + \vec{j})\vec{n} dS = 0 \tag{1.5}$$

Difúzní tok vyjádříme pomocí prvního Fickova zákona, podle kterého souvisí difúzní tok kontaminantu s gradientem jeho koncentrace vztahem

$$\vec{j} = -\rho D\, \vec{grad}\, c\,, \tag{1.6}$$

kde D je koeficient molekulární difúze.

Po dosazení (1.6) do (1.5) získáme konečnou rovnici bilance hmoty v integrálním tvaru

$$\frac{d}{dt}\int_V \rho c dV + \int_{\partial V} (\rho c\vec{v})\vec{n} dS - \int_{\partial V} \rho D\, \vec{grad}\, c\, \vec{n} dS = 0 \tag{1.7}$$

v diferenciálním tvaru

$$\frac{\partial(\rho c)}{\partial t} + div(\rho c\vec{v}) - div(\rho D\, \vec{grad}\, c) = 0 \tag{1.8}$$

Jev difúze obecně není zanedbatelný, my se však budeme zabývat návrhem čistě konvekčního modelu transportu. Jeho rozšíření uvážením difúze bude pro řešení reálných úloh nutným dalším krokem zkoumání.

Podrobněji se tématem zabývá [1].

1.3 Okrajové a počáteční podmínky

Úlohou konvekčního transportu kontaminantu rozumíme řešení rovnice (1.2) a (1.3) v omezené oblasti Ω a časovém intervalu <0,T> s předepsaným rychlostním polem $\vec{v}(\vec{x},t)$ s počátečními podmínkami udávajícími rozložení koncentrace a hustoty v čase t = 0

$$c = (\vec{x},0) = c_0(\vec{x}), \rho(\vec{x},0) = \rho_0(\vec{x}),\ \vec{x} \in \Omega \tag{1.9}$$

a okrajovými podmínkami předepisujícími koncentraci a hustotu na části hranice Ω, kde plyn vstupuje do oblasti.

$$c = (\vec{x},t) = c_D(\vec{x},t), \rho(\vec{x},t) = \rho_D(\vec{x},t),\ \vec{x} \in \Gamma_D, t \in < 0,T > \tag{1.10}$$

Na nepropustné části a na části hranice, kde plyn opouští oblast, nepředepisujeme žádné okrajové podmínky.

2 NUMERICKÝ MODEL

V této kapitole bude podán návrh na diskretizaci rovnic

$$\frac{\partial \rho(\vec{x},t)}{\partial t} + div(\rho(\vec{x},t)\vec{v}(\vec{x},t)) = 0 \text{ a} \tag{2.1}$$

$$\frac{\partial(\rho(\vec{x},t)c(\vec{x},t))}{\partial t} + div(\rho(\vec{x},t)c(\vec{x},t)\vec{v}(\vec{x},t)) = 0 \tag{2.2}$$

$$\vec{x} \in \Omega,\ t \in < 0,T >$$

s okrajovými a počátečními podmínkami

$$c = (\vec{x},t) = c_D(\vec{x},t), \quad \vec{x} \in \Gamma_D, t \in < 0,T >, \tag{2.3}$$

$$\rho(\vec{x},t) = \rho_D(\vec{x},t), \quad \vec{x} \in \Gamma_D, t \in < 0,T >, \tag{2.4}$$

$$c = (\vec{x},0) = c_0(\vec{x}), \quad \vec{x} \in \Omega \ , \tag{2.5}$$

$$\rho(\vec{x},0) = \rho_0(\vec{x}), \quad \vec{x} \in \Omega, \tag{2.6}$$

s neznámými funkcemi $\rho(\vec{x},t)$ a $c(\vec{x},t)$. Rychlost proudění $\vec{v}(\vec{x},t)$ je vypočtena metodou konečných diferencí a je známa v uzlech modelu proudění.

2.1 Časová diskretizace

Úlohu řešíme v intervalu $t \in < 0,T >$, který aproximujeme rostoucí posloupností časových hodnot $\{t_n\}_{n=0}^{n_T}$ $t_0 = 0, t_{n_T} = T$. Časový diskretizační krok, který je během výpočtu konstantní, označíme $\Delta t = t_{n+1} - t_n$.

2.2 Prostorová diskretizace

Oblast Ω rozložíme na síť kontrolních objemů τ, které volíme ve tvaru obdélníka s vrcholy v uzlech sítě modelu proudění. Uzly jsou ekvidistantně rozložené a mají souřadnice (x_k,y_l)

$$x_k = x_0 + k\Delta x, \quad k = 0,1,...,n$$
$$y_s = y_0 + l\Delta y, \quad l = 0,1,...,m.$$

Diskretizační kroky Δx, Δy mohou být pro jednotlivé směry různé[2].

Množinu stěn kontrolních objemů označíme ε. Množinu vnitřních, resp. hraničních stěn označíme ε_{int}, resp. ε_{ext}

$$\varepsilon_{\text{int}} = \{\sigma \in \varepsilon \mid \sigma \not\subset \partial\Omega\},\ \ \varepsilon_{ext} = \{\sigma \in \varepsilon \mid \sigma \subset \partial\Omega\}$$

Pro každý kontrolní objem $K \in \tau$ je definovaná množina stěn $\varepsilon_K \subset \varepsilon$, tvořících jeho hranici. Potřebné vlastnosti diskretizace viz [1].

2.3 Aplikace metody konečných objemů

Metoda konečných objemů vychází z integrálního tvaru rovnice kontinuity. Integrujeme-li rovnice (2.1) a (2.2) přes vybraný kontrolní objem $K \in \tau$ a časový interval (t_n, t_{n+1}), dostaneme

$$\int_K [\rho(\vec{x},t_{n+1}) - \rho(\vec{x},t_n)]dV + \int_{t_n}^{t_{n+1}}\int_{\partial K} \rho(\vec{x},t)\vec{v}(\vec{x},t)\cdot\vec{n}(\vec{x})\,dSdt = 0, \tag{2.7}$$

$$\int_K [\rho(\vec{x},t_{n+1})c(\vec{x},t_{n+1}) - \rho(\vec{x},t_n)c(\vec{x},t_n)]dV + \int_{t_n}^{t_{n+1}}\int_{\partial K} \rho(\vec{x},t)c(\vec{x},t)\vec{v}(\vec{x},t)\cdot\vec{n}(\vec{x})\,dSdt = 0. \tag{2.8}$$

Časové integrály nahradíme explicitní diferencí, pak

$$\int_K [\rho(\vec{x},t_{n+1}) - \rho(\vec{x},t_n)]dV + \Delta t\int_{\partial K} \rho(\vec{x},t)\vec{v}(\vec{x},t)\cdot\vec{n}(\vec{x})\,dS = 0, \tag{2.9}$$

$$\int_K [\rho(\vec{x},t_{n+1})c(\vec{x},t_{n+1}) - \rho(\vec{x},t_n)c(\vec{x},t_n)]dV + \Delta t\int_{\partial K} \rho(\vec{x},t)c(\vec{x},t)\vec{v}(\vec{x},t)\cdot\vec{n}(\vec{x})\,dS = 0 \tag{2.10}$$

Zavedeme diskrétní neznámé veličiny, vyjadřující průměrnou hustotu plynu a průměrnou koncentraci kontaminantu v čase t_n v objemu K

$$\rho_K^n = \frac{1}{V_K}\int_{V_K} \rho(K,t_n)dV \quad \text{a}$$

$$c_K^n = \frac{1}{V_K}\int_{V_K} c(K,t_n)dV, \qquad K \in T,\ n \in \{1...n_T\}$$

Přepíšeme předcházející rovnice vzhledem k těmto veličinám

$$(\rho_K^{n+1} - \rho_K^n)V_K = -\Delta t \sum_{\sigma \in \varepsilon_K} f_{K,\sigma}^n \quad , \tag{2.11}$$

$$(\rho_K^{n+1} c_K^{n+1} - \rho_K^n c_K^n)V_K = -\Delta t \sum_{\sigma \in \varepsilon_K} f_{K,\sigma}^n c_\sigma^n \quad , \qquad \forall K \in \tau, \forall n \in \{0,...,n_\tau\} \tag{2.12}$$

kde $f_{K,\sigma}^n = \rho_\sigma^n \vec{v}_\sigma^n \vec{n}_{K,\sigma} S_\sigma$ má fyzikální význam toku hmoty stěnou σ z objemu *K*. $\vec{v}_\sigma^n$ je aritmetický průměr rychlostí v krajních bodech stěny σ, $\vec{n}_{K,\sigma}^n$ je vnější normála k této stěně, S_σ délka stěny, V_K plocha kontrolního objemu *K*.

K určení hodnot ρ_σ^n a c_σ^n použijme upwind metodu, podle které tok sledované látky stěnou závisí na hodnotách hustoty a koncentrace v objemu, který je v protisměru tohoto toku. σ je stěna mezi objemy *K* a *L*, pak

$$\rho_\sigma^n c_\sigma^n = \begin{cases} \rho_K^n c_K^n & pro \;\; f_{K,\sigma}^n \geq 0 \\ \rho_L^n c_L^n & pro \;\; f_{K,\sigma}^n < 0, \sigma \in \varepsilon_{\text{int}} \\ \rho_D^n c_D^n & pro \;\; f_{K,\sigma}^n < 0, \sigma \subset \Gamma_D \end{cases}$$

[1]

2.4 Stabilita

Numerické schéma (2.11) a (2.12) je podmíněně stabilní. Podmínka stability plyne z požadavku, aby z kontrolního objemu neodteklo větší množství hmoty, než tento objem obsahuje. Odtud je podmínka pro omezení časového kroku

$$\Delta t \leq \frac{\rho_K^n V}{\sum_{\sigma \in \varepsilon_{K+,}^n} f_{K,\sigma}^n}, \; K \in \tau, \, n \in \{0,...,n_T\},$$

kde $\varepsilon_{K,+}^n = \{\sigma \in \varepsilon_K \mid f_{K,\sigma}^n > 0\}$ [1].

2.4.1 Numerická difúze

Během časového kroku menšího než na hranici stability nevyteče z kontrolního objemu všechna hmota a dochází k chybě numerického výpočtu nazývané numerická difúze. Kontaminant se rozptýlí kolem oblasti analytického řešení konvekční rovnice.

V jednodimenzionálním případě tento rozptyl odpovídá řešení konvekčně–difúzní rovnice. Pokud řešíme jednodimenzionální konvekční transport s ustáleným prouděním, pak má numerické schéma rovnice (2.2) tvar

$$c_i^{n+1} = c_i^n - v\frac{\Delta t}{h}(c_i^n - c_{i-1}^n), \qquad (2.13)$$

kde h je rozměr kontrolního objemu ve směru proudění.

Z tohoto schématu lze pomocí vyjádření hodnot c_{i-1}^n a c_i^{n+1} použitím Taylorova rozvoje získat výraz pro chybu numerického řešení konvečního transportu. Tato chyba je přibližně rovná

$$\frac{1}{2}vh(1 - v\frac{\Delta t}{h})\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \qquad (2.14)$$

Numerické řešení konvečního transportu pak přibližně odpovídá řešení konvečně-difúzní rovnice

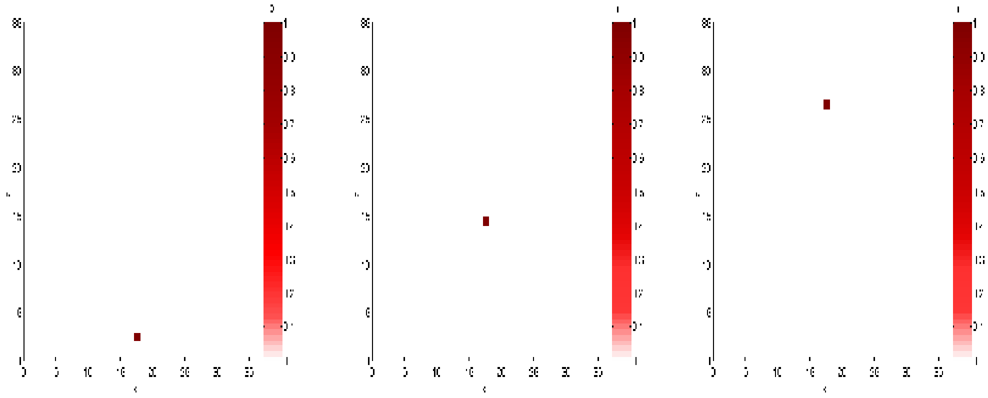
$$\frac{\partial c}{\partial t} + v\frac{\partial c}{\partial x} - \frac{1}{2}vh(1 - v\frac{\Delta t}{h})\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \approx 0 \qquad (2.15)$$

Koeficient u druhé derivace charakterizuje rychlost šíření chyby numerické difúze v závislosti na diskretizačních krocích Δt, h a rychlosti proudění, označíme ho jako koeficient numerické difúze

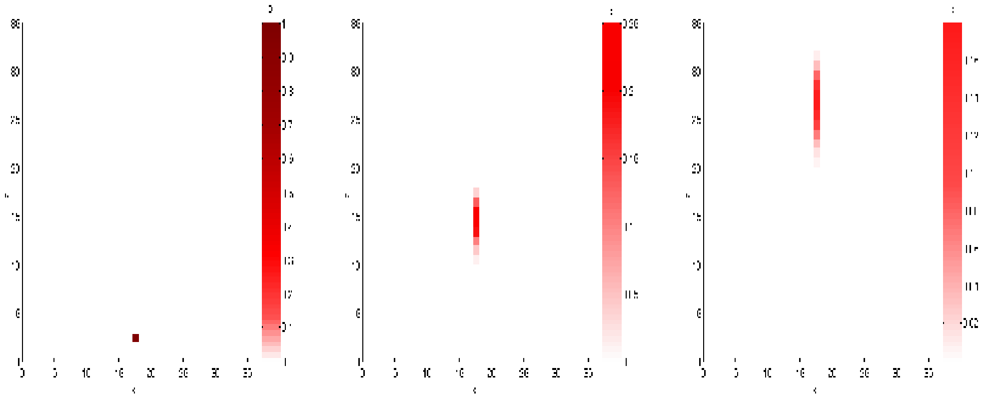
$$D_{num} \approx \frac{1}{2}vh(1 - v\frac{\Delta t}{h}), \qquad (2.16)$$

Při časovém kroku na hranici stability $\Delta t = \frac{h}{v}$ je $D_{num} = 0$, tedy k numerické difúzi nedochází (obr. 2.1 (a)) Při zmenšování časového kroku vliv této chyby vzrůstá (příklad výpočtu s časovým krokem menším než na hranici stability je na obr. 2.1 (b)), až pro limitní případ nulového časového kroku dosahuje koeficient numerické difúze maximální hodnoty $vh/2$. Při $\Delta t > \frac{h}{v}$ je výpočet nestabilní, koncentrace nabývají nefyzikálních hodnot (záporných, větších než jedna). Příklad nestabilního výpočtu je na obr. 2.1 (c). [1]

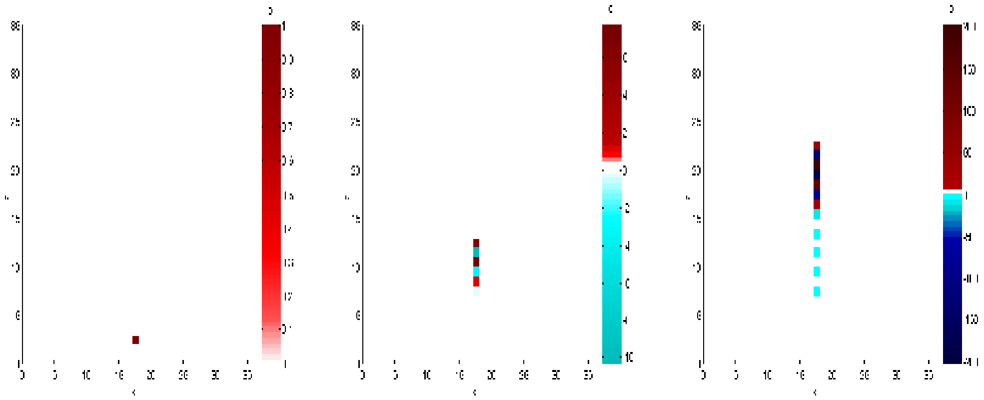
Při 2D transportu se kontaminant vlivem numerické difúze rozptýlí ve směrech daných geometrií sítě. Tento rozptyl nelze chápat jako řešení difúzní rovnice jako při 1D transportu. Přesto se však pokusíme najít analogii v popisech šíření kontaminantu vlivem molekulární difúze a numerické difúze ve 2D.



(a)



(b)



(c)

Obr. 2.1 – Numerické řešení 1D transportu při konstantní rychlosti v_y – zleva doprava rostoucí čas – pod sebou ve stejných časech (a) při časovém kroku na hranici stability, (b) menším než na hranici stability, (c) větším, než na hranici stability

3 IMPLEMENTACE

Program pro modelování konvekčního transportu v plynu je napsán v programovacím jazyce C. Program obsahuje funkce pro načtení informací o síti uzlů modelu proudění, vytvoření této sítě, vytvoření sítě objemů, výpočet řešení a jeho uložení do souboru.

Rychlostní pole je načítáno ze souboru do struktury bod, ve které jsou položky rychlosti ve směru x, y a hustota v uzlech modelu proudění a informace, jestli je uzel vyřazen ze sítě.

typedef struct{	
float x,	rychlost v uzlu diferenční metody ve směru x
y,	rychlost v uzlu diferenční metody ve směru y
ro;	hustota v uzlu diferenční metody
int vyrazen;	informace, jestli je uzel vyřazen ze sítě
}bod;	

Průměrné hodnoty hustoty a koncentrace v kontrolním objemu, změny hustoty a koncentrace oproti minulému časovému kroku a rozměr kontrolního objemu jsou uloženy ve struktuře objem:

typedef struct{	
float ro,	průměrná hustota plynu v kontrolním objemu
c,	průměrná koncentrace kontaminantu v kontrolním objemu
V,	plocha kontrolního objemu
d_ro,	změna hustoty v objemu oproti minulému časovému kroku
d_c;	změna koncentrace v objemu oproti minulému časovému kroku
}objem;	

Změny hustoty a koncentrace jsou dány hmotnostními toky přes stěny objemu. Ty jsou počítány pomocí struktury hrana, ve které jsou odkazy na objemy, jejichž hranici stěna tvoří, rychlosti v krajních bodech stěny a rozměr stěny.

typedef struct{	
*float *v1, *v2*	ukazatele na rychlosti v krajních bodech hrany, rychlosti jsou uložené ve struktuře bod
S;	délka hrany kontrolního objemu
int z_obj,	index objemu ležícího od hrany v záporném směru osy
do_obj;	index objemu ležícího od hrany v kladném směru osy
}hrana;	

V hlavní funkci main jsou ze souboru načteny informace o rozměrech sítě modelu proudění, alokovány pole struktur bod, objem a hrana a naplněny počátečními podmínkami. V cyklu je pak volána funkce načítající rychlostí pole pro výpočet transportu v dalším časovém kroku a funkce realizující samotný výpočet nových hodnot koncentrací a hustot, tj. řešící rovnice (2.11) a (2.12). Vypočtené hodnoty jsou ukládány souboru pro zobrazení v Matlabu.

4 TESTOVACÍ ÚLOHY

4.1 Proudění v oblasti bez překážky

4.1.1 Jednorozměrné proudění

4.1.1.1 Ustálené proudění

Jako testovací úlohu při 1D ustáleném proudění řešíme rovnice

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(x,t) + v_x \frac{\partial \rho}{\partial x}(x,t) = 0\,, \tag{4.1}$$

$$\frac{\partial(\rho(x,t)c(x,t))}{\partial t} + v_x \frac{\partial(\rho(x,t)c(x,t))}{\partial x} = 0 \tag{4.2}$$

v oblasti $\Omega = <0{,}100>$ a čase <0,T>, s počáteční podmínkou

$$\rho^0(\vec{x}) = 1,\ x \in \Omega\,, \tag{4.3}$$

$$c(x,0) = \begin{cases} 1 \ \text{ pro } x \in <0,\Delta x> \\ 0 \ \text{ pro } x \in \Omega \setminus <0,\Delta x> \end{cases} \tag{4.4}$$

na vstupní straně je

$$\rho(t) = 1, t \in <0,T>, \tag{4.5}$$

$$c(t) = 0, t \in <0,T>. \tag{4.6}$$

Za předpokladu $v_x(\vec{x},t) =$ konst. při počáteční podmínce (4.3) a okrajové podmínce (4.5) nedochází v oblasti ke změně hustoty, $\rho(\vec{x},t) =$ konst. Pak hledáme řešení rovnice

$$\frac{\partial c}{\partial t}(x,t) + v_x \frac{\partial c}{\partial x}(x,t) = 0,\ (x,t) \in \Omega \times (0,T) \tag{4.7}$$

s počáteční podmínkou (4.4) a okrajovou podmínkou (4.6).

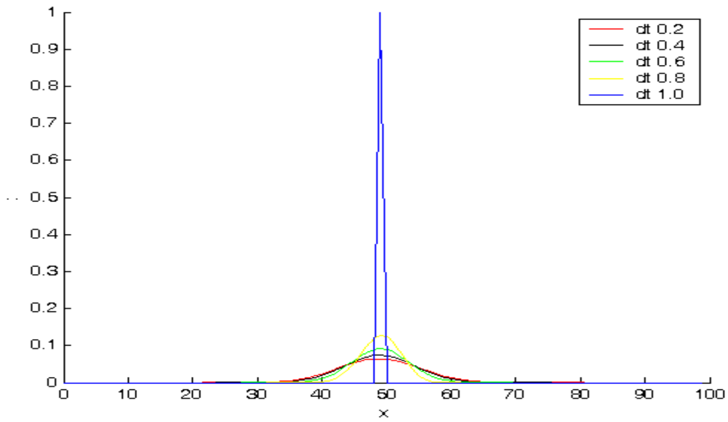
Numerický výpočet provádíme v oblasti rozložené na kontrolní objemy. Její rozměry jsou $\langle 0;100\rangle \times \langle 0;1\rangle$, $\Delta x = \Delta y = 1$, je tedy dvojrozměrná. Rychlost proudění ve směru y je v celé oblasti nulová, takže v tomto směru směru transport neprobíhá. Za této podmínky můžeme transport ve 2D oblasti $\langle 0;100\rangle \times \langle 0;1\rangle$ popsat rovnicí 1D transportu v oblasti $\Omega = <0{,}100>$.

Analytické řešení rovnice (4.7) s počáteční podmínkou (4.4) vyjadřuje skutečnost, že kontaminant v oblasti postupuje rychlostí v_x, takže je rovno

$$c(x,t) = \begin{cases} 1 \ \text{ pro } x \in <v_x t, v_x t + \Delta x> \\ 0 \ \text{ pro } x \in \Omega \setminus <v_x t, v_x t + \Delta x>. \end{cases} \tag{4.8}$$

Porovnání analytického řešení s výpočtem

Shoda numerického řešení s analytickým je závislá na volbě časového kroku. Dochází k ní jen na mezi stability, při časovém kroku $\Delta t = \frac{\Delta x}{v_x}$. Je-li časový krok $\Delta t < \frac{\Delta x}{v_x}$, dochází k numerické difúzi (obr. 4.1)



Obr. 4.1 – Rychlost v_x = 1, Δx =1. Při Δt < 1se projeví numerická difúze, při Δt = 1 odpovídá numerické řešení analytickému .

4.1.1.2 Neustálené proudění

Výpočet byl proveden v oblasti $\Omega = \langle 0;24 \rangle \times \langle 0;24 \rangle$, Δx =Δy =1 (obr. 4.2). V této oblasti známe z modelu proudění rychlost v_x, která se mění v čase a x-ovém směru, tj. $v_x(x,t) \neq$ konst., pak $\rho(x,t) \neq$ konst. a celkové množství hmoty v oblasti se mění.

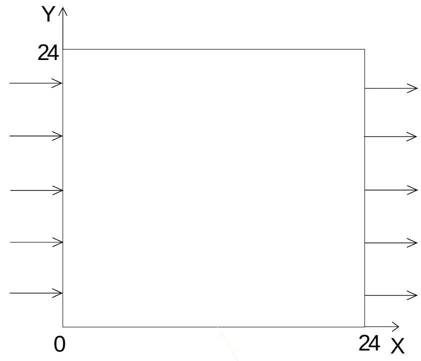
Rychlost $v_y(\vec{x},t) = 0$, takže řešíme úlohu transportu v 1D, tj rovnice (4.1) a (4.2) s počátečními podmínkami (4.3), (4.4) a okrajovými podmínkami(4.5), (4.6).

Při výpočtu rychlosti a hustoty plynu modelem proudění byly použity počáteční podmínky

$$v_x(t=0) = 0 \; v \, \Omega \setminus (\{0\} \times < 0;24 >),$$
$$v_x(t=0) = 1 \; na \, \{0\} \times < 0;24 >,$$
$$v_y(t=0) = 0 \; v\Omega,$$
$$\rho(t=0) = 1 \; v\Omega$$

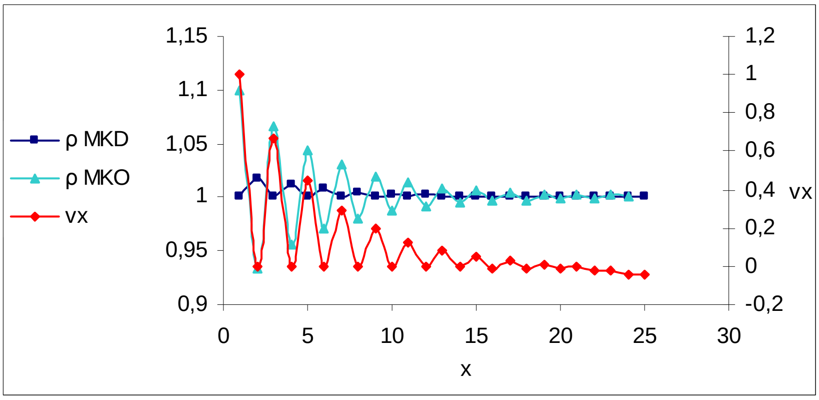
a okrajové podmínky na vstupní straně

$$v_x(x=0) = 1,$$
$$v_y(x=0) = 0,$$
$$\rho(x=0) = 1.$$



Obr. 4.2 – Oblast testovací úlohy s 1D neustáleným prouděním

Při proudění se pole rychlosti a hustoty plynu vzájemně ovlivňují. Model proudění [2] proto obsahuje řešení obou těchto polí. Při výpočtu transportu používáme z modelu proudění pouze rychlosti. Pomocí nich počítáme metodou konečných objemů pole hustoty plynu a koncentrace kontaminantu. Pokud má pole hustot vypočtené modelem transportu odpovídat hodnotám rychlostí předem vypočteným modelem proudění, musí být rozložení hustot vypočtených modelem proudění a modelem transportu stejné. Jiné pole hustot vypočtené modelem transportu by měly jinak ovlivnit rychlostní pole a proto by použití modelu transportu používající rychlosti modelu proudění nebylo možné.

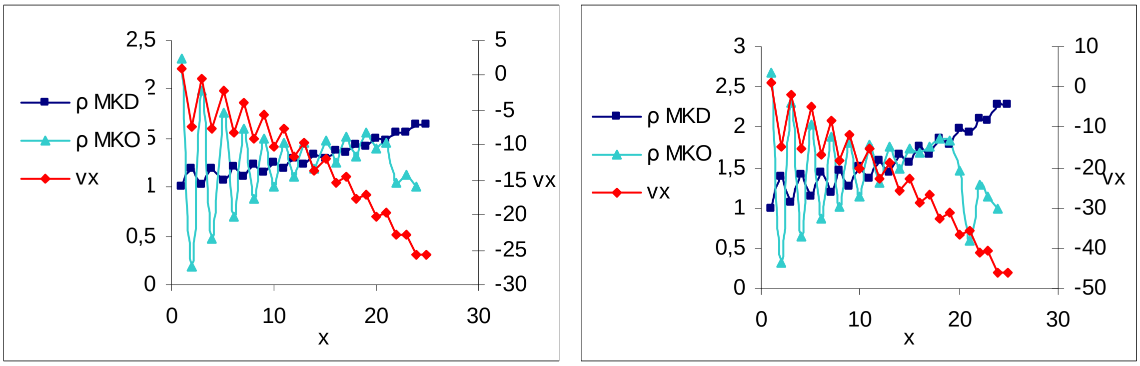


Obr. 4.3 – Hustota vypočtená metodou konečných diferencí modelem proudění a metodou konečných objemů modelem transportu po jednom časovém kroku Δt = 0,1

Porovnání hodnot s výpočtem modelu proudění

Z výsledků testovacích výpočtů uvádíme hodnoty vypočtené při časovém kroku Δt = 0,1. Na obr. 4.3 je hustota plynu a rychlost proudění vypočtená modelem proudění metodou konečných diferencí, a pole hustoty vypočtené modelem transportu metodou konečných objemů po jednom časovém kroku.

V uzlech diferenční metody se pravidelně střídají kladné a záporné hodnoty rychlosti. Takto pravidelné střídání hodnot rychlosti není fyzikální, ale způsobené numerickým výpočtem. Oscilace rychlostí způsobí výkyvy hustot kolem hodnoty hustoty $\rho_0 = 1$. Oscilace hustoty vypočítané metodou konečných objemů jsou výrazně větší než oscilace hustoty spočítané metodou konečných diferencí modelem proudění. Podobné chování obou modelů jsme pozorovali a při jiných volbách časové a prostorové diskretizace.



(a) (b)

Obr. 4.4 – Hustota vypočtená metodou konečných diferencí modelem proudění a metodou konečných objemů modelem transportu po (a) sedmi(b) osmi časových krocích $\Delta t = 0{,}1$

Po několika časových krocích jsou již pole hustot vypočtených modelem proudění a modelem transportu kvalitativně odlišná. Na obrázku 4.4 jsou rozložení hustot vypočtených oběma modely po sedmi a) a osmi b) časových krocích $\Delta t = 0{,}1$. Model proudění se chová nefyzikálně, rychlost vtoku do oblasti se zvětšuje, přesto že je v ní hustota oproti počáteční podmínce větší. Hustota vypočtená metodou konečných diferencí roste, pole hustoty vypočtené metodou konečných objemů se rozpadá.

4.1.2 Dvourozměrné ustálené proudění

Hledáme řešení rovnic

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(\vec{x},t) + v_x \frac{\partial \rho}{\partial x}(\vec{x},t) + v_y \frac{\partial \rho}{\partial y}(\vec{x},t) = 0, \qquad (4.9)$$

$$\frac{\partial (c(\vec{x},t)\rho(\vec{x},t))}{\partial t} + v_x \frac{\partial (c(\vec{x},t)\rho(\vec{x},t))}{\partial x} + v_y \frac{\partial (c(\vec{x},t)\rho(\vec{x},t))}{\partial y} = 0 \qquad (4.10)$$

v oblasti $\Omega = <0,450> \times <0,350>$, čase $t = <0,T>$

s počáteční podmínkou

$$\rho^0(\vec{x}) = 1,\ \vec{x} \in \Omega, \tag{4.11}$$

$$c(\vec{x},0) = \begin{cases} 1 \text{ pro } \vec{x} \in K = <0,\Delta x> \times <0,\Delta y> \\ 0 \text{ pro } \vec{x} \in \Omega \setminus K \end{cases}, \tag{4.12}$$

na vstupní straně

$$\rho(t) = 1, t \in <0,T>, \tag{4.13}$$

$$c(t) = 0, t \in <0,T> \tag{4.14}$$

V uzlech sítě známe rychlosti v x-ovém směru $v_x(\vec{x},t) = \text{konst.}$ a y-ovém směru $v_y(\vec{x},t) = \text{konst.}$ Při počáteční podmínce (4.11) a okrajové podmínce (4.13), zůstává hustota $\rho(\vec{x},t)$ konstantní a hledáme řešení rovnice

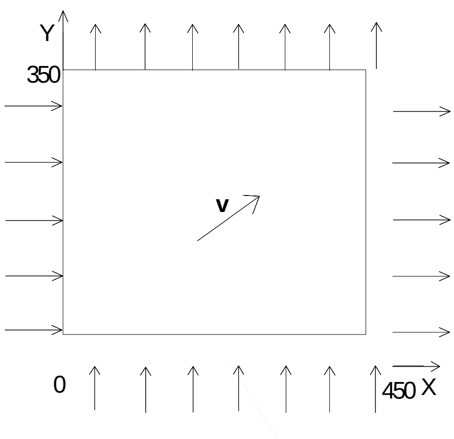
$$\frac{\partial c}{\partial t}(\vec{x},t) + v_x \frac{\partial c}{\partial x}(\vec{x},t) + v_y \frac{\partial c}{\partial y}(\vec{x},t) = 0,\ (\vec{x},t) \in \Omega \times <0,T> \tag{4.15}$$

s počáteční podmínkou (4.12) a okrajovou podmínkou (4.14)

Oblast $\Omega = \langle 0;450 \rangle \times \langle 0;300 \rangle$ byla rozdělena na kontrolní objemy o rozměrech $\Delta x = \Delta y = 1$. Strany, kde plyn vstupuje do oblasti a kde ji opouští jsou znázorněny na obrázku 4.5

Rovnice (4.15) vyjadřuje, že kontaminant vlivem proudění postupuje rychlostí $\vec{v} = (v_x, v_y)$, tj. analytické řešení rovnice (4.15) s počáteční podmínkou (4.12) a okrajovou podmínkou (4.14) je rovno

$$c(\vec{x},t) = \begin{cases} 1 \text{ pro } \vec{x} \in V = <v_x t, v_x t + \Delta x> \times <v_y t, v_y t + \Delta y> \\ 0 \text{ pro } \vec{x} \in \Omega \setminus V \end{cases}$$



Obr. 4.5 – Oblast testovací úlohy s 2D ustáleným prouděním

Porovnání analytického řešení s výpočtem

Numerické řešení analytickému neodpovídá. Shody numerického řešení s analytickým nelze dosáhnout ani volbou časového kroku jako u jednodimenzionálního proudění. Numerická difúze se projeví i na hranici stability při časovém kroku $\Delta t = \dfrac{\Delta x \Delta y}{v_x \Delta y + v_y \Delta x}$.

Podle analytického řešení by měla být koncentrace rovna jedné v $V = < v_x t, v_x t + \Delta x > \times < v_y t, v_y t + \Delta y >$ a nulová jinde.

Při numerickém řešení se kontaminant z jednoho kontrolního objemu po časovém kroku na hranici stability rozdělí do objemů ve směru v_x a v_y. V čase T je rozptýlen v objemech sousedících s K po diagonále čtverců sítě, jak je vidět na obrázku 4.6. Tuto diagonálu budeme nazývat „vedlejší”

Na obrázku 4.7 je příklad výpočtu s časovým krokem menším než na hranici stability. Numerická difúze se v tomto případě projevuje i ve směru druhé diagonály, kterou budeme nazývat „hlavní“. S klesajícím časovým krokem vliv numerické difúze v tomto směru roste.

4.1.2.1 Numerická difúze ve čtvercové síti

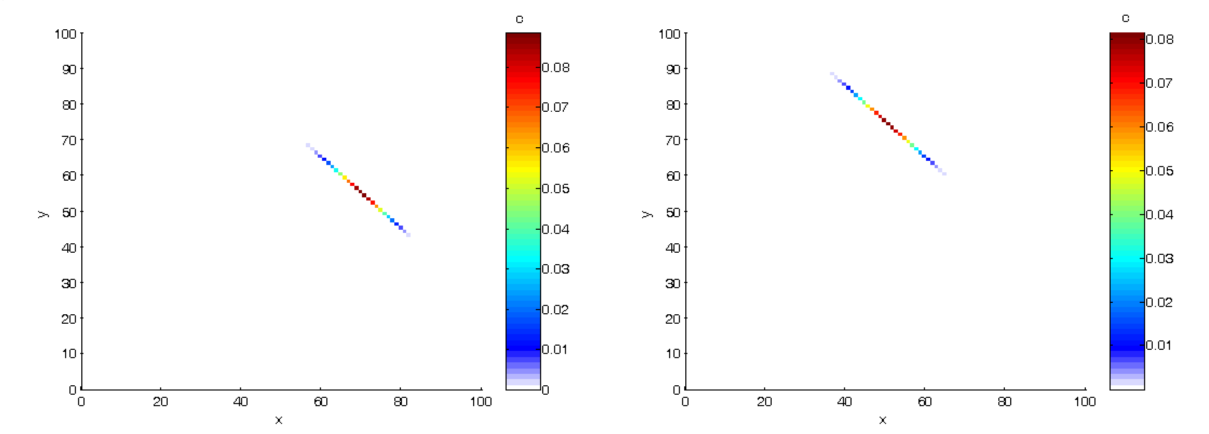
Z vypočtených řešení rovnice (4.15) s počáteční podmínkou (4.12) a okrajovou podmínkou (4.14) s různými časovými kroky při různých směrech rychlosti $\vec{v} = (v_x, v_y)$, (příklady na obr. 4.6 a 4.7) usuzujeme, že se kontaminant při výpočtu konvečního transportu metodou konečných objemů vlivem numerické difúze šíří v pravidelné čtvercové síti ve dvou směrech.

Ve směru vedlejší diagonály kontrolních objemů dochází k numerické difúzi vždy, i při časovém kroku na hranici stability, ve směru hlavní diagonály při časových krocích menších než na hranici stability.

Směry rozptylu jsou dány geometrií sítě, nezávisí na směru rychlosti proudění.

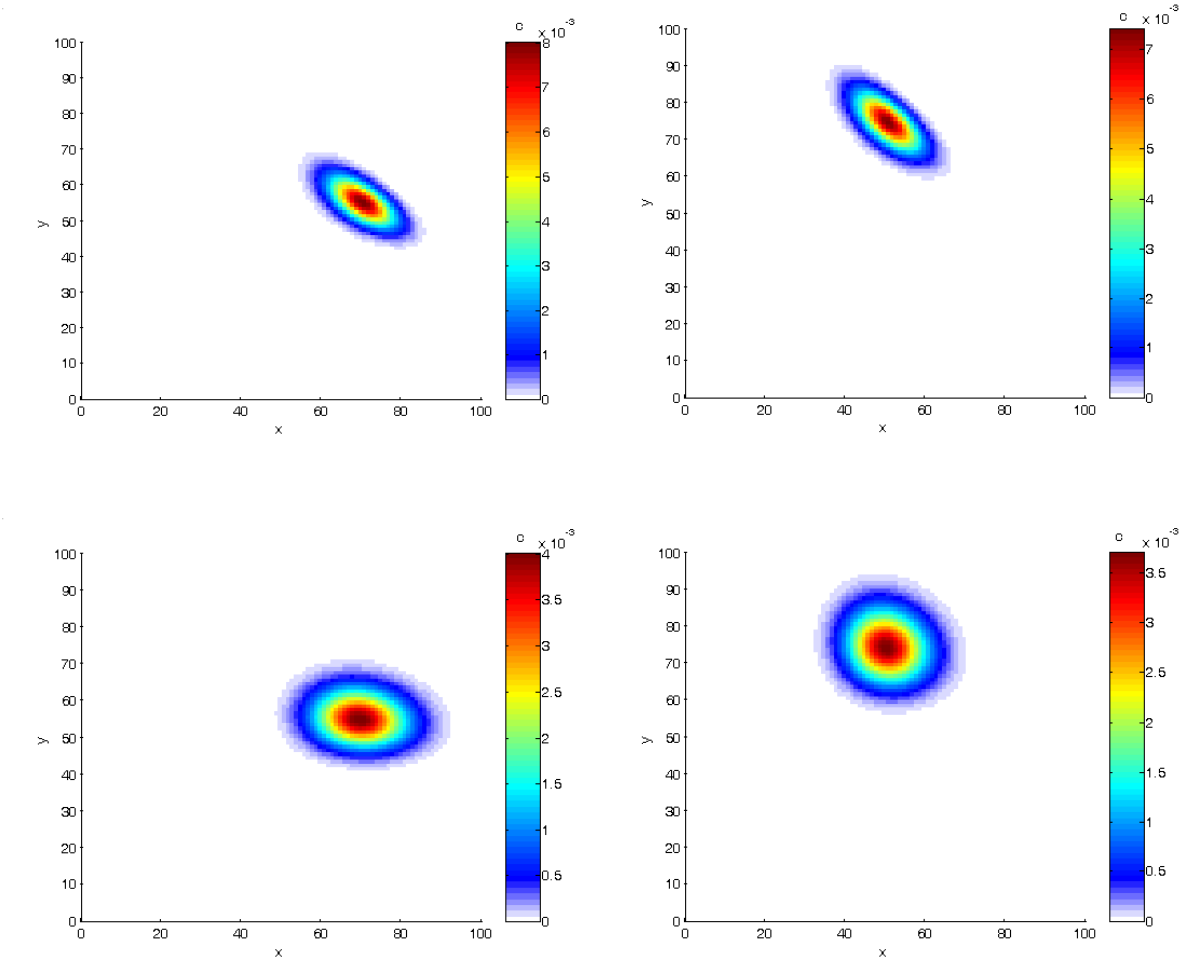
4.1.2.1.1 Koeficienty numerické difúze

V 1D se chyba numerické difúze chová jako řešení difúzní rovnice. Rychlost šíření kontaminantu mimo oblast analytického řešení numerickou difúzí lze stejně jako rychlost šíření kontaminantu vlivem difúze charakterizovat difúzním koeficientem. Jeho velikost závisí na diskretizačních krocích a velikosti rychlosti proudění.



(a) (b)

Obr. 4.6 – Vliv numerické ve čtvercové síti při výpočtu s časovým krokem
na hranici stability, Δt = 1, $\Delta x = \Delta y$ =1 (a) v_x = 0,7, v_y = 0,3 (b) v_x = 0,5, v_y = 0,5



(a) (b)

Obr. 4.7 – Vliv numerické difúze při časovém kroku menším než na hranici stability,
$\Delta x = \Delta y$ =1. Nahoře při časovém kroku Δt = 0,8, dole Δt = 0,2,
pod sebou při stejných rychlostech (a) v_x = 0,7, v_y = 0,3 (b) v_x = 0,5, v_y = 0,5

Ve 2D nelze charakterizovat vliv numerické difúze difúzním koeficientem, který by vyjadřoval chybu řešení konvekčního transportu jako analytické řešení konvekčně-difúzní rovnice. Směry rozptylu kontaminantu vlivem numerické difúze ve 2D jsou dány geometrií sítě. Dále se pokusíme se spočítat koeficienty, které by charakterizovaly rychlost tohoto rozptylu ve čtvercové síti.

Podle předpokladu, že se kontaminant numerickou difúzí ve čtvercové síti šíří ve směrech diagonál čtverců sítě, zavedeme v těchto směrech koeficienty numerické difúze. Ve směru vedlejší diagonály budeme nazývat koeficient numerické difúze „vedlejší" a značit D_v a ve směru hlavní diagonály „hlavní" a značit D_h. Při jejich výpočtu budeme uvažovat, že rozložení koncentrace kontaminantu rozptýleného ve směrech šíření numerické difúze lze vyjádřit vzorcem pro rozložení koncentrace při difúzním transportu.

Výpočet koeficientů numerické difúze

Vztah ze kterého vyjdeme při určování D_v a D_h je řešením difúzní rovnice v 1D

$$\frac{\partial c}{\partial t}(x,t) - D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}(x,t) = 0,\ (x,t) \in (-\infty,\infty)\times(0,T) \tag{4.16}$$

s počáteční podmínkou

$$c(x,0) = \frac{m_c}{\rho \Delta y}\delta(x - x_0), \tag{4.17}$$

kde $\delta(x)$ je Diracova funkce, m_c je celková hmota kontaminantu v oblasti, $D > 0$ je difúzní koeficient.

Řešení rovnice (4.16) s počáteční podmínkou (4.17) má tvar

$$c(x,D,t) = \frac{m_c}{2\rho\Delta y\sqrt{\pi D t}} e^{[-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt}]}. \tag{4.18}$$

[1]. V našem případě $m_c = 1$, $\rho = 1$, $\Delta y = 1$, $x_0 = 0$, pak

$$c(x,D,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D t}} e^{[-\frac{x^2}{4Dt}]}. \tag{4.19}$$

Vztah (4.19) dává do souvislosti koncentraci kontaminantu transportovaného difúzí ve vzdálenosti x od místa x_0, kde je kotaminant soustředěn v čase $t = 0$, velikost x, čas t, po který difúzní transport probíhal a velikost koeficientu difúze.

Při numerickém řešení rovnice konvečního transportu (4.15) s počáteční podmínkou (4.12) je v čase t kontaminant vlivem numerické difúze rozptýlen do vzdálenosti x od místa, kam má být podle analytického řešení zanesen prouděním. Kontaminant má v této vzdálenosti koncentraci *c*. Z velikosti koncentrace *c* ve vzdálenosti *x* ve směru hlavní a vedlejší diagonály v čase *t* se pokusíme pomocí vztahu (4.19) vypočítat koeficienty numerické difúze ve směrech diagonál D_v a D_h.

Vztah (4.19) popisuje difúzní transport při počáteční podmínce (4.18). Počáteční podmínkou rozptylu vlivem numerické difúze je počáteční podmínka (4.12) konvekční úlohy (4.15). Náhrada počáteční podmínky Diracovy funkce v oblasti rozložené na kontrolní objemy počáteční podmínkou (4.12) způsobí nepřesnost při určování difúzních koeficientů. Podmínka (4.12) je bližší řešení difúzní rovnice po krátkém čase než počáteční podmínce (4.18). Při výpočtu v delších časech můžeme chybu způsobenou náhradou počáteční podmínky (4.18) podmínkou (4.12) zanedbat a k výpočtu D_v a D_h vztah (4.19) použít.

Koeficienty numerické difúze vypočítáme z numerického řešení rovnice (4.15) pomocí vztahu (4.19) tak, že budeme měřit vzdálenost ve směrech diagonál od místa, kde má být podle analytického řešení koncentrace rovna jedné, tedy kde je numericky vypočtená koncentrace v oblasti maximální, po místo, kde klesne hodnota koncentrace rozptýleného kontaminantu na desetinu hodnoty maximální koncentrace. Ve vztahu (4.19) je koncentrace maximální pro x = 0, platí tedy

$$c_{\max} = \frac{1}{2\sqrt{\pi D t}}, \text{ pak}$$

$$c(x, D, t) = c_{\max} e^{[-\frac{x^2}{4Dt}]}.$$

Pokud $c(x,D,t) = 0{,}1c_{max},$ potom

$$D = \frac{{x_{10}}^2}{4t} \ln 10, \tag{4.20}$$

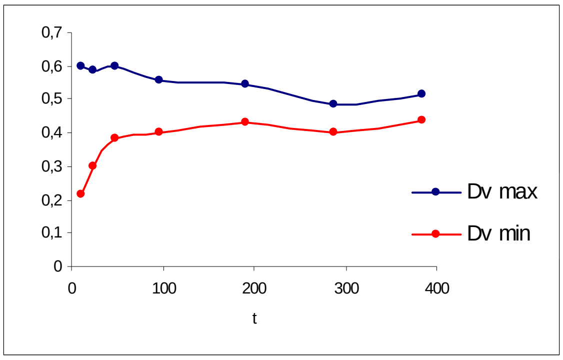
kde x_{10} je vzdálenost místa, kde má kontaminant rozptýlený vlivem numerické difúze koncentraci $c = 0{,}1c_{max}$, od kontrolního objemu, kde je podle analytického řešení koncentrace v čase *t* rovna jedné.

Z hodnot vypočtených v oblasti Ω diskretizované s krokem $\Delta x = \Delta y = 1$ určíme x_{10} jako $n.\sqrt{2}$, kde *n* je počet kontrolních objemů, ve kterých $c > 0{,}1\ c_{max,}$ od objemu, kde $c = c_{max,}$ takže

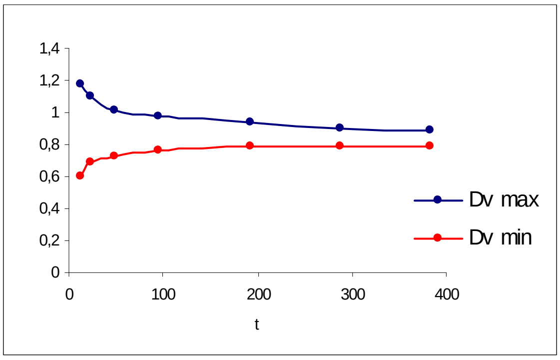
$$D_v = \frac{{n_v}^2}{2t} \ln 10,$$

$$D_h = \frac{{n_h}^2}{2t} \ln 10,$$

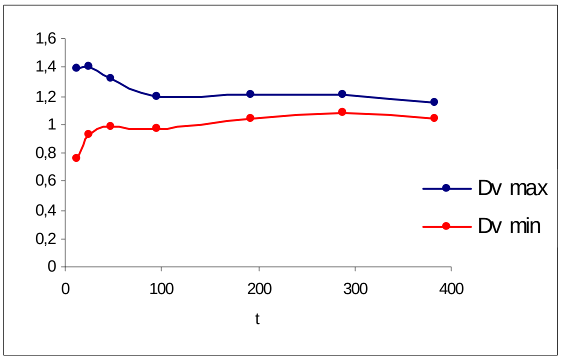
kde n_v a n_h jsou počty kontrolních objemů n ve směru vedlejší a hlavní diagonály.



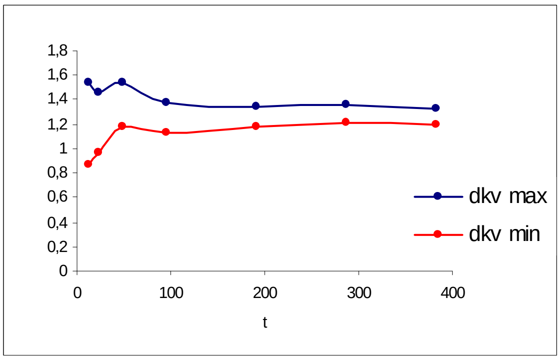
(a) $v_x = 0{,}9$ $v_y = 0{,}1$



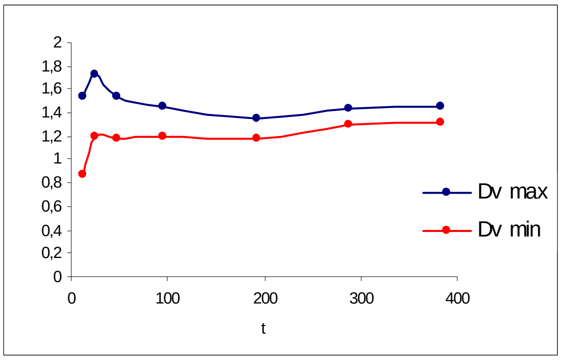
(b) $v_x = 0{,}8$ $v_y = 0{,}2$



(c) $v_x = 0{,}7$ $v_y = 0{,}3$



(d) $v_x = 0{,}6$ $v_y = 0{,}4$



(e) $v_x = 0{,}5$ $v_y = 0{,}5$

Obr. 4.8 – Závislost D_v na čase pro různé směry rychlosti proudění

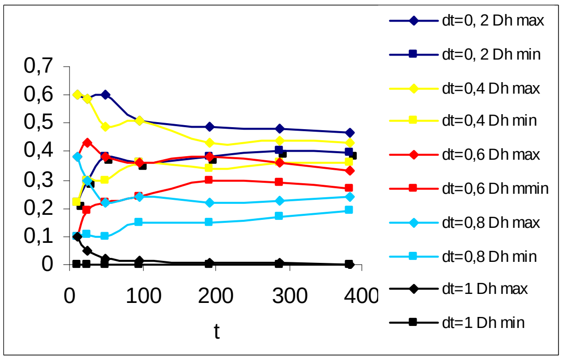
4.1.2.1.2 Diskuze výsledků

Koeficienty numerické difúze D_v a D_h jsme spočítali z řešení rovnice (4.15) s počáteční podmínkou (4.12) získaných modelem transportu v různých časech, vypočtených s použitím různých časových kroků a při různých směrech rychlosti proudění. V tomto odstavci ukážeme, jak D_v a D_h závisí na těchto parametrech.

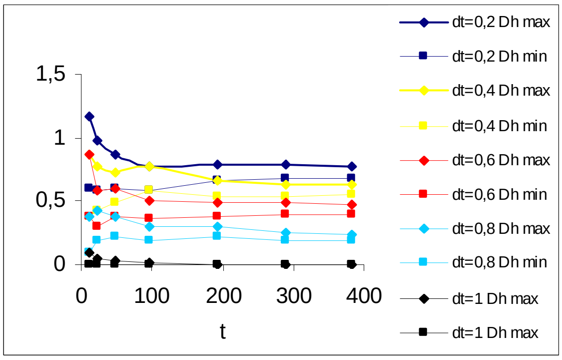
Závislost D_v a D_h na čase

Při určování vzdálenosti, po které koncentrace rozptýleného kontaminantu klesne na 0,1 c_{max}, z počtu kontrolních objemů o rozměrech $\Delta x = \Delta y = 1$ zjistíme hodnotu x s přesností $\pm\sqrt{2}/2$. Na obrázku 4.8 a 4.9 jsou závislosti mezních hodnot difúzních koeficientů

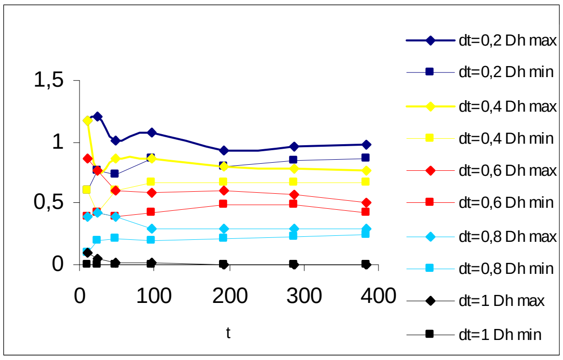
$$D_v = \frac{(n_v \pm 0{,}5)^2}{2t} \ln 10 \, , \; D_h = \frac{(n_h \pm 0{,}5)^2}{2t} \ln 10 \, .$$



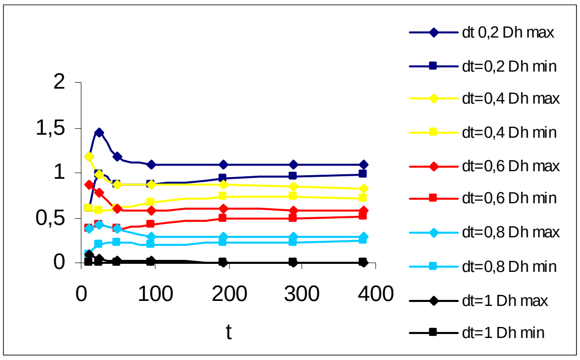
(a) $v_x = 0{,}9$ $v_y = 0{,}1$



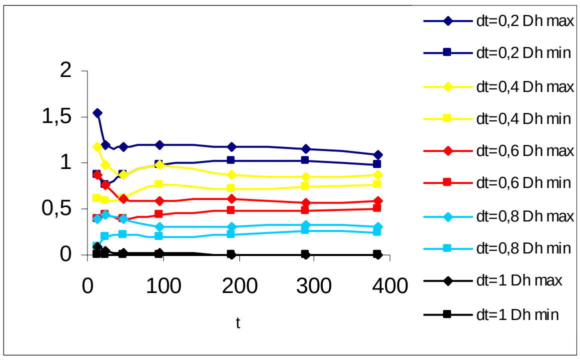
(b) $v_x = 0{,}8$ $v_y = 0{,}2$



(c) $v_x = 0{,}7$ $v_y = 0{,}3$



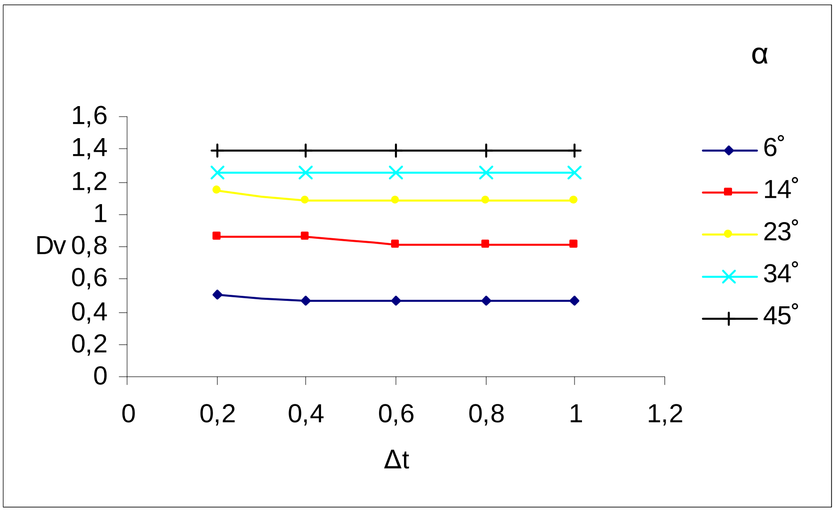
(d) $v_x = 0{,}6$ $v_y = 0{,}4$



(e) $v_x = 0{,}5$ $v_y = 0{,}5$

Obr. 4.9 – Závislost vedlejšího difúzního koeficientu na časovém kroku při různých směrech rychlosti proudění v čase $t = 384$.

Vedlejší difúzní koeficient D_v nezávisí na velikosti časového kroku (obr. 4.10). Roste se vzrůstajícím úhlem $\alpha = \mathrm{arctg}\dfrac{v_y}{v_x}$, jak je vidět s obrázku 4.8, kde jsou závislosti D_v na čase vyneseny při různých hodnotách v_x a v_y. Hlavní difúzní koeficient D_h s klesajícím časovým krokem i s úhlem rychlosti roste (obr. 4.9)



Obr. 4.10 – Závislost vedlejšího difúzního koeficientu na časovém kroku při různých směrech rychlosti proudění v čase t = 384.

Závislost hlavního difúzního koeficientu na časovém kroku

Při zmenšování časového kroku roste vliv numerické difúze ve směru hlavní diagonály, tedy hlavní difúzní koeficient roste s klesajícím časovým krokem.

Pro jednorozměrném proudění známe přibližný vztah mezi koeficientem numerické difúze a velikostí časového kroku při daných velikostech rychlosti proudění v_x a velikosti hrany kontrolního objemu Δx (2.16). Při poměru $v_x / \Delta x = 1$ se tento vztah zjednoduší na

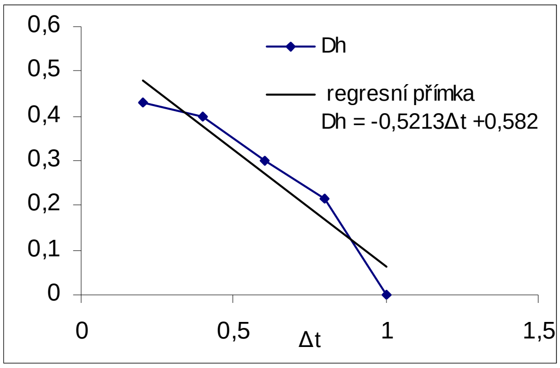
$$D_{num} \approx \frac{1}{2} v_x \Delta x (1 - \Delta t) \qquad (4.21)$$

Chceme zjistit, jestli pro závislost D_h na časovém kroku platí obdobný lineární vztah, ve kterém lze oddělit závislost na rychlosti, velikostech hran kontrolního objemu od velikosti časového kroku, jako v (4.21). Proto při výpočtu transportu volíme velikosti rychlostí v_x a v_y a diskretizační parametry Δx , Δy tak, aby byl časový krok na hranici stability, kdy D_{num} = 0, roven jedné jako je tomu v rovnici (4.21). Závislosti D_h na Δt za této podmínky pro různé směry rychlosti jsou na obr. 4.11

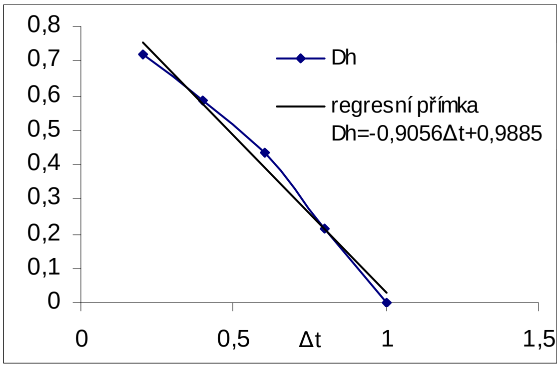
Z popisů závislostí D_h na časovém kroku pomocí regresních přímek usuzujeme, že závislost D_h na rychlosti a časovém kroku lze při poměrech rychlostí a hran sítě zvolených tak, aby byl časový krok na hranici stability rovný jedné, vyjádřit obdobně jako při jednodimenzionálním úloze v odděleném tvaru

$$D_h = f(\vec{v}, \Delta x, \Delta y)(1 - \Delta t), \tag{4.22}$$

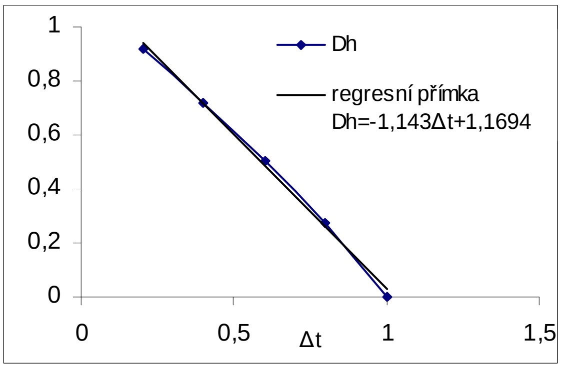
kde f je funkce rychlosti proudění a diskretizačních kroků sítě metody konečných objemů.



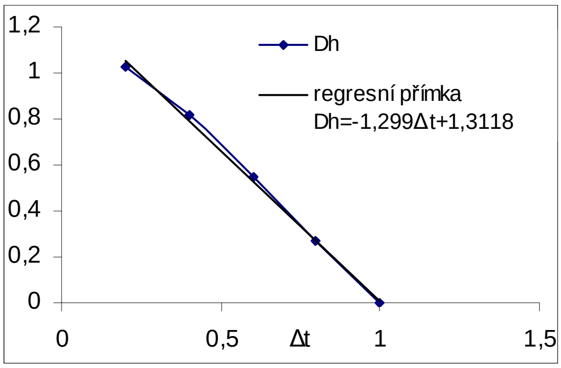
(a) $v_x = 0{,}9$ $v_y = 0{,}1$



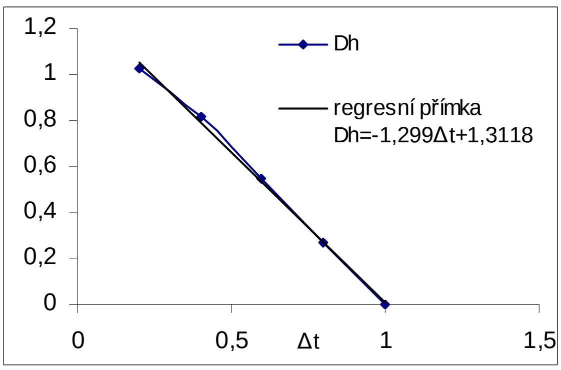
(b) $v_x = 0{,}8$ $v_y = 0{,}2$



(c) $v_x = 0{,}7$ $v_y = 0{,}3$



(d) $v_x = 0{,}6$ $v_y = 0{,}4$



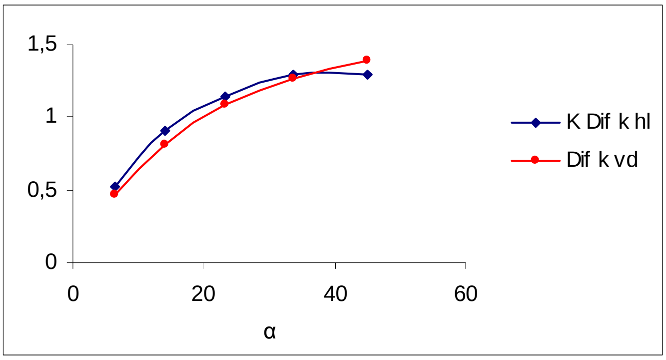
(e) $v_x = 0{,}5$ $v_y = 0{,}5$

Obr. 4.11 – Závislost D_h na časovém kroku při různých směrech rychlosti proudění

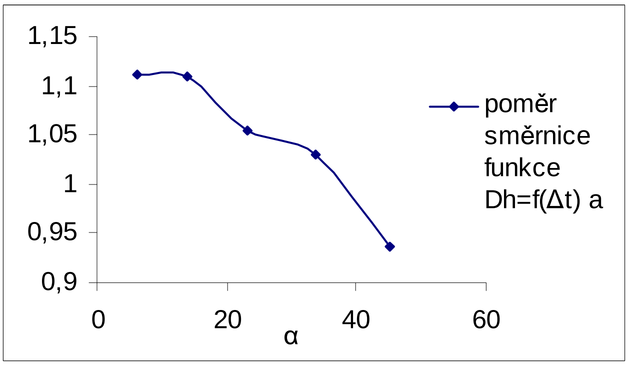
Závislost hlavního a vedlejšího difúzního koeficientu na směru rychlosti proudění

Vedlejší difúzní koeficient D_v nezávisí na časovém kroku, jen na směru rychlosti proudění. D_h závisí na časovém kroku i směru rychlosti. Tuto závislost lze ale vyjádřit ve tvaru (4.22), ve kterém je závislost na časovém kroku a směru rychlosti oddělená. Na směru rychlosti pak závisí směrnice přímky závislosti D_h na časovém kroku, kterou označíme k. Velikost vedlejšího difúzního koeficientu D_h a směrnice k přímky $D_h = f(\Delta t)$ v závislosti na směru rychlosti proudění je na obr 4.12.

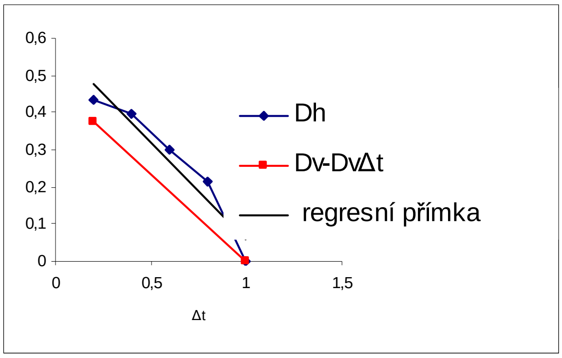
Závislosti směrnice k a D_v na směru rychlosti mají podobný průběh. Aby bylo jasnější v jakém jsou k a D_v vztahu, jestli lze jejich závislosti na směru rychlosti proudění považovat za shodné, vynesli jsme do grafu závislosti D_h na časovém kroku při daném úhlu α přímky D_v - D_v Δt , tedy ve vztahu $D_h = f(\Delta t)$ jsme nahradili směrnici k vypočtenou regresí koeficientem D_v (obr. 4.14). Při nejmenším úhlu rychlosti má přímka se směrnicí D_v výrazně menší sklon než $D_h = f(\Delta t)$, rozdíl sklonu se s rostoucím úhlem zmenšuje a pro úhel 45° je sklon D_v - D_v Δt větší než $D_h = f(\Delta t)$. Poměr k a směrnice přímky D_v - D_v Δt klesá s rostoucím úhlem (obr. 4.13), takže závislosti D_v a směrnice přímky $D_h = f(\Delta t)$ (obr.4.12) na úhlu rychlosti nejsou shodné.



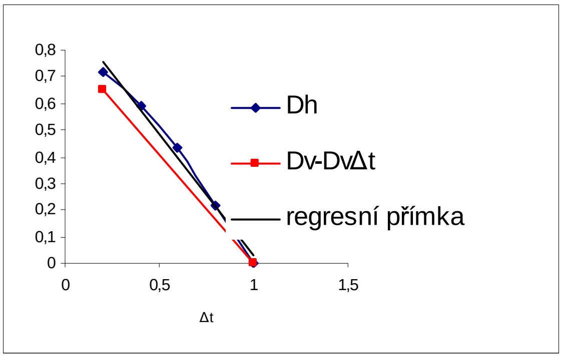
Obr. 4.12 – Závislost D_v a směrnice k přímky $D_h = f(\Delta t)$ na úhlu rychlosti α



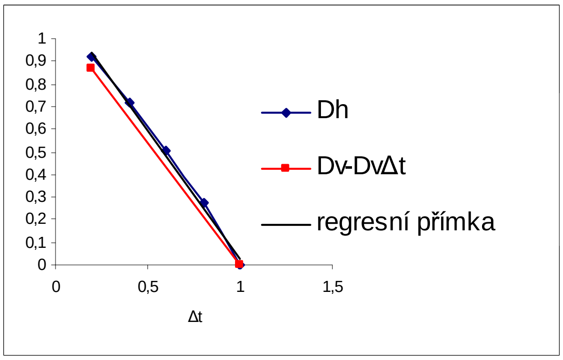
Obr. 4.13 – Poměr k/Dv v závislosti na směru rychlosti proudění



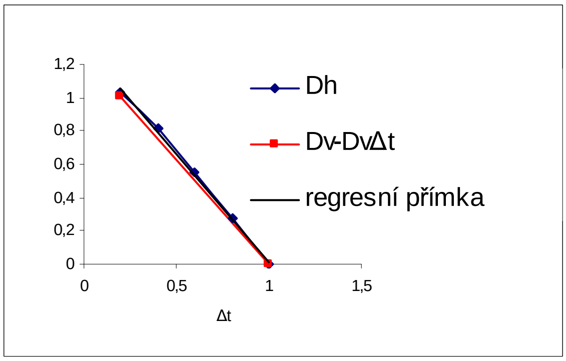
(a) $v_x = 0,9$ $v_y = 0,1$



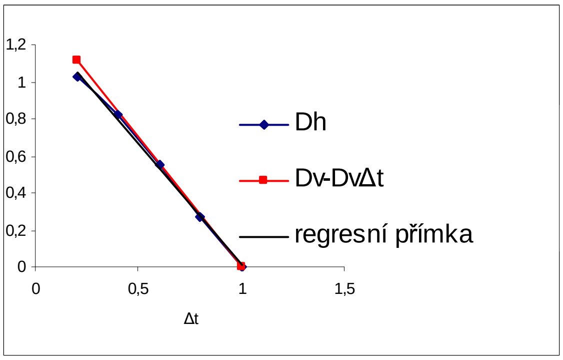
(b) $v_x = 0,8$ $v_y = 0,2$



(c) $v_x = 0,7$ $v_y = 0,3$



(d) $v_x = 0,6$ $v_y = 0,4$

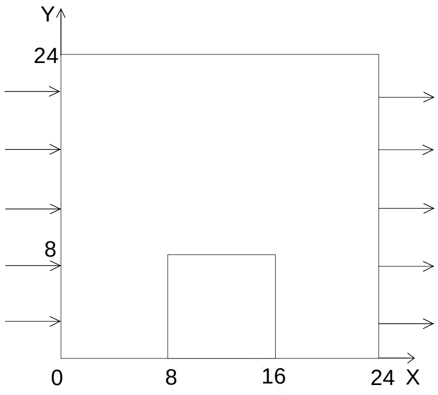


e) $v_x = 0,5$ $v_y = 0,5$

Obr. 4.14 – Závislosti D_h na časovém kroku při různých úhlech rychlosti α s vynesenou přímkou D_v -D_v Δt pro porovnání závislosti směrnice k funkce $D_h = f(\Delta t)$ a D_v na směru rychlosti proudění

4.2 Proudění v oblasti s překážkou

Transport byl počítán ve čtvercové oblasti $\Omega = \langle 0;24 \rangle \times \langle 0;24 \rangle$ s překážkou znázorněné na obr. 4.15. Plyn v oblasti proudí kolem překážky, takže $v_x(x,t) \neq \text{konst.}$ a $v_y(x,t) \neq \text{konst.}$



Obr. 4.15 – Oblast testovací úlohy s překážkou

Řešíme pak rovnice 2D transportu (4.9) a (4.10) v oblasti Ω a čase $t = < 0, T >$, v čase t = 0 jsou předepsány počáteční podmínky (4.11), (4.12) a na vstupní straně okrajové podmínky (4.13) a (4.14).

Z výpočtu modelu proudění známe v uzlech sítě diferenční metody hustotu plynu. K porovnání polí hustot vypočtených modelem proudění a transportu jsme měli k dispozici pouze výsledky prvního návrhu modelu proudění z ročníkového projektu [2]. Rychlostní pole vypočtené tímto modelem se po několika prvních krocích rozpadá a dochází k velkým oscilacím hustoty. Proto nebylo možné porovnání provést.

ZÁVĚR

V rámci bakalářské práce byl navržen a implementován model konvekčního transportu kontaminantu ve vzduchu ve 2D oblasti pomocí explicitní metody konečných objemů.

Model transportu navazuje na model proudění plynu řešený metodou konečných diferencí. Ten poskytuje modelu transportu rychlostní pole k výpočtu hustoty plynu a koncentrace kontaminantu. Uzly modelu proudění tvoří krajní body stěn kontrolních objemů. Rychlost proudícího plynu přes stěnu objemu je vypočtena jako aritmetický průměr rychlostí v uzlech modelu proudění tvořících hranici této stěny.

Pole rychlosti a hustoty plynu se při proudění vzájemně ovlivňují, proto je možné použití rychlostí předem vypočtených modelem proudění pro výpočet transportu, pokud jsou rozložení hustoty vypočtená oběma modely stejná.

Porovnání bylo provedeno jen pro 1D úlohu. Bylo zjištěno, že výkyvy hodnot rychlosti zesilují oscilace hustoty vypočtené metodou konečných objemů mnohem víc než hustoty vypočtené metodou konečných diferencí. Použít proudové pole vypočtené předem metodou konečných diferencí pro výpočet transportu metodou konečných objemů způsobem, jakým bylo použito v této práci, proto není možné.

V dalších testovacích úlohách bylo numerické řešení transportu porovnáno s analytickým a byla analyzovaná chyba numerické difúze ve čtvercové síti. Na základě předpokladu, že se ve čtvercové síti kontaminant vlivem chyby numerické difúze šíří ve směrech diagonál čtverců a rozložení koncentrací v těchto směrech odpovídá rozložení koncentrace při difúzním 1D transportu byly spočítány koeficienty charakterizující rychlost rozptylu kontaminantu způsobeného touto chybou. Diagonálu, podle které je rozložen kontaminant při výpočtu na hranici stability, jsme označili jako vedlejší a koeficient vyjadřující vliv numerické difúze v jejím směru „vedlejší difúzní koeficient“. Druhou diagonálu nazýváme hlavní a příslušný koeficient „hlavní difúzní koeficient“. Vliv numerické difúze vyjádřený velikostí těchto koeficientů byl pak posuzován v závislosti na časovém kroku a směru rychlosti proudění.

Z testovacích výpočtů vyplývá, že k numerické difúzi v hlavním směru při časovém kroku na hranici stability nedochází. S klesajícím časovým krokem pak vliv numerické difúze v tomto směru roste. Ve vedlejším směru dochází k numerické difúzi vždy, i při výpočtu s časovým krokem na hranici stability.

Velikosti rychlosti proudění byly v jednotlivých testovacích výpočtech voleny tak, aby byl časový krok na hranici stability rovný jedné, i když nebyla celková velikost rychlosti ve výpočtech úplně shodná. Chtěli jsme tak zjistit, zda je možné za této podmínky velikost difúzních koeficientů vyjádřit obdobně jako při 1D transportu součinem funkce časového kroku a funkce závisející na rychlosti proudění.

Z výpočtů vyplynulo, že velikost vedlejšího difúzního koeficientu na velikosti časového kroku nezávisí. Velikost hlavního difúzního koeficientu pak byla vynesena v závislosti na časovém kroku při různých směrech rychlosti proudění. Z vyjádření těchto závislostí pomocí regresních přímek jsme usoudili, že je možné obdobně jako u difúzního koeficientu při 1D transportu závislost hlavního difúzního koeficientu psát ve tvaru součinu funkce časového kroku a funkce závisející na rychlosti proudění. Hodnotu funkce závisející na rychlosti vypočtenou regresí, jsme pak vynesli spolu s vedlejším difúzním koeficientem v závislosti na úhlu rychlosti vzhledem k ose x, abychom porovnali, jak oba koeficienty závisí na směru proudění. Tyto závislosti mají podobný průběh. Když ale nahradíme ve vztahu závislosti hlavního difúzní koeficientu na časovém kroku hodnotu, která je funkcí rychlosti proudění, vedlejším difúzním koeficientem a vyneseme takto získané hodnoty v závislosti na časovém kroku při různých směrech proudění, je z porovnání se závislostí hlavního difúzního koeficientu na časovém kroku zřejmé, že závislost obou difúzních koeficientů na směru rychlosti není úplně shodná.

LITERATURA

[1] JIRÁNEK, Pavel. Numerický model difúze pro model transportu látek ve spalovacím motoru. Liberec 2003. 61 s. Diplomová práce na fakultě mechatroniky a mezioborových inženýrských studií Technické univerzity v Liberci. Vedoucí diplomové práce Jen Šembera.

[2] PLEŠINGER, Jakub. Návrh modelu proudění a transportu škodlivin v atmosféře. Liberec 2005. 28 s. Ročníkový projekt na fakultě mechatroniky a mezioborových inženýrských studií Technické univerzity v Liberci. Vedoucí ročníkového projektu Jen Šembera.