# Matematické metody pro fyzikální chemii

# Závěrečný projekt

Martin Pospíšil

## Zadání

Trubicí o průřezu pravidelného šestiúhelníka (plocha A) protéká newtonovská kapalina. Průtok je roven

$$I = C \frac{A^2}{\eta} \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}z},\tag{1}$$

kde  $\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}z}$ je tlakový gradient a  $\eta$ je viskozita. Stanovte konstantu C.

#### Teorie

Rovnice (1) je vyjádřením Hagenova-Poiseuilleova zákona, který popisuje ustálený laminární tok nestlačitelné newtonovské kapaliny potrubím o konstantním průřezu. Ze zákona vyplývá, že objemový průtok je přímo úměrný čtverci plochy potrubí a tlakovému gradientu a nepřímo úměrný viskozitě kapaliny. Konstanta úměrnosti pak závisí na průřezu potrubí.

V případě potrubí, které má nějakou pěknou symetrii – např. kruhovou – lze hodnotu konstanty C poměrně snadno určit analyticky z Navierovy-Stokesovy rovnice

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} = \nabla p + \eta \nabla^2 v + f, \tag{2}$$

kde v je rychlost,  $\rho$  je hustota a f vnější síla<sup>1</sup>. Rovncie (2) za podmínek platnosti Hagenova-Poiseuillova zákona (nulové zrychlení a absence vnějších sil) přejde na tvar

$$0 = \nabla p + \eta \nabla^2 v. \tag{3}$$

Zvolíme-li vhodně polární souřadný systém a orientaci, získáme integrací (3) (anebo alternativní úvahou vycházející z bilance sil) vztah pro rychlostní profil

$$v(r) = -\frac{1}{4\eta} \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}z} r^2 + v_0, \tag{4}$$

kde r je poloměr trubky. Z okrajové podmínky nulové rychlosti u stěny potrubí (v(R)=0) získáme integrační konstantu

$$v_0 = \frac{1}{4\eta} \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}z} R^2. \tag{5}$$

Objemový průtok je pak integrálem rychlostního profilu přes celou plochu potrubí

$$I = \int_0^{2\pi} \int_0^R \frac{1}{4\eta} \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}z} (R^2 - r^2) \, \mathrm{d}r \, \mathrm{d}\varphi = \frac{\pi R^4}{8\eta} \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}z} = \frac{A^2}{8\pi\eta} \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}z}. \tag{6}$$

Porovnáním s (1) zjistíme, že

$$C_{\text{kruh}} = \frac{1}{8\pi} \doteq 0,03979 \tag{7}$$

Podobné, jen o něco složitější, je odvození v případě elipsy, pro kterou vychází také celkem pěkný analytický tvar

$$C_{\text{elips}} = \frac{1}{4\pi} \frac{ab}{a^2 + b^2},\tag{8}$$

 $<sup>^1</sup>$ Znaménko u členu gradientu tlaku závisí na použité uzanci. Aby platila rovnice (1), uvažuje se gradient v kladném smyslu

kde a, b jsou polosy elipsy.

V případě jiných útvarů je již analytické odvození buď velmi složité nebo je tvar výsledku značně nepřehledný. V literatuře je ještě občas k dohledání analytický vztah pro potrubí čtvercového průřezu:

$$I = \frac{wh^3}{12\eta} \frac{dp}{dz} \left[ 1 - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{192}{\pi (2n+1)^5} \frac{h}{w} \tanh\left(\pi (2n+1) \frac{w}{2h}\right) \right],\tag{9}$$

odkud vyplývá

$$C_{\text{rect}} = \frac{1}{12\eta} \frac{h}{w} \left[ 1 - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{192}{\pi (2n+1)^5} \frac{h}{w} \tanh\left(\pi (2n+1) \frac{w}{2h}\right) \right] \doteq 0,03514$$
 (10)

kde h a w jsou šířka a výška potrubí.

Ukazuje se, že konstanta úměrnosti je největší pro potrubí kruhového průřezu a klesá tím víc, čím je tvar potrubí "dále" od kruhového. To dává smysl, např. v potrubích pravoúhlého průřezu se v ostrých rozích kapalina pohybuje velmi pomalu, což při ekvivalentním průřezu vede k nižšímu průtoku. Dalo by se tedy čekat, že hodnota konstanty pro šestiúhelníkovou trubku se bude nacházet někde mezi hodnotou odpovídající kruhu a čtverci.

#### Numerické řešení

Z důvodu obtíží při analytickém řešení je tedy jednodušší uchýlit se k řešení numerickému, pomocí metody sítí. Konstantu C získáme přímo, pokud budeme řešit rovnici (3) pro jednotkovou viskozitu a jedntkový tlakový gradient na průřezu normovaném na jednotku,

$$\nabla^2 v(x, y) + 1 = 0, (11)$$

její číselná hodnota bude v takové případě shodná s hodnotou objemového průtoku I.

#### Tvar sítě

Vzhledem k nepříjemnému tvaru je vhodné zvolit jinou než pravoúhlou síť. Nabízí se síť uzlů, tvořící rovnostranné trojúhelníky. Ovšem pozor – je nutné si uvědomit, že buňky této sítě nejsou trojúhelníky, ale rovnostranné šestiúhelníky, centrované kolem daného uzlu. Seskládáním takových šestiúhelníkových polí sice nevznikne přesný šestiúhelníkový profil, nicméně se zjemňováním dělení půjde chyba ve výpočtu objemového průtoku k nule.

Rektorys pro tuto síť uvádí vzorec

$$v_0 = \frac{1}{6}(v_1 + v_2 + v_3 + v_4 + v_5 + v_6) - \frac{1}{4}h^2 f_0 - \frac{1}{64}h^4 \Delta f_0, \tag{12}$$

kde  $\nabla^2 v_0(x,y) = f_0$ . Jedná se tedy o metodu s řádem přesnosti 4, ale vzhledem k tomu, že  $f_0 = 1$ , poslední člen vypadne. Okrajová podmínka se zavede tak, že všechny uzly B, které tvoří okraj šestiúhelníku, platí  $v_{\rm B} = 0$ .

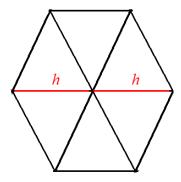
#### Délka kroku a obsah pole

Pro rovnostranný šestiúhelník se stranou délky a, platí pro výšku strany  $r_v$  a obsah S

$$r_v = \frac{\sqrt{3}}{2}a,$$
  $S = \frac{3\sqrt{3}}{2}a^2.$  (13)

Budeme-li uvažovat šestiúhelníkové potrubí tvořené reprezentované trojúhelníčky s vrcholy v jednotlivých uzlech a použijeme-li takové dělení, kdy (k+1) uzlů rozdělí "průměr" šestiúhelníku na k úseků (smysl má pouze k sudé) a přitom pro celkovou plochu bude platit A=1, dostaneme:

$$h = \frac{2}{k} \sqrt{\frac{2}{3\sqrt{3}}},\tag{14}$$



Obrázek 1: Určení délky kroku h v závislosti na jemnosti dělení

Pro výšku strany jednotlivých buněk pak platí

$$r_v = \frac{h}{2} \tag{15}$$

a z rovnice (13) dostáváme

$$a = \frac{h}{\sqrt{3}}, \qquad S = \frac{\sqrt{3}}{2}h^2 = \frac{4}{3k^2}$$
 (16)

### Implementace numerického řešení

Řešení úlohy jsem naprogramoval v jazyce Fortran 77. Vstupními parametry jsou počet šestiúhelníkových "vrstev" kolem centrálního uzlu² (který je roven k/2) a hodnota relaxačního faktoru  $\omega$ . Výstupem je na obrazovce informace o jemnosti dělení k, hodnota celkového objemového průtoku I, počet uzlů sítě pro dané dělení, délka kroku  $h^3$  a počet iterací než výpočet zkonvergoval. Dále se do externího souboru velocity\_profile.dat uloží data o rychlostním profilu která se dají zobrazit např programem qnuplot.

Síť pro výpočet jsem jsem zkonstruoval zkosením původní trojúhelníkové sítě, takže lze s výhodou použít standardní indexovaná pole, jak ukazuje obázek 2. Pro výpočet rychlosti v uzlu (i,j) v  $(\tau+1)$ -té iteraci s relaxačním faktorem  $\omega$  dostaneme vztah

$$v_{i,j}^{(\tau+1)} = \left[\frac{1}{6} \left(v_{i-1,j}^{(\tau)} + v_{i+1,j}^{(\tau)} + v_{i,j-1}^{(\tau)} + v_{i,j+1}^{(\tau)} + v_{i-1,j+1}^{(\tau)} + v_{i+1,j-1}^{(\tau)}\right) + \frac{1}{4}h^2\right] \cdot \omega + v_{i,j}^{(\tau)} \cdot (1 - \omega) \quad (17)$$

s okrajovou podmínkou

$$v_{\rm B}^{(\tau)} = 0 \qquad \forall \tau \tag{18}$$

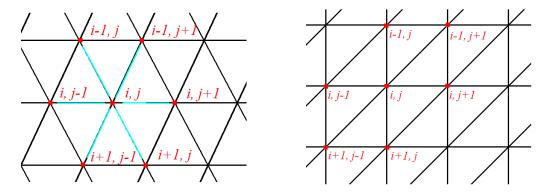
Objemový průtok pro  $\tau$ -tou se získáme sumací součinů rychlostí v uzlech sítě s objemem šestiúhelníkové buňky přes všechny buňky sítě

$$I^{(\tau)} = S \sum_{i,j} v_{i,j}^{(\tau)} \tag{19}$$

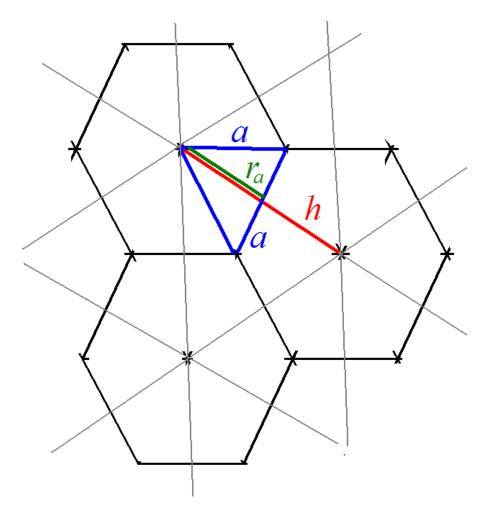
a pokud výpočet zkonverguje, limitní hodnota I se bude rovnat konstantě C. Výpočet je prováděn způsobem, že nejprve se spočtou  $v_{i,j}^{(\tau+1)}$  pro všechna (i,j) a teprve pak se kopíruje do  $v_{i,j}^{(\tau)}$ .

# Výsledky

Tabulka 1 a Graf 4 ukazují závislost vypočtené hodnoty C na jemnosti dělení k. Hodnoty konvergují k  $C_{\text{hex}} \doteq 0,03833$ , což odpovídá očekávání, neboť tato hodnota se nachází mezi  $C_{\text{rect}}$  a  $C_{\text{kruh}}$ .



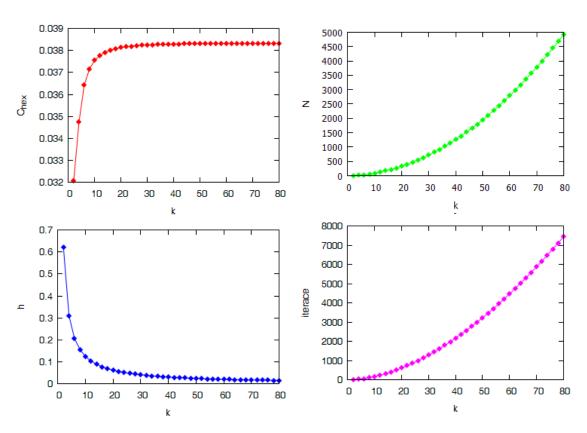
Obrázek 2: Uspořádání sítě - původní a zkosené



Obrázek 3: K výpočtu plochy jednotlivých buněk

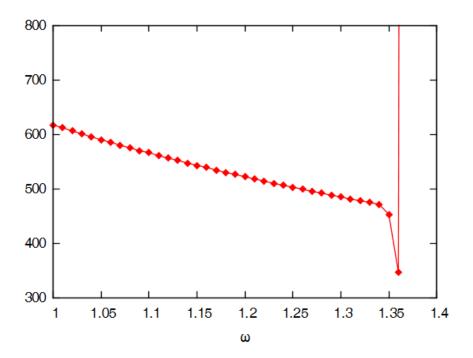
Tabulka 1: Závislost výsledků výpočtu na jemnosti dělení

			gooda ma jommood	
k	$C_{ m hex}$	N	h	iterací
2	0,032075	7	0,620403	1
10	0,037552	91	$0,\!124081$	171
20	0,038130	331	0,062040	617
30	0,038248	721	0,041360	1290
40	0,038291	1261	0,031020	2167
50	0,038310	1951	0,024816	3232
60	0,038319	2791	0,020680	4472
70	0,038324	3781	$0,\!017726$	5876
80	0,038327	4921	0,015510	7437



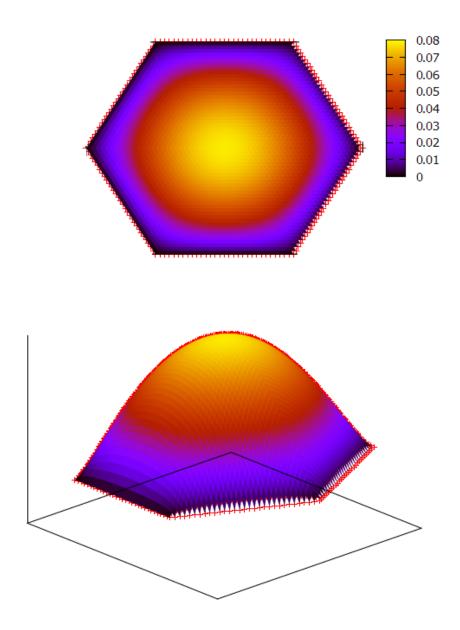
Obrázek 4: Závislost  $C_{\rm hex},\,N,\,h$ a počtu iterací na k

Obrázek ukazuje závislost potřebného počtu iterací pro dosažení konvergence při použití relaxačního faktoru  $\omega$ . Je z něj patrné, že při superrelaxaci  $\omega>1,36$  začne výpočet divergovat.



Obrázek 5: Závislost počtu iterací na relaxačním faktoru

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>proměnná HexRings <sup>3</sup>proměnná StepSize



Obrázek 6: Rychlostní profil pro $k=40\,$