3.4 Numerické metody dynamiky plynů

K řešení konkrétních úloh dynamiky plynů např. v astrofyzice musíme často užívat numerického modelování. Existuje řada různých osvědčených metod, které lze k tomuto účelu zvolit, a lze poměrně snadno vytvořit další, více či méně odlišné. Proto se zde nebudeme snažit o systematický přehled a výklad všech metod a raději si na několika vybraných metodách ukážeme jejich vlastnosti a problémy spojené s jejich užíváním. V zásadě však numerické metody vycházejí z modelování plynu buď kontinuem, popsaným parciálními diferenciálními rovnicemi, nebo velkým počtem částic splňujících pohybové rovnice (existuje ovšem i řada metod smíšených). O obou těchto přístupech existuje velké množství literatury (např. [?] pro síťové metody).

V případě spojitého popisu prostředí můžeme proměnné veličiny numericky reprezentovat jejich hodnotami v jisté prostorové síti, nebo rozvojem do vhodného systému funkcí. Druhý přístup bývá výhodný když vychází z jisté (alespoň přibližné) symetrie úlohy a snižuje tak její dimenzi (za cenu většího počtu proměnných, který je však stále menší než počet uzlů sítě potřebných k reprezentaci potlačené dimenze). Parciální diferenciální rovnice, ke kterým úloha v obou případech vede (pokud rozvojem nepotlačíme např. všechny prostorové dimenze a nedostaneme tak soustavu obyčejných diferenciálních rovnic), bývá zvykem klasifikovat jako eliptické (např. Poissonova rovnice $(\partial_x^2 + \partial_y^2)F(x,y) = Q(x,y)$), parabolické (např. rovnice difuze $(\partial_t + C\partial_x^2)F(t,x) = 0$) a hyperbolické (např. vlnová rovnice $(\partial_t^2 - c^2\partial_x^2)F(t,x) = 0$). Z numerického hlediska je mezi nimi rozdíl v tom, že první dává 'problém okrajových podmínek' vyžadující self-konzistentní statické řešení ve všech proměnných, zatím co druhé dva typy dávají tzv. 'Cauchyho problém' ('počátečních podmínek'), umožňující postupnou integraci časového vývoje. Právě tímto případem se budeme v následujícím zabývat.

3.4.1 Metody sítí

Hydrodynamické rovnice a další rovnice, které s nimi mohou být případně svázány (např. Maxwellovy rovnice pro elektromagnetické pole, nebo Poissonova rovnice pro newtonovský gravitační potenciál), tvoří zpravidla soustavu parciálních diferenciálních rovnic prvního řádu. Pokud jsou totiž některé diferenciální rovnice vyššího řádu, lze je vhodnými substitucemi a doplněním definičních rovnic převést na rovnice prvního řádu pro větší počet proměnných (např. Poissonovu rovnici pro potenciál označením gradientů potenciálu jako intenzit pole).

Stabilitu řešení takové soustavy rovnic samotné i různých diferenčních schémat užitých k jejímu numerickému řešení můžeme vyšetřovat pomocí tzv. von Neumannovy analýzy lokální stability, tj. studiem chování amplitud jednotlivých fourierovských modů poruch řešení. Předpokládejme, že rovnice mohou být zapsány v eulerovských souřadnicích ve tvaru

$$\partial_t u + \partial_x F(u) + G(u) = 0 \,. \tag{3.164}$$

Proměnná u je obecně vícesložková množina – 'vektor' (ve smyslu pole v programovacích jazycích, nikoliv z hlediska diferenciální geometrie) stavových veličin, $F(u)$ představuje toky těchto veličin a $G(u)$ zdrojové členy. Pokud by soustava nebyla lineární v u, můžeme ji napřed linearizovat do tvaru

$$\partial_t u = L(u) = Au + B\partial_x u \,, \tag{3.165}$$

kde L je lineární diferenciální operátor, tj. A a B jsou matice.[25] Potom pro Fourierovu transformaci $\tilde{u}$ (kde $u(t,x) = \int \tilde{u}(t,k)\mathrm{e}^{ikx}dk$) dostáváme rovnici

$$\partial_t \tilde{u} = A\tilde{u} + ikB\tilde{u} \,, \tag{3.166}$$

[25]Pokud soustava lineárních rovnic (3.165) obsahuje na pravé straně absolutní člen, vyšetřujeme napřed chování homogenní soustavy.

která má formální řešení

$$\tilde{u}(t,k) = \exp(At + ikBt)\tilde{u}(0,k) \ . \tag{3.167}$$

Rozložíme-li tedy vektor u do vlastních vektorů matice $A+ikB$, pak jeho složky odpovídající vlastním hodnotám se zápornou reálnou částí budou exponenciálně tlumené a s kladnou exponenciálně porostou.

Nahradíme-li soustavu diferenciálních rovnic (3.165) diferenčními rovnicemi

$$u_j^{n+1} = \sum_{l=-m}^{+m} C_l u_{j+l}^n \tag{3.168}$$

a $u_j^n = u(n\Delta t, j\Delta x)$ rozložíme v x do Fourierovy řady $u_j^n = \sum_k \tilde{u}_k^n \mathrm{e}^{ikj\Delta x}$, pak v analogii s (3.167) dostaneme

$$\tilde{u}_k^n = \left(\sum_{l=-m}^{+m} C_l \mathrm{e}^{ikl\Delta x} \right)^n \tilde{u}_k^0 \ . \tag{3.169}$$

Každý mod tedy opět bude klesat nebo poroste podle velikosti absolutní hodnoty příslušné vlastní hodnoty matice $\sum_{l=-m}^{+m} C_l \mathrm{e}^{ikl\Delta x}$.

Jako příklad vyšetřujme nejprve soustavu rovnic kontinuity (3.59) a pohybové rovnice (3.61) s nulovými srážkovými členy v jedné prostorové dimenzi,

$$u = \begin{pmatrix} \rho \\ \pi \end{pmatrix} , \qquad F(u) = \begin{pmatrix} \pi \\ T \end{pmatrix} , \qquad G(u) = \begin{pmatrix} 0 \\ \rho\Phi' \end{pmatrix} , \tag{3.170}$$

kterou uzavřeme algebraickou rovnicí (3.11)

$$T = \frac{\pi^2}{\rho} + P(\rho) \tag{3.171}$$

pro celkový tenzor napětí T při známé stavové rovnici $\tau^{ij} = P(\rho)\delta^{ij}$ pro tlak P ve vlastní soustavě kontinua. Rovnice (3.165) má tedy tvar

$$\partial_t \begin{pmatrix} \rho \\ \pi \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \Phi' & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho \\ \pi \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ c^2 - v^2 & 2v \end{pmatrix} \partial_x \begin{pmatrix} \rho \\ \pi \end{pmatrix} , \tag{3.172}$$

kde $v = \frac{\pi}{\rho}$ je rychlost proudění kontinua a $c^2 \equiv \frac{\partial P}{\partial \rho}$ je čtverec rychlosti zvuku (při stavové rovnici $P(\rho)$) v klidové soustavě kontinua. Po Fourierově transformaci tedy bude mít matice na pravé straně rovnice (3.166) tvar

$$A + ikB = - \begin{pmatrix} 0 & ik \\ ik(c^2 - v^2) + \Phi' & 2ikv \end{pmatrix} . \tag{3.173}$$

Vlastní hodnoty této matice jsou

$$\lambda_\pm = -ik \left(v \pm c\sqrt{1 - i\frac{\Phi'}{kc^2}} \right) , \tag{3.174}$$

a vlastní vektory

$$u_\pm(k) = - \begin{pmatrix} ik \\ \lambda_\pm \end{pmatrix} . \tag{3.175}$$

Tabulka 3.1: Chyby metody FTCS

$k\Delta x$	$ck\Delta t$	v/c	$\cos^{-1} vk\Delta t$
10°	10°	.985	1.015
30°	30°	.886	1.118
90°	90°	.500	1.414
90°	45°	.590	$1.118{=}1.25^{1/2}$
90°	10°	.634	$1.006{=}1.057^{1/9}$

Řešení (3.167) tak bude představovat zvukové vlny s vlnovým vektorem k a frekvencemi $\Im(\lambda)$, to znamená postupující rychlostmi $v \pm c$ (v je rychlost unášení prouděním a c je rychlost zvuku ve vlastní soustavě kontinua). Pokud je $\Phi' \neq 0$, pak amplituda jedné z těchto vln s časem exponenciálně roste a druhá klesá (podle znaménka $\Re(\lambda)$).

Toto chování jednotlivých fourierovských modů samotné soustavy diferenciálních rovnic i chování její aproximace pomocí různých diferenčních schémat k numerickému modelování časového vývoje kontinua můžeme vyšetřovat i na velmi jednoduchém příkladu daném parciální diferenciální rovnicí

$$\partial_t u + c\partial_x u = 0 \tag{3.176}$$

pro skalár u, jejíž řešení má tvar konstantní obecné vlny

$$u_j^n \equiv u(t_n, x_j) = u_0(x_j - ct_n) \tag{3.177}$$

pohybující se rychlostí c.

FTCS Patrně nejelementárnější metoda řešení spočívá ve vyjádření časové derivace funkce u z pohybové rovnice pomocí ostatních členů a v postupném přičítání k počátečním hodnotám u_0 v každém bodě přírůstků $\Delta t \partial_t u$ odpovídajících konstantnímu časovému kroku Δt. Prostorové derivace přitom nahradíme konečnými diferencemi (proto název *forward time – centered space*), takže v případě rov. (3.176) dostáváme rekurentní vztahy

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{c\Delta t}{2\Delta x}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) \ . \tag{3.178}$$

Jestliže například počáteční podmínka má tvar $u_0(x) = \sin kx$, pak se s pomocí součtových vzorců můžeme úplnou indukcí přesvědčit, že

$$u_j^n = \cos^{-n}(vk\Delta t)\sin(kx_j - vkt_n) \ , \tag{3.179}$$

kde

$$\mathrm{tg}(vk\Delta t) = \frac{c\Delta t}{\Delta x}\sin(k\Delta x) \ . \tag{3.180}$$

Tento výsledek souhlasí s přesným řešením (3.177) pouze v limitě $\Delta x \to 0$ a $\Delta t \to 0$, kdy $v \equiv c$. Pro konečné diference však vidíme (např. v tab. 3.1), že vlny s kratší vlnovou délkou postupují menší rychlostí v a jejich amplituda roste. Protože počáteční tvar u_0 obecné neharmonické vlny můžeme rozložit na jednotlivé fourierovské složky, které se pak díky disperzi rychlosti $v = v(k)$ budou rozbíhat a díky členu $\cos^{-n}(vk\Delta t)$ jejich amplitudy porostou rozdílnou rychlostí, je zřejmé, že vadou integračního schématu se bude tvar vlny měnit.

V případě FTCS schématu (3.178) pro naši modelovou rovnici (3.176) dostáváme ve shodě s (3.179) a (3.180)

$$\tilde{u}_k^n = \left(1 - i\frac{c\Delta t}{\Delta x}\sin k\Delta x\right)^n \tilde{u}_k^0 \ , \tag{3.181}$$

tj. tím rychlejší divergenci všech modů, čím větší je tzv. Courantovo číslo $C = \frac{c\Delta t}{\Delta x}$. V důsledku této numerické nestability se mohou např. hodnoty v sudých a lichých bodech neustále navzájem vzdalovat, aniž by to schéma (3.178), ve kterém se tyto soustavy bodů navzájem ovlivňují pouze prostřednictvím svých prostorových derivací (a nikoliv svojí celkovou velikostí), mohlo kompenzovat. K potlačení této nestability je proto třeba do integračního schématu zavést jisté středování.

Laxovo schéma Jednu z nekonečně mnoha možností dává tzv. Laxovo schéma vyjádřené rekurentním vztahem

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2}(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) - \frac{c\Delta t}{2\Delta x}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) \,. \tag{3.182}$$

Metodou von Neumannovy analýzy stability odtud můžeme vyjádřit rekurentní vztah pro fourierovské složky

$$\tilde{u}_k^{n+1} = \left(\cos k\Delta x - i\frac{c\Delta t}{\Delta x}\sin k\Delta x\right)\tilde{u}_k^n \,, \tag{3.183}$$

odkud je zřejmé, že v tomto schématu jsou všechny mody stabilní zvolíme-li $C^2 \leq 1$. Rovnici (3.182) můžeme také přepsat ve tvaru

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{c\Delta t}{2\Delta x}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \frac{1}{2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \,, \tag{3.184}$$

který se od (3.178) liší přídavným třetím členem. Tento člen je úměrný diferenčně vyjádřené druhé derivaci u, která zjevně přispívá k potlačení oscilací funkce u. Takovýto člen nazýváme numerickou (umělou) viskozitou.

Laxovo – Wendroffovo schéma Velikost numerické viskozity lze zvolit také tak, aby výsledné schéma bylo přesné do druhého řádu Taylorova rozvoje podle Δt

$$u_j^{n+1} = u(t_n + \Delta t, x_j) = u_j^n + \Delta t \partial_t u(t_n, x_j) + \frac{1}{2}(\Delta t)^2 \partial_{tt}^2 u(t_n, x_j) \,. \tag{3.185}$$

Podle vlnové rovnice, kterou dostaneme derivováním (3.176), totiž $\partial_{tt}^2 u = -c\partial_{tx}^2 u = c^2\partial_{xx}^2 u$, takže tuto vlastnost má schéma

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{c\Delta t}{2\Delta x}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \frac{c^2(\Delta t)^2}{2(\Delta x)^2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \tag{3.186}$$

zavedené Laxem a Wendroffem.

Schéma upwind Další velmi jednoduchou možností je schéma počítající prostorové diference asymetricky ‘po proudu’ (upwind, upstream)

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{c\Delta t}{\Delta x}(u_j^n - u_{j-1}^n) \,, \tag{3.187}$$

které můžeme přepsat v symetrizovaném tvaru

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{c\Delta t}{2\Delta x}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \frac{|c|\Delta t}{2\Delta x}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \,. \tag{3.188}$$

Cvičení 4 *Proveďte von Neumannovu analýzu stability numerického schématu*

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{C}{2}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \sigma(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)$$

s obecnou numerickou viskozitou σ a aplikujte ji na výše uvedená nebo další schémata.

3.4.2 N-částicové metody

Alternativní metodou k popisu dynamiky velkého souboru částic (např. atomů plynu nebo hvězd v galaxii) jako kontinua pomocí hydrodynamických, tj. parciálních diferenciálních rovnic, je jeho reprezentace pomocí souřadnic velkého počtu částic, pro které řešíme pohybové rovnice. Nízká výpočetní kapacita nás zpravidla nutí omezit se na počet bodů, který je o mnoho řádů nižší, než skutečný počet studované soustavy. Každá počítaná částice v tom případě představuje podstatně větší počet částic. Tomu je třeba přizpůsobit především započtení vzájemné interakce částic. Konkrétní naprogramování výpočtu může pracovat buď s trvale sledovanými částicemi, nebo může používat různé varianty metody Monte Carlo s náhodně generovanými, nebo náhodně interagujícími částicemi. Výhodou částicových modelů ve srovnání se síťovými metodami je okolnost, že nemarní výpočetní čas na modelování vývoje v oblastech s velmi nízkou hustotou, které nemohou prakticky ovlivnit řešení v hustých oblastech prostoru.

N-particle simulations. Přímočaré programové implementace simultánního řešení pohybových rovnic zpravidla počítají s řádově 10^4 částic. Jsou výhodné zejména pro modelování systémů se slabými binárními interakcemi (hvězdokupy, galaxie, velkorozměrová struktura v kosmologii). Zrychlení jednotlivých částic v důsledku binární interakce silně vzrůstá při blízkých setkáních s jinými částicemi. Proto jsou výhodné programy s možností proměnného časového kroku, voleného pro každou částici podle její okamžité vzdálenosti od nejbližších sousedů. Úspora strojového času na slabě interagujících částicích pak umožňuje zvýšit o řád počet sledovaných částic.

PIC – Particles in cell. Strojový čas potřebný k výpočtu zrychlení při explicitním zahrnutí všech binárních interakcí (rovněž i jenom výpočet vzájemných vzdáleností, který by umožnil odhadnout, které interakce mohou být zanedbány) roste u N-částicových metod jako N^2. Proto může být výhodné kombinovat částicovou metodu se síťovou metodou – rozdělit prostor na objemové buňky, pro každou částici určovat, ve které buňce se okamžitě nachází, a explicitně počítat pouze její interakci s částicemi v téže nebo sousední buňce, zatímco interakce s ostatními se berou jako násobek počtu částic ve vzdálené buňce a interakci s charakteristickou částicí ve středu oné buňky. Podobného efektu lze dosáhnout i sdružováním vzdálených částic do jistých kup, nebo např. nahrazením blízkých binárních interakcí náhodnými srážkami a vzdálených interakcí s kolektivním polem počítaným metodou sítí.

SPH – Smoothed particle hydrodynamics. Metoda Monte Carlo, která aproximuje kontinuum velkým počtem částic v bodech $r_i|_{i=1}^{N}$, z nichž každé je přiřazena jistá váha $W(r,h)$ o charakteristické 'rozmazávací' délce h v okolí r_i (např. Gaussova funkce $W(r,h) = \exp(-(r-r_i)^2/h^2)$). Jestliže i-tá částice přispívá k nějaké fyzikální veličině hodnotou A_i pak, střední hodnota této veličiny v bodě r je

$$\langle A(r)\rangle \simeq \sum_i A_i W(r-r_i,h)\ . \tag{3.189}$$

a gradient této veličiny

$$\langle \nabla A(r)\rangle \simeq \sum_i A_i \nabla W(r-r_i,h)\ . \tag{3.190}$$