Matematické modely v CFD

Petr Šidlof

Česko-anglický slovník termínů v CFD

Česky	Anglicky
verifikace / validace	verification / validation
jednofázové / vícefázové proudění	single- / multiphase flow
plyn / kapalina / pevná fáze	gas / liquid / solid phase
povrchové napětí	surface tension
(ne)newtonovská tekutina	(non) Newtonian fluid
(ne)stlačitelný	(in)compressible
podzvukový	subsonic
nadzvukový	supersonic
stavová rovnice	equation of state
vazký / nevazký	viscous / inviscid
mezní vrstva	boundary layer

Česky	Anglicky
zjemnění sítě	mesh refinement
stacionární / nestacionární	steady / unsteady
vír	vortex, eddy
vířivý	turbulent
laminární / turbulentní	laminar / turbulent
turbulentní model	turbulence model
rovina symetrie	symmetry plane

Matematické a numerické modelování

Matematický model = rovnice popisující a zachycující fyzikální realitu

- klíčový prvek při CFD simulaci – jak zvolit model tak, aby byl co nejjednodušší a zároveň s dostatečnou přesností vystihoval reálný děj
- příliš komplexní model – numerické problémy, mnoho neznámých konstant a parametrů, jejichž různým nastavením lze dostat téměř libovolný výsledek
- příliš zjednodušený model – rychlý, bezproblémově konvergující a špatný výsledek

Matematické modelování

- jak korektně popsat daný jev řečí rovnic
- ověření: **validace** (porovnání s experimentem, benchmarkem)

Numerické modelování

- jak korektně numericky (přibližně) vyřešit daný jev
- ověření: **verifikace** (porovnání s přesným analytickým řešením, vliv sítě – mesh convergence, vliv časového kroku)

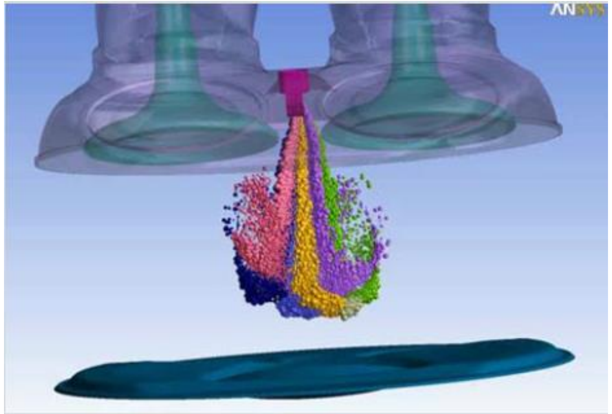
Overview of CFD verification and validation: https://www.grc.nasa.gov/www/wind/valid/tutorial/overview.html

Jednofázové vs. vícefázové proudění

Vícefázové proudění = proudění média, ve kterém je přítomných více fází

Dvoufázové proudění

- plyn – kapalina (spreje, proudění s bublinami, var, kavitace, inhalace léků, spalovací motory)
- plyn – pevné částice (aerosoly, filtrace, pneumatický transport, těžba plynu)
- kapalina – kapalina (emulze, potravinářský průmysl)
- kapalina – pevné částice (filtrace, těžba ropy)



Problémy při modelování vícefázového proudění

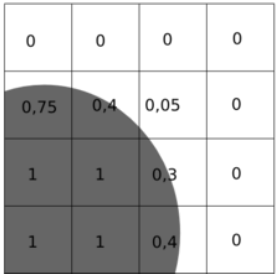
- efekty na rozhraní fází (např. povrchové napětí)
- zachycení rozhraní – matematický a numerický model oblastí zabraných jednotlivými fázemi
- dispergované částice (aerosoly a spreje) – interakce částic se stěnou a navzájem

Přístupy k modelování dvoufázového proudění

Euler - Lagrange

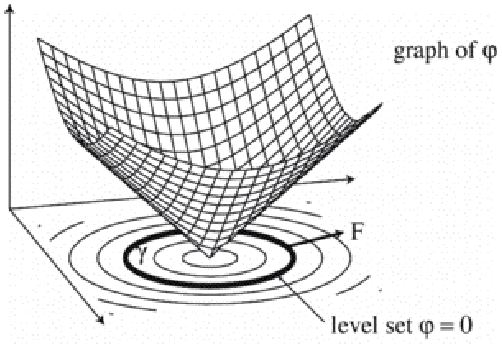
- Eulerovský popis tekutiny (N-S rovnice)
- Lagrangeovský popis pro částice (Newtonovy pohybové rovnice) – explicitní sledování trajektorie částic
- Síly působící na částice: aerodynamická odporová síla, gravitace, elektrostatické síly, Saffmanova síla (shear-induced lift), termoporetická síla, turboporetická síla
- užitečné zejména pro modelování transportu menšího počtu pevných částic
- Fluent: `Discrete phase modeling – DPM`
- OpenFOAM: `DPMFoam, MPPICFoam`

VOF



Euler - Euler

- Eulerovský popis pro obě fáze
- Fluent:
  - `Mixture model` (jedna sada rovnic pro hybnost, objemový poměr a relativní rychlost)
  - `Eulerian model` (dvě sady rovnic pro hybnost – pro každou fázi, společné tlakové pole)
- OpenFOAM: `interFoam` a další
- Numerické metody: Volume of Fluid (VOF), Level Set Method



Proudění Newtonovské vs. nenewtonovské tekutiny

Navier-Stokesovy rovnice v obecném tvaru:

$$\frac{\partial(\rho\,\mathbf{v})}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\,\mathbf{v}\otimes\mathbf{v}) = \nabla\cdot\bar{\bar{\mathbf{T}}} = -\nabla p + \nabla\cdot\bar{\bar{\tau}}$$

Newtonovské tekutiny

- vazká část tenzoru napětí je úměrná gradientu rychlosti (rychlosti deformace):

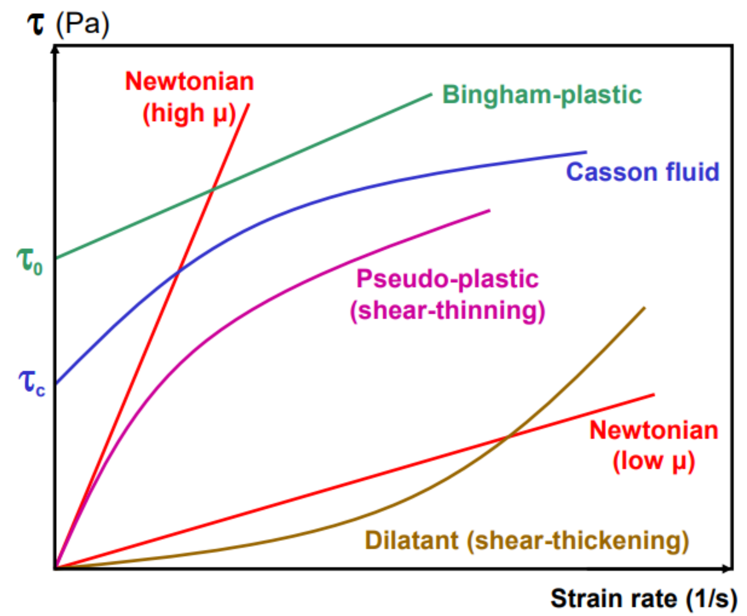
$$\bar{\bar{\mathbf{T}}} = -p\,\bar{\bar{\mathbf{I}}} + \underbrace{\frac{2}{3}\mu(\mathrm{div}\,\mathbf{v})\bar{\bar{\mathbf{I}}} + 2\,\mu\,\bar{\bar{\mathbf{D}}}}_{\bar{\bar{\tau}}}$$

$$\bar{\bar{\mathbf{D}}} = \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{v} + (\nabla\mathbf{v})^T)$$

- konstanta úměrnosti – dynamická viskozita
- voda, vzduch
- platí Navier-Stokesovy rovnice v běžném tvaru

Nenewtonovské tekutiny

- napětí je složitější funkce rychlosti deformace
- pseudoplastické (barvy, taveniny polymerů)
- dilatantní (cement, škrobové suspenze)
- Casson (krev)
- Binghamské (zubní pasta, odpadní kaly)
- viskoelastické (polymery) – částečně tečou, částečně si pamatují tvar



André Bakker – CFD course, Dartmouth College

Proudění stlačitelné vs. nestlačitelné tekutiny

N-S rovnice pro proudění nestlačitelné tekutiny

$$\frac{\partial(\rho\,\mathbf{v})}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\mathbf{v}\otimes\mathbf{v}) - \nabla\cdot\big(\nu\,\nabla(\rho\,\mathbf{v})\big) = -\nabla p$$

$$\nabla\cdot\mathbf{v} = 0$$

- změny hustoty v proudovém poli zanedbatelné: $\rho = const.$
- rovnice pro vektorové pole rychlosti a skalární pole tlaku (4 složky)
- lze použít pro kapaliny a plyny při nízkých subsonických rychlostech proudění do cca M < 0.3 (fluktuace hustoty < 10%)

N-S rovnice pro proudění stlačitelné tekutiny

$$\frac{\partial(\rho\,\mathbf{v})}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\,\mathbf{v}\otimes\mathbf{v}) = -\nabla p + \nabla\cdot\bar{\bar{\tau}}$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\,\mathbf{v}) = 0$$

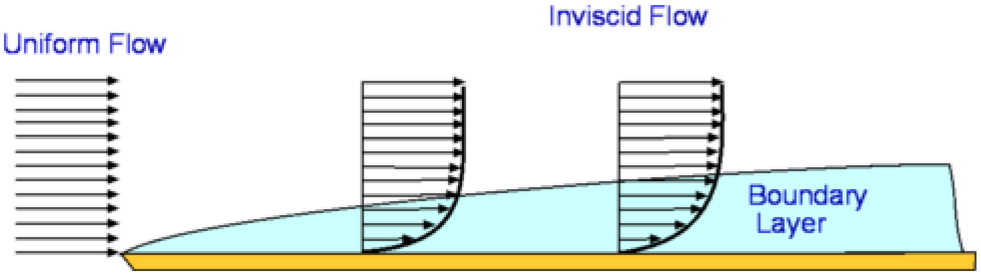
$$\tau_{ij} = \mu\left[\left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_j}\right) - \frac{2}{3}(\nabla\cdot\mathbf{v})\,\delta_{ij}\right]$$

+ stavová rovnice $\rho = \rho(p,T)$ a rovnice pro vnitřní energii $e = e(p,T)$

- změny hustoty v proudovém poli již nelze zanedbat
- rovnice pro vektorové pole rychlosti, skalární pole tlaku, hustoty, vnitřní energie a teploty (7 složek)
- rovnice pro energii (teplotu) a hustotu jsou sdružené s rovnicemi pro rychlost a tlak
- transonické (M ~ 0.8 – 1.2) a supersonické (M > 1) proudění

Vazké vs. nevazké proudění

V některých případech (zejména externí aerodynamika při vysokých Re) hraje viskozita roli pouze v malé oblasti – mezní vrstvě, lze zanedbat



Eulerovy rovnice pro proudění nevazké (nestlačitelné) tekutiny:

$$\frac{\partial(\rho\,\mathbf{v})}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\,\mathbf{v}\otimes\mathbf{v}) - \cancel{\nabla\cdot\big(\nu\nabla(\rho\mathbf{v})\big)} = -\nabla p$$

$$\nabla\cdot\mathbf{v} = 0$$

- úspora elementů sítě u stěny – není nutné zjemňovat
- okrajová podmínka na pevné stěně: slip …. $\mathbf{v}\cdot\boldsymbol{n} = 0$

Stokesovo proudění

Proudění při velmi malých Re (nízká rychlost, vysoká viskozita) – lze zanedbat konvektivní člen

$$\frac{\partial(\rho\,\mathbf{v})}{\partial t} + \cancel{\nabla\cdot(\rho\,\mathbf{v}\otimes\mathbf{v})} - \nabla\cdot\big(\nu\,\nabla(\rho\,\mathbf{v})\big) = -\nabla p$$

$$\nabla\cdot\mathbf{v} = 0$$

- bez konvektivního členu jsou rovnice lineární
- obtékání malých těles
- proudění v úzkých štěrbinách
- mikrofluidika, mikroorganismy
- velmi vazké tekutiny (hydraulické oleje apod.)

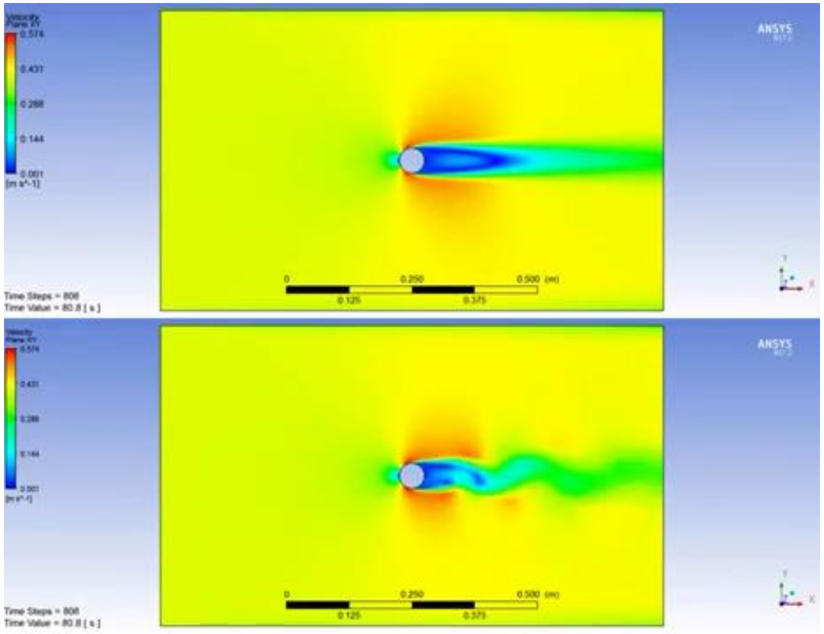
Patrick Honner – University of New Mexico, Physics department

Stacionární vs. nestacionární proudění

Stacionární proudění (steady flow)

$$\cancel{\frac{\partial(\rho\,\mathbf{v})}{\partial t}} + \nabla\cdot(\rho\,\mathbf{v}\otimes\mathbf{v}) - \nabla\cdot\big(\nu\,\nabla(\rho\,\mathbf{v})\big) = -\nabla p$$

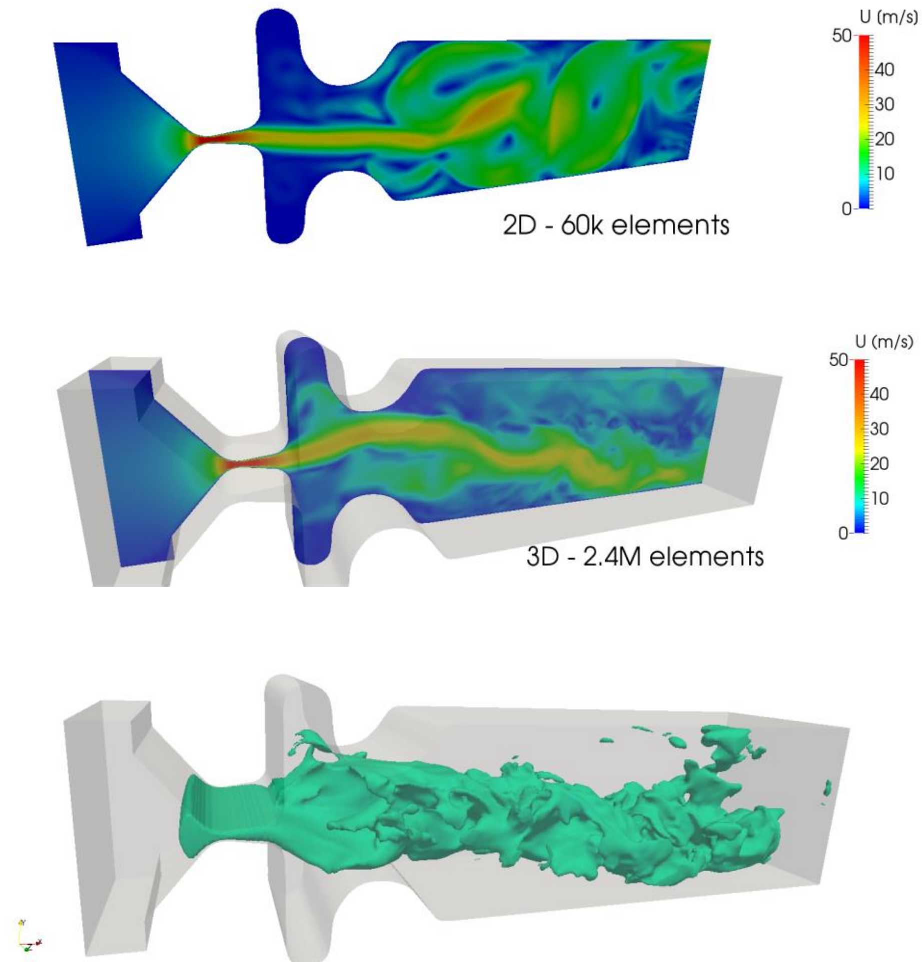
$$\nabla\cdot\mathbf{v} = 0$$



- proudové veličiny (rychlost, tlak, hustota..) jsou v každém bodě v čase neměnné
- stacionární řešení nemusí být stabilní (např. při vysokých Re) – řešič „nekonverguje“
- řádová úspora času a diskového prostoru – ukládá se pouze výsledek poslední iterace
- většina inženýrských problémů – zajímáme se o ustálené řešení

2D vs. 3D modely

- realita je vždy 3D
- geometrie je často „2D“
- Navier-Stokesovy rovnice platí i ve (fiktivním) 2D prostoru
- lze zanedbat složku rychlosti a změny veličin podél osy z?



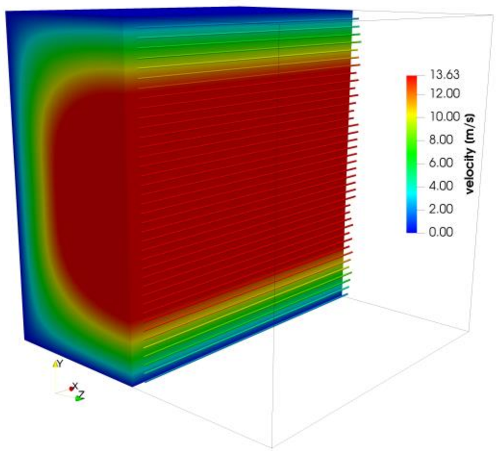
2D model

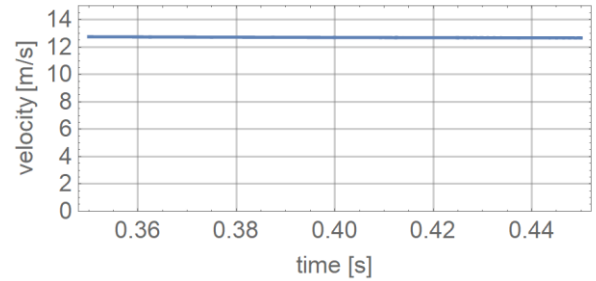
- řádová úspora výpočetního výkonu, času a diskového prostoru (počet elementů sítě, počet řešených složek rychlosti)
- vhodné pro první pokusy a situace, kdy je proudové pole a priori dvourozměrné

Pozor: turbulence je vždy 3D !

Laminární a turbulentní proudění

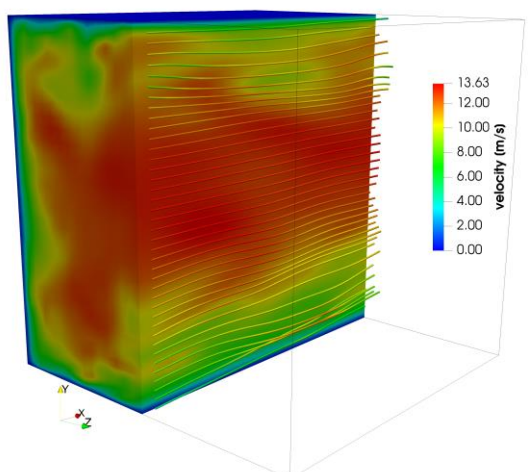
Laminární proudění

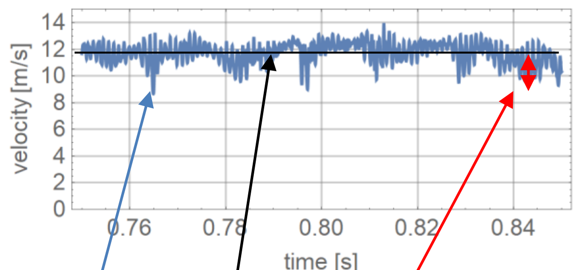




- uspořádané
- proudění ve vrstvách, nejsou víry
- méně intenzivní míchání (přenos tepla a hmoty)
- nižší disipace energie

Turbulentní proudění





$$v(x,t) = \bar{V}(x) + v'(x,t)$$

okamžitá rychlost

střední rychlost

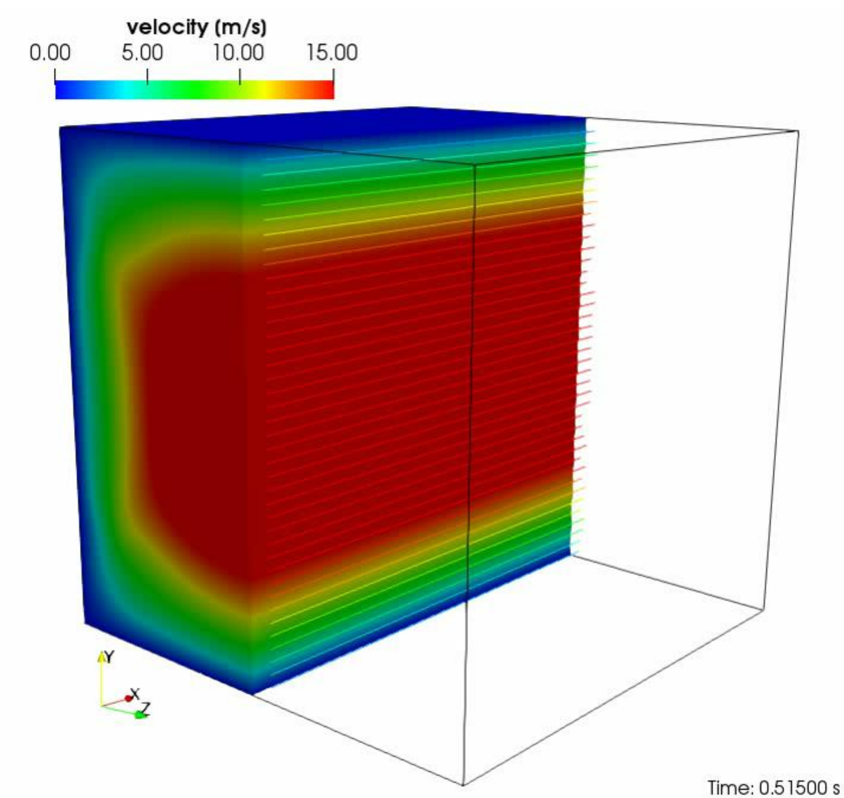
turbulentní fluktuace rychlosti

- neuspořádané, chaotické
- vířivé
- intenzivní míchání
- disipativní – energetická kaskáda

Přechod od laminárního k turbulentnímu proudění

Experiment

- proudění v potrubí
- postupné zvyšování rychlosti
- vizualizace tryskou s proudem barviva



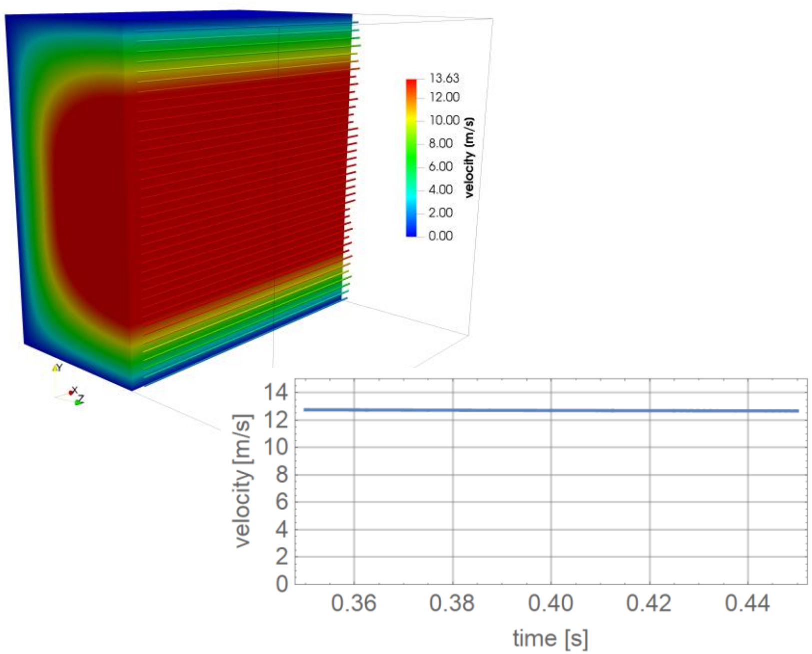
Numerická simulace

- proudění v kanálu s čtvercovým průřezem
- problém – okrajové podmínky (zde proudění řízeno objemovým zdrojem hybnosti)

Numerické modelování turbulentního proudění („modelování turbulence“)

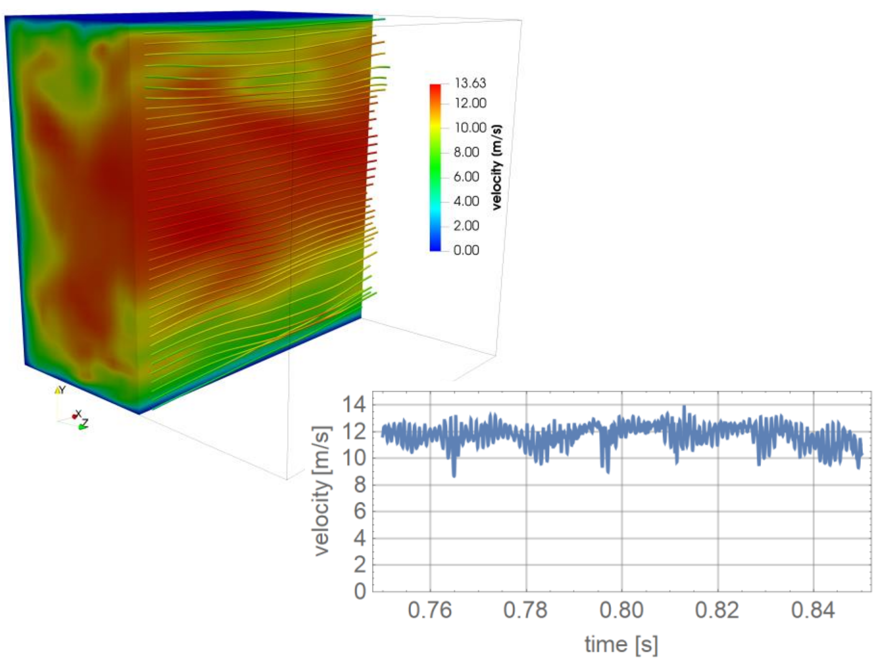
Laminární proudění

- nevyžaduje žádný speciální přístup
- přímé numerické řešení Navier-Stokesových rovnic bez modelu turbulence („laminární model“)



Turbulentní proudění

- numerická síť není schopná zachytit všechny škály turbulence (nejmenší víry)
- vliv malých vírů na makroskopické proudové pole se musí modelovat – **turbulentní model**



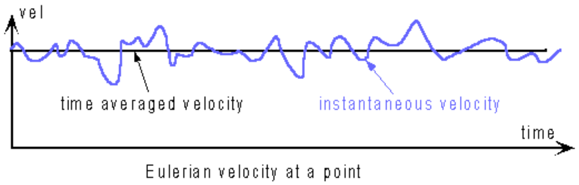
Modelování turbulence (2)

1. Direct Numerical Simulation (DNS)

- žádný model turbulence
- rozměr elementu sítě musí být srovnatelný s nejmenšími víry. Počet elementů ~ $Re^{9/4}$, výpočetní náročnost ~ Re^3.. obrovské výpočetní a paměťové nároky už pro střední Re
- DNS = výzkumný přístup, ne nástroj využívající brutální sílu pro řešení inženýrských problémů

2. Reynolds-Averaged Navier-Stokes Equations (RANS)

$$v(x,t) = \bar{V}(x) + v'(x,t)$$



- RANS = rovnice pro časově vystředované proudové pole $\bar{V}(x)$
- výsledkem RANS (ani uRANS!) není okamžitá hodnota rychlosti, ale střední hodnota
- vliv turbulence na střední pole je modelován – Reynoldsova napětí - turbulentní vazkost (eddy viscosity)
- nejpoužívanější modely: k-ε, k-ω, k-ω SST (SST = shear stress transport)
- chování proudění v mezní vrstvě modelováno stěnovými funkcemi
- RANS .. průmyslový standard
- špatně zachycuje masivně odtržené proudění s recirkulací, anizotropní 3D proudění – nutné ladit model ad hoc

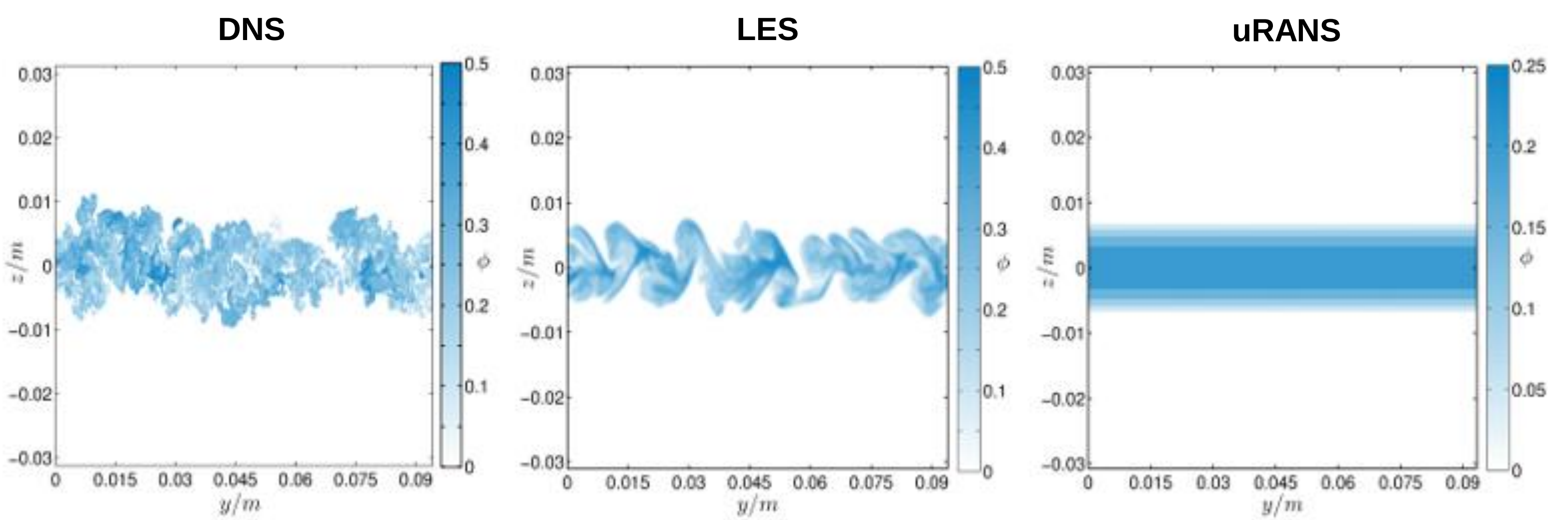
Modelování turbulence (3)

Large Eddy Simulation (LES)

RANS model turbulence musí zachytit chování malých izotropních vírů i velkých vysoce anizotropních vírů, silně ovlivněných geometrií problému

LES: velké víry řešeny v numerickém výpočtu, vliv malých vírů (sub-grid scales) modelován

- výpočetní náklady – kompromis mezi RANS a DNS
- zachycuje lépe i případy, které jsou pro RANS problematické
- poskytuje podstatně více detailů o proudovém poli



Scalar mixing in a temporarily evolving jet (TU Freiberg)

Okrajové podmínky (1)

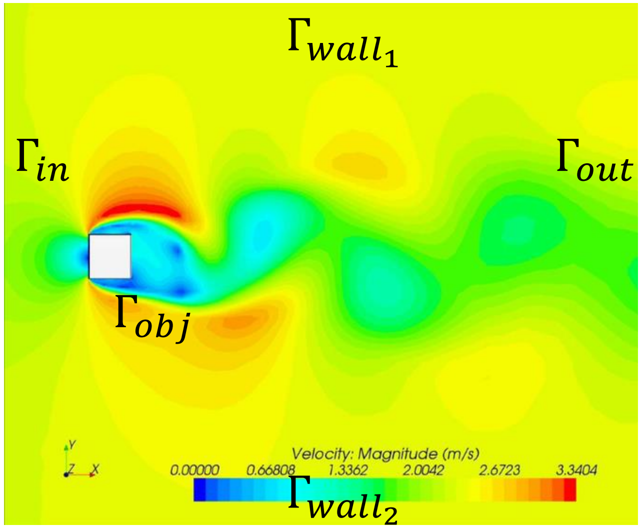
Špatně zadané okrajové podmínky – nejčastější důvod „divergence“ výpočtu!

Typy okrajových podmínek

- Dirichletova – specifikována hodnota veličiny $\mathbf{v}\big|_\Gamma = \mathbf{v}_0$
- Neumannova – specifikována normálová derivace $\left.\frac{\partial p}{\partial \boldsymbol{n}}\right|_\Gamma = 0$
- smíšená (Robinova) podmínka – lineární kombinace Dir. a Neum.

Stěna $\boldsymbol{\Gamma_{wall}}, \boldsymbol{\Gamma_{obj}}$

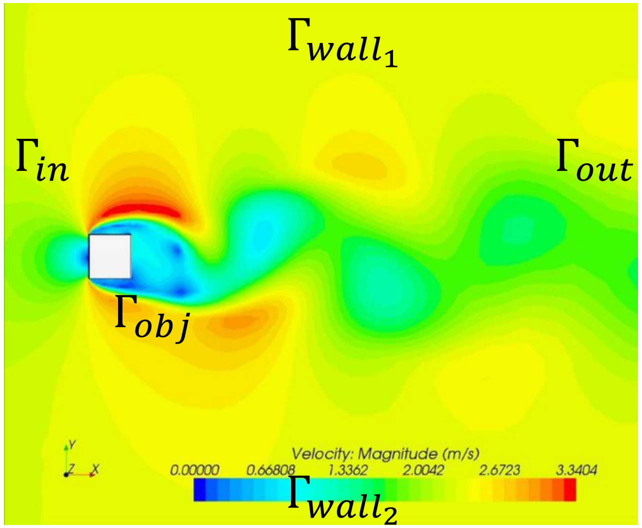
- no-slip condition: $\mathbf{v} = 0$ (pevná stěna) nebo $\mathbf{v} = \mathbf{v}_{wall}$ (pohyblivá stěna)
- Eulerovy rovnice – slip condition: $\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{n} = 0$
- stlač. proudění: $T = T_{wall}$ (daná teplota) nebo $k\frac{\partial T}{\partial \boldsymbol{n}} = -q_w$ (daný tepelný tok)
- turbulentní model – stěnové funkce pro $\mathbf{v}$



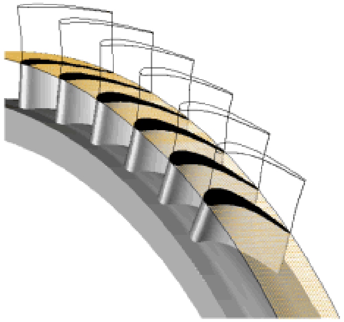
Okrajové podmínky (2)

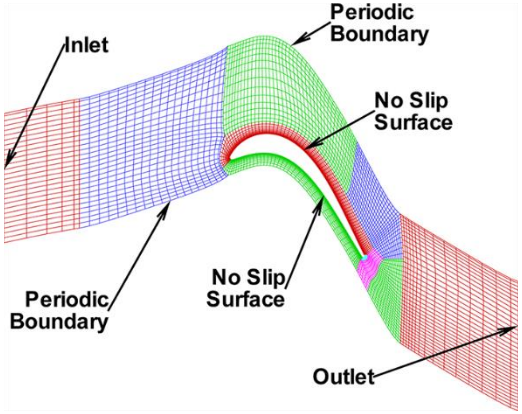
	Vstup $\boldsymbol{\Gamma_{in}}$	**Výstup $\boldsymbol{\Gamma_{out}}$**
Varianta 1	$\mathbf{v} = \mathbf{v}_{in}$	$p = p_{out}$
Varianta 2	$p = p_{in}$	$p = p_{out}$

- neznámý tlak na výstupu .. lze předepsat nulové normálové derivace pro všechny veličiny (nemá fyzikální význam – matematický trik)
- stlačitelné proudění: na vstupu nutné předepsat teplotu a hustotu
- turbulentní model: na vstupu třeba předepsat vstupní hodnotu turbulentních veličin (např. turbulentní kinetická energie k, disipace TKE ϵ)



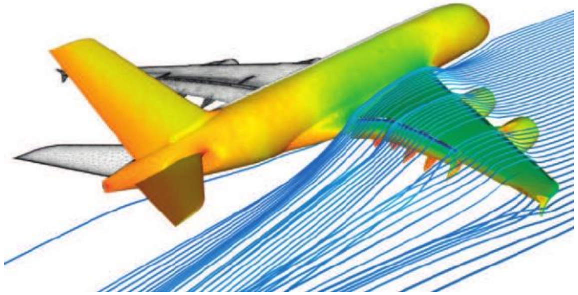
Speciální typy okrajových podmínek





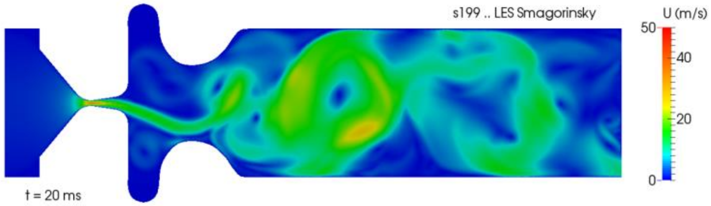
Periodická okrajová podmínka

- rychlost, tlak (teplota a hustota) mají stejnou hodnotu na obou periodických okrajích výpočetní oblasti



Symetrická okrajová podmínka

- proudění a priori symetrické kolem roviny – stačí modelovat polovinu oblasti
- pro skalární veličiny (např. tlak) v rovině symetrie $\frac{\partial p}{\partial \boldsymbol{n}} = 0$
- pro vektorové veličiny (např. rychlost) v rovině symetrie $\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{n} = 0$, $\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \boldsymbol{n}} = 0$
- **Pozor**: symetrická geometrie nemusí znamenat symetrické proudění!



Shrnutí – klasifikace typů proudění

jednofázové (single-phase)	**x**	vícefázové (multi-phase)
Newtonovské (Newtonian)	**x**	nenewtonovské (non-Newtonian)
laminární (laminar)	**x**	turbulentní (turbulent)
stlačitelné (compressible)	**x**	nestlačitelné (incompressible)

subsonické (subsonic) **x** transsonické (transonic) **x** supersonické (supersonic)

stacionární (steady)	**x**	nestacionární (unsteady)
vnitřní (internal)	**x**	vnější (external)