

Vladimíra MICHALCOVÁ¹, Milada KOZUBKOVÁ²

VYHODNOCENÍ VELIKOSTI NUMERICKÉ CHYBY PŘI ŘEŠENÍ PROBLEMATIKY
PROUDĚNÍ METODOU KONEČNÝCH OBJEMŮ

EVALUATION OF NUMERICAL ERROR IN FLUID FLOW SOLUTION USING FINITE
VOLUMES ANALYSIS

Abstrakt

Řešení transportních rovnic ve Fluentu využívá diskretizačního procesu, ve kterém je základním problémem přesný výpočet transportní veličiny Φ přes stěny konkrétního objemu a jeho konvektivní tok přes tyto hranice. Při výpočtu je nutno počítat jednak s výskytem tzv. „falešné“ numerické difúze a také s výskytem hodnot Φ , které jsou mimo rozsah správného řešení. Tato práce porovnává fyzikální přesnost výpočtu při použití nabízených diskretizačních výpočtových schémat navržených v CFD kódu ve Fluentu 6.3 a možnosti, jak tyto numerické chyby zredukovat.

Abstract

Numerical diffusion impairs the accuracy of discrete solutions of the equations governing the convective transport of a scalar when the flow is not aligned with grid lines. Numerical diffusion leads to unintentional smoothing of advected gradients. This work presents an assessment of numerical diffusion in CFD code FLUENT 6.3 and available means of reducing impairment.

1 ÚVOD

Fluent využívá metodu konečných objemů k převodu obecných transportních rovnic na soustavu lineárních rovnic, které jsou řešeny numericky Gauss-Seidlovou iterační metodou. Tento způsob spočívá v integrování rovnic v každém kontrolním objemu-buňce, jehož výsledkem jsou diskrétní rovnice, které prezentují rovnováhu toku, tedy zákony zachování každé transportní veličiny Φ v daném objemu. V této práci je diskretizace rovnic ukázána na zákonu zachování transportu veličiny Φ při stacionárním proudění, které lze popsat rovnicí v integrální formě ve tvaru (1), jež prezentuje rovnováhu toku v konstantním objemu:

$$\oint \rho \vec{v} \cdot d\vec{A} = \oint \Gamma_{\Phi} \nabla \Phi \cdot d\vec{A} + \int_V S_{\Phi} dV \quad (1)$$

kde:

ρ – je hustota proudícího média [$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$],

\vec{v} – vektor rychlosti [$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$],

\vec{A} – vektor plochy [m^2],

Γ_{Φ} – difúzní koeficient veličiny Φ [dle veličiny],

¹ Ing. Vladimíra Michalcová, Ph.D., Katedra stavební mechaniky, Fakulta stavební, VŠB - Technická univerzita Ostrava, VŠB - Technická univerzita Ostrava, Fakulta stavební (FAST), Ludvíka Podéště 1875/17, 708 33 Ostrava - Poruba, tel.: (+420) 597 321 348, e-mail: vladimira.michalcova@vsb.cz.

² doc. RNDr. Milada Kozubková, CS.c., Katedra hydromechaniky a hydraulických zařízení, Fakulta strojní, VŠB - Technická univerzita Ostrava, Fakulta strojní (FS), 17.listopadu 15, 708 33 Ostrava - Poruba, tel.: (+420) 597 323 342, e-mail: milada.kozubkova@vsb.cz.

$\nabla \Phi$ – gradient veličiny Φ [dle veličiny],

Γ_Φ – difúzní koeficient veličiny Φ [dle veličiny] a

S_Φ – zdroj veličiny Φ na jednotku objemu [dle veličiny].

Rovnice (1) se aplikuje na všechny kontrolní objemy (buňky) výpočtové oblasti. Po diskretizaci rovnic (1) v dané buňce dostaneme:

$$\sum_f^{N_{\text{faces}}} \rho_f \vec{v}_f \Phi_f \cdot \vec{A}_f = \sum_f^{N_{\text{faces}}} \Gamma_\Phi \nabla \Phi_f \cdot \vec{A}_f + S_\Phi V \quad (2)$$

kde:

N_{faces} počet stěn (faces) obklopujících buňku [-],

Φ_f hodnota veličiny Φ proudící přes plochu f [dle veličiny],

$\rho_f \vec{v}_f \cdot \vec{A}_f$ hmotnostní tok přes plochu [kg.s⁻¹],

\vec{A}_f vektor plochy f [m²],

$\nabla \Phi_f$ gradient veličiny Φ na ploše f [dle veličiny] a

V objem buňky [m³].

Levá strana v obou rovnicích představuje konvektivní přenos veličiny Φ , pravá strana pak difúzní přenos a zdrojový člen transportní veličiny Φ (její úbytek nebo nárůst). Základním problémem při diskretizaci konvektivního členu je přesný výpočet transportní veličiny na stěně konkrétního objemu Φ_f a její gradient $\nabla \Phi_f$. Difúzní proces ovlivňuje přenos transportní veličiny podél jejího gradientu ve všech směrech, zatímco konvektivní přenos se šíří pouze ve směru proudění. Najít přesné diskretizační výpočtové schéma při řešení konvektivního členu v rovnici (2) je velmi obtížné.

Je známo, že numerická difúze vzniká hlavně v případě, když směr proudění není rovnoběžný se stěnami mřížky. Takových optimálních stavů (rovnoběžné proudění) lze ovšem dosáhnout jen při výpočtech rovných úseků potrubí bez překážek s použitím hexa buněk. U převážné většiny případů proudění je směr proudu vždy v obecném směru vzhledem ke stěnám buněk (hexa, tetra, polyhedra) a při hodnocení konvektivního stavu je nutno počítat s numerickou chybou.

Rovnice (2) obsahuje neznámou skalární veličinu Φ v centru buňky a zároveň neznámé skalární hodnoty Φ_{nb} v přiléhajících buňkách. Rovnice je obecně nelineární a převádí se do linearizovaného tvaru:

$$a_p \Phi = \sum_{nb} a_{nb} \Phi_{nb} + b \quad (3)$$

Index nb zde značí přiléhající (okolní) buňky, a_p a a_{nb} jsou linearizované koeficienty pro veličinu Φ a Φ_{nb} .

Počet okolních buněk závisí na typologii mřížky, ale ve většině případů je množství shodné s počtem stěn tvořících sledovanou buňku. Daná rovnice popisuje stav ve všech buňkách mřížky. Soustava lineárních rovnic se ve Fluentu řeší implicitně Gauss-Seidlovou metodou v kombinaci s algebraickou „multidrid“ vícestupňovou metodou, v našem případě AMG.

Fluent ukládá diskrétní hodnoty skalární veličiny Φ v centru buňky. V rovnici (2) jsou ovšem pro výpočet konvektivního členu (levá strana rovnice) požadovány hodnoty skalární veličiny Φ_f také na stěnách buňky, které jsou stanovené interpolací z hodnot v centrech přiléhajících okolních buněk. K tomuto procesu se používá „upwind“ schéma, což znamená, že hodnota Φ_f je odvozena z hodnoty následující buňky ve směru proudění.

Fluent umožňuje výběr z pěti „upwind“ schémat pro výpočet konvektivního členu: First-order upwind, Power-law, Second-order upwind, Quick, Third-order Muscl s tím, že Quick schéma je použitelné pouze pro hexa buňky.

Difúzní člen v rovnici (2) (první člen na pravé straně) je nastaven na „Central –differencing“ výpočtové schéma druhého řádu, které je dostatečně přesné.

Při řešení proudění je také potřeba stanovení gradientů, které jsou nutné pro výpočet hodnot skalárních veličin na stěnách buněk, ale též při diskreditaci konvektivního a difúzního členu v rovnici (2). Ve Fluentu je možno gradient $\nabla \Phi$ počítat třemi způsoby: Green-Gauss Cell-Based, Green-Gauss Node-Based a Least Squares Cell-Based. Poslední jmenovaný výpočet gradientu je doporučený pro polyhedra buňky a pro jeho rozsáhlé vysvětlení odkazujeme na manuál [2].

Green-Gausovy teoremy počítají gradient v centru buňky ve tvaru:

$$(\nabla \Phi)_{c_0} = \frac{1}{V} \sum_f \bar{\Phi}_f \bar{A} \quad (4)$$

příčemž hodnota buňky na stěně Φ_f se počítá v případě Green-Gauss Cell-Based jako průměr z hodnot v sousedících buňkách:

$$\bar{\Phi}_f = \frac{\Phi_{c0} + \Phi_{cl}}{2}, \quad (5)$$

zatímco v případě Green-Gauss Node-Based jako průměr z uzlů dané stěny

$$\bar{\Phi}_f = \frac{1}{N_f} \sum_n^{N_f} \Phi_n \quad (6)$$

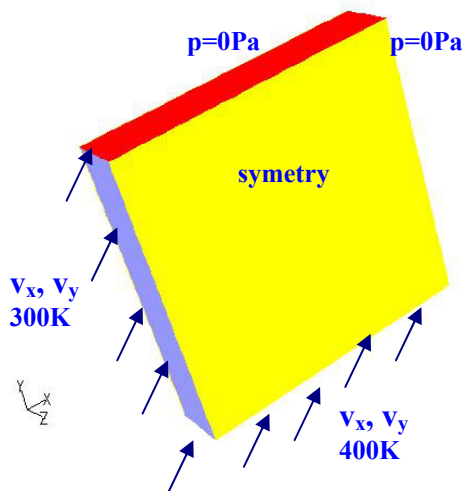
kde N_f je počet uzlů.

Hodnota v uzlu Φ_n se počítá z hodnot v centru všech buněk s daným uzlem.

2 POPIS TESTOVACÍCH ÚLOH

Cílem testovacích úloh bylo vyhodnocení stupně fyzikální přesnosti numerického výpočtu v závislosti na hustotě i tvaru mřížky a na volbě výše popsaných výpočtových schémat i přístupů k výpočtu gradientů transportní veličiny.

Bylo simulováno 3D stacionární proudění **fiktivního** plynu při hustotě $\rho=1\text{kgm}^{-3}$ ve výpočtové oblasti o rozměrech $1 \times 1 \times 0,2$ metrů (obr.1). Hodnoty tepelné vodivosti $\lambda [\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}]$ a dynamické viskozity $\mu [\text{Pa.s}]$ plynu se blížily nule. Okrajové podmínky jsou uvedeny v tabulce 1.



Obr. 1: Schéma výpočtové oblasti $1 \times 1 \times 0,2$ metrů

Tab.1: Okrajové podmínky

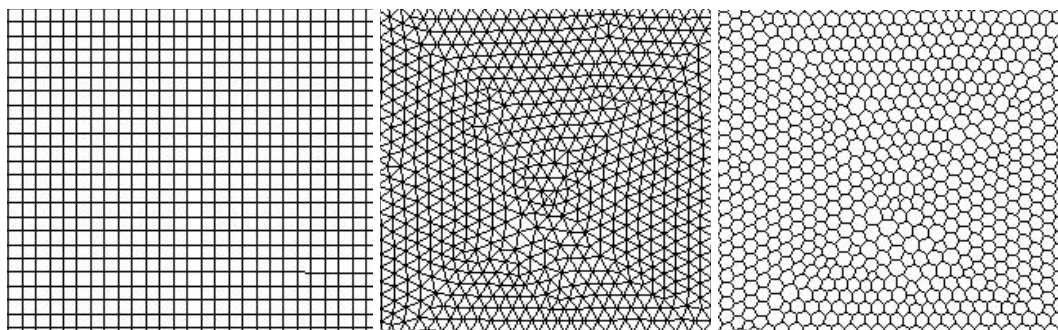
Okrajové podmínky		
Vstup do oblasti	velocity inlet	Na dvou stěnách konstantní vertikální profil zadaný vektory rychlosti $v_x=v_y=5\text{m/s}$
	teplota	Jedna stěna 300K Druhá stěna 400K
Výstup z oblasti	pressure outlet	$p=0\text{Pa}$
Boční stěny	symetry	Nulový tok všech veličin přes hranici a nulová normálová rychlost

Předmětem sledování bylo stanovení úrovně rozptylu (numerické difúze) teplotního pole a vyhodnocení hodnot teploty, které jsou mimo rozsah zadaných okrajových podmínek (tedy mimo rozsah 300-400 K) při různě nastavených faktorech výpočtů.

Úlohy byly řešeny na třech typech mřížky (hexa, tetra a polyhedra), jejichž tvary jsou patrné z obr.2. Všechny typy mřížek měly dvojí hustotu. Hexa a tetra buňky byly vytvořeny ze 40-ti, nebo ze 100 bodů vztažených na délku 1m na všech hranách oblasti. Polyhedra buňky byly vytvořeny ve Fluentu z tetra buněk. Vzniklo tím tedy celkem 6 výpočtových oblastí o shodných výše uvedených rozměrech a o počtu buněk uvedených v tabulce 2. Názorně je zde vidět velká úspora jejich počtu při použití polyhedra typologie, která je právě z tohoto důvodů v mnoha případech doporučována.

Tab.2: Počet buněk ve výpočtových oblastech

Druh mřížky	Hexa 40 bodů	Hexa 100 bodů	Tetra 40 bodů	Tetra 100 bodů	Polyhedra 40 bodů _{tetra}	Polyhedra 100 bodů _{tetra}
Počet buněk v tisících	12,8	200	83,9	1332	16,6	238



Obr. 2: Typologie buněk (hexa – tetra - polyhedra)

Výpočty s tetra a polyhedra buňkami byly testovány s postupným nastavením tří výpočtových schémat (First-order upwind, Second-order upwind, Third-order Muscl). U hexa buněk byl výpočet proveden navíc také se schématem Quick.

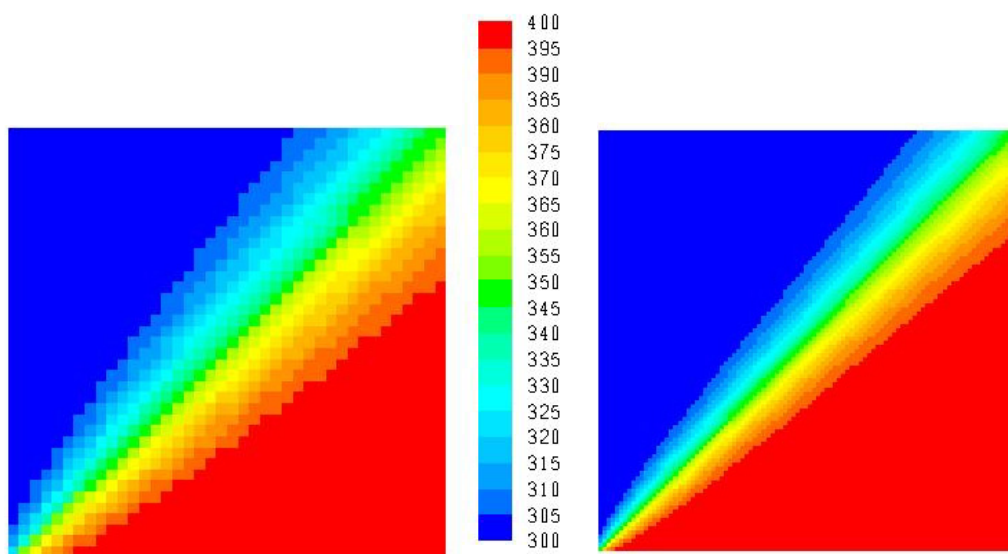
Výpočet gradientu u hexa a tetra buněk byl řešen Green-Gauss Cell-Based i Green-Gauss Node-Based metodou, u polyhedra buněk byl použit ve Fluentu doporučený Least Squares Cell-Based způsob. Všechny výsledky při různých podmínkách nastavení výpočtu byly vzájemně porovnány. Výpočtové schéma Power-law nebylo testováno, protože pro tento případ výpočtu počítá stejně jako First-order upwind.

3 VYHODNOCENÍ VÝSLEDKŮ

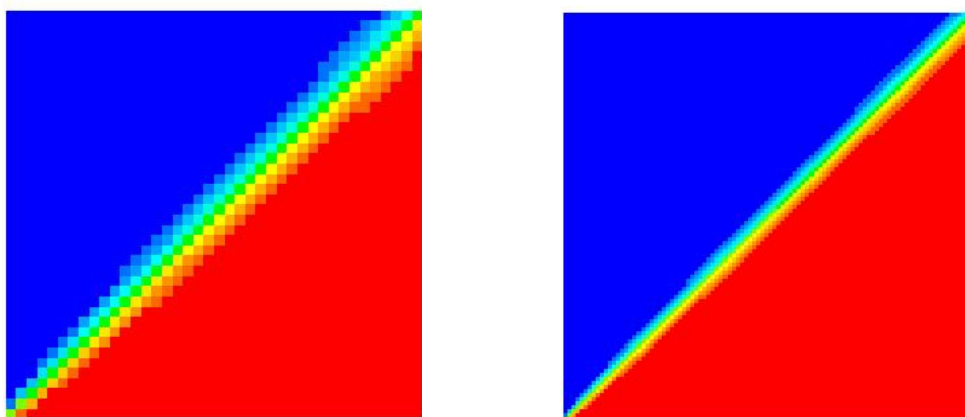
Níže uvedené obrázky představují teplotní pole v podélných řezech vedených středem výpočtových oblastí při různě zadaných podmínkách výpočtu. Stupnice teplot v kelvinech [K] u obr.3 je platná i pro ostatní obrázky. V ideálním případě by mělo být teplotní pole úhlopříčně ostře rozděleno na dvě pole odpovídající vstupním parametrům a v celé oblasti by se neměly vyskytovat teploty mimo rozsah 300K a 400K.

3.1 Vliv hustoty mřížky

Na velikost numerické difúze má hustota mřížky významný vliv. Na obr.3 je názorně ukázán teplotní rozptyl při hexa mřížce o hustotě 40bodů a 100bodů na jednotce délky při použití výpočtového schématu First order. U zbývajících dvou typů mřížek a stejného schématu má hustota mřížky podobný vliv na rozptyl teplotního pole. Při použití výpočtových schémat Second-order upwind, Quick, Third-order Muscl jsou sice celkové rozptyly i rozdíly v hustotě mřížky menší (obr.4), ale vyskytují se problémy s hodnotami transportní veličiny (teploty) mimo rozsah vstupních parametrů (více kap.3.3).



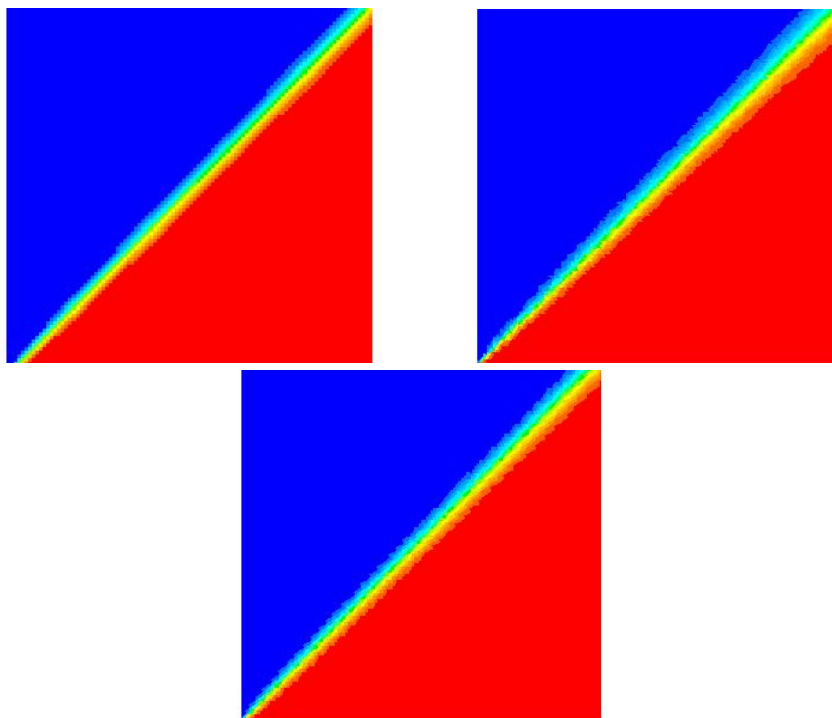
Obr. 3: Teplotní pole, vliv hustoty mřížky na numerickou difúzi-hexa buňky-First order:
40 bodů/metr 100 bodů/ metr



Obr. 4: Teplotní pole, vliv hustoty mřížky na numerickou difúzi-hexa buňky-Second order:
40 bodů/metr 100 bodů/metr

3.2 Vliv typologie mřížky

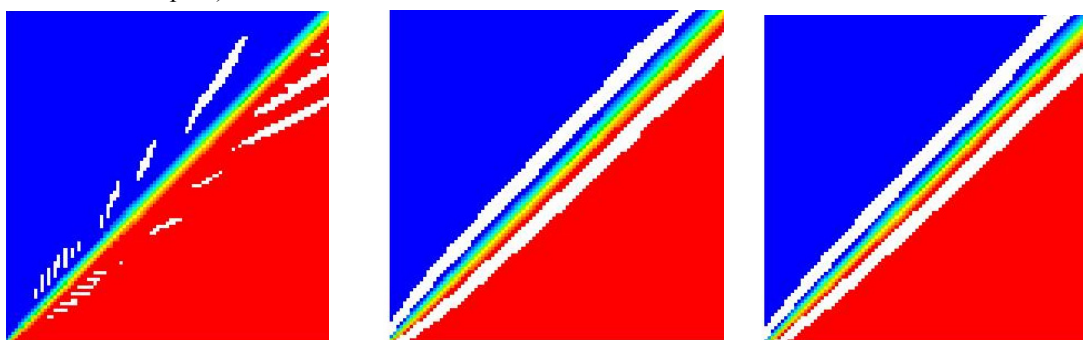
Typologie mřížky má také vliv na numerickou difúzi transportní veličiny, i když ne tak výrazný, jak je patrné z obr.5. Jsou zde porovnány rozptyly teplotních polí všech tří typů mřížek o srovnatelné hustotě (100 bodů na 1m) a shodně zvoleném výpočtovém schématu (Second-order upwind). Je zřejmé, že nejmenšího rozptylu docílí hexa mřížka, ovšem vzhledem k typům výpočtových oblastí i obtékaných těles, není častá možnost tuto mřížku použít. Typ mřížky ovšem částečně omezuje volbu výpočtového schématu i způsob výpočtu gradientu, což se výrazně projeví na přesnosti výpočtu (viz další kap.).



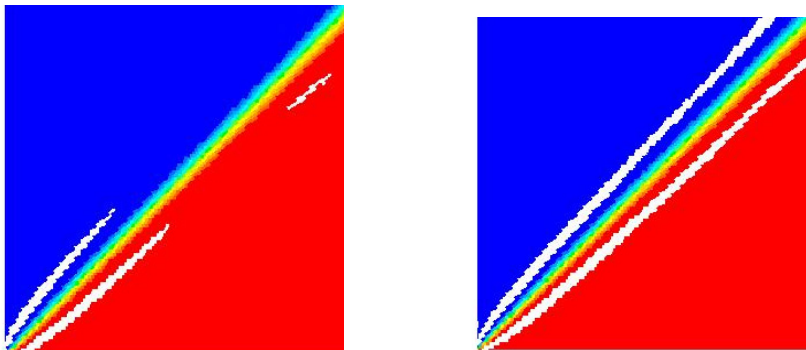
Obr. 5: Teplotní pole, vliv typologie mřížky na numerickou difúzi-100bodů/metr-Second order:
hexa buňky - tetra buňky - polyhedra buňky

3.3 Vliv volby výpočtového schématu

Nejpřesnějších výsledků se dosáhne při využití Quick výpočtového schématu, jak v oblasti numerické difúze, tak i v nejmenším výskytu hodnot mimo rozsah vstupních parametrů (na obr.6 a obr.7 bezbarvá pole).



Obr. 6: Teplotní pole- vliv volby výpočtového schématu na přesnost výpočtu-hexa buňky-100bodů/metr:
Quick Second-order Third-order Muscl



Obr. 7: Teplotní pole, vliv volby výpočtového schématu na přesnost výpočtu- polyhedra-100bodů/metr:

Second-order

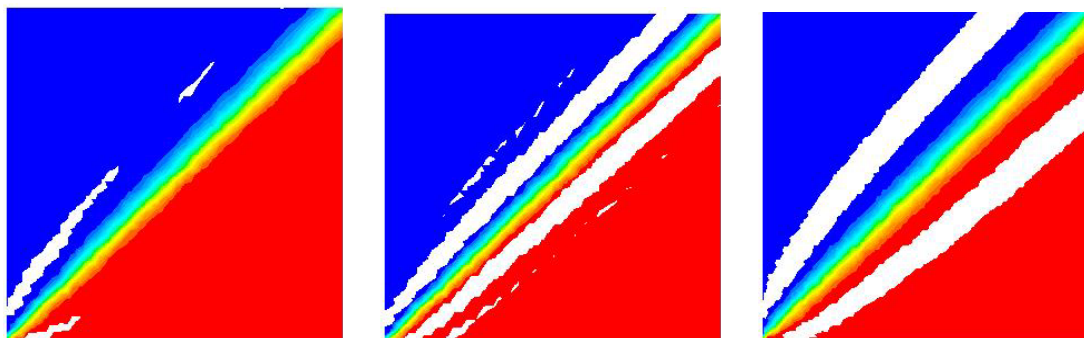
Third-order Muscl

Výpočtová schémata First-order a Power-law vykazují vzájemně stejné výsledky, v teplotním poli se nevyskytují hodnoty mimo požadovaný rozsah, ale u obou schémat vzniká výrazná numerická difúze, jak bylo vidět již v obr.3. Tento výrazný rozptyl vzniká u všech typů mřížek při použití těchto dvou schémat.

U tetra a polyhedra mřížek vykazuje lepší výsledky výpočtové schéma Second-order oproti Third-order Muscl, jak je patrné z obr.7. Nižší počet buněk s hodnotami mimo požadovaný rozsah teplotního pole oproti hexa buňkám na obr.6 negativně kompenzuje vyšší hodnota odchylky, jak bude vysvětleno v kap.3.4.

3.4 Vliv volby způsobu řešení gradientu transportní veličiny

Způsob řešení gradientu transportní veličiny má výrazný vliv na vznik hodnot mimo rozsah vstupních parametrů, stejně jako volba výpočtových schémat. Výpočty s hexa a tetra buňkami byly řešeny doporučenými Green-Gauss Cell-Based i Green-Gauss Node-Based metodami, přičemž u hexa buněk vykazovala lepších výsledků Cell-Based metoda, zatímco u tetra buněk Node-Based metoda.



Obr. 8: Teplotní pole, vliv volby způsobu řešení gradientu transportní veličiny-40bodů/metr:

tetra, Cell-Based

tetra, Node-Based

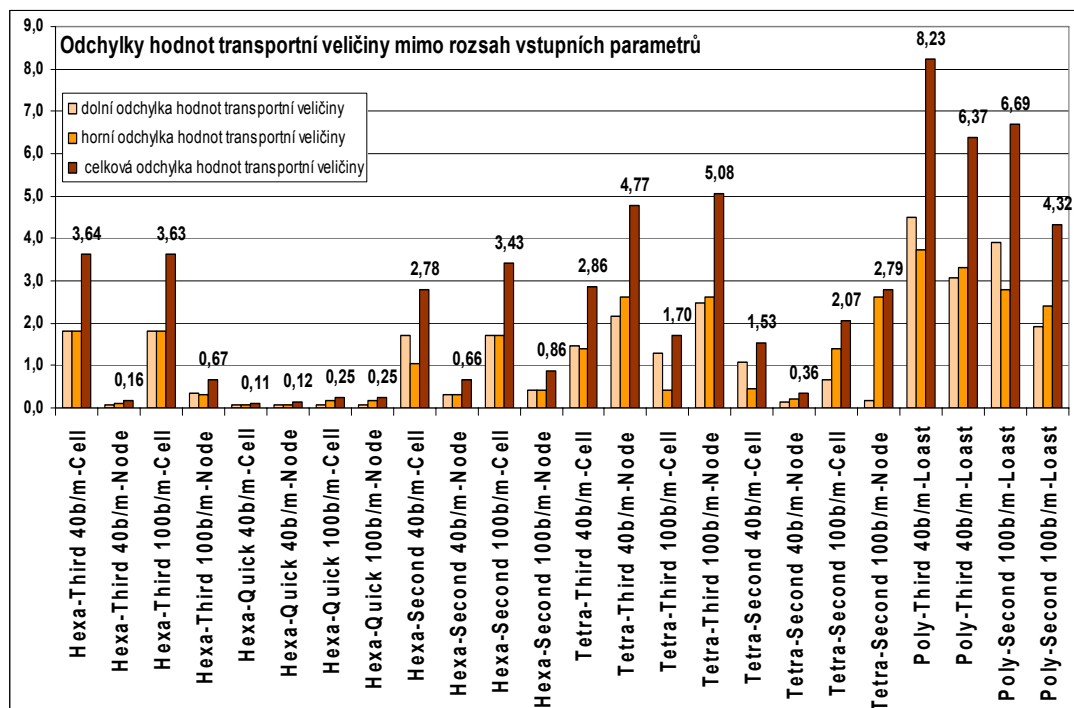
polyhedra, Least Squares

Oblasti s polyhedra buňkami byly počítány pouze Least Squares Cell-Based metodou, který je pro tento typ buněk doporučený v manuálu Fluent. Tato metoda však dosáhla nejslabších výsledků, hlavně ve výši hodnot odchylek od požadovaných parametrů, které jsou dobře zřetelné na obr.9. Jsou zde vzájemně porovnány výsledky všech variant výpočtů, při kterých odchylky vznikají.

4 ZÁVĚR

- Jak již bylo zmíněno, při aplikaci First-order a Power-law schémat nevznikají žádná teplotní pole mimo rozmezí vstupních podmínek, ovšem velká numerická difúze značně snižuje přesnost výpočtu.

- Nejlepších výsledků se dosahuje při použití Hexa mřížky a výpočtového schématu Quick upwind. V tomto případě má způsob výpočtu gradientu zanedbatelný vliv na výskyt hodnot mimo „správné“ rozmezí teplot. Menší difúze vzniká při hustější mřížce.
- U zbývajících dvou schémat (Second-order a Third-order) je zajímavé poznání, že pro hexa buňky je jednoznačně přesnější výpočet gradientu Node-Based metodou, naopak pro tetra buňky je přesnější Cell-Based metoda.
- Negativním poznáním jsou poměrně vysoké hodnoty odchylek transportní veličiny mimo rozsah teplot u polyhedra buněk, které výrazně snižují počet buněk ve výpočtové oblasti a tím také časovou náročnost výpočtu. Současná nabídka možností způsobu výpočtu u tohoto typu mřížkování zatím neumožňuje provádět výpočty s uspokojivou fyzikální přesností.



Obr. 9: Vliv typologie i hustoty mřížky, výpočtového schématu i způsobu výpočtu gradientu na hodnoty teplotního pole mimo rozsah vstupních parametrů

PODĚKOVÁNÍ

Příspěvek byl realizován za finanční podpory ze státních prostředků prostřednictvím Grantové agentury České republiky. Registrační číslo projektu je GAČR 105/08/1414.

LITERATURA

- [1] VESTEER, H. K., MALALASEKERA, W. *Computational Fluid dynamics*. England: Pearson education limited, 2007. 503 pp. ISBN 978-0-13-127498-3.
- [2] Fluent 6.3, Users guide, Tutorial guide.

Oponentní posudek vypracoval:

RNDr. Jan Chura, Ústav Geoniky AV ČR, Ostrava Poruba