Текущи резултати от разработката на числени реализации по изчислителна флуидна динамика в Институт за космически изследвания – БАН

н.с. I ст. д-р инж. Константин К. Методиев

Въведение в „Метод на крайните обеми".

Техниките за числена симулация по настоящем са на предния фронт в етапите на проектиране и разработка на всеки инженерен продукт. В наши дни в индустрията не се произвежда опитен образец преди да се тества на компютър. Това спомага за по-бързия и по-евтин дизайн на всеки индустриален продукт. Тези продукти, от своя страна, могат да бъдат изправени пред различни проблеми като неудовлетворителна работа, възникване на големи механични напрежения, динамична неустойчивост и корозия в случай на метали.

До сега много техники са разработени за виртуално тестване на продукти и изненадващо почти всички от тях произхождат от Аерокосмическия инженерен бранш. Изучаването на движението на всеки обект във флуид се нарича „Изчислителна флуидна динамика – ИФД", анализът на натоварването е „Изчислителна строителна механика" (понякога „Метод на крайните елементи" – МКЕ), анализът на устойчивостта на движението е „Динамика, устойчивост и управляемост", а оценката на корозионния процес – като „Симулация на корозията".

Повечето от тези науки изискват сериозна математическа подготовка на ниво следдипломна квалификация. За да се опростят нещата до по-елементарно ниво, потребителят изпозва готов софтуерен продукт за анализ. Тази статия цели запознаването на читателя със средствата на ИФД чрез формално описание на теорията и използвания ИФД софтуер за решаване на големи инженерни задачи.

През 1917 г. британският учен Ричардсън направи първия докладван опит за предсказване на метеорологичното време чрез числено решаване на частни диференциални уравнения и то на ръка! Като цяло е прието, че работата на Ричардсън, макар и неуспешна, отбелязва началото на ИФД, която в наши дни е голям бранш от „Научните изчисления". Неговата работа притежаваше четирите отличителни признака на ИДФ: ПРАКТИЧЕСКА ЗАДАЧА за решаване, МАТЕМАТИЧЕСКИ МОДЕЛ за представяне на задачата във форма на система частни диференциални уравнения, ЧИСЛЕН МЕТОД и КОМПЮТЪР, в този случай – самият Ричардсън. Осем години по-късно тези четири признака станаха стълб на модерната ИФД. Следователно не е изненадващо, че общоприетата дефиниция на ИФД като наука за намиране на числено решение на частни диференциални или интегрални уравнения, които от своя страна са модели на явленията на флуидни течения, до голяма степен олицетворява работата на Ричардсън.

От времето на Ричардсън КОМПЮТРИТЕ са се развили до безпрецедентни нива и то на все по-ниска цена. Обхватът от приложения пораждащ ПРАКТИЧЕСКИ ЗАДАЧИ за числено решаване се е увеличил драматично. В допълнение на традиционните нужди на метеорологията, океанографията, някои отрасли на физиката и гама от инженерни отрасли, по настоящем се правят заявки от динамичната и бързо развиващата се производствена индустрия, чийто традиционен подход „Направи-тествай-корогирай” бързо се заменя от количествени методи на всички нива. Нуждата както от нови материали, така и от средства за вземане на решение при ограниченията на околната среда, е нарастващ източник на пазарни търсения за математическото моделиране, числените алгоритми и индустриалните изчислителни машини.

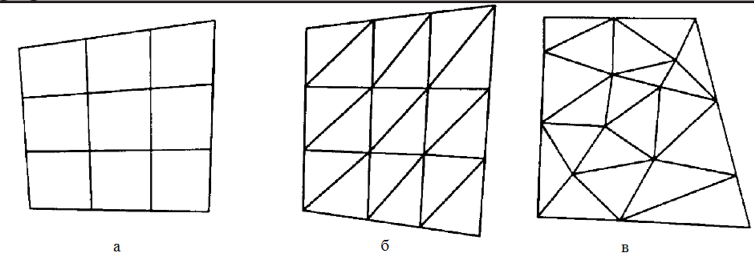
МАТЕМАТИЧЕСКИТЕ МОДЕЛИ от своя страна са подобрени, обаче основните уравнения на механиката на непрекъснатите среди, бидейки налице повече от век преди първите опитие на Ричардсън в областта на ИФД, все още са в основите за моделирането на процесите на флуидно течение. Необходимо е единствено да се „приспособят” уравненията на термодинамиката, уравненията на състоянието, както и закони от областите на моделиране на неравновесни и многофазни явления на течението.

ЧИСЛЕНИТЕ МЕТОДИ вероятно са ключа за успеха през последните осемдесет години, като последните двадесет от тях може би са най-продуктивните. Успехът се основава на пионерната работа на учени като Кюрант, Фридрикс, Рихтмайер, Лакс, Олейник, Вендроф, Годунов, Русанов, ван Лиър, Роу, Ошер, Колела и много други. Чистият резултат е, че по-точни, по-ефективни, по-силни и по-усъвършенствани числени методи са налице за амбициозните практически нужди днес. Заради масивните нужди от ИФД на ниво усъвършенствани числени методи, нови образователни нужди и обучение на учени и инженери възникват по настоящем и в бъдеще.

Основните закони на флуидната динамика са консервативните. Това са изрази, които показват съхранението на масата, количеството на движение и енергията в обем, затворен от повърхнина. Само с допълнителен критерии за достатъчна правилност на решението тези закони могат да бъдат превърнати в частни диференциални уравнения (ЧДУ). Регулярността обаче не може да бъде винаги гарантирана. Формирането на ударна вълна е най-типичният пример за прекъсване на монотонността на полето на течението. Ако се появи такова прекъсване, решението на ЧДУ трябва да се интерпретира в неустойчива форма, т.е. като решение на уравненията в тяхната обобщена форма. Например законите, описващи течение през ударна вълна, т.е. законите на Ранкин – Хюгонио, са комбинации от консервативни уравнения в обобщена форма. За коректното представяне на ударните вълни, също и в числените методи, тези закони трябва да се взимат под внимание.

Съществуват допълнителни ситуации, където акуратното представяне на консервативните закони е важно за числения метод. Втори пример е разделителна линия, която се появява зад крилен профил или лопатка когато ентропията е различна от двете страни на профила. В този случай се появява тангенциално прекъсване в монотонността. Друг пример е несвиваемия поток, където предписването на условие за несвиваемост, в качеството му на консервативен закон за масата, определя полето на статичното налягане.

В случаите, цитирани горе, важно е консервативните закони в тяхната интегрална форма да се представят акуратно. Най-естественият метод да се осъществи това е да се дискретизира интегралната форма на уравненията, а не диференциалната. Това е основата на Метода на крайните обеми. По-нататък, в случаите когато строгото съхранение в интегралния смисъл не е абсолютно необходимо, все още физически е „привлекателно” да се използват основните закони в тяхната най-примитивна форма.



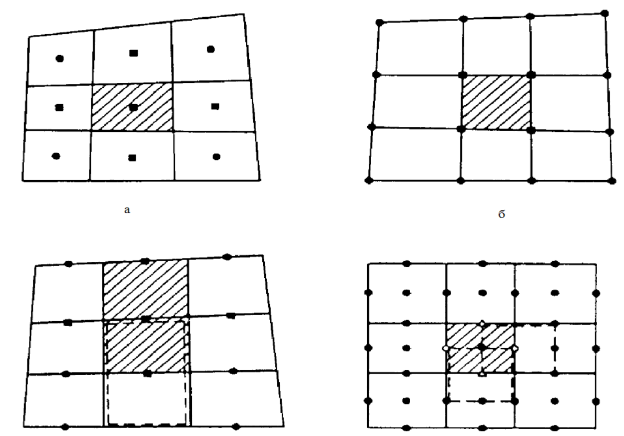
Типичен избор на мрежи в МКО: (а) структурна квадртична мрежа; (б) структрна триъгълн мрежа; (в) неструктурна триъгълна мрежа

Полето на течението или изчислителната област се разделя, както и в метода на крайните елементи, на множество от непокриващи се клетки, които покриват цялата област. В метода на крайните обми (МКО) се използва терминът „клетка” вместо термина „елемент”, използван в метода на крайните елементи (МКЕ).

В практиката се прилагат консервативни закони, за да се определят променливите на течението в някои дискретни точки на клетките, наречени възли. Както и в МКЕ, тези възли са разположени в типични места на клетките, като центроида, върховете или средите на стените. Клетките могат да бъдат триъгълни, четириъгълни и др. Те могат да образуват структурна или неструктурна мрежа. Цялата геометрична свобода на МКЕ може да се използва в МКО. Горната фигура показва някои типични мрежи.

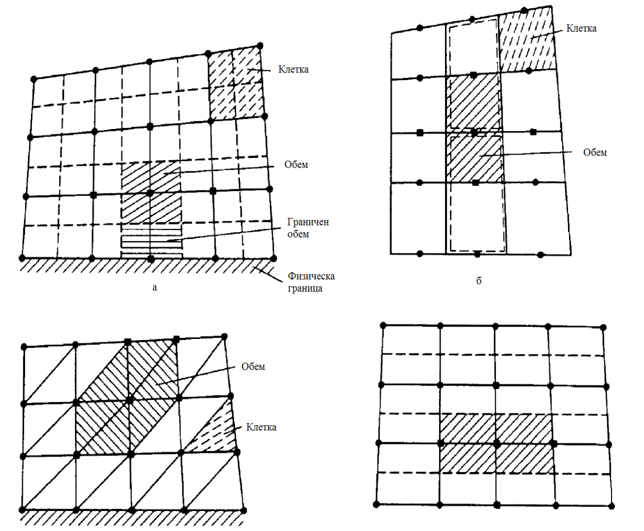
Изборът на възли може да се диктува от желанието да се представи решението чрез интерполационна структура, както е в МКЕ. Типичен избор тогава е геометричният център на тежестта на клетката, за представяне на частично константни функции, или върховете на клетката, за представяне на частично линейни (или квадратични) функции. Обаче, в МКО функционалното пространство за решението не е необходимо да се дефинира и възлите могат да бъдат избрани по начин, който не предполага интерполационна структура. Следните фигури показват някои типични примери за избор на възли със съответната дефиниция на променливите.

Първите два избора заключават интерполационна структура, а последните два – не. В последния пример функционалните стойности не са дефинирани във всички възли. Мрежата от възли, по която налягането и плътността са дефинирани, е различна от мрежа, по която са дефинирани X и Y компонентите на скоростта. Този подход в общия случай се нарича шахматен.



Типичен избор на възли в МКО. Маркираните възли се използват в изравняването на числената флуксия в контролния обем: (а) интерполационна структура на частична константа, (б) интерполационна структура на частично линейна функция, (в) без интерполационна структура с всички променливи, дефинирани за всеки възел, (г) без интерполационна структура, като не всички обеми са дефинирани з всеки възел (Декартова координатна система).

Третата основна съставна на метода е изборът на обеми, по които се прилагат консервативните закони. В горната фигура някои възможни избора на контролни обеми са показани с щриховка. В първите два примера, контролните обеми съвпадат с клетките. Третият пример в горната фигура показва, че обемите, по които се прилагат консервативните закони, не е необходимо да съвпадат с клетките на мрежата. Обемите даже могат да се препокриват. Следващата фигура показва някои типични примери за обеми, които не съвпадат с клетките, за припокриващи се и непрепокриващи се случаи. Понятието обем означава контролен обем, към който се прилага консервативен закон (т.е. определяне на стойност, свързана с функция), докато терминът „клетка” има чисто геометричен смисъл, т.е. това е дискретизация, свързана с геометрията. Изискването за състоятелност обаче за обемите е по-слабо. Те могат да се припокриват така, че да се формират фамилии от обеми. Всяка фамилия трябва да се състои от неприпокриващи се обеми, които обхващат цялата област. Изискването за състоятелност е, че потокът, напускащ обема трябва да влезе в друг.



Избор на обеми, които не съвпадат с клетките, за припокриващи се и непрепокриващи се случаи: (а) обеми, шахматно рзположени спрямо клетките, непрепокриващ се случай, (б) обеми нешахматно разположени прямо клетките, припокриващ се случай, (в) обеми нешахматно разположени спрямо клетките, припокриващ се случай, (г) обеми шахматно разположени спрямо клетките, припокриващ се случай.

Очевидно е, че посредством декуплирането на обемите и клетките, свободата в определянето на функционалното представяне на полето на течението в МКО става много поголяма от тази в МКЕ и Метода на крайните разлики (МКР). В частност става дума за комбинация от формализми на флуидната задача по контролнит обеми, които са най-естествения начин за получаване на дискретизация с геометричната гъвкавост в избора на мрежа и гъвкавост в дефинирането на дискретни променливи на течението, а това прави МКО по-привлекателен за инженерни приложения.

МКО комбинира най-доброто от МКЕ, а именно геометричната гъвкавост, с най-доброто от МКР – гъвкавост в дефинирането на дискретно поле на течението (дискретни стойности на зависимите променливи и техните асоциирани флуксии). Някои фомулировки са близо до тези на МКЕ и могат да се интерпретират като подобласт на колокация на МКЕ (вж. предпоследната фигура). Други формулировки са близо до тези на МКР и могат да се интерпретират като консервативни МКР (вж. фигурата горе). Други формулировки попадат между тези граници.

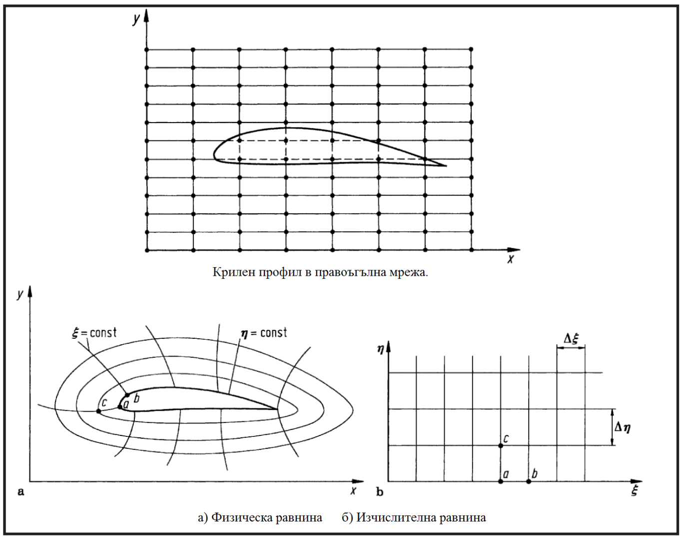
Смесицата между подобните на МКО и МКЕ подходи понякога води до объркване в терминологията. Някои автори с образователна основа МКЕ използват термина „елемент" за клетката както и често използват термина „контролна клетка" за „контролния обем". Строго казано, понятието „елемент" е различно от понятието „клетка". Мрежата се подразделя на „отвори", а те от своя страна представляват клетки само ако се предполага разделяне на геометрията. Ако клетките също заключават в себе си, в смисъла на МКЕ, дефиниция на функционално пространство, то те са и елементи.

От горепосоченото може да се заключи, че МКО има само предимства пред МКЕ и МКР и по този начин може да се зададе въпроса защо всички методи на ИФД не са базирани на МКО. Пак от гореспоменатото вече е ясно, че в МКО се изпитва затруднение в акуратната дефиниция на производните. Понеже изчислителната мрежа не е задължително ортогонална и с еднаква стъпка, както е в МКР, дефиницията на производна на основата на ред на Тейлор е невъзможна. Също така няма механизъм, подобен на интегралната формулировка, както е в МКЕ, чрез който по-високите производни се конвертират в по-нисък порядък. Следователно МКО е най-подходящ за флуидни задачи в примитивни променливи, където отсъстват вискозни такива (уравнения на Ойлер) или поне не са доминиращи (уравнения на Навие-Стокс за големи числа на Рейнолдс). По-нататък в МКО има затруднения в получаването на точност от по-висок ред. Закривените граници на клетката, използвани в МКО, или закривените линии на мрежата, използвани в МКР, се реализират трудно. В повечето методи границите на клетките са прави и линиите на мрежата са частично прави. Представянето на функционалните стойности или флуксии по един по-добър начин от частично константен или частично линеен е възможно, но по-скоро е трудно. Повечето МКО са само от втори порядък на точност. За много инженерни приложения, тази точност е достатъчна. Разработката на МКО с по-добра точност е по настоящем област на много активно изследване и все още няма ясна представа за това как да се достигне по-висока точност по ефективен начин.

Въведение в координатните трансформации и мрежи.

Във всички ИФД приложения, занимаващи се с физически задачи, където еднаква правоъгълна мрежа би могла да се използва във физическата равнина, не би имало причина да се променят основните уравнения. Вместо това тези уравнения биха могли просто да се приложат в правоъгълно (x, y, z, t) пространство, да се дискретизират тези уравнения на крайни разлики с някаква стъпка и да се решат с използването на еднакви инкрементални стойности на Δx, Δy, Δz и Δt. В практиката обаче само няколко реални задачи са толкова пригодни за целта. Например да допуснем, че ние искаме да изчислим полето на течението около крилен профил, скициран по начина на следната фигура, където профилът е разположен в правоъгълна мрежа. Забележителни са проблемите с този тип мрежа:

Някои точки на мрежата попадат вътре в профила, където течение естествено няма. Какви стойности на параметрите на течението тогава могат да се предпишат за тези точки?
Съществуват понякога точки, които попадат на повърхността на профила. Това не е добре защото повърхността на профила е жизнено важно гранично условие за определянето на течението и следователно повърхността на профила трябва да бъде ясно и силно „видяна" от численото решение.



Крилен профил в правоъгълна мрежа.

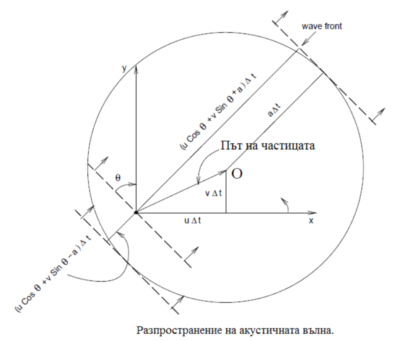
а) Физическа равнина б) Изчислителна равнина

Като резултат може да се заключи, че правоъгълната мрежа в горната фигура не е подходяща за решаване полето на течението. В контраст, мрежа, която е подходяща, е скицирана на последната фигура (а). Тук се вижда неравномерна криволинейна мрежа, която буквално обхваща крилния профил. Новите координатни линии ξ и η са дефинирани така, че повърхността на профила става координатна линия само по себе си с уравнение η = const. Това се нарича подравнена към границата координатна система. Важният момент е, че точките на мрежата по естествен път попадат на повърхността на профила така, както е показано на последната фигура (а). Това, което е съществено, е, че във физическото пространство, показано тук, мрежата не е правоъгълна и няма еднаква стъпка. Като следствие, конвенционалните разликови техники се използват трудно. Това, което трябва да се направи, е да се трансформира криволинейната във физическото пространство мрежа в провоъгълна във функция на координатите ξ и η. Това е показано на последната фигура (б), която поквза такава правоъгълна мрежа. Тя се нарича изчислителна област. Съществува съответствие едно към едно между тази мрежа и криволинейната в (а), която пък се нарича физическа област. Например точки a, b и c във физическата обаст (а) съответстват на точки a, b и c в изчислителната област, за която Δξ и Δη са еднакви инкременти. Изчислената информация тогава се предава обратно на физическото пространство. Освен това, когато уравненията са решават в изчислителното пространство, те трябва да се изразят във функция на променливите ξ и η вместо x и y. Това означава, че уравненията, описващи процеса, трябва да се трансформират от (x, y) в (ξ, η) независими променливи.

Риманова задача.

Началната задача на Риман е една от най-фундаменталните задачи в газовата динамика. Решението на тази задача е точно и по такъв начин дава физическото решение за разпространението на акустични вълни в рамките на нестационарен свиваем поток. Това прави тази задача често използван метод за решение на различни задачи от газовата динамика. Освен неговото приложение за решаване на задачи за физически течения, методът също се използва за създаване на техники за числено решение. Годунов първи приложи теорията на Римановата задача за пресмятане на флуксиите по клетъчните стени в МКО за едномерни уравнения на Ойлер. Този негов метод позволява да се намерят акуратни решения за по-сложни задачи от флуидни течения дори и за по-големи размерности.

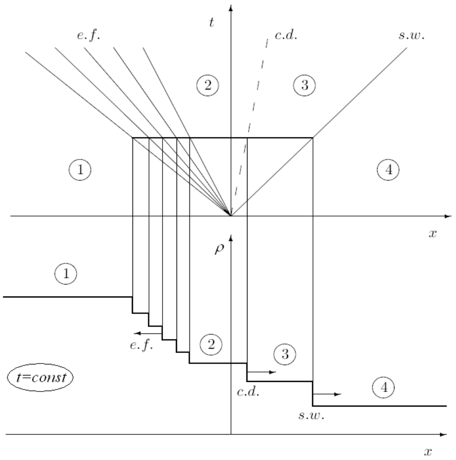
Във физиката уравнението на акустичната вълна описва разпространението на акустични вълни в непрекъсната среда. Видът на уравнението е частно диференциално от втори ред. Това уравнение описва еволюцията на акустичното смущение върху статичното налягане p или скоростта на флуидната частица u като функция на координатата r и времето t. Опростена форма на уравнението описва акустичните вълни само в една размерност (позиция x), докато по-общата форма описва вълните в три димензии (обобщен вектор r = (x, y, z)).



Разпространение на акустичната вълна.

Разпространение на ентропийната вълна.

В горната фигура е изобразен типичен случай за разпространението на фронта на акустична вълна. Движението на вълновия фронт може да се проследи във вида на повърхност в (x, y) пространството. Всеки вълнови фронт се характеризира с неговата скорост λ_i, нарпавление θ и вида на смущение, което то пренася r_i.

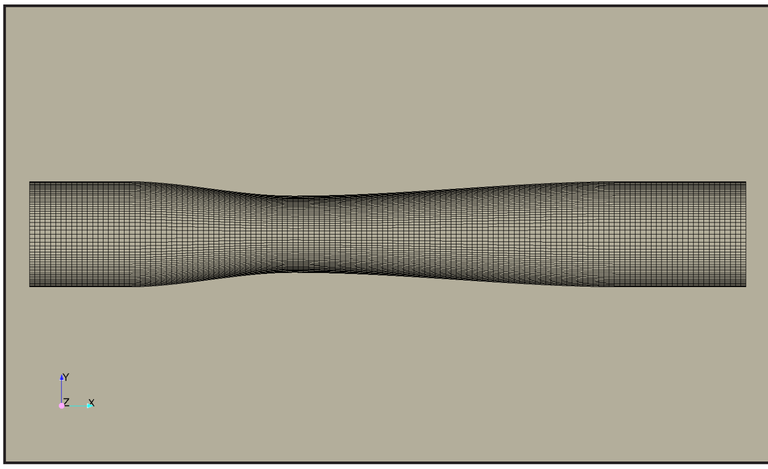


Задача на Риман. Две акустични вълни (или ударна (s.w.) или разширителна (e.f.)) разделят началните състояния 1 и 4 и състоянията 2 и 3. Контактен разрив (c.d.) разделя и двете финални състояния.

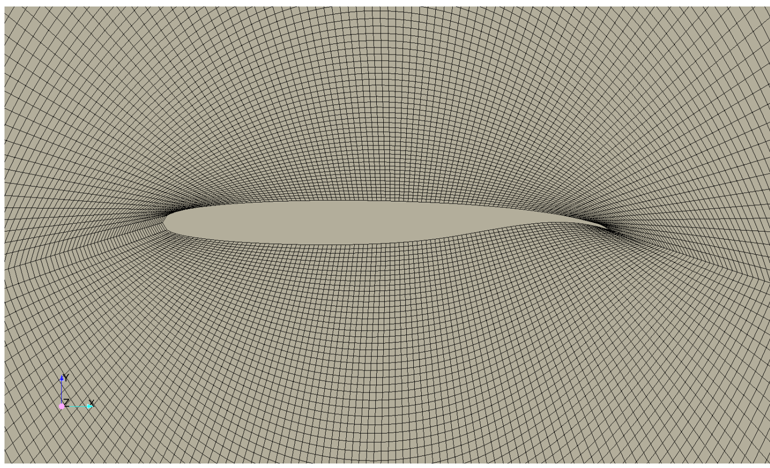
В горната фигура акустичното решение е представено в характеристичната и физическа области. Може да се наблюдава модела, на който се разпада началния разрив. Появяват се три акустични вълни, движещи се с местната звукова скорост в обратни направления: разширителна вълна, контактен разрив и ударна вълна. „Характеристичната” диаграма е нещо удобно до известна степен, тъй като тя „замразява” еволюцията на целия процес във времето вместо да се изобразява тази еволюция чрез много фигури в течение на времето. Най-важното нещо, което трябва да се запомни, е следното. Всяка елементарна разширителна вълна намалява местната звукова скорост, като така позволява на следващата я да изостава. Що се отнася до ударната вълна, там логиката е обратна. Всяка елементарна ударна вълна увеличава местната звукова скорост и по такъв начин тя бива настигана от следващата. Това, което се получава, е ветрило в първия случай и скок на уплътнение във втория. Оставащият контектен разрив не афектира параметрите на течението с изключение на плътността.

Нашият опит.

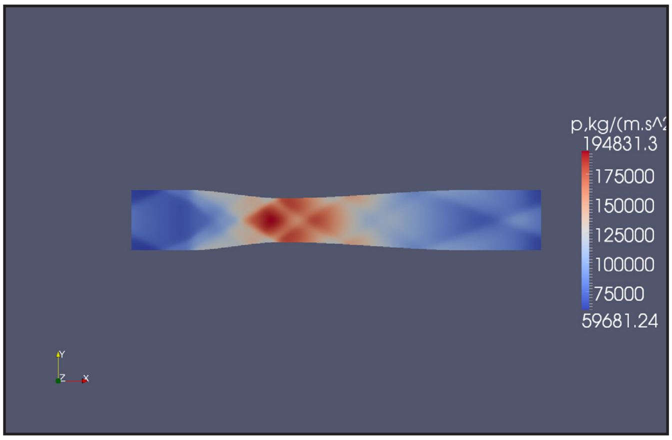
Понастоящем в Института за космически изследвания – БАН успешно се разработва изчислителна програма в опит да се постигнат приемливи резултати за симулация на флуидно течение посредством МКО. Така наречените суперкритични крилни профили и Лаваловата дюза са изкушаващите задачи, които ние решихме. В случай, че някои има въпроси относно алгоритъма на числено решение, авторът на статията е силно склонен да сподели своето познание. Някои резултати са публикувани и в Интернет на адрес: *http://www.space.bas.bg/acsu/cfd.htm*



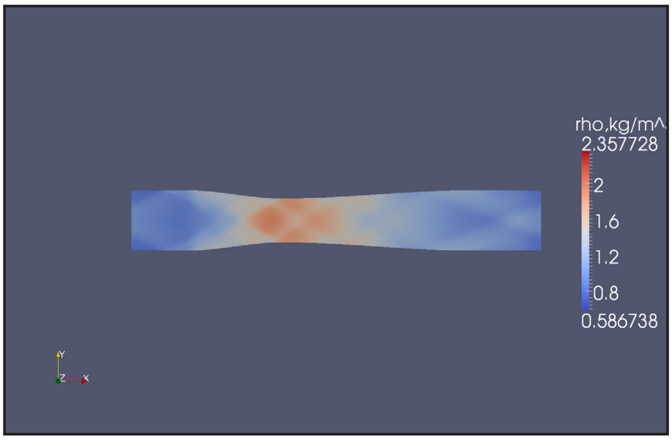
Лавалова дюза, изчислителна мрежа, 137x61 точки



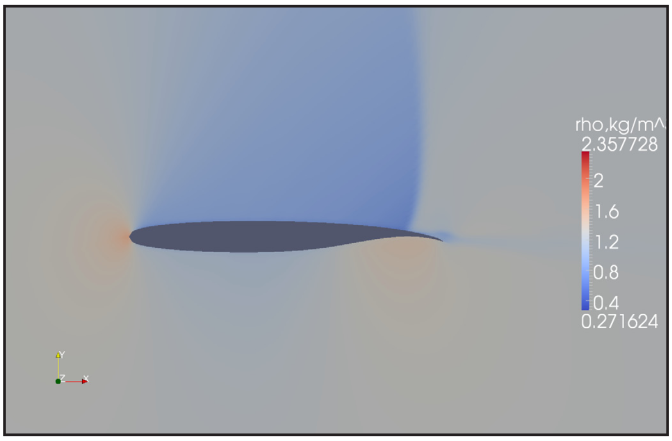
Крилен профил NASA SC-31, изчислителна мрежа, 201x105 точки



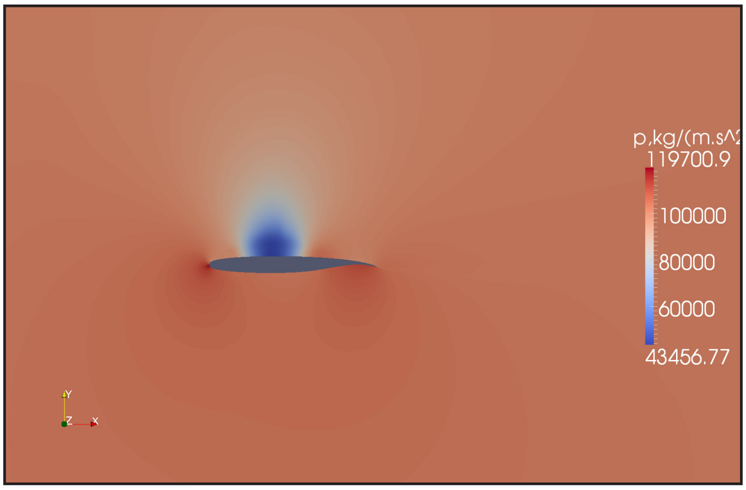
Лавалова дюза, M=2, статично налягане, итерации 5000, метод на Рунге–Кута от $6^{ти}$ ред



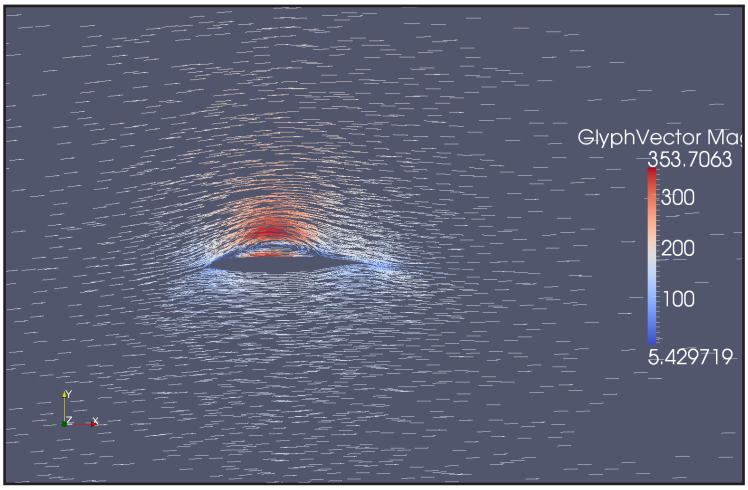
Лавалова дюза, M=2, плътност, итерации 5000, метод на Рунге–Кута от $6^{ти}$ ред



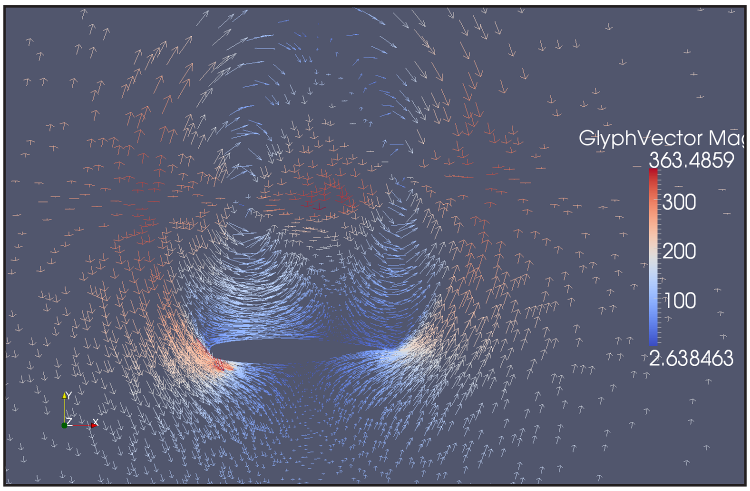
SC-31, M=0.8, плътност, итерации 50000, ъгъл на атака=0.1^o, двустъпкова схема на Адамс от типа „Прогноза – корекция”



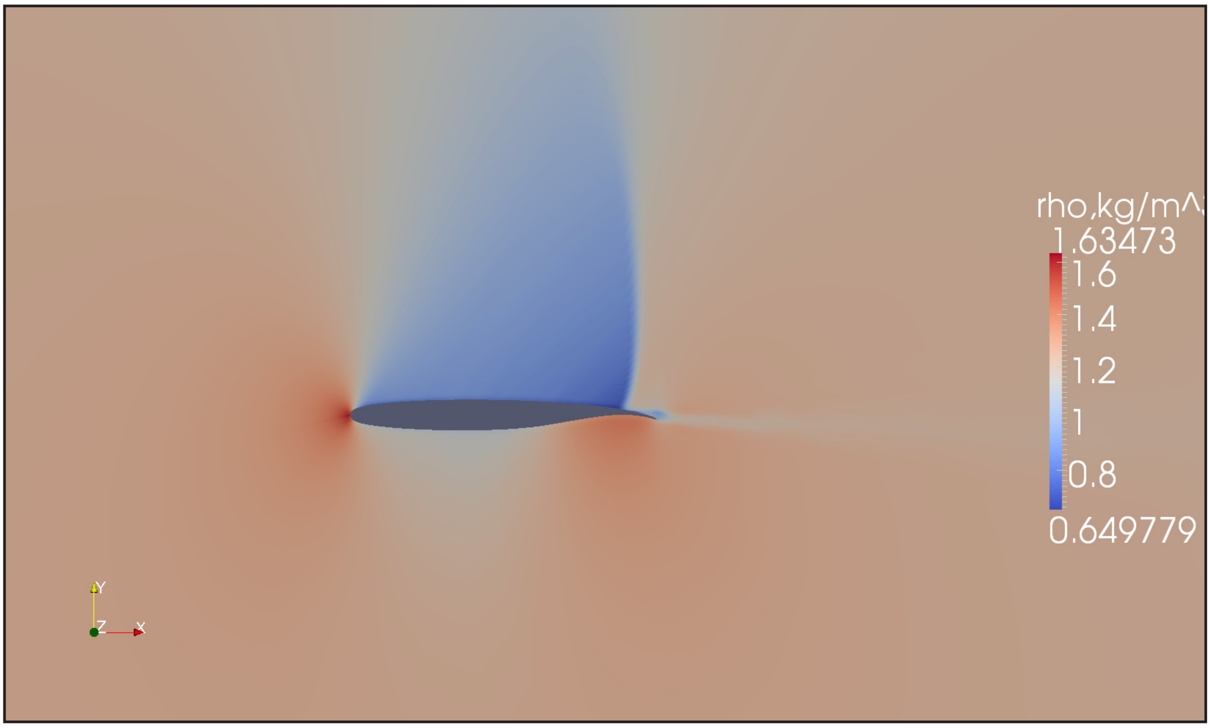
SC-31, M=0.8, статично налягане, итерации 50000, ъгъл на атака=3.1^o, двустъпкова схема на Адамс от типа „Прогноза – корекция”



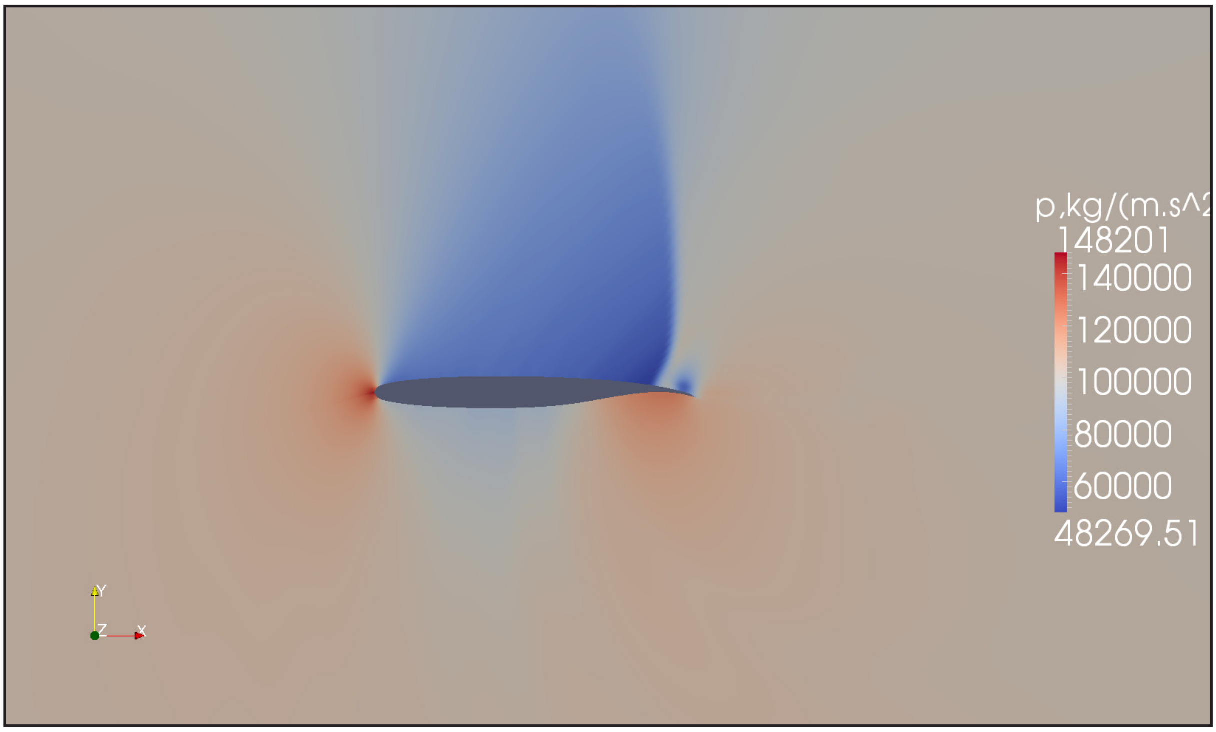
SC-31, M=0.5, скоростно векторно поле, итерации 50000, ъгъл на атака=3.1^o, двустъпкова схема на Адамс от типа „Прогноза – корекция”



SC-0414, M=0.5, скоростно векторно поле, итерации 50000, ъгъл на атака=90^o, метод на Рунге–Кута от $6^{ти}$ ред



SC-31, M=0.81, плътност, итерации 50000, ъгъл на атака=0.1°, метод на Рунге–Кута от 6ти ред



SC-31, *M=0.81, статично налягане, итерации 50000, ъгъл на атака=0.1°, двустъпкова схема на Адамс от типа „Прогноза – корекция"*

komet@space.bas.bg
konstantinmetodiev@gmail.com