

# Dinàmica de fluids computacional

# Índex

<b>Continguts</b>	<b>2</b>
6.1 Introducció i objectius	2
6.2 Instal·lació d'Ansys Fluent	3
6.3 Modelització	9
6.4 Discretització	11
6.5 Exemple: Flux en una canonada 2D	13
6.6 Mètode dels volums finits	16
6.7 Algorismes per a una solució iterativa	20
<b>Bibliografia</b>	<b>22</b>
<b>Exercicis</b>	<b>23</b>

# Continguts

## 6.1 Introducció i objectius

En aquest tema introduïrem la dinàmica de fluids computacional o CFD (per les seves sigles en anglès). Com hem vist als temes anteriors, el flux de fluids es descriu per tres lleis fonamentals de conservació: de la massa, del moment i de l'energia. La formulació matemàtica d'aquestes lleis condueix a les equacions que governen el flux dels fluids; poden ser equacions diferencials en derivades parcials, o bé equacions integrals.

Si s'apliquen les equacions a una partícula de fluid infinitesimal s'obtenen les equacions en derivades parcials. Una visió complementària consisteix en aplicar les lleis de conservació a un volum fix del domini, al que anomenem volum de control, per obtenir així la forma integral de les equacions. Les dues formulacions són equivalents. Ambdues representen sistemes d'equacions acoplades i no lineals. El que significa que es poden resoldre de forma exacta en molt pocs casos, alguns dels quals hem vist al Tema 5. Per aquest motiu s'utilitza a bastament la dinàmica de fluids computacional, on mitjançant algorismes adequats convertim les equacions governants en un conjunt d'equacions algebraiques.

No és l'objectiu d'aquest curs construir programes per resoldre el flux de fluids: n'hi ha molts, i de molt bons, ja sigui de programari comercial o lliure, i amb formulacions diverses. Fes una ullada a <https://www.cfd-online.com/Wiki/Codes> per copsar ràpidament i exhaustiva el que hi ha disponible en l'actualitat. La indústria utilitza aquests codis amb profusió: en estudis d'aerodinàmica (aeronàutica i automobilística), flux supersònic i hipersònic (indústria aeroespacial i de defensa), previsió meteorològica, ciències naturals i enginyeria ambiental, bioenginyeria, disseny i anàlisi de sistemes industrials amb flux de fluids i transferència de calor, reactors químics, anàlisi de motors i combustió, i fins i tot la indústria de la publicitat i l'entreteniment, per crear efectes visuals per a pel·lícules, anuncis i videojocs.

També s'utilitza en recerca, en aquests mateixos camps, amb codis propietaris dels grups de recerca, per resoldre problemes específics.

En aquesta assignatura utilitzarem **Fluent**, que és un programa comercial, en detriment de **OpenFoam**, que fa el mateix, però és de codi lliure. Ambdós són molt versàtils i potents, la diferència és que Fluent proporciona un aterratge “suau”, amb una interfície d’usuari amigable i endreçada, mentre que OpenFoam requereix molt més temps de rodatge per poder-lo fer servir.

Els objectius seran

- ▶ La instal·lació d’Ansys Fluent
- ▶ Descriure una “caixa negra”
- ▶ Introduir mètode dels volums finits
- ▶ Discretitzar de les equacions
- ▶ Escriure les equacions algebraiques
- ▶ Descriure els algorismes de resolució

La bibliografia rellevant es basa en els llibres de ([Ferziger i Perić, 1999](#)), ([Mazumder, 2016](#)) i de la documentació de ([Ansys, n.d.](#)).

## 6.2 Instal·lació d’Ansys Fluent

Com hem dit, utilitzarem el programa Ansys Fluent (en endavant, Fluent) de l’empresa Ansys Inc., que comercialitza programari d’ús generalitzat a la indústria. Tenim un parell d’opcions per utilitzar Fluent:

- ▶ Instal·lar la versió d’estudiant, gratuïta, amb una llicència d’un any de validesa (fins l’actualització següent de Fluent, és a dir, la següent “release”) que es pot descarregar des de la pàgina web de Fluent. La versió d’estudiant té certes limitacions, bàsicament 1) el nombre de punts o cel·les de càlcul té un topall de 1 milió, i 2) que la versió d’estudiant està disponible només per a Windows 10.
- ▶ Utilitzar alguna de les versions que tenim a **virtlabs**, completa, amb la llicència que tenim a la Universitat. Malgrat que és la versió completa, vol dir sense les limitacions de la versió d’estudiant, també té desavantatges: 1) l’accés a virtlabs requereix de VPN si es fa des de fora de la URV, amb la consegüent lentitud i dificultat que això comporta, 2) igual que la versió d’estudiant, només està disponible per a windows.

En qualsevol dels dos casos, es requereix un ordinador windows. Si no tens windows com a sistema operatiu al teu ordinador, encara pots instal·lar-hi una màquina virtual en Windows10, per instal·lar-hi després la versió d'estudiant (no es pot córrer Fluent a través de virtlabs). Aquí no explicarem els passos per fer-ho, però. Dependrà del teu sistema operatiu.

Fluent resol les equacions del flux de fluids mitjançant la tècnica dels volums finits. Fluent permet incorporar turbulència, reacció química, fluxos no newtonians, deformació de les fronteres del domini i altres extres.

Estudiarem numèricament el flux en una canonada de secció circular, per al qual sabem que hi ha solució exacta (el flux de Poiseuille circular que hem estudiat al Tema 5). Aquest exemple és una bona plataforma per explicar els conceptes que hem d'introduir en aquest tema.

## Requeriments del sistema

Tingues en compte que la versió d'estudiant del programari és un paquet complet d'aplicacions d'Ansys, és a dir, a més a més de Fluent conté moltes altres eines de simulació que no farem servir però que s'afegeixen igualment a la instal·lació. A part d'un Windows10, necessitaràs un mínim de 4GB de memòria RAM i 50 GB d'espai lliure en disc.

## Descàrrega i instal·lació del programari

Abans d'instal·lar:

- ▶ Assegura't que el teu ordinador compleix els requisits tècnics necessaris per executar el programari —consulta el document de suport de la plataforma per a més detalls.
- ▶ Assegura't de tenir privilegis d'administrador per a l'ordinador on vols instal·lar Fluent.
- ▶ Desinstal·la qualsevol producte ANSYS existent al teu ordinador.

Per baixar el programari, hem d'anar a la pàgina de descàrrega de **Ansys Student**. Només caldrà fer clic al botó de descàrrega, de color groc,

[DOWNLOAD ANSYS STUDENT 2024 R2](#)

Com hem dit, amb Ansys Student s'instal·len diferents mòduls que es poden utilitzar per resoldre els problemes de flux de fluids en moltes aplicacions. En aquest curs només utilitzarem Fluent, ja que tractarem problemes amb fluids simples, sense acoblaments amb estructures sòlides, ni camps electromagnètics, etc.

## Funcions i aplicacions incloses

Els diferents mòduls que s'instal·len amb Ansys Student són

- ▶ Ansys Workbench
- ▶ Ansys Multiphysics
- ▶ Ansys Mechanical
- ▶ Ansys Discovery
- ▶ Ansys SPEOS
- ▶ Ansys Autodyn
- ▶ Ansys Forte
- ▶ Ansys Chemkin-Pro
- ▶ Ansys CFD (Ansys CFX and **Ansys Fluent**)
- ▶ Ansys Meshing and Extended Meshing
- ▶ Ansys DesignModeler
- ▶ Ansys DesignExplorer
- ▶ Ansys SpaceClaim
- ▶ Ansys Mechanical APDL
- ▶ Ansys Motion
- ▶ Ansys Polyflow
- ▶ Ansys CFD-Post
- ▶ Ansys EnSight
- ▶ Ansys TurboGrid
- ▶ Ansys EnVision
- ▶ Ansys ACP Pre & Post
- ▶ FENSAP-ICE
- ▶ Aqwa
- ▶ Ansys System Coupling

que poden utilitzar-se en diferents aplicacions en què intervenen fluids: amb estructures elàstiques, amb camps electromagnètics, etc. Diferents mòduls s'agrupen en plataformes d'anàlisi diferents, els "bancs de treball". També hi ha manera de treballar amb les eines cridant-les una per una, però el sistema en Workbench facilita la feina:

### Sistemes d'anàlisi en Workbench

- ▶ Couple Field Harmonic, Modal, Static & Transient
- ▶ Eigenvalue Buckling
- ▶ IC Engine
- ▶ Structural Optimization (Topology)
- ▶ Turbomachinery Fluid Flow
- ▶ Design Assessment
- ▶ Electric
- ▶ Explicit Dynamics
- ▶ Fluid Flow (CFX)
- ▶ **Fluid Flow (Fluent)**
- ▶ Harmonic Response
- ▶ Linear Buckling
- ▶ Magnetostatic
- ▶ Modal
- ▶ Random Vibration
- ▶ Response Spectrum
- ▶ Rigid Dynamics
- ▶ Shape Optimization
- ▶ Static Structural
- ▶ Steady-State Thermal
- ▶ Thermal-Electric
- ▶ Transient Structural

### Importació de geometria

- ▶ Importació de format neutre IGES, STEP.
- ▶ Parasolid (nadiu d'ANSYS DesignModeler)

Després de la instal·lació, pots rebotar l'ordinador i executar el producte fent clic a l'accés directe al Workbench que apareix a l'escriptori.

Si optes per utilitzar alguna de les versions de virtlabs, comprova que funciona en el teu ordinador.

## Què és una caixa negra

El programari comercial Fluent és el que anomenem una *caixa negra* per a un usuari de CFD. És important conèixer els elements principals que hi ha dins d'aquesta *caixa negra*, per poder utilitzar l'eina d'una manera efectiva i evitar *garbage in, garbage out*, és a dir, "brossa entra, brossa surt". Aquesta discussió, però, s'aplica a qualsevol eina de simulació comparable.

Les entrades de l'usuari són, típicament,

- ▶ propietats del material,
- ▶ geometria,
- ▶ malla,
- ▶ condicions de contorn,

. Correm la nostra simulació, i obtenim els resultats. Aquests resultats poden ser, per exemple,

- ▶ línies de contorn,
- ▶ imatges en plans de tall i 3D de les magnituds interessants,
- ▶ perfils dels camps hidrodinàmics,
- ▶ vector velocitat, línies de corrent, traça, etc

Les imatges en color són la part més seductora dels resultats. No obstant això, si no saps què passa exactament a la "caixa negra", aquestes imatges en color poden ser incorrectes, per la qual cosa necessitem entendre com funciona i què hi ha dins la caixa negra.

Les entrades d'usuari són utilitzades per l'eina computacional per resoldre un model matemàtic. És fonamental tenir sempre en compte que *resolem un model matemàtic que modela un problema físic*. No resolem un problema físic. El model matemàtic incorpora principis físics bàsics del nostre problema (com ara condicions d'equilibri o de conservació) però alhora incorpora hipòtesis que són pròpies del model matemàtic. Per això és fonamental saber quin és el model matemàtic que es resol a la simulació, quins són els principis físics en què es basa i quines són les hipòtesis que fa.



La nostra eina de simulació obtindrà una solució numèrica del model matemàtic, això és, determinades variables (típicament el camp de pressió i el de velocitats) en punts seleccionats del domini –no a tots els punts. Aquests punts poden ser els centres de les cel·les en què dividim el domini, poden ser els vèrtexs de les cel·les, o els centres de cara. Per això, hem de tenir clar quines variables està calculant l'eina, i on les calcula.

Un cop tenim els valors de les variables passem al postprocessament. Les imatges en color són un exemple de post-processat.

Quan treballem amb el nostre simulador hem de tenir cura

- ▶ de no afectar el model matemàtic, entrant ingredients o elements que no formaven part de les hipòtesis,
- ▶ de no afectar el procediment de solució numèrica, amb eleccions equivocades dels esquemes de càlcul, del control de la tolerància, etc
- ▶ qde no afectar el postprocessament, amb representacions, interpolacions o projeccions incorrectes.

## **Validació dels resultats de simulació**

Els càlculs analítics previs a la resolució numèrica ens poden donar una idea dels resultats esperables o tendències; en molts casos, també, podem partir del problema físic, fer alguns càlculs analítics i utilitzar aproximacions per al model matemàtic.

En qualsevol cas, quan hem obtingut els nostres resultats numèrics hem de verificar i validar els nostres resultats. La verificació consisteix a qüestionar-se si el model s'ha resolt correctament. Les preguntes que ens hem de fer són,

- ▶ Els resultats són consistents amb el model matemàtic?
- ▶ El valor de l'error numèric és acceptable?
- ▶ La comparació amb els resultats analítics o experimentals és raonable?

La validació es pot realitzar mitjançant la comparació dels nostres resultats amb dades experimentals, en cas que estiguin disponibles, o amb resultats publicats a la literatura (*Benchmarks*).

### 6.3 Modelització

El model matemàtic ve representat per les equacions de conservació de la massa i del moment. Si hi ha acoblament amb fenòmens tèrmics, també caldrà inclure el balanç d'energia, que no considerarem aquí.

En el mètode dels volums finits que utilitzarem, la formulació és **integral** sobre elements de volum eulerians  $V$ . És a dir, partirem de les equacions (3) i (10) del Tema 3. Particularitzades a un fluid incompressible, aquestes equacions s'escriuen com

$$0 = - \oint_S \vec{v} \cdot \vec{n} dS \quad (1)$$

per al balanç de matèria, on la integral de superfície s'estén sobre la superfície  $S$  que envolta l'element de volum, i

$$\int_V \rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} dV = - \oint_S \rho \vec{v} \vec{v} \cdot \vec{n} dS - \int_V \rho \vec{g} dV + \oint_S \vec{\sigma} \cdot \vec{n} dS \quad (2)$$

per al balanç del moment.

En ocasions es pot afegir una equació de transport d'un "escalar passiu" o traçador,  $\phi$ , que típicament seria la concentració d'una substància que es transporta amb el camp de velocitats però que no altera en res el flux,

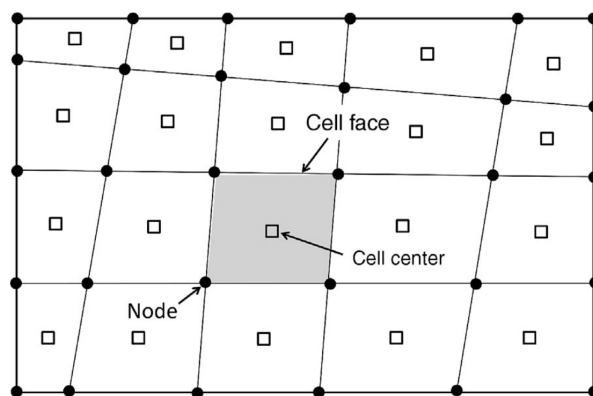
$$\int_V \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} dV = - \oint_S \rho \phi \vec{v} \cdot \vec{n} dS + \oint_S \Gamma \nabla \phi \cdot \vec{n} dS \quad (3)$$

on  $\Gamma$  és el coeficient de difusió de la substància.

Hem escrit les equacions de balanç en la forma integral perquè Fluent, igual que molts altres codis comercials de CFD, utilitza el mètode dels volums finits. Aquest mètode funciona imposant equacions aproximades numèricament que han de complir-se en un conjunt de subregions o volums que cobreixen tot el domini (Fig. 1).

A cada subregió, les equacions s'aproximen mitjançant fórmules discretes d'interpolació, diferenciació, integrals de superfície (**fluxos**) i integrals de volum (**termes font**).

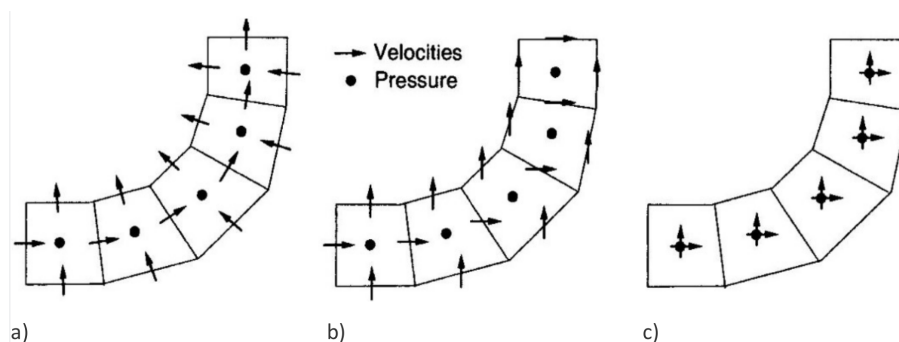
Finalment, les equacions aproximades es linealitzen (pas que explicarem més endavant) i s'aïllen convenientment per obtenir un sistema d'equacions algebraiques que es resolen de forma iterativa en cada pas de temps.



**Fig. 1.** Representació esquemàtica d'una discretització en volums finits d'un domini rectangular, que mostra els centres de cel·la, les cares i els vèrtexs o nodes (Mazumder, 2016)

## Coordenades i bases de vectors

L'elecció del sistema de coordenades i la base de vectors, juntament amb l'estructura de la malla i la topologia, tindrà un impacte sobre com s'aproximaran les equacions. L'elecció es pot derivar de la geometria del domini (cilíndrica, esfèrica, etc.), de les propietats del problema i l'equació (simetries esperades, etc), de l'elecció de fórmules de discretització, o de la topologia de la malla. La figura 2 mostra la disposició del camp de velocitats

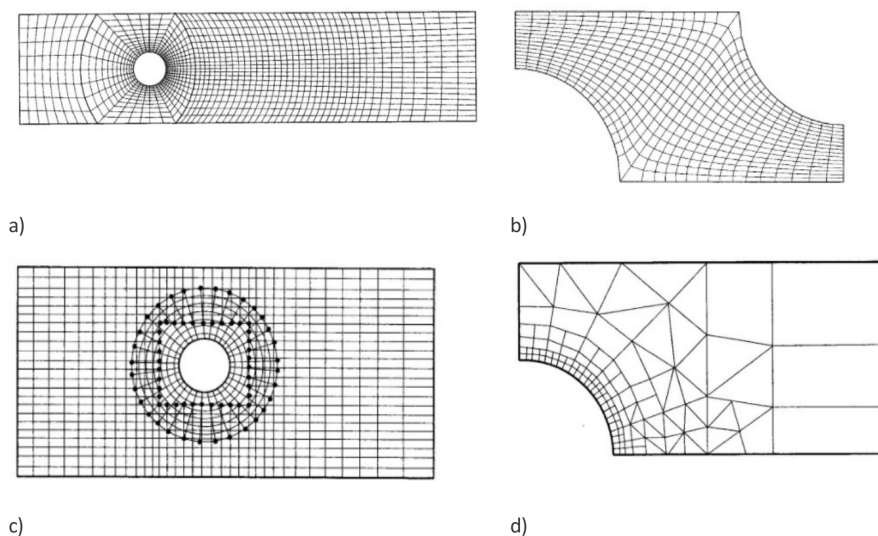


**Fig. 2.** Disposició de les variables en una quadrícula no ortogonal: a) disposició esglaonada amb components de velocitat contravariants, b) disposició esglaonada amb components cartesianes de velocitat, c) disposició cúbica amb components cartesianes de velocitat (Ferziger i Perić, 1999).

i del camp de pressions en una malla no ortogonal, posant de rellevància la importància de l'elecció del sistema de coordenades i de la base de vectors. En general, escollir el sistema de coordenades i base de vectors més simple possible és sempre el millor.

## Estructura de la malla i topologia

La configuració del conjunt de subdominis constitueix la “malla”. L’elecció d’aquesta tindrà un fort impacte sobre la localització dels nodes de càlcul, l’elecció de les fórmules de discretització i l’estructura del sistema discret d’equacions. Les malles poden ser estructurades o no estructurades, ortogonals o no, uniformes o no, de bloc únic o de múltiples blocs, ajustades o no al cos, imbricades, superposades, fixes o mòbils, etc. A la figura 3 trobem diversos exemples de malles. L’elecció i la configuració de la malla



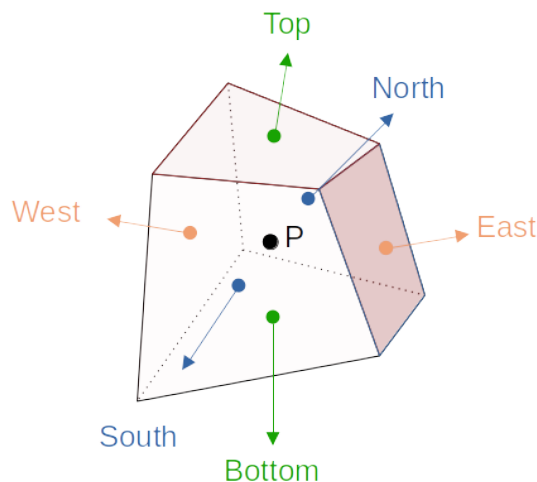
**Fig. 3.** Exemples de malles: a) malla 2D estructurada per blocs utilitzada per al càlcul del flux al voltant d'un cilindre circular en un canal, b) malla 2D estructurada, no ortogonal, c) malla 2D estructurada per blocs superposats (malla composta o malla *Chimera*, d) malla no estructurada en 2D. (Ferziger i Perić, 1999).

són les estratègies més habituals per tractar la geometria del domini, però no les úniques que hi ha. A les referències (Ferziger i Perić, 1999) i (Mittal i Iaccarino, 2005) trobaràs mètodes més sofisticats: refinament local, condicions de contorn del tipus *immersed*, etc.

## 6.4 Discretització

Com hem comentat a la secció anterior, hi ha diversos tipus de malles amb què podrem treballar i haurem de triar la malla que millor s'ajusti a les nostres necessitats en cada problema particular. Dit això i sense perdre generalitat, plantejarem la discretització en una malla curvilínia estructurada per blocs en 3 dimensions. Per a aquesta malla cada cel·la de càlcul

serà un hexaedre irregular amb sis veïns propers, com es mostra a la figura 4.



**Fig. 4.** Element de volum hexaèdric amb sis veïns propers.

A cada hexaedre, obtenim una equació algebraica discreta per a cada equació escalar en el model matemàtic, i també una incògnita discreta per a cada camp escalar, associada amb el seu valor mitjà dins de l'hexaedre. Usualment la combinació de 7 punts (P, W, E, S, N, B, T) produeix sistemes d'equacions algebraiques *heptadiagonals* (un sistema per a cada camp escalar), com veurem al següent apartat. Si el domini consta de  $N$  elements de volum, haurem d'obtenir la solució de les  $N$  incògnites, o el que val el camp (pressió, velocitat) als  $N$  nodes de càlcul.

### Discretització de l'equació de balanç del moment

L'objectiu és obtenir expressions discretitzades i linealitzades de les projeccions de l'equació de balanç del moment lineal en cada element de volum. Cada projecció estarà associada a una component del vector velocitat. El desenvolupament s'exemplifica en el que segueix per a la component  $v_x$  de la velocitat. L'expressió general dels sistemes lineals d'equacions que obtindrem serà,

$$\mathbf{A}^{v_x} \cdot v_x = \mathbf{Q}^{v_x}$$

on  $\mathbf{A}$  és una matriu  $N \times N$  de coeficients  $v_x$  és el vector incògnita, igualment de dimensió  $N$ , i  $\mathbf{Q}^{v_x}$  és el vector terme independent.

La matriu de coeficients  $\mathbf{A}$  és heptadiagonal, corresponent a la cel·la de

càlcul de 7 elements (P,E,W,N,S,T,B). Per a un element genèric P s'obté una equació amb l'estructura següent,

$$A_P^{v_x} v_{x,P} + A_W^{v_x} v_{x,W} + A_E^{v_x} v_{x,E} + A_S^{v_x} v_{x,S} + A_N^{v_x} v_{x,N} + A_B^{v_x} v_{x,B} + A_T^{v_x} v_{x,T} = Q_P^{v_x} \quad (4)$$

Al cas 2D, tindrem 5 termes en lloc de 7 sent el tractament de les equacions equivalent.

## 6.5 Exemple: Flux en una canonada 2D

Aquest exemple serà útil per fixar les idees. L'esquema és el de la figura 5, on un flux entra en un tub horitzontal de parets paral·leles amb una velocitat uniforme  $v_{x,IN}$  especificada, i surt a una pressió  $p_{OUT}$  especificada. La regió de l'espai entre l'entrada i la sortida és el nostre domini computacional.



**Fig. 5.** Esquema del flux en una canonada horitzontal en 2D.

Quan tenim un problema d'un flux sortint d'un domini, típicament especifiquem la pressió, i tot i que no sempre serà així, és una situació ben comuna.

El nostre objectiu és resoldre el flux en el domini, i per això volem determinar:

- ▶ la distribució de velocitats,
- ▶ la distribució de pressions,
- ▶ la força de fricció sobre la paret.

Conèixer la força de fricció sobre la paret permet saber la potència amb la que hem de bombegar el fluid a través de la canonada.

Per obtenir la solució numèrica, farem les simplificacions següents,

1. estat estacionari,
2. flux laminar,
3. fluid incompressible.

Primer de tot especificarem el model matemàtic que resoldrem: les equacions de transport del flux viscos incompressible, i les condicions de contorn necessàries per a la resolució.

## Model matemàtic

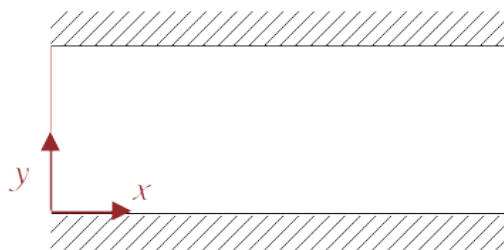
Les equacions de conservació són

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (5)$$

per a la massa, i

$$\rho \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{v} \quad (6)$$

per al moment, on  $\vec{v} = v_x \vec{i} + v_y \vec{j}$  ja que es tracta d'un problema 2D. L'origen del sistema de coordenades el situem com mostra la figura 6. Les



**Fig. 6.** Sistema de coordenades per a l'estudi del flux en una canonada horitzontal en 2D.

incògnites que hem de resoldre són 3: les dues components del camp de velocitats  $v_x(x, y)$ ,  $v_y(x, y)$ , i la pressió  $p(x, y)$ . Per això tenim 3 equacions, les dues de la conservació del moment en les direccions  $x$  i  $y$ , i la conservació de la massa.

## Condicions de contorn

Les condicions de contorn s'apliquen sobre les parets sòlides i allà on hi ha fluxos d'entrada i de sortida de matèria, moment, i energia. Una àmplia gamma de tipus de condicions de contorn permet modelar l'entrada i sortida del flux del domini de la solució:

- ▶ Entrada de pressió, sortida de pressió.
- ▶ A l'entrada, perfil de velocitats; a la sortida una condició de tipus *out-flow*, que és el terme en anglès que denomina la condició en què el gradient de les variables en la direcció del flux de sortida s'anul·la.
- ▶ Perfil de velocitats a l'entrada, a la sortida el valor del camp de pressió.
- ▶ Altres, en funció del problema, quan hi ha màquines i dispositius forçant el flux.

La sortida a pressió constant és una situació perfecta per exemplificar el problema. Les condicions de contorn que considerarem en el nostre problema són doncs

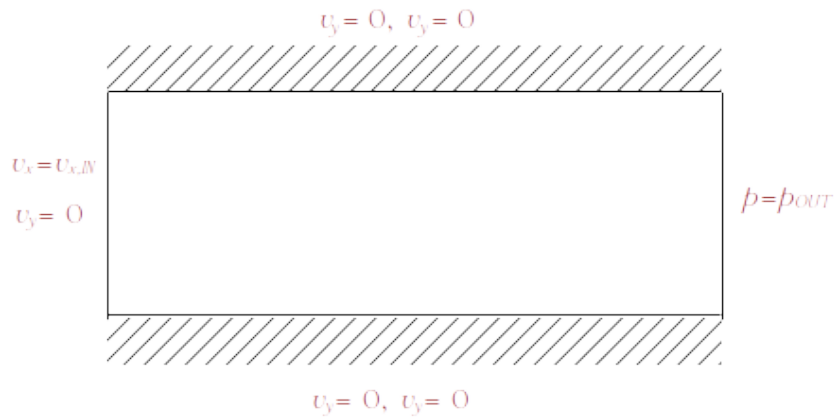
- ▶ velocitat nul·la sobre les parets,  $v_x = 0$ ,  $v_y = 0$  (*no-slip*).
- ▶ velocitat uniforme a l'entrada,  $v_x = v_{x,IN}$ ,  $v_y = 0$ .
- ▶ pressió constant  $p_{OUT}$  a la sortida.

Evidentment, donarem valors adients a  $v_{x,IN}$  i  $p_{OUT}$  quan fem l'aplicació numèrica.

Tenim així tres contorns on especifiquem la velocitat, i un contorn on especifiquem la pressió. Tingues en compte que no és possible especificar la velocitat a l'entrada i a la sortida en un flux incompressible, o no se satisfarà l'equació de continuïtat.

És important tenir en compte que no existeix una solució exacta per a aquest problema, excepte a la regió "aigües avall" on el flux està completament desenvolupat.



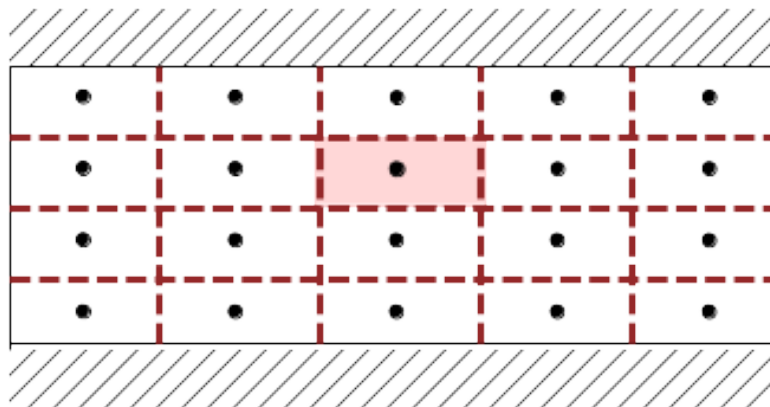


**Fig. 7.** Condicions de contorn.

## 6.6 Mètode dels volums finits

### Discretització

Ara que hem plantejat el model matemàtic, ens centrarem en el procediment de la solució numèrica. En particular, en com resoldre el model usant el mètode dels volums finits. El primer pas és dividir el domini en múltiples volums o cel·les de control, com es mostra a la figura 8.



**Fig. 8.** Cel·la o volum de control.

Després cal escriure el problema per determinar la velocitat i la pressió als centres de les cel·les. En aquest exemple hi ha 20 cel·les, i com hi ha tres incògnites per a cada cel·la hi ha un total de 60 incògnites per resoldre. D'aquesta manera, hem reduït el problema de determinar 3 funcions des-

conegudes a trobar 60 valors, i això representa una gran simplificació: en comptes d'haver de determinar 3 funcions desconegudes, triem 20 punts específics per calcular els 3 camps hidrodinàmics.

És a dir, hem **discretitzat** el nostre domini, reduint el problema havent de determinar només un conjunt finit de valors. Els valors de les variables al centre de les cel·les són aproximacions dels valors mitjans en cada cel·la. Aquest tipus de mètode de volums finits s'anomena **mètode de volums finits centrat en la cel·la**. Hi ha altres variacions del mètode de volums finits, per exemple el centrat en el node, on les incògnites es calculen als centres de les cares (les fronteres de les cel·les), o el centrat al vèrtex, que calcula les variables als vèrtexs de de les cel·les.

Aquí utilitzarem la metodologia centrada en els centres de cel·la, perquè aquesta és la que implementa Fluent.

## Equacions algebraiques

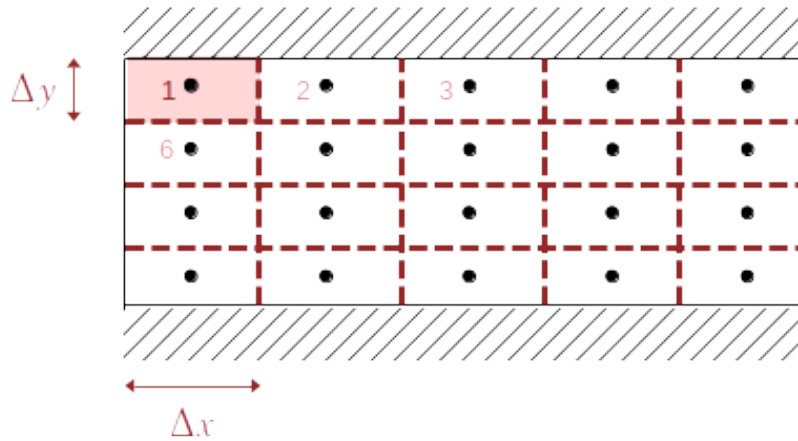
Per obtenir les equacions algebraiques haurem de desenvolupar l'equació 4.

En el nostre exemple tenim 60 incògnites, per la qual cosa necessitarem 60 equacions algebraiques, que obtindrem aplicant els balanços de massa i de moment a cada volum de control. Cada equació algebraica relaciona la variable en el centre de la cel·la amb la de les seves veïnes, això és un màxim de 5 variables diferents en cadascuna de les 60 equacions, ja que el sistema del nostre exemple és 2D.

Primer, prenem el volum de control o cel·la #1 de la figura 9 per discretitzar i expressar numèricament l'equació 1, que expressa que el volum de fluid que entra a la cel·la 1 és igual al volum que surt, de manera que no hi ha acumulació de matèria (fluid incompressible) en cap moment.

La quantitat de matèria que entra per l'esquerra és  $v_{x,IN}\Delta y$ , ja que a l'esquerra de la cel·la #1 hi ha la velocitat especificada per la condició de contorn a l'entrada del domini.

Per calcular la quantitat de matèria que surt cap a la cel·la #2, hem d'estimar la velocitat que hi ha en la frontera entre les cel·les 1 i 2, i això se



**Fig. 9.** Volum de control #1 per establir el balanç de matèria.

sol fer fer en l'aproximació més habitual prenent el promig entre  $v_{1,x}$  i  $v_{2,x}$ <sup>1</sup> (evidentment es poden obtenir aproximacions més sofisticades fent interpolacions a més punts). També, per altra banda, hem d'assumir que la velocitat és constant en tota la cara. *La decisió sobre la densitat de cel·les en el domini incideix directament sobre aquest error de discretització.* Aquest error de discretització es propaga a l'error d'interpolació a l'hora d'estimar la velocitat en la frontera entre les cel·les, i quan assumim la constància de la velocitat sobre aquesta mateixa frontera.

Així doncs, dintre d'aquesta aproximació, la quantitat de matèria de surt de 1 cap a 2 és

$$\frac{v_{1,x} + v_{2,x}}{2} \Delta y.$$

Hem de fer el mateix per a la matèria que travessa la frontera entre 1 i 6, i amb la mateixa estratègia obtindrem

$$\frac{v_{1,y} + v_{6,y}}{2} \Delta x$$

Si sumem totes les contribucions, la conservació de la massa al volum de

<sup>1</sup>Es pot demostrar, combinant desenvolupaments en sèrie de Taylor entorn del punt centrat a la cara entre 1 i 2, que aquesta elecció comporta errors de segon ordre en  $\Delta x$ , vol dir que l'expressió de la velocitat sobre la frontera,  $v_{12}$ , com el promig de les velocitats en 1 i en 2 és correcta excepte termes en  $\Delta x^2$ ,

$$v_{12} = \frac{v_{1,x} + v_{2,x}}{2} + O(\Delta x)^2$$

control #1 s'escriu

$$v_{x,IN}\Delta y - v_{1,x}\frac{\Delta y}{2} - v_{2,x}\frac{\Delta y}{2} + v_{1,y}\frac{\Delta x}{2} + v_{6,y}\frac{\Delta x}{2} = 0 \quad (7)$$

On hem tingut en compte que el flux d'entrada a la cel·la 1 és positiu i el de sortida és negatiu.

Podem fer el mateix per a les equacions de transport del moment. Considerem la component  $x$ . Si ens fixem en les integrals de superfície de l'equació 2, per exemple el primer terme del segon membre,

$$\oint_S \rho v_x \vec{v} \cdot \vec{n} dS$$

observem que la seva dependència no lineal no permet una expressió del tipus 4, amb una matriu  $A$  de coeficients. En particular, el moment en la direcció  $x$  que va de 1 cap a 2 (junt amb la matèria que surt de 1 cap a 2) s'escriu

$$\rho \left( \frac{v_{1,x} + v_{2,x}}{2} \right)^2 \Delta y.$$

excepte els errors de discretització. Com que la variació del moment és proporcional a una suma de termes no lineals, caldrà resoldre un sistema d'equacions algebraiques no lineal.

Degut al fet que el domini contindrà en un cas general moltes cel·les, el sistema d'equacions algebraiques tindrà moltes equacions; alhora, el fet que el sistema sigui no lineal imposa l'ús d'un mètode de tipus iteratiu, com ara el procediment de Gauss-Seidel.

Un sistema d'equacions algebraiques no lineal es pot resoldre amb el procediment de Gauss-Seidel linealitzant els termes no lineals. Així, aproximem

$$(v_x^{[k+1]})^2 \approx v_x^{[k+1]} v_x^{[k]}$$

on  $v_x^{[k+1]}$  representa el valor que es vol calcular en la iteració actual, i  $v_x^{[k]}$  el valor iterat anterior. El valor de  $v_x^{[k]}$  ja ha estat generat i per tant es ja conegut, i s'utilitza per obtenir el coeficient de matriu corresponent. A mesura que la iteració progressa, els errors de linealització es fan més i més petits, de fet tant petits com vulguem.

## Convergència i residus

Quan utilitzem un procediment iteratiu, els resultats convergeixen a la solució que busquem dintre d'una certa tolerància preestablerta. Les no linealitats alenteixen qualsevol procediment iteratiu i és imperatiu saber si el valor estimat de la velocitat després d'un nombre  $N$  d'iteracions és la solució al nostre problema.

Després de cada iteració, l'equació 7 no se satisfarà exactament, és a dir el segon membre no serà exactament igual a zero, i la discrepància donarà una mesura de l'error,  $R_1$ . Si tenim en compte totes les cel·les del domini i no només la primera, podem definir el residu agregat (de massa, en aquest cas) com

$$R = \frac{\sum |R_i|}{\text{factor d'escala}}$$

on el factor d'escala pot dependre del problema que tractem, i cal ajustar-lo en funció dels cabals màssics en determinades cel·les d'entrada.

La iteració s'aturarà quan el residu sigui inferior a un cert valor de la tolerància. Per defecte, Fluent estableix una tolerància predeterminada de  $10^{-3}$ . Aquest valor es pot modificar, i en la majoria de casos cal modificar-lo, per utilitzar toleràncies de  $10^{-6}$  o inferiors.

Com a resum, podem dir que la resolució numèrica d'un model matemàtic ens proporcionarà una solució aproximada, que tindrà un error de linealització que haurà d'estar per sota d'un valor de tolerància, i també un error de discretització que dependrà del refinament de la malla escollida.

## 6.7 Algorismes per a una solució iterativa

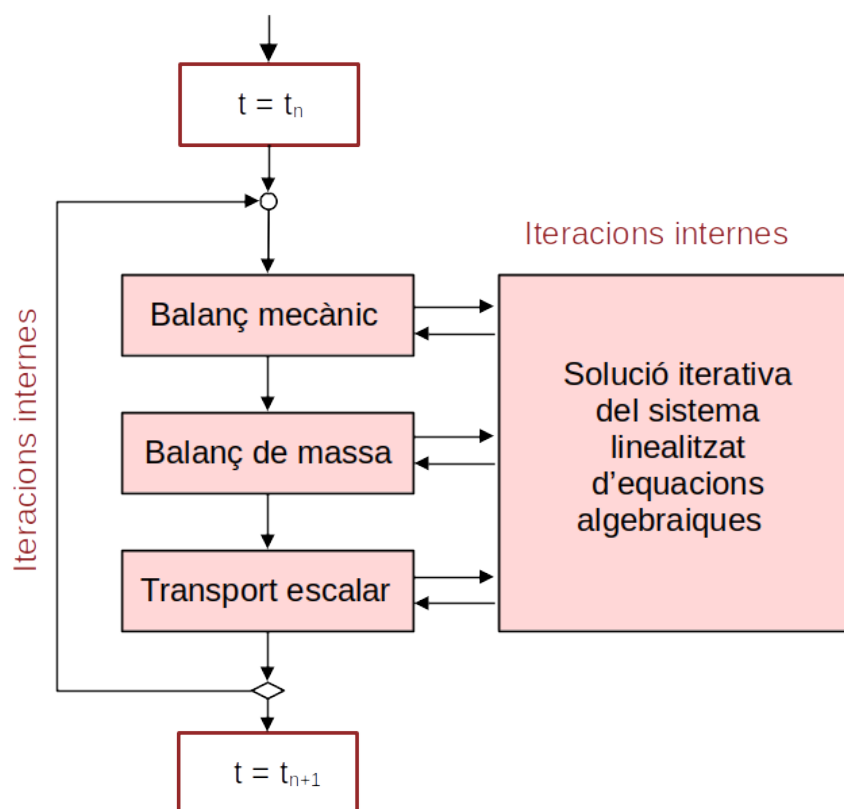
Vegem com les idees de discretització i linealització es combinen en un algorisme per generar la solució iterativa del nostre model matemàtic.

Cal doncs resoldre l'equació 4 per a cadascuna de les components de la velocitat i per a la pressió, la qual satisfà l'equació de Poisson ([Essential skills for reproducible research computing, n.d.](#)), alternativament i successivament. En cas que hi hagués el transport d'un escalar (Eq. 3) que no

hem inclòs, també es resol. Quan el procediment hagi convergit, tindrem la solució del nostre problema estacionari. Per tant, la solució d'un sistema d'equacions en derivades parcials, no lineal i acoblat és aproximada per la resolució successiva d'un sistema lineal d'equacions.

La majoria de problemes no són estacionaris. Alsehores cal discretitzar les derivades temporals, de les equacions de Navier-Stokes, i triar un esquema de discretització temporal adient (pensa, per exemple, en un esquema tipus Euler, que és el més simple). Això dona lloc a un algorisme que combina per una banda, la integració temporal, junt amb la resolució del sistema d'equacions linealitzat mitjançant iteracions tipus Gauss-Seidel dintre de cada pas de temps (Fig. 10).

En el llenguatge de la CFD, tindrem dos tipus d'iteracions, internes i externes.



**Fig. 10.** Esquema general d'un algorisme de resolució d'un problema de dinàmica de fluids no estacionari. Les iteracions *internes* convergeixen en una sèrie de passos a la solució dels camps de velocitat i de pressió per a un instant de temps determinat. Les iteracions *externes* fan avançar el temps.

Les iteracions internes són les que realitzem dintre de cada pas de temps,

per obtenir les variables amb un procediment iteratiu, definida una certa tolerància. S'iteren velocitats i pressions en cada punt fins que els residus per a la massa i el moment siguin menors que la tolerància. Només en aquest moment, s'actualitza el temps i es passa al següent (iteració "externa"). Si l'esquema és estable, la solució numèrica convergirà.

## Bibliografia

- Ansys. (n.d.). *Ansys fluent resource center*. <https://www.ansys.com/resource-center>. (Data d'accés: 22/8/2023)
- Essential skills for reproducible research computing. (n.d.). *Application - pressure poisson equation*. [https://barbagroup.github.io/essential\\_skills\\_RRC/numba/4/](https://barbagroup.github.io/essential_skills_RRC/numba/4/). (Data d'accés: 1/9/2023)
- Ferziger, J. H., i Perić, M. (1999). *Computational Methods for Fluid Dynamics* (2nd ed.). Berlin: Springer.
- Mazumder, S. (2016). Chapter 6 - the finite volume method (fvm). In S. Mazumder (Ed.), *Numerical methods for partial differential equations* (p. 277-338). Academic Press.
- Mittal, R., i Iaccarino, G. (2005). Immersed boundary methods. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 37(1), 239-261. Retrieved from <https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.37.061903.175743> doi: 10.1146/annurev.fluid.37.061903.175743

## Exercicis

1. Demuestra que la pressió en un flux incompressible satisfà una equació de Poisson. Obtén la seva expressió per a un flux 2D, consultant per exemple [Essential skills for reproducible research computing](#).
2. Resolució numèrica del flux laminar incompressible en una canonada horitzontal

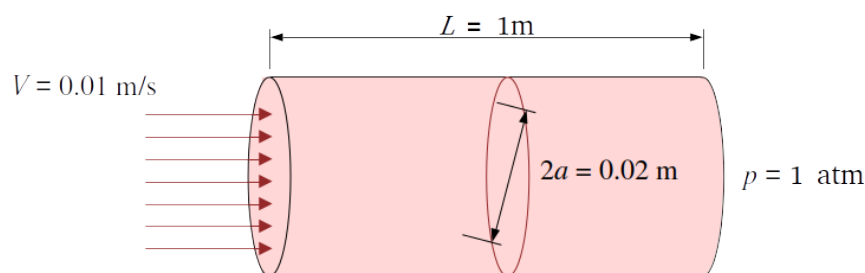
Aquest és el flux de Poiseuille circular que hem analitzat al Tema 5 §5.3, que té com a solució

$$v_z(r) = \frac{r^2 - a^2}{4\mu} \left( \frac{dp}{dz} \right), \quad (8)$$

en coordenades cilíndriques, on  $z$  és la direcció de la canonada. El gradient de pressió  $dp/dz$  és constant al llarg de la canonada, i està relacionat amb el cabal volumètric,

$$Q = \int_0^a v_z(r) 2\pi r dr = -\frac{\pi a^4}{8\mu} \left( \frac{dp}{dz} \right) \quad (9)$$

Ara resoldrem la mateixa geometria amb Fluent a classe, com a exemple introductori, i veurem el desenvolupament del flux a partir d'un perfil d'entrada uniforme.



El tub té una longitud de  $L = 1\text{ m}$  i diàmetre  $2a = 0.02\text{ m}$ . La velocitat a l'entrada és constant en tota la secció horitzontal amb un valor de  $0.01\text{ m/s}$ . La sortida és a la pressió de  $1\text{ atm}$ . Considerem que el fluid és aigua a  $20^\circ\text{C}$  ( $\rho = 998\text{ kg/m}^3$ , viscositat cinemàtica  $\nu = 1.02 \times 10^{-6}\text{ m}^2/\text{s}$ ). Aquests paràmetres han estat triats per obtenir un nombre de Reynolds de  $Re = 200$  (comprova-ho).



Tot i que les dimensions de la canonada i la velocitat característica no són les mateixes, seguirem el tutorial introductori [https://www.youtube.com/watch?v=KWP0n1\\_Qf-0](https://www.youtube.com/watch?v=KWP0n1_Qf-0) per la seva simplicitat. Amb ell farem el model i obtindrem la solució.

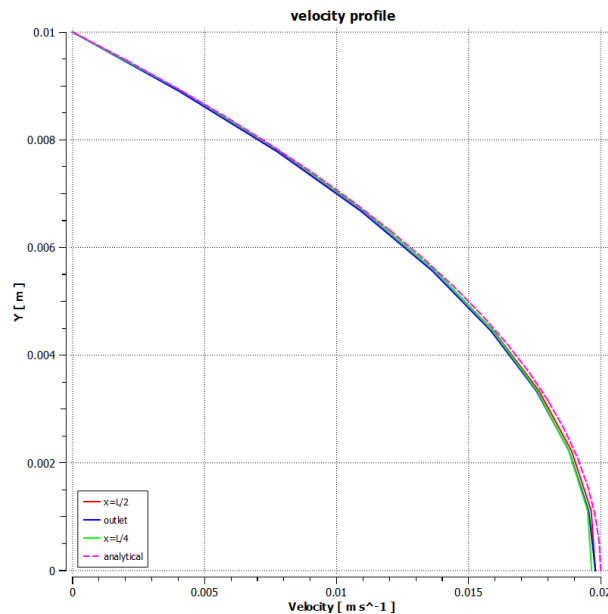
Amb el **Workbench** de CFD Fluent, el procés que seguirem serà el següent,

- ▶ Obrirem **Workbench**, donarem nom al nostre projecte i establirem les condicions generals amb les que treballarem: la geometria és 2D ja que el problema depèn de dues coordenades únicament i a més a més el problema té un eix de simetria.
- ▶ Dibuixarem el domini amb **DesignModeler** i donarem nom a les fronteres per aplicar-hi després les condicions de contorn.
- ▶ Farem el mallat amb **Mesh**,
- ▶ Farem el **Setup** preparatori per calcular la solució, és a dir,
  - triarem doble precisió,
  - seleccionarem el *solver* de flux laminar,
  - establirem la simetria respecte de l'eix de la canonada (mig domini),
  - definirem les propietats del fluid,
  - especificarem les condicions de contorn
- ▶ Seguidament, amb el conjunt d'eines qu'hi ha a **Solution**, triarem els esquemes o *solvers* adequats, el nombre d'iteracions i els criteris de convergència, inicialitzarem la solució i farem que Fluent la calculi.
- ▶ Des del mateix **Solution** o des de **Results** amb l'eina **CFD Post**, generarem 1) els contorns de pressió i velocitat, 2) el perfil de velocitats en qualsevol punt al llarg de la canonada, i podrem així veure el desenvolupament de la capa límit fins a obtenir un perfil "parabòlic".
- ▶ Finalment, obtindrem línies de corrent i farem l'animació del flux i la guardarem en un fitxer amb format de vídeo.

Per validar la solució, compararem el perfil de velocitats a la sortida, que ens ha donat Fluent com a solució, amb el perfil teòric, que és el flux de Poiseuille circular. Aquest el podem generar a partir de l'equació 8, ajustant el gradient de pressió  $dp/dz$  amb el cabal d'entrada  $Q = vA$  de l'equació 9, utilitzant  $v = 0.01$  m/s (la velocitat d'entrada) i

$A = \pi a^2$  l'àrea de la canonada.

Durant l'activitat, pots descarregar-te **les dades del perfil teòric** directament de moodle. Segueix el procediment explicat al video per representar el perfil de velocitats numèric (millor posar la velocitat a l'eix  $x$ , i la coordenada vertical a l'eix  $y$ ). Per importar el fitxer .csv a CFDPost, afegeix una nova sèrie de dades al plot que hakis generat, i selecciona el fitxer que has descarregat. Hauries d'obtenir un resultat similar al de la figura següent,



De quin valor és la discrepància en la velocitat màxima? A què penses que es podria deure?

Podem també fer el *chart* amb el perfil de pressions al llarg de la canonada.

- ▶ És lineal?
- ▶ Coincideix el gradient de pressions numèric amb el teòric?

**En tota l'activitat, tingues en compte que al video es treballa sobre el pla  $xy$  (imposant simetria axial respecte de  $x$ ). En 2D, el Design Modeler dibuixa sobre el pla  $xy$ , no permet cap altre aranjament. Per tant, l'eix  $z$  de la nostra canonada serà el  $x$  de Fluent, mentre que  $r$  passarà a ser  $y$**