

Technická univerzita v Košiciach
Fakulta baníctva, ekológie, riadenia a geotechnológií

Písomná príprava k predmetu
Matematické metódy identifikácie,
modelovania a simulácie

Obsah

1	Úvod	1
2	Matematické metódy	1
3	Počítačom podporované matematické modelovanie	2
4	CFD analýza	4
4.1	Stlačiteľnosť tekutín	6
4.2	Navier-Stokesova rovnica	6
4.3	Metóda lattice Boltzmann	8
4.4	Modelovanie turbulencie	10
4.5	DNS	10
5	Programy pre CFD simulácie	10
5.1	Matlab	10
5.2	Ansys Fluid	10
5.3	SimScale	10
5.4	OpenFOAM	11
5.5	OpenLB	11
6	Záver	12

1 Úvod

Matematický model predstavuje súbor funkčných vzťahov, ktoré transformujú vstupné hodnoty na výsledky, ktorými je možné vyjadriť podstatu modelovaného deja. Modelovanie je pravdepodobne najdôležitejšia časť procesu simulácie. Jej cieľom je čo najpresnejšie zachytiť správanie sa reálneho systému. Zahŕňa identifikáciu problému a očakávaný cieľ riešenia problému, zber reálnych dát alebo generácia náhodných dát, vytvorenie modelu, jeho úprava, prispôbovanie a jeho overenie porovnaním výstupných dát zo simulácie s reálnymi dátami z reálneho systému.

Procesy výroby ocele všeobecne zahŕňajú základnú kyslíkovú pec, elektrickú oblúkovú pec alebo ekvivalentnú, panvu a kontinuálne liatie a obsahujúce medzipanvu a plesne. Všetky tieto kroky spracovania ocele zahŕňajú vysoko spojené komplexné dopravné javy.

Hlavným cieľom riadenia výroby ocele s kyslíkovým konvertorom je získanie predpísaných parametrov pre oceľ, keď sa odoberá z pece, vrátane hmotnosti, teploty a obsahu každého prvku. V praktickom procese výroby ocele sa o konečnom obsahu uhlíka a teplote často rozhoduje o tom, či je roztavená oceľ prijateľná alebo nie Wang et al. (2010).

2 Matematické metódy

Parciálne diferenciálne rovnice popisujú fyzikálne procesy pohybu tekutín.

Po špecifikovaní problému, ktorý chceme riešiť, je nutné zostaviť sústavu rovníc popisujúcich problém a zvoliť počiatočné, respektíve okrajové podmienky. Je všeobecne známe, že fyzikálne javy v oblasti dynamiky tekutín

3 Počítačom podporované matematické modelovanie

Počítačom podporované inžinierstvo (CAE - Computer Aided Engineering) je použitie počítačového softvéru na simuláciu výkonu s cieľom vylepšiť návrhy výrobkov alebo pomôcť pri riešení technických problémov pre celý rad priemyselných odvetví. To zahŕňa simuláciu, validáciu a optimalizáciu produktov, procesov a výrobných nástrojov.

Typický proces CAE pozostáva z krokov predbežného spracovania, riešenia a následného spracovania. Vo fáze predspracovania inžinieri modelujú geometriu (alebo reprezentáciu systému) a fyzikálne vlastnosti návrhu, ako aj prostredie vo forme aplikovaného zaťaženia alebo obmedzení. Ďalej je model vyriešený pomocou vhodnej matematickej formulácie základnej fyziky. Vo fáze po spracovaní sa výsledky predložia technikovi na preskúmanie.

Aplikácie CAE, výhody používania CAE...

<https://www.plm.automation.siemens.com/global/en/our-story/glossary/computer-aided-manufacturing>
13112

Motivácia na používanie počítačových simulácií na skúmanie metalurgických procesov je dvojaká. Po prvé, umožňuje testovať zmeny dizajnu pred vytvorením prototypu, čo samozrejme vedie k nižším celkovým nákladom na návrh. Po druhé, umožňuje skúmať javy, ktoré sa nedajú ľahko merať alebo pozorovať v procese. Dokonca aj zdanlivo jednoduchá operácia, ako napríklad nepretržité meranie teploty počas procesu oduhličovania, je zložitá z dôvodu veľmi vysokých teplôt v procese a všeobecne drsných podmienok prevládajúcich v oceliarnach (Ersson and Tillander, 2018).

V metalurgii pri výrobe ocele je veľmi dôležité simulovať lineárne a nelineárne procesy, s ktorými sa pri výrobe ocele stretávame pri tvorbe matematických modelov. Od prvých pokusov o využitie matematických techník na simuláciu a optima-

lizáciu veľkých metalurgických operácií (Ray a kol., 1973) sa zaviedli rôzne numerické metódy ako algoritmy a použili sa na simuláciu javov v oceliarskych procesoch. Jednou z tried takýchto metód je Monte Carlo, ktoré je užitočné na simuláciu systémov s mnohými stupňami slobody, ako sú tekutiny.

Problémy s modernou mechanikou tekutín by nebolo možné vyriešiť bez použitia počítačovej dynamiky tekutín (CFD - Computational Fluid Dynamics). CFD je vetva CAE, ktorá sa zaoberá simuláciou pohybu tekutín a prenosom tepla pomocou numerických prístupov, pretože rozsah analytických riešení základných rovníc mechaniky tekutín je veľmi obmedzený a hlavne veľmi obtiažny. V prípade zložitejšej geometrie to znamená, že zvyčajne na výber riešenia musia zvoliť danú numerickú metódu.

CFD zahŕňa široké spektrum numerických metód používaných pri riešení komplexné trojrozmerné (3D) a časovo závislé problémy s tokom (Rapp, 2017). Od počiatku priekopníckej práce v oblasti metalurgie, ktorú uskutočnili Szekely a kol. (1977), náklady na vykonávanie počítačových simulácií sa za posledných niekoľko desaťročí znížili, zatiaľ čo dostupný spracovateľský výkon sa zvýšil. Väčšina procesorov a spracovateľských jednotiek, ktoré sa v súčasnosti vyvíjajú a vyrábajú, má niekoľko jadier, ktoré môžu vykonávať pokyny súbežne. Spracovateľský výkon, ktorý je k dispozícii pre softvér CFD, teda tiež závisí od schopnosti softvéru vykonávať paralelne. Štúdiá z posledných dvoch desaťročí (Ersson and Tilliander, 2018) simulácií metalurgického CFD odhaľuje obrovské zlepšenia týkajúce sa typu javov, ktoré je možné preskúmať, a tento trend bude pokračovať vďaka zlepšeniam v dostupnom spracovaní, výkonu a dostupným algoritmom. Preto CFD našiel cestu do mnohých štúdií v oceliarstve, kde sa tieto metódy ukázali ako užitočné pri preukazovaní skrytých a významných vlastností. Jeho použitie v oceliarskom priemysle však nemusí byť také integrované ako v leteckom a automobilovom priemysle, v ktorých je vývoj nových dizajnov kľúčový. Hlavný rozdiel medzi leteckým a metalurgickým priemyslom spočíva v tom, že hutnícky priemysel sa takmer vždy zaoberá viacfázovými systémami pri

zvýšených teplotách a že motiváciou modelovania je najmä optimalizácia procesov. S pokračujúcim vývojom vo viacfázových modeloch, ako aj pri reakčnom modelovaní toku, ostáva pokračujúca užitočnosť CFD v metalurgii jasná.

V procese LD / BOF určujú rôzne chemické reakcie medzi kyslíkom, troskou a roztaveným železom v konvertore kyslíka, v kombinácii s energickým miešaním, aby sa podporila troska, defosforizácia, dekarbonizácia, zahrievanie roztavenej ocele a homogenizácia zloženia a teploty ocele. výsledné vlastnosti ocele. Cieľom konvertora kyslíka je rafinovať roztavené železo na surovú oceľ oxidáciou, aby sa dosiahla konečná teplota a chemické zloženie na konci rany. Ak to neurobíte, bude to potrebné zrevidovať. Vplyv prúdu kyslíka do roztaveného kúpeľa silne ovplyvňuje kúpeľ a podporuje trojfázový tok medzi plynom, troskou a roztavenou oceľou v kúpeli. S prechodom od starých systémov založených na pravidlách k modelu v reálnom čase uzavretým

4 CFD analýza

CFD je využívaná od začiatku 20. storočia v oboroch fyziky akými sú aerodynamika, termodynamika alebo hydrodynamika. Dynamika je časť mechaniky, ktorá sa zaoberá vplyvom pôsobenia síl na pohyb telies.

Aerodynamika sa venuje štúdiom pohybu plynov a ich interakciou s pevnými objektami, akými je napríklad karoséria pretekárskeho auta alebo krídlo lietadla.

Dynamika kvapalín

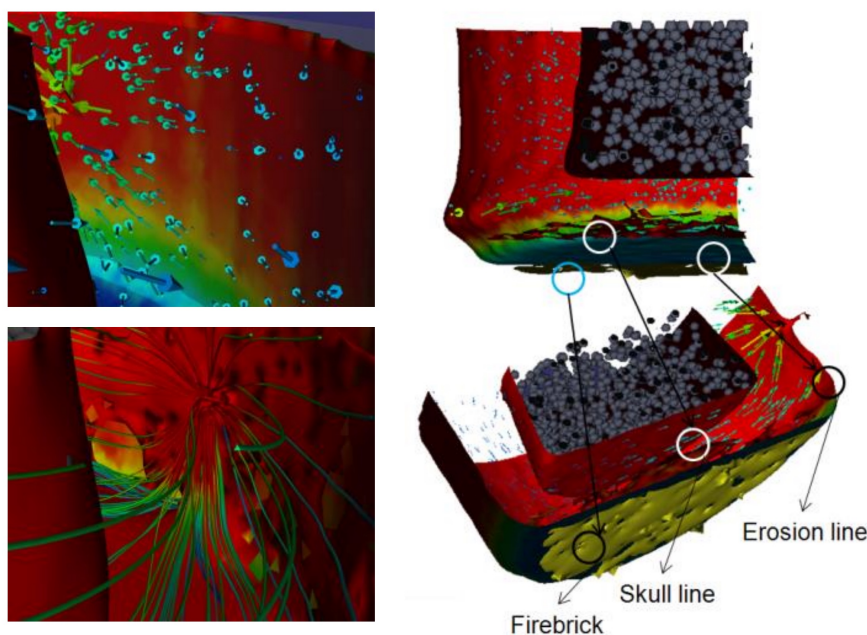
Pri skúmaní dynamických javov je cieľom CFD analýzy vytvoriť čo najpresnejší obraz týchto javov a procesov, ktoré vznikajú a prebiehajú pri pohybe plynných a kvapalných látok v okolí alebo vo vnútri objektov v pevnom skupenstve. Zároveň je vhodná na analyzovanie toku alebo zmeny teploty v okolí skúmaných objektov. Tieto procesy väčšinou súvisia s pôsobením javov akými sú rozptyl, šírenie, konvekcia, náraz vln, klzké povrchy, medzné vrstvy a turbulencia.

metóda konečných prvkov (FEM - Finite Element Analysis)

CFD simulácie sú využívané v rôznych oblastiach, akými sú napríklad prúdenie tekutín v potrubíach, plynov vo vzduchotechnike, analýza chladenia uzavretých priestorov alebo analýzu elektrotechnických zariadení.

Presnosť CFD simulácií ale nie je zaručená a tak treba stále počítať s tým, že nám vedia poskytnúť iba približné informácie o tom, ako sa bude simulovaná súčiastka alebo proces správať v reálnom svete.

Bolo vyvinutých veľa modelov na predpovedanie zmiešavania, napnenia trosky, interakcií plyn-kvapalina, viacfázových tokov, ako aj aspektov prenosu tepla a hmoty (Chattopadhyay et al., 2010)



Obr. 4 – 1: 3D CFD simulácia vnútra ("srdca") vysokej pece.

Počiatkové podmienky definujú počiatkové hodnoty pre každé pole riešenia. Zohrávajú dôležitú úlohu v stabilite a výpočtovom čase pre simulácie v ustálenom stave a sú dôležité na získanie fyzikálne presných výsledkov pri analýzach prechodných dejov. Preto je veľmi dôležité definovať vhodné počiatkové podmienky pre vaše simulácie.

Hraničné podmienky určujú, ako systém (napríklad štruktúra alebo tekutina) interaguje s prostredím. Fixácie, zaťaženia, tlaky, prietok alebo rýchlosť tekutiny sú príklady hraničných podmienok.

4.1 Stlačiteľnosť tekutín

Kľúčový rozdiel medzi stlačiteľnými a nestlačiteľnými tekutinami je v tom, že stlačiteľné tekutiny sa vyskytujú v reálnom prostredí, zatiaľ čo nestlačiteľné tekutiny, nazývané aj ideálne tekutiny, sú koncepciou vyvinutou na uľahčenie výpočtu.

Kvapaliny, s ktorými sa stretávame v bežnom živote sú do určitej miery stlačiteľné, no

Stlačiteľnosť tekutiny môžeme definovať ako zmenšenie jej objemu v dôsledku vonkajších tlakov na ňu pôsobiacich. Naopak stlačiteľná tekutina zníži svoj objem v prítomnosti vonkajšieho tlaku. Preto môžeme kvantitatívne meranie stlačiteľnosti vziať ako relatívnu zmenu objemu kvapaliny v reakcii na zmenu tlaku.

Matematicky môžeme stlačiteľnosť γ definovať ako

$$\gamma = \frac{-1}{V} \frac{\partial V}{\partial p} \quad (4.1)$$

kde V je objem tekutiny pred stlačením, ∂V je zmena objemu po stlačení a ∂p je zmena tlaku.

4.2 Navier-Stokesova rovnica

Navier-Stokesova (NS) rovnica popisuje prúdenie tekutiny. V praxi má široké využitie, ako napríklad modelovanie minimalizácie odporu vzduchu karosérie áut, návrhu vodných turbín, toku krvi v tele, predpovede počasia a iné. Jej zápis je nasledovný:

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \vec{u} + \vec{g}. \quad (4.2)$$

V praxi sa ňou modeluje hlavne prúdenie nestlačiteľnej (ideálnej) newtonovskej tekutiny, ktorej základná vlastnosť je, že deformácia je priamo úmerná napätiu a jej viskozita je nemenná. Modelovanie stlačiteľnej tekutiny je z hľadiska výpočtového výkonu náročnejšie, čoho dôsledkom je utilizácia vysoko výkonných počítačov a vývoj algoritmov na využitie paralelnej architektúry grafických procesných jednotiek v grafických kartách.

Keďže pri modelovaní systému toku tekutín Navier-Stokesovou rovnicou sa pohybujeme v obore mechaniky tekutín a mechaniky spojitého prostredia (mechanika kontinua), nesmieme zabudnúť na zákon zachovania hmotnosti. Ten popisuje rovnica kontinuity, ktorá v prípade nestlačiteľnej tekutiny nadobúda tvar

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \vec{u}) = 0, \quad (4.3)$$

kde ϱ je hustota, t je čas, $\nabla \cdot$ je divergencia a \vec{u} je vektorové pole rýchlosti prúdenia.

Pri nestlačiteľnej tekutine zostáva hustota pozdĺž toku v priebehu času konštantná (teda nemenná)

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} = 0, \quad (4.4)$$

z čoho vyplýva, že divergencia vektorového poľa rýchlosti prúdenia je nulová

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0. \quad (4.5)$$

Vo všeobecnosti sú NS rovnice v realite nelineárne parciálne diferenciálne rovnice. Tieto nelinearity sú zodpovedné za turbulencie, ktoré vznikajú pri prúdení tekutín a ktoré tieto rovnice modelujú. Dôvodom vzniku nelinearit je konvekčné zrýchlenie, teda zrýchlenie šírenia tepla prúdením.

Turbulencia je chaotické správanie sa mnohých tekutín. Riešenie NS rovníc pre turbulentné prúdenie tekutiny je extrémne obtiažne, keďže pre dosiahnutie stabilného riešenia je potrebná veľmi detailná sieť.

Aj napriek praktickému využitiu, zatiaľ neexistuje dôkaz o tom, či riešenia NSR vždy existujú v troch dimenziách, a ak áno, tak či sú na celom intervale nekonečne diferencovateľné. Na tento problém Clayov inštitút vypísal odmenu 1 milión dolárov.

4.3 Metóda lattice Boltzmann

Metóda lattice Boltzmann je relatívne nová metóda v oblasti CFD analýzy.

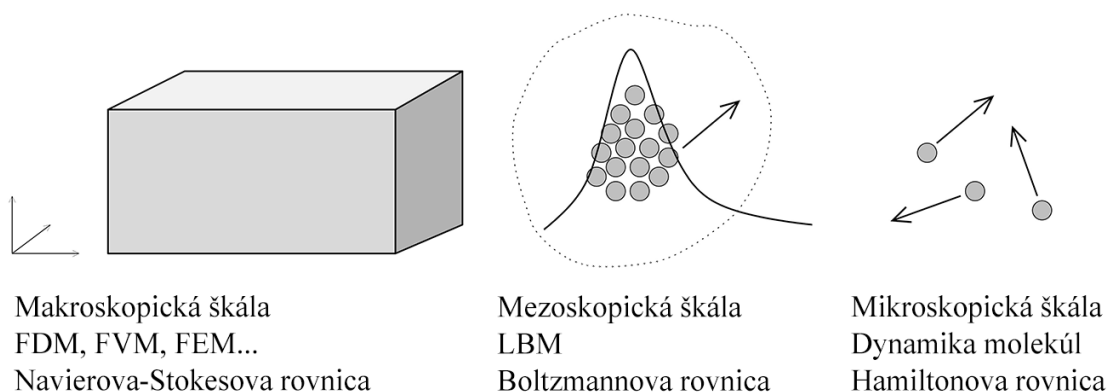
(Delbosc, 2015)

Boltzmannova rovnica je základná evolučná rovnica pre kontinuum, popísanej v šesť-dimenzionálnom fázovom priestore. Rovnica popisuje vývoj distribučnej funkcie v čase. Tá sa môže meniť v dôsledku vzájomných kolízií častíc, ktoré pri nárazoch menia svoju hybnosť a energiu, a to v dôsledku vlastného pohybu častíc alebo vplyvom externých síl (Heidler, 2011).

LBM vychádza z

V posledných niekoľkých desaťročiach sa dosiahol obrovský pokrok vo vývoji diskretných simulačných metód založených na časticách v porovnaní s konvenčnými metódami založenými na kontinue. Najmä sa metóda mriežky Boltzmann (LB) vyvinula z teoretickej novosti na všadeprítomnú, všestrannú a výkonnú výpočtovú metodológiu pre základné výskumné aj inžinierske aplikácie. Jedná sa o kineticky založený mezoskopický prístup, ktorý premostňuje mikroskopické a makroskopické mierky, čo ponúka výrazné výhody pri vernosti simulácie a výpočtovej účinnosti. Aplikácie metódy LB sa v súčasnosti nachádzajú v širokej škále odborov vrátane fyziky, chémie, materiálov, biomedicíny a rôznych odborov strojárstva.

Častice skočia z jedného mriežkového uzla do nasledujúceho podľa svojej (diskrétnej)

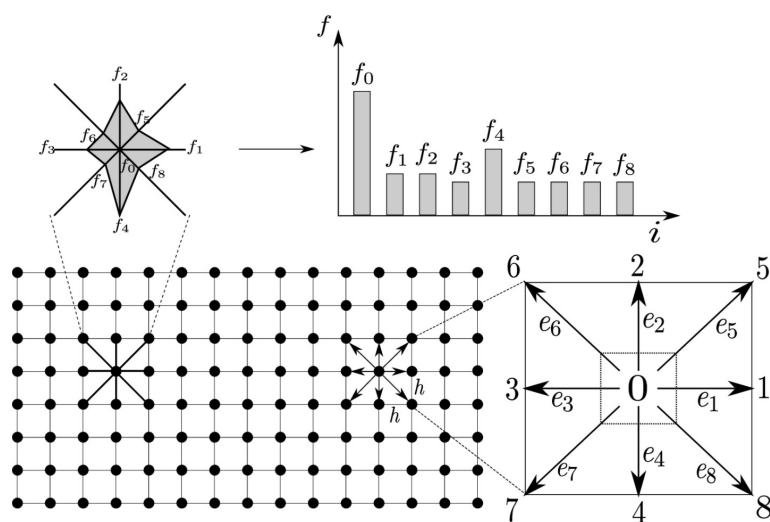


Obr. 4–2: Techniky simulácie v rôznych škálach (Mele, 2013).

rýchlosti. Toto je propagačná fáza

Potom sa častice zrazia a získajú novú rýchlosť. Toto je fáza kolízie

Pravidlá upravujúce zrážky sú navrhnuté tak, aby priemerný čas vyhovoval zachovaniu hmotnosti a hybnosti



Obr. 4–3: Mriežková štruktúra LBM (Soga et al., 2020).

Pri LBM sa (ako aj pri iných numerických metódach) môže objaviť numerická nestabilita. Zatiaľ pre túto metódu nie sú presne dané podmienky stability, ale z doterajších praktických výpočtov vzišlo niekoľko podmienok, pri ktorých držaní sa je

možné dosiahnuť akceptovateľnú stabilitu:

1. Kinetická viskozita by mala byť kladná.
2. Výsledná makroskopická rýchlosť prúdenia

4.4 Modelovanie turbulencie

LES (Large Eddy Simulation) je matematický model turbulencie pôvodne navrhnutý Josephom Smagorinskim

$K - \epsilon$ je matematický model turbulencie

4.5 DNS

Direct Numerical Simulation

5 Programy pre CFD simulácie

5.1 Matlab

Matlab obsahuje niekoľko toolboxov pre CFD analýzu.

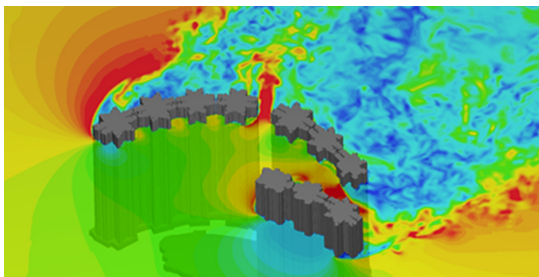
5.2 Ansys Fluid

Ansys Fluid

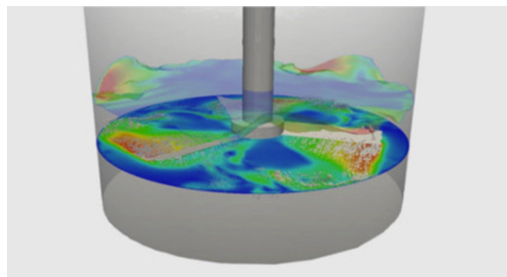
5.3 SimScale

Platforma SimScale ponúka v rámci čiastkových produktov mnohé funkcionality ako ostatné simulačné programy, no táto firma stavila na využitie cloudových technológií. Práca s programom prebieha cez webové rozhranie, kde užívateľ nastavuje a spúšťa simulácie a taktiež sa priamo vo webovom prehliadači zobrazuje 2D alebo 3D vizualizácia simulovaného modelu. Výpočty prebiehajú na serveroch prevádzkovaných

alebo prenajímaných firmou SimScale, ktoré využívajú možnosti masívnej paralelizácie grafických kariet



(a) Simulácia toku vetra okolo modelu niekoľkých výškových budov so zložitou geometriou.



(b) CFD simulácia viacfázovej tekutiny.

Obr. 5 – 1: Vizualizácie CFD simulácií v prostredí SimScale.

5.4 OpenFOAM

OpenFOAM je súbor nástrojov s voľne prístupným zdrojovým kódom na riešenie zložitých problémov s výpočtovou dynamikou tekutín. Obsahuje širokú škálu fyzikálnych modelov (vrátane turbulencie, úprav stien hraničných podmienok - geometrie, termodynamiky a hromadnej dopravy), numerických metód a nástrojov na predbežné a následné spracovanie.

5.5 OpenLB

OpenLB je balík C++ modulov pre implementáciu lattice Boltzmann simulácií určený predovšetkým ako programová podpora pre výskumníkov a technikov, ktorí simulujú toky tekutín pomocou LBM. Podporuje komplexné dátové štruktúry, pomocou ktorých je možné simulovať zložité geometrie. Diskretizovať geometrie (meshing alebo voxelizácia) z dopredu pripravených 3D modelov a nastaviť okrajové podmienky je možné automaticky - automatickým predspracovaním (aj komplexného) 3D modelu. Paralelizácia v implementovaných algoritmoch je riešená využitím knižnice

OpenMP, z čoho môžu benefitovať výkonné multiprocesorové viacjadrové počítače (v architektúrach využívajúcich zdieľanú pamäť). Pri distribuovaných počítačových systémoch, na ktorých by sme chceli simulovať modely na báze LBM pomocou OpenLB majú paralelné algoritmy v tomto balíku implementované rozhranie na posielanie a prijímanie správ medzi jednotlivými procesmi (MPI - Message-Passing Interface)

6 Záver

Simulácie sú v súčasnosti už neoddeliteľnou súčasťou počítačom podporovaného inžinierstva ako aj vedeckého skúmania fyzikálnych javov. Výsledkom simulácie je približné, no dostatočne presné riešenie modelovanej úlohy. Modelovanie na základe matematických metód prešlo dekadami vývoja a vylepšovanie metód pokračuje naďalej.

Literatúra

Chattopadhyay, K., Isac, M. and Guthrie, R. I. L. (2010). Applications of Computational Fluid Dynamics (CFD) in iron- and steelmaking: Part 2, *Ironmaking & Steelmaking* **37**(8): 562–569.

URL: <http://www.tandfonline.com/doi/full/10.1179/030192310X12731438631840>

Delbosc, N. (2015). Real-Time Simulation of Indoor Air Flow Using the Lattice Boltzmann Method on Graphics Processing Unit.

Ersson, M. and Tilliander, A. (2018). Review on CFD Simulation and Modeling of Decarburization Processes, *Steel Research International* **89**(1): 1–13.

Heidler, V. (2011). Numerické řešení modelu mělké vody pomocí lattice boltzmannovy metody [online].

URL: <https://theses.cz/id/06i4dm/>

Mele, I. (2013). Lattice boltzmann method.

URL: http://mafija.fmf.uni-lj.si/seminar/files/2012_2013/Lattice_Boltzmann_method.pdf

Rapp, B. E. (2017). Chapter 1 - introduction, in B. E. Rapp (ed.), *Microfluidics: Modelling, Mechanics and Mathematics*, Micro and Nano Technologies, Elsevier, Oxford, pp. 3 – 7.

URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9781455731411500010>

Soga, K., Kumar, K., Gardner, M., Hosseini, R. and Wang, Q. (2020). Lattice boltzmann method.

URL: <https://www.cb-geo.com/research/lbm/>

Wang, X., Han, M. and Wang, J. (2010). Applying input variables selection technique on input weighted support vector machine modeling for BOF endpoint prediction, *Engineering Applications of Artificial Intelligence* **23**(6): 1012–1018.

URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.engappai.2009.12.007>