
thar

Vydání 0.1

Matej Rzehulka

28.09.2022

Contents

1	PDF verze	1
2	Úvod	3
2.1	Obsah a cíle předmětu	3
2.2	Teorie k proudění a sdílení tepla (opakování)	3
2.3	Problémy s řešením proudění v praxi	4
2.4	Metody řešení	5
3	CFD	7
3.1	Principy modelování	7
3.2	Postup	7
3.3	Chyby	8
3.4	Tvorba geometrie	9
3.5	Diskretizace geometrie	10
4	Instalace balíku ANSYS Fluent	13

CHAPTER 1

PDF verze

PDF verze

2.1 Obsah a cíle předmětu

- praktická aplikace výpočetních kódů v termohydraulice – zejména CFD a subkanálová analýza

2.2 Teorie k proudění a sdílení tepla (opakování)

- více info viz THNJ2, 3

2.2.1 Proudění – jednofázové

- chceme: $p(x, t)$, $w(x, t)$, $h(x, t)$ → 5 neznámých
- tedy potřebujeme 5 rovnic (níže jsou rovnice kontinuity, Navier-Stokesovy rovnice – ve formulaci pro stlačitelné Newtonovské tekutiny a zákon zachování energie)

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \frac{\partial(\rho w_i)}{\partial x_i} &= 0 \\ \frac{\partial(\rho w_i)}{\partial \tau} + \frac{\partial w_i}{\partial x_j}(\rho w_j) &= \rho K_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\tau_{ij}}{\partial x_j} \\ \frac{\partial(\rho h)}{\partial \tau} + \frac{\partial(\rho h w_j)}{\partial x_j} &= \frac{\partial p}{\partial \tau} + w_j \frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial w_i}{\partial x_j} + K_i \rho w_i + q_V - \frac{\partial q_{r,i}}{\partial x_j}\end{aligned}$$

kde

$$\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\eta \left(\frac{\partial w_i}{\partial x_j} + \frac{\partial w_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial w_k}{\partial x_k} \right) + \xi \delta_{ij} \frac{\partial w_k}{\partial x_k} \right]$$

Dále je potřeba dodat

- vztahy pro transportní veličiny
 - stavové rovnice

- další vztahy
- konstitutivní vztahy - popisují specifické situace, např.
 - proudění z povrchu (vztahy s Nu)
 - ...
- okrajové podmínky
 - v případě nestacionárních dějů se počáteční stav může určit např. stacionárním výpočtem

2.2.2 Dvofázové proudění

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \tau}(\rho_\ell(1 - \langle \alpha \rangle)) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_\ell w_{\ell,i}(1 - \langle \alpha \rangle)) &= \Gamma_\ell \\ \frac{\partial}{\partial \tau}(\rho_v \langle \alpha \rangle) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_v w_{v,i} \langle \alpha \rangle) &= \Gamma_v\end{aligned}$$

TODO

- je potřeba více vztahů – např. konstitutivní vztahy pro výpočet členů Γ

2.3 Problémy s řešením proudění v praxi

- výpočetní prostředky jsou omezené
 - vztahy je potřeba zjednodušovat (k dosažení rozumné výpočetní náročnosti)
 - typicky se balancuje rychlost výpočtu proti přesnosti (a realističnosti)
- je potřeba zvolit vhodnou metodu

2.3.1 Aspekty ovlivňující výběr výpočetní metody

- geometrie problému
- probíhající fyzikální jevy
 - proudění - jednofázové x vícefázové
 - fázové přeměny
 - chemické reakce
 - rychlost změn - velikost časového kroku musí být dostatečně malá
- požadovaná přesnost
- nároky na HW a rychlost výpočtu
 - souvisí s aplikací
 - * můžeme si dovolit čekat (např. bezpečnostní analýzy), nebo ne (on-line modelování)
 - * počet opakování - jen 1 výpočet, nebo více (např. při optimalizaci)
- předpoklady výpočtu
 - konzervativní nebo best-estimate?

2.3.2 Příklady metod – výpočet aktivní zóny

- kanálová zóna – k příčnému mísení nedochází (RBMK, GCR,...) - lze aproximovat 1D výpočtem
- kazetové palivové soubory s obálkou (např. BWR, VVER-440,...) - přetoky mezi PS nejsou, ale chceme uvažovat přenos energie
 - subkanálová analýza funguje dobře
- příčné přetoky existují (např. VVER-1000) - složitější

2.4 Metody řešení

- CFD
 - univerzální, široce rozšířené v praxi
 - nejbližší skutečnému řešení, ale typicky používá zjednodušené modely (např. RANS, LES v modelování turbulence)
 - velká náročnost na výpočetní prostředky
 - Příklad: ANSYS Fluent, Siemens StarCCM+, OpenFOAM,...
- subkanálová analýza
 - předpoklad: proudění v axiálním směru je dominantní, ale existují příčné přetoky
 - * rovnice se přepíší do 1D tvaru s členy pro příčné přetoky
 - * „mezi 1D a 2D“
 - potřebuje více konstitutivních vztahů
 - dnes používané jen ve výpočtech aktivních zón
 - Příklad: Cobra, Altham, Subchanflow
- metoda náhradního média
 - původní složitá geometrie se nahradí jednodušší „náhradní“ úlohou
- systémové (integrální) kódy
 - rovnice jsou integrované přes objem, výpočetní oblast se „nodalizuje“
 - časté v havarijních analýzách
 - typicky vhodné i pro velké oblasti jako celá smyčka nebo celý primární okruh
 - při velkém množství nodů je srovnatelné se subkanálovou analýzou či dokonce s CFD
 - Příklad: RELAP, ATHLET, MELCOR, TRACE
- metoda izolovaného kanálu
- code coupling
 - spojování více různých kódů do složitějších celků
 - specifické pro daný typ úlohy
 - časté pro propojení termohydraulických a neutronických výpočtů
 - Příklad: RELAP + neutronika, ATHLET + neutronika, DYN3D, TRACE + PARCS, OpenFOAM + Serpent,...

3.1 Principy modelování

CFD = Computational Fluid Dynamics

- řešení diferenciálních rovnic (ZZ hmoty - rovnice kontinuity, hybnosti - Navier-Stokesovy rovnice, energie)

Obecně výpočet probíhá ve 2 krocích:

1. Diskretizace definičního oboru (\vec{x}, t)
 - různé metody (FVM, FEM, ...)
2. Iterační řešení systému algebraických rovnic

3.2 Postup

1. Pre-processing
 - definice geometrie
 - generace výpočetní sítě (mesh) - prostorová, časová
 - volba modelů (turbulence, fyzikální a chemické procesy,...)
 - záleží na požadované přesnosti (a dostupném hardwaru)
 - další faktory - počet fází, přenos energie,...
 - termofyzikální vlastnosti materiálů (hustota, viskozita,...)
 - zadane jako konstanty, tabulka hodnot nebo funkce
 - hraniční (popř. i počáteční) podmínky
 - vstup, výstup, stěny,...
 - v případě nestacionárních úloh se často používá řešení stacionární úlohy jako počáteční podmínka

2. Výpočet

- nejsnazší část - pracuje počítač
- vyplatí se sledovat konvergenci – např. zkontrolovat, že residua klesají

3. Post-processing

- kontrola, že výsledky dávají smysl
- analýza konvergence
 - zkontrolovat, že další iterace už nemění výsledek
 - ověřit vliv sítě (meshe) na výsledek
 - * provést výpočet na jemnějším meshi a porovnat výsledky
- zpracování výsledků do požadovaného formátu

3.3 Chyby

1. Numerické

1. Diskretizační

Souvisí s náhradou derivace diferenčním schématem:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial x} &\approx \frac{u(x+h) - u(x)}{h} + \mathcal{O}(h) \\ \frac{\partial u}{\partial x} &\approx \frac{u(x) - u(x-h)}{h} + \mathcal{O}(h) \\ \frac{\partial u}{\partial x} &\approx \frac{u(x+0.5h) - u(x-0.5h)}{h} + \mathcal{O}(h^2)\end{aligned}$$

Odhad velikosti diskretizační chyby – porovnat výpočty na různých sítích.

2. Zaokrouhlovací

Souvisí s reprezentací reálných čísel v počítači (`float`, `double`).

Diskretizační a zaokrouhlovací chyby jdou proti sobě:

- snížení diskretizační chyby vede k většímu počtu výpočtů, což může vést k větší zaokrouhlovací chybě (záleží však na typu úlohy, stabilitě schématu,...)

3. Chyba konvergence

- výpočet různých veličin (rychlosti, teploty,...) konverguje různě rychle
- pro kontrolu stačí sledovat např. velikost residua v závislosti na iteraci
- souvisí s iteračním schématem (typem a hyperparametry) pro řešení maticové úlohy

4. Chyba diskretizace fyzikálního modelu

- souvisí se zadáním a modelovacími chybami
- TODO

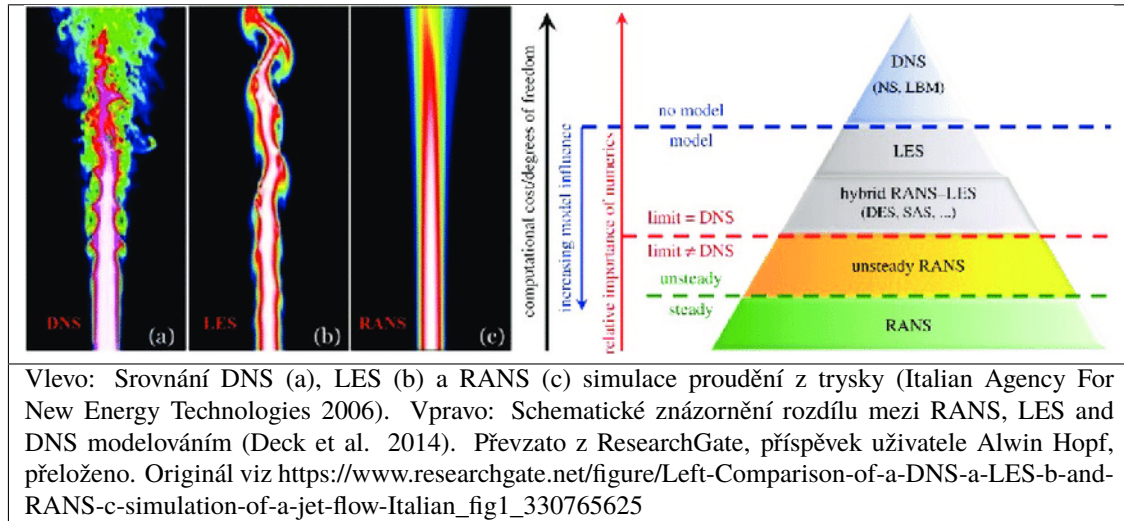
2. Modelovací

1. Příliš zjednodušená geometrie

- např. špatné použití symetrie nebo zanedbání malé oblasti

2. Fyzikální modely

- souvisí s modelováním fyzikálních procesů
- např. volba modelu turbulence
 - RANS je rychlé, ale dělá značná zjednodušení
 - LES řeší některé struktury v proudění, malé struktury pak modeluje; více náročné na HW než RANS, méně než DNS
 - DNS řeší přímo Navier-Stokesovy rovnice, ale je vysoce náročné na HW



- stlačitelnost tekutin – často se aproximují jako nestlačitelné - ale to není použitelné vždy
- potřeba předem odhadnout, co je použitelné (např. $v \ll c$, kde c je rychlost zvuku, pak aproximace nestlačitelné tekutiny lze použít)

3. Termofyzikální vlastnosti

- často aproximujeme konstantami, ale někdy je potřeba poskytnout závislost $x(\rho)$ nebo $x(T)$
- např. přirozená konvekce

4. Hraniční podmínky

5. Počáteční podmínky

6. Uživatelské funkce

7. Fázové přechody

3.4 Tvorba geometrie

2 možnosti:

1. Import modelu z CAD (např. stl formát)
 - často zdroj chyb – model se nenaimportuje správně,...
2. Vlastní SW pro tvorbu geometrie v CFD programu
 - Odstraňuje problém s importem

- Modelovací prostředí nemusí nabízet funkcionalitu jako samostatný CAD software
- 2 přístupy k implementaci
 - centrální - 1 prostředí, kde se pracuje pořád (např. Geostar)
 - samostatné moduly - typické u velkých balíků (např. Ansys)

3.4.1 Přístupy ke geometrii

1. CLI (*command line interface*) + náhled
 - expert-friendly
2. myš + ikony
3. od nejmenších modelů - křivky -> plochy -> objemy - nejdřív geometrie, pak síť
4. od sítě - deformace apod. - typické pro starší SW

3.5 Diskretizace geometrie

- v CFD může mít velký vliv na výsledek (v pevnostních výpočtech spíš menší)

3.5.1 Prvky

- dle dimenzionality:
 - 1D
 - * úsečka / křivka
 - * obsahuje ≥ 2 nody (2 - úsečka, 3 - quadratic curve, 4 - cubic curve)
 - 2D
 - * trojúhelníky (≥ 3 nody), čtyřhrany (≥ 4 nody)
 - * strana může být křivá (pak potřebuje > 2 nody)
 - 3D
 - * hexahedron - 6 stěn, ≥ 8 nodů, nemusí být pravoúhlý
 - * hranol (prism)
 - * pyramid
 - * tetrahedron
 - * dodecahedron
 - * polyhedra - libovolný tvar (mnohostěn)

3.5.2 Požadavky na síť

- pokrýt celý objem
- prvky se nesmí překrývat
 - výjimka - síť typu „chiméra“ - překryv je úmyslný

3.5.3 Typy sítí

1. Strukturované = pravidelné
 - typ H - každý nód obklopen stejným množstvím prvků
 - typ O - okolo kruhových těles - radiální
 - typ C - kulaté + ostrý bod - např. křídla
 - obecně jednodušší na výpočet - vede na řešení úlohy s pásovou maticí
2. Nestrukturované = nepravidelné
 - složitější (horší indexování kvůli nepravidelnostem) -> náročnější
 - dnes preferováno – dává elementy tam, kde je potřeba lepší rozlišení (oblasti s ostrými gradienty)
 - při použití několika různých sítí je potřeba řešit napojení
 - konformní - sítě se napojují
 - nekonformní - nody nesousedí
 - rozhraní 2 sítí může být zdrojem chyb
 - Speciální
 - rotující mříž - pro čerpadla a jiné pohyblivé části
 - dynamické - pohybuje se
 - dynamic refinement - zhušťuje se podle potřeby
 - * problém - jak správně zvolit kritérium pro zhuštění
 - * použití např. pro dvoufázové proudění - zjemnění sítě poblíž fázového rozhraní

3.5.4 Posuzování kvality sítě

1. hustota sítě
 - balancování HW náročnosti proti přesnosti
 - doporučuje se provést výpočet na 2 různě hustých sítích a sledovat konvergenci hodnot
2. parametry prvků
3. poměr stran - optimálně blízko 1 (tj. prvky nejsou příliš roztáhnuté v 1 dimenzi - výjimka - prismatické prvky pro rozlišení mezní vrstvy)
4. šikmost (skewness) - zkosení
5. ortogonalita

CHAPTER 4

Instalace balíku ANSYS Fluent
