

# Implementace modelu podměřítkové turbulence WALE a ověření jeho funkčnosti

Vojtěch Votruba

2023-11-09

## Cíle

1. Rešerše literatury, seznámení s modelem a testovací výpočty se stávajícími subgrid modely
2. Implementace modelu WALE do modelu ELMM a první testy
3. Testovací výpočty s modelem WALE a vyhodnocení výsledků porovnání

## 1 Úvod

Popis proudění tekutin patří mezi nejdůležitější úlohy současné fyziky. Na jeho aplikace narážíme například v letectví, při modelování počasí a podnebí, ale rovněž i při studiu magnetického pole plazmatu.

Výchozím fyzikálním modelem pro tento popis je nestlačitelná newtonovská kapalina. Pro matematické vyjádření jejího pohybu byly odvozeny tzv. *Navierovy-Stokesovy rovnice*. Řešením těchto diferenciálních rovnic 2. řádu (které lze po uvážení všech působících sil odvodit například z Newtonova 2. zákona) je pak funkce rychlosti  $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ .

Neboť jsou tyto rovnice mnohdy neřešitelné analytickými metodami, přistupujeme v praxi k metodám numerickým. Zde existuje několik postupů. Jedním z nich je například simulování Navierových-Stokesových rovnic přímo – tento postup nazýváme *DNS: Direct Numerical Simulation*. Dalším postupem, který se využívá nejčastěji pro simulaci na větších měřítkách, jsou tzv. *LES: Large Eddy Simulation* neboli *simulace velkých vírů*. Tuto metodu využívá právě model *ELMM: Extended Large-eddy Microscale Model* vyvinutý vedoucím tohoto projektu: panem Mgr. Vladimírem Fukou, Ph.D.

Metoda LES spočívá ve vytvoření „hrubší“ sítě, na které budeme simulovat Navierovy-Stokesovy rovnice, tato síť se většinou získává použitím nějakého konvolučního filtru s využitím rychlé Fourierovy transformace. Abychom však nezanedbali turbulentní efekty na škálách menších, než je rozměr sítě, zavádíme do rovnice tzv. turbulentní viskozitu, která je počítána příslušným *subgrid* (podměřítkovým) modelem. Jedním z takových modelů je právě model *WALE: Wall-Adapting Local Eddy-viscosity*, jehož implementace byla hlavním úkolem tohoto projektu.

## 2 Metody

V této sekci stručně shrneme matematiku, která souvisí s modelem WALE, a popíšeme jeho implementaci do modelu ELMM.

## 2.1 Použité rovnice a vztahy

Navierovy-Stokestovy rovnice v podobě, kterou používáme v LES, s rovnicí kontinuity mají dohromady tvar

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} + \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \bar{\mathbf{u}} = -\frac{1}{\rho} \nabla \bar{p} + \nu \nabla^2 \bar{\mathbf{u}} - \nabla \tau, \quad \nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} = 0, \quad (1)$$

kde  $\rho$  je hustota,  $p$  je tlak a  $\nu$  viskozita [1]. Symbol  $\overline{(\dots)}$  zde značí hodnotu filtrovanou konvolučním filtrem. Důležitým pro nás bude člen  $\nabla \tau$ , kde  $\tau$  označuje tzv. *SGS: subgrid-scale tensor* [1]. Tento tenzor nám přidává do rovnice podměřítkovou turbulenci. Většina subgrid modelů ho pak počítá pomocí vztahu [2]

$$\tau_{ij} - \frac{\tau_{kk}}{3} \delta_{ij} = 2\nu_t \bar{S}_{ij}. \quad (2)$$

Zde vystupuje právě ona, již v Úvodu zmíněná, turbulentní viskozita  $\nu_t$ , kterou počítají konkrétní subgrid modely.  $\delta_{ij}$  je zde podle standardního značení Kroneckerovo delta a  $\bar{S}$  je symetrická část gradientu rychlosti

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right). \quad (3)$$

Obdobně pak také definujeme tenzor  $\bar{\Omega}$  jako antisymetrickou část gradientu rychlosti [2]. Dále pro přehlednost zavedeme veličiny  $S^2 = \bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij}$ ,  $\Omega^2 = \bar{\Omega}_{ij} \bar{\Omega}_{ij}$ ,  $IV_{S\Omega} = \bar{S}_{ik} \bar{S}_{kj} \bar{\Omega}_{jl} \bar{\Omega}_{li}$ , kde používáme Einsteinovu sumační konvenci. Nakonec si také zavedeme veličinu  $\mathcal{S}_d \mathcal{S}_d$  definovanou [2]

$$\mathcal{S}_d \mathcal{S}_d = \frac{1}{6} (S^2 S^2 + \Omega^2 \Omega^2) + \frac{2}{3} S^2 \Omega^2 + 2IV_{S\Omega}. \quad (4)$$

Z těchto všech veličin zapíšeme vzorec pro kýženou turbulentní viskozitu jako

$$\nu_t = (C_w \Delta)^2 \frac{(\mathcal{S}_d \mathcal{S}_d)^{\frac{3}{2}}}{(\bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij})^{\frac{5}{2}} + (\mathcal{S}_d \mathcal{S}_d)^{\frac{5}{4}}}, \quad (5)$$

kde  $\Delta$  označuje zobecněný rozměr výpočetní sítě [2], který je standardně počítán jako  $\Delta = \sqrt[3]{\Delta_x \Delta_y \Delta_z}$ <sup>1</sup>.  $C_w$  je zde konstanta modelu, která nabývá hodnot z intervalu [0,55; 0,6] [2].

## 2.2 Implementace

Celý model ELMM použitý k tomuto projektu i s finální implementací WALE je dostupný v GitHub repozitáři řešitele na adrese <https://github.com/vojtech-votruba/elmm/>.

Vzhledem k tomu, že model ELMM byl napsán v programovacím jazyce Fortran, bylo potřeba i model WALE naimplementovat v tomto jazyce. Konkrétně byl WALE naprogramován jako soubrouťina do souboru `/src/subgrid.f90`, kam byly obdobným způsobem umístěny i další subgrid modely. Modelu WALE bylo přiděleno číslo 6, které bylo nutné nastavovat v konfiguraci spouštěné simulace.

Struktura soubrouťiny byla napsána tak, aby přibližně odpovídala výpočtu v předchozí podsekcí, kdy jména jednotlivých lokálních proměnných byla zvolena v souladu se značením použitým zde. Výstupem soubrouťiny pak bylo zapsání vypočtené viskozity podle vztahu (5) do globální

---

<sup>1</sup> $\Delta_i$  značí rozměr sítě v daném směru

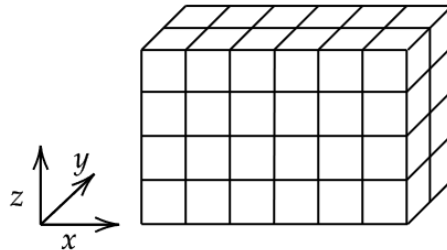
proměnné `Viscosity(i,j,k)`.

Hlavní částí celé implementace bylo vlastně napsání několika cyklů, které prováděly výpočty zapsané Einsteinovou sumační konvencí výše. Kromě toho bylo dále potřeba pod hlavní subroutinu `SGS_WALE()` napsat další pure subroutinu `OmegaIJ()`, která do připravené lokální proměnné spočetla a zapsala antisymetrizaci gradientu rychlost  $\bar{\Omega}$ .

Pole rychlosti je v modelu ELMM ukládáno na posunuté síti a jednotlivé derivace byly vypočteny metodou konečných diferencí. Výpočet tenzoru  $\bar{S}$  takto implementován být nemusel, neboť pro jeho pro něj byla použita již existující subroutina `StrainIJ()`.

Model WALE má z jednoduché analýzy cyklů asymptotickou časovou složitost  $\mathcal{O}(xyz)$ , kde  $x, y$  a  $z$  je počet buněk v každém směru sítě. Pro urychlení výpočtu byla přidána ještě paralelizace pomocí `OpenMP`. Jelikož ELMM sám o sobě již pro jiné subgrid modely paralelizaci také využívá, stačilo zabalit celý cyklus ve WALE subroutině analogicky k ostatním modelům do direktivy `!$omp parallel`.

Pro interpretaci výsledků, které budou prezentovány v další sekci, je také důležité zmínit, jakou orientaci souřadnicové sítě ELMM používá. K tomu slouží obrázek 1 níže.



Obrázek 1: Defaultní orientace souřadnicových os v ELMM

### 3 Výsledky

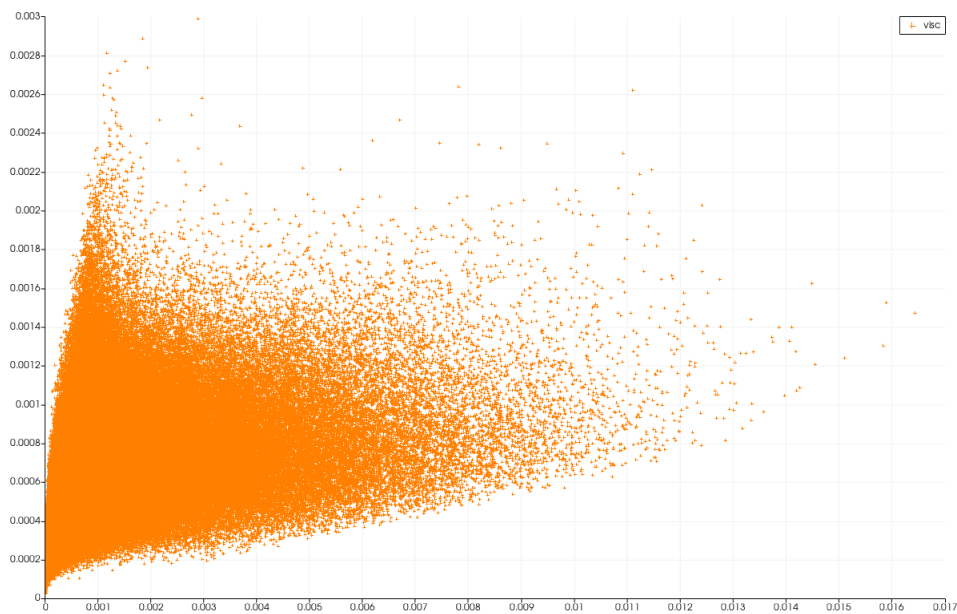
Poté, co byl model WALE naimplementován (viz Metody), bylo již možné přistoupit k testovacím výpočtům. Většina testů probíhala tak, že jsme nechali ELMM příslušnou testovací konfiguraci vypočítat pro WALE model a pak také pro model Vremanův<sup>2</sup>, výsledky těchto výpočtů jsme pak porovnávali v grafech.

Cílem tohoto porovnání nebylo rozebírat jednotlivé případy, proto se nebudeme příliš zabývat konkrétními trendy v grafech. Jde nám pouze o ověření toho, že se model WALE přibližně shoduje s jiným modelem a že celkové výsledky přibližně odpovídají přesnějším výpočtům/simulacím.

#### 3.1 Turbulentní viskozita

Pro úvodní porovnání a ověření správnosti implementace našeho modelu byl vytvořen softwarem ParaView jednoduchý bodový graf (obr. 2) porovnávající turbulentní viskozitu. Na jednu osu byla vynesena turbulentní viskozita získaná simulací s použitím modelu WALE a na druhou viskozita získaná použitím Vremanova modelu. Konfigurace příkladu, na kterém simulace probíhala, se nachází ve složce s umístěním `/examples/visc_comparison/`.

<sup>2</sup>Ten byl v modelu naimplementován ještě před začátkem projektu. Jeho podklad nalezneme v článku Vreman A. W. (2004) "An eddy-viscosity subgrid-scale model for turbulent shear flow: Algebraic theory and applications", Phys. Fluids 16, 3670-3681. <https://dx.doi.org/10.1063/1.1785131>

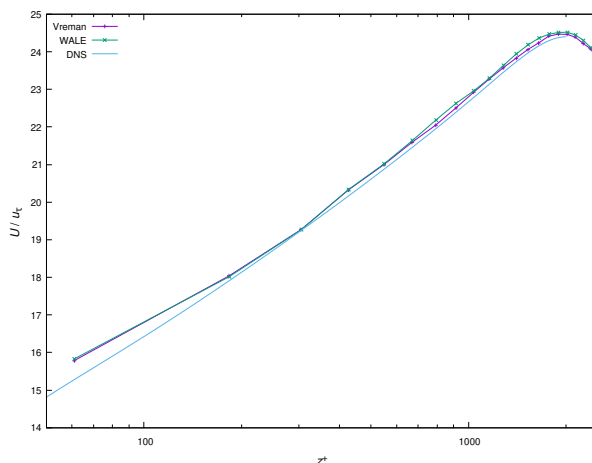


Obrázek 2: Porovnání turbulentní viskozity Vremanova modelu a WALE modelu

### 3.2 Prázdný kanál

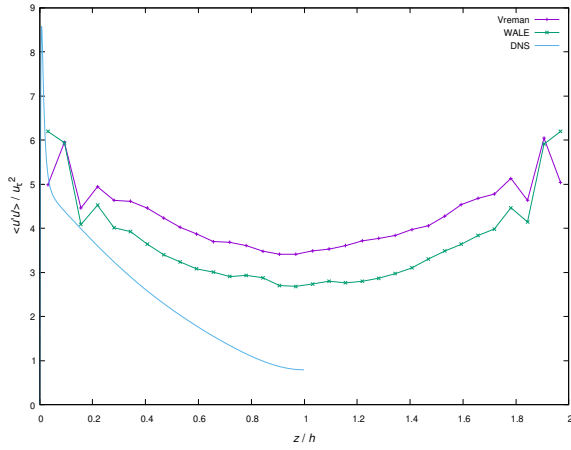
Dalším příkladem, který jsme testovali, byl prázdný kanál podle konfigurace ve složce s umístěním `/examples/channel_test/`. Pro tento výpočet jsme se již nezabývali turbulentní viskozitou, ale přímo polem rychlosti, které nám ELMM vrátil. Toto pole bylo časově průměrované podle parametru `time_when_to_start_averaging` v souboru `main.conf`.

Na poli rychlosti jsme pak studovali rozptyl jednotlivých složek, průměrnou rychlost a turbulentní kinetickou energii<sup>3</sup>, porovnávali jsme znovu WALE model s Vremanovým modelem a do porovnání jsme přidali ještě data z přesnější simulace DNS [3]. Grafické zpracování, které bylo vytvořeno softwarem gnuplot, je k vidění na obr. 3 a 4.

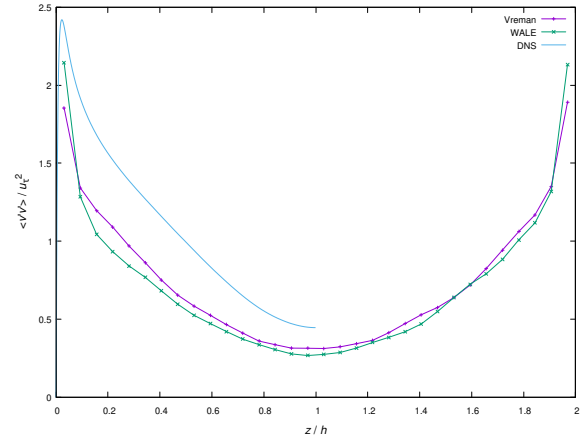


Obrázek 3: Závislost normované průměrné rychlosti  $U$  na výšce (stěnové souřadnici)  $z^+$

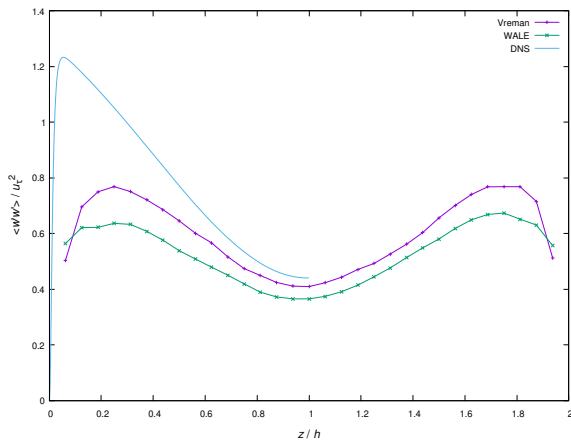
<sup>3</sup>Všechny tyto veličiny byly normované tzv. frikční rychlostí  $u_\tau$ , případně  $u_\tau^2$ .



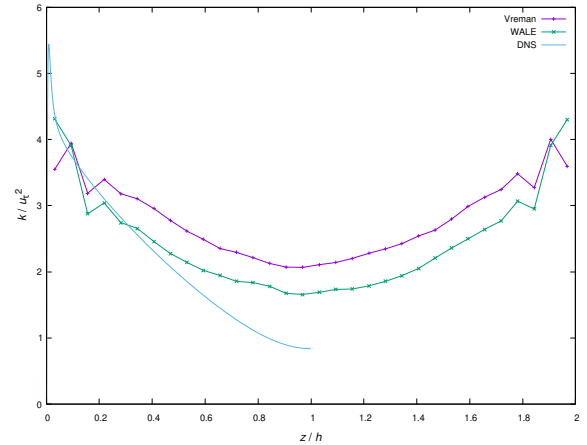
(a) Závislost rozptylu první složky na normované výšce



(b) Závislost rozptylu druhé složky na normované výšce



(c) Závislost rozptylu třetí složky na normované výšce



(d) Závislost turbulentní kinetické energie na normované výšce

Obrázek 4: Grafy normovaných rozptylů rychlost a turbulentní kinetické energie

### 3.3 Jednoduchá překážka

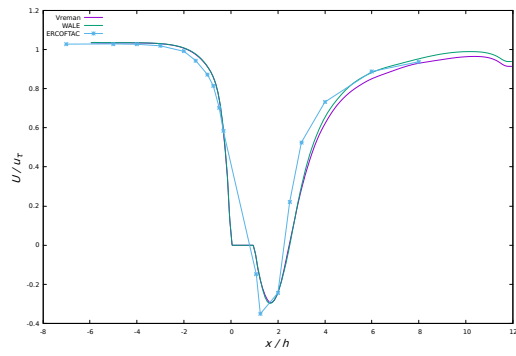
Posledním případem, který jsme testovali, bylo chování modelu WALE v kanále s umístěnou pevnou překážkou. Za překážku byla zvolena kostka<sup>4</sup> vytvořená a nastavená softwarem Para-View. Konfigurace pro tento případ se nachází ve složce s umístěním `/examples/obstacle_test/`.

Zatímco v minulé podsekcí jsme použili jako referenční hodnoty data z DNS, zde použijeme experiment<sup>5</sup>. Data z experimentu, která byla použita, jsou k dispozici v databázi [4], přičemž rozměry kanálu a umístění kostky byly v simulaci nastavovány podle nich.

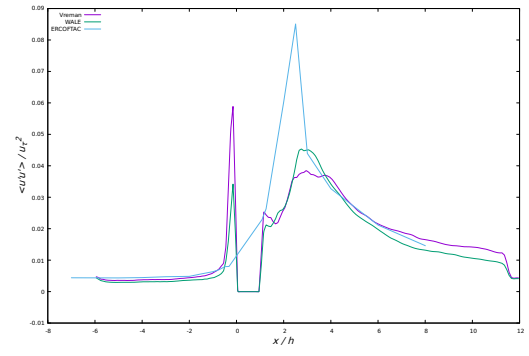
Zde je však nutné se pozastavit při výběru dat. Zatímco v prázdném kanále jsme porovnávali pouze vertikální profil, neboť jinak bylo pole rychlosti homogenní, zde situace bude jiná. Musíme vybrat, jaké profily rychlosti chceme porovnat. Po konzultaci s vedoucím projektu byly vybrány dvě přímky: Jedna vodorovná umístěná v souřadnici  $z/h = 0,5$  ( $h$  je zde rozměr kostky) a druhá svislá umístěná v úplavu za kostkou v poloze  $x/h = 2$ . Obě takto vybrané přímky byly umístěny do souřadnice  $y = 0$ . Znovu jsme zde prozkoumali pro oba profily průměrnou rychlost a rozptyly ve všech složkách (viz obr. 5 a 6).

<sup>4</sup>Její strana byla rovna polovině rozměru oblasti ve směru osy  $z$ .

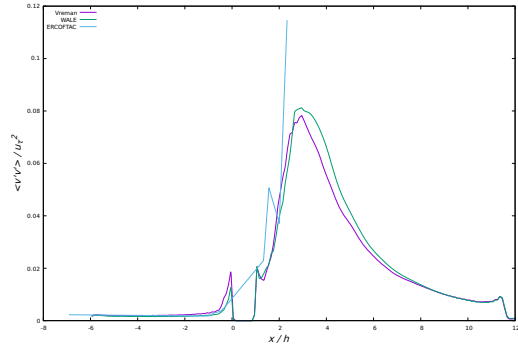
<sup>5</sup>Konkrétně jde o experiment využívající (LDA) Laser Doppler Anemometry, viz [4]



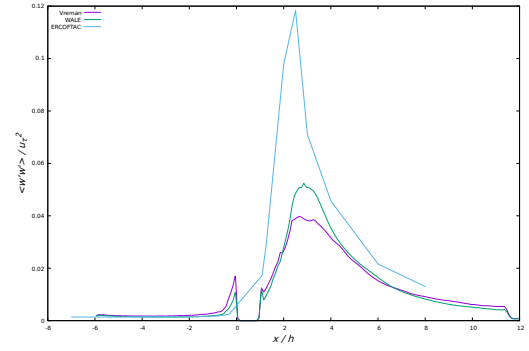
(a) Závislost průměrné rychlosti na normované šířce



(b) Závislost rozptylu první složky na normované šířce

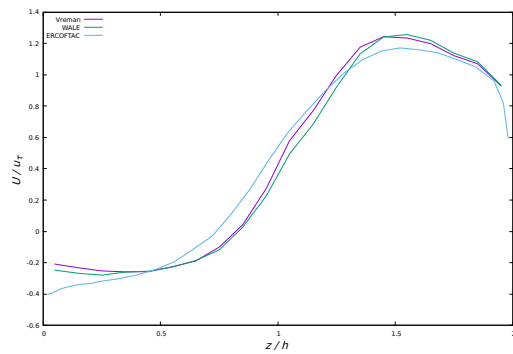


(c) Závislost rozptylu druhé složky na normované šířce

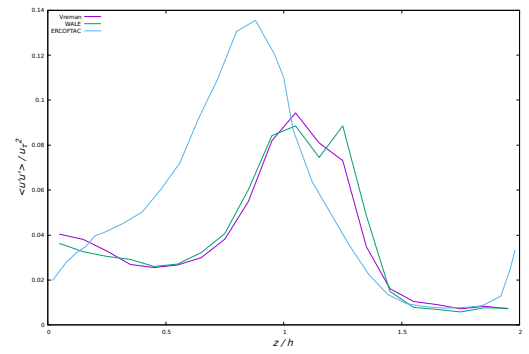


(d) Závislost rozptylu třetí složky na normované šířce

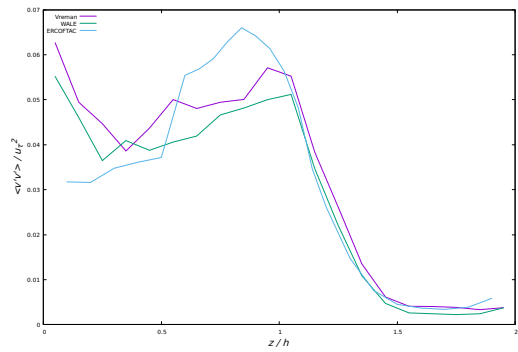
Obrázek 5: Grafy normované rychlosti a normovaných rozptylů rychlosti pro vodorovný profil



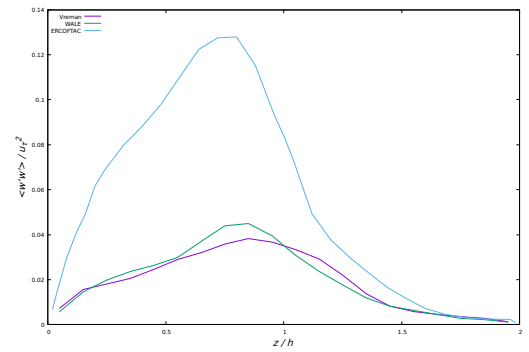
(a) Závislost průměrné rychlosti na normované výšce



(b) Závislost rozptylu první složky na normované výšce



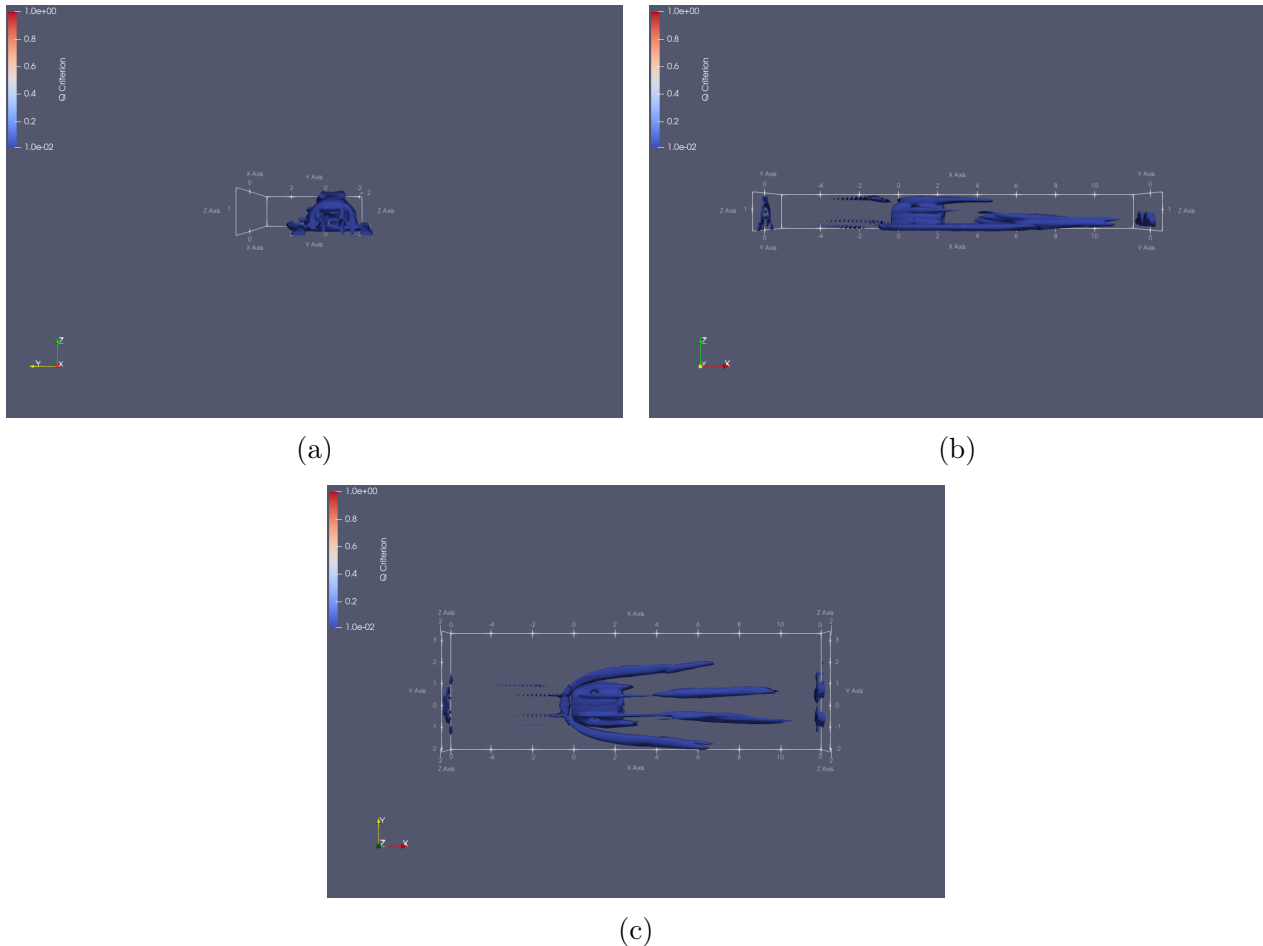
(c) Závislost rozptylu druhé složky na normované výšce



(d) Závislost rozptylu třetí složky na normované výšce

Obrázek 6: Grafy normované rychlosti a normovaných rozptylů rychlosti pro svislý profil

Pro názornou ilustraci toho, jak vypadá výsledné pole rychlosti v kanálu s překážkou, do této podsekcce ještě přidáváme snímky ze 3D vizualizace softwarem ParaView (obr. 7). Pro přehlednost jde o snímky pořízené ze tří profilů. To, co na nich vidíme, jsou izoplochy tzv.  $Q$ -kritéria, které můžeme jednoduše vypočítat z tenzorů  $\bar{S}$  a  $\bar{\Omega}$ . Vizualizace těchto izoploch jsou běžným nástrojem pro zobrazování vírových struktur v simulacích a ukazují nám oblasti, kde má rotace rychlosti (s odečtením viskózního napětí) příslušnou velikost. [5].



Obrázek 7: Vizualizace izoploch  $Q$ -kritéria pro simulaci případu s jednoduchou překážkou

## 4 Závěr

Řešitel se seznámil s problematikou modelování turbulentního proudění pomocí simulací velkých vírů. Naučil se také pracovat s již existujícím modelem ELMM (Extended Large-eddy Microscale Model) a základům práce s vizualizačním softwarem ParaView. Model ELMM rozšířil přidáním modelu podměřítkové turbulence WALE.

Dále provedl několik testovacích výpočtů, na kterých ukázal, že se model WALE chová podobně jako již naimplementovaný Vremanův model. Do srovnání byly pro referenci také přidány přesnější výsledky z DNS nebo experimentální data. Takto byly splněny všechny cíle projektu.

## Reference

- [1] Meneveau C. (2010) Turbulence: Subgrid-Scale Modeling. Scholarpedia, 5(1):9489. [http://www.scholarpedia.org/article/Turbulence:\\_Subgrid-Scale\\_Modeling](http://www.scholarpedia.org/article/Turbulence:_Subgrid-Scale_Modeling)

- [2] Nicoud F., Ducros F. (1999) Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor, *Flow, Turbul. Combust.* 62(3), 183–200. <https://doi.org/10.1023/A:1009995426001>
- [3] Myoungkyu Lee and Robert D. Moser "Direct numerical simulation of turbulent channel flow up to  $Re_{\tau} = 5200$ ", *Journal of Fluid Mechanics*, 2015, vol. 774, pp. 395-415 [http://journals.cambridge.org/article\\_S0022112015002682](http://journals.cambridge.org/article_S0022112015002682)
- [4] Martinuzzi, R., Tropea, C. (1993) Flow Around Surface-Mounted Cubical Obstacle, European Research Community on Flow Turbulence and Combustion, Classic Collection Database <http://cfd.mace.manchester.ac.uk/ercoftac/doku.php?id=cases:case041>
- [5] Szwabowski E. (2021) Q-criterion for Vortex Visualization, M4 Engineering, <https://www.m4-engineering.com/q-criterion-for-vortex-visualization/>