

Министерство образования и науки Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра математического и
компьютерного моделирования

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СМЕШЕНИЯ ЖИДКОСТЕЙ
СРЕДСТВАМИ OpenFOAM

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

Студента 4 курса 413 группы
направления 01.03.02—Прикладная математика и информатика
механико-математического факультета
Коваленко Никиты Андреевича

Научный руководитель
к.т.н., доцент

И.А.Панкратов

Зав. кафедрой
зав.каф., д.ф.м.н.

Ю. А. Блинков

Саратов 2017

СОДЕРЖАНИЕ

Стр.

ВВЕДЕНИЕ	3
1 Общая структура работы	4
1.1 Актуальность работы	4
1.2 Цели и задачи работы	5
2 Содержание выпускной квалификационной работы	6
2.1 Основные файлы OpenFOAM	6
2.2 Рассмотрение и модернизация стандартного примера сме- шения двух жидкостей	7
2.3 Распараллеливание примера	9
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	10

ВВЕДЕНИЕ

Численное моделирование является одним из эффективных методов изучения сложных систем. Компьютерные модели проще и удобнее исследовать благодаря их способности проводить вычислительные эксперименты, в тех случаях, когда опыты затруднены из-за финансовых или физических препятствий, или возможно наблюдение непредсказуемого результата. Логичность и формализация компьютерных моделей позволяет изучить основные факторы, определяющие свойства объекта-оригинала (или целого класса объектов), в частности, исследовать отклик моделируемой системы на изменение ее параметров и начальных условий.

Различают аналитическое и имитационное моделирование. При аналитическом моделировании изучаются математические (абстрактные) модели реального объекта в виде алгебраических, дифференциальных и других уравнений, а также предусматривающих осуществление однозначной вычислительной процедуры, приводящих к их точному решению. При имитационном моделировании исследуются математические модели в виде алгоритма(ов), воспроизводящего функционирование исследуемой системы путем последовательного выполнения большого количества элементарных операций.

Численное моделирование дает возможность:

- расширить круг исследовательских объектов - становится возможным изучать не повторяющиеся явления, явления прошлого и будущего, объекты, которые не воспроизводятся в реальных условиях;
- исследовать явления и процессы в динамике их развертывания;
- управлять временем (ускорять, замедлять и т.д.);
- совершать многократные испытания модели, каждый раз возвращая её в первичное состояние;
- получать разные характеристики объекта в числовом или графическом виде;
- находить оптимальную конструкцию объекта, не изготавливая его пробных экземпляров;
- проводить эксперименты без риска негативных последствий для здоровья человека или окружающей среды.

1 Общая структура работы

1.1 Актуальность работы

Контроль качества смешения жидкостей является актуальной проблемой в промышленности. Смешение – это процесс, уменьшающий неоднородность среды и являющийся важной частью технологических процессов многих отраслей.

Показатель превращения и качество получаемых продуктов в химических реакторах, а также механические, химические и физические свойства полимерных материалов, эффективность использования катализаторов, ингибиторов и других добавок в значительной степени определяются эффективностью и качеством смешения.

Ни одна современная технологическая установка в химической, пищевой отраслях не обходится без процесса смешения и эмульгирования. Однако не смотря на широкое распространение интенсивность и свойства этих процессов недостаточно изучены. Именно низкая эффективность и плохое качество смешения является основным тормозом интенсивности многих технологических процессов.

Для изучения особенностей смешения необходимо рассматривать специфику многих веществ, например, химически активные или инертные жидкости, медленные ламинарные или быстрые турбулентные потоки. Именно поэтому на данный момент не существует единой теории, способной детально объяснить процесс смешения в жидкостях и прямые вычисления не могут охватить все важные аспекты этого явления. Нахождение аналитического решения для большинства промышленных задач не всегда возможно, а проведение натурального эксперимента с соблюдением всех критериев часто очень затратно, долговременно и не может дать точные ответы на поставленные вопросы, поэтому наиболее перспективным направлением является развитие численных методов исследования. На их основе возможно создание компьютерных моделей, которые смогли бы полностью соответствовать поставленным задачам, не требуя больших финансовых или временных затрат.

1.2 Цели и задачи работы

Целью дипломной работы является рассмотрение моделирования смешения двух жидкостей средствами OpenFOAM. Для решения поставленной цели решаются следующие задачи:

- Разобрать основные файлы OpenFOAM;
- Рассмотреть стандартный пример смешения двух жидкостей;
- Модифицировать стандартный пример;
- Сделать и рассмотреть распараллеливание примера.

2 Содержание выпускной квалификационной работы

2.1 Основные файлы OpenFOAM

OpenFOAM — это открытая (лицензия GPL) платформа для численного моделирования — в первую очередь для моделирования, связанного с решением уравнений в частных производных методом конечных объемов, и для решения задач механики сплошных сред.

Основными файлами, для любой задачи в OpenFOAM, являются: BlockMeshDict, controlDict, fvSchemes и fvSolution. Они находятся в каталоге system каждой задачи. Также для запуска требуются файл Allrun, а для очистки от каталогов созданных во время решения необходим файл Allclean.

BlockMeshDict: В файле BlockMeshDict создаются параметрические сетки с определением градации и изгибов ребра. Читая этот файл утилита BlockMesh генерирует сетку и записывает данные сетки в точки и грани. Принцип blockMesh заключается в том, чтобы разложить геометрию области на набор из одного или более трехмерных шестигранных блоков. Края блоков могут быть прямыми, дугами или шлицами. Сетка определяется как количество ячеек в каждом направлении блока, это достаточная информация для генерации данных ячейки.

Каждый блок геометрии определяется восемью вершинами, по одному на каждом углу шестигранника. Вершины записываются в список, так что к каждой вершине можно получить доступ, используя ее метку, помня, что OpenFOAM всегда использует язык C++, значит первый элемент списка имеет метку «0».

controlDict: Решатели OpenFOAM начинают все запуски настраивая базу данных. База данных управляет вводом/выводом и, поскольку вывод данных обычно запрашивается через интервалы времени во время выполнения, время является неотъемлемой частью базы данных. В файле controlDict задаются входные параметры, необходимые для создания базы данных.

Параметры задаваемые в controlDict:

- Временем начала моделирования.
- Время окончания моделирования.
- Временной шаг.

- Параметры записи в файл.
- Задаем числу Куранта.

fvSchemes: Файл fvSchemes задает числовые схемы для слагаемых которые вычисляются во время моделирования. Здесь задаются схемы дивергенции, интерполяции и лапласовские слагаемые.

fvSolution: Решатели уравнений, допустимые отклонения и алгоритмы управляются из файла fvSolution.

2.2 Рассмотрение и модернизация стандартного примера смешения двух жидкостей

В данном примере мы рассматриваем смешение жидкостей средствами OpenFOAM. При решение таких задач программа использует решатель TwoLiquidMixingFoam.

Описание TwoLiquidMixingFoam:

1. Переходный решатель для смешения двух несжимаемых жидкостей.
2. Моделирование турбулентности является общим, то есть можно выбрать Laminar, RAS или LES. близкие по смыслу (синонимы), если синонимические обозначения не являются общепринятыми;
3. Поток - это разность плотностей.
4. Это изотермический решатель.

Решаемые уравнения: Нижеследующие индексы 1 и 2 обозначают соответственно первичную и вторичную фазы. Уравнение непрерывности:

$$\nabla(U) = 0$$

U - скорость смеси. Уравнение альфа-диффузии:

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U \alpha_1) - \nabla \cdot \left(\left(D + \frac{1}{Sc} D_t \right) \nabla \alpha_1 \right) = 0$$

$$\rho = \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2$$

D-молекулярная диффузия. D_t - молекулярная диффузия, обусловленная турбулентностью. S_c - число Шмидта. Уравнение импульса:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho U}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U U) &= -\nabla (P_{rgh}) - gh \nabla \rho + \nabla \cdot (\rho \tau) \\ \tau &= -\frac{2}{3} \mu_{effective} \nabla \cdot U I + \mu_{effective} \nabla U + \mu_{effective} (\nabla U)^T \\ \mu_{effective} &= \alpha_1 (\mu_{effective})_1 + \alpha_2 (\mu_{effective})_2 \\ P &= P_{rgh} + \rho gh \end{aligned}$$

В стандартном примере рассматривается двух жидкостей с разностью плотностей в 1%. В начальной задаче берется 100 шагов. Пример работы на рисунке 2.1.

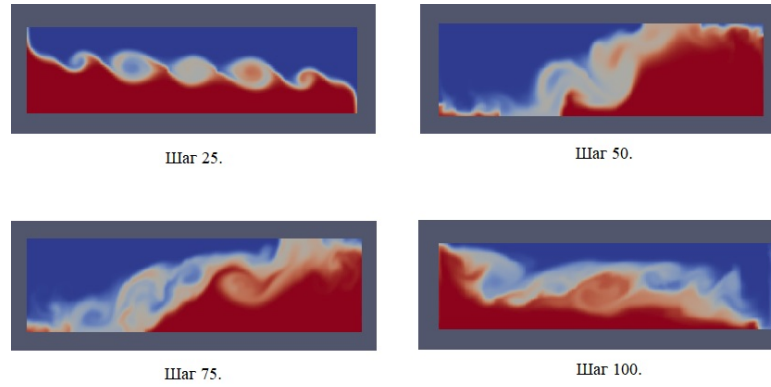


Рисунок 2.1 — Визуализация стандартного примера.

Модернизация происходит путем смешения жидкостей с большей разницей в плотности, увлечением числа шагов и перенос задачи на другую планету увеличивая ускорение свободного падения. Увеличим разность плотности жидкостей на 80%. Как видим из рисунка 2.2 смешение происходит гораздо быстрее.

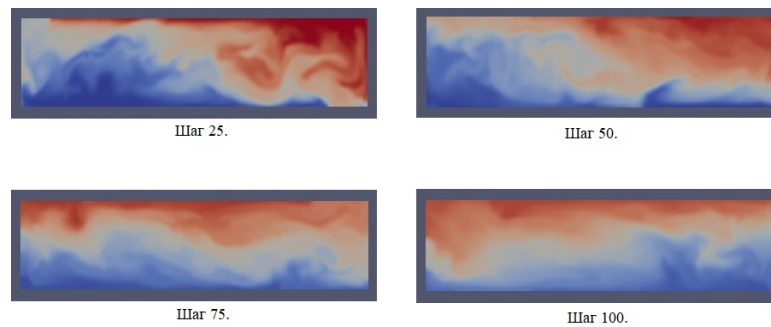


Рисунок 2.2 — Визуализация модифицированного примера.

2.3 Распараллеливание примера

Метод параллельных вычислений, используемый OpenFOAM, известен как декомпозиция области, в котором геометрия и связанные поля разбиваются на кусочки и выделяются отдельным процессорам для решения. Процесс параллельных вычислений включает в себя: декомпозицию сетки и полей, параллельный расчет декомпозированных областей, и последующая обработка областей. Сетка и поля декомпозируются с использованием утилиты *decomposePar*. Основная цель состоит в том, чтобы разбить область с минимальными усилиями, но таким образом, чтобы гарантировать увеличение скорости решения. Геометрия и поля разбиваются в соответствии с набором параметров, указанных в словаре с именем *decomposeParDict*, который должен быть расположен в каталоге *system* нашего примера. У пользователя есть выбор из четырех методов декомпозиции, указанных ключевым словом метода: *simple*, *hierarchical*, *scotch* и *manual*.

Изучив зависимость времени на произведение расчетов от количества областей, на которые разбиваем основную область. Можно сделать следующие выводы: самое оптимальное разбиение наблюдалось в третьем опыте, так как оно было значительно быстрее первого и второго случая, а от четвертого отличалось одной секундой. Существенным преимуществом в третьем случае является то, что не происходит перегрузки всех ядер процессора. Тем не менее данное исследование может быть действительно только на данном компьютере и отличаться от таких же испытаний на других ЭВМ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В представленной работе были разобраны основные файлы OpenFOAM такие как BlockMeshDict, controlDict, fvSchemes, fvSolution, Allrun и Allclean. Это общие файлы для всех задач в программе. Они задают область выполнения задачи, параметры для записи, схемы дивергенции и т. д..

Рассмотрен стандартный пример смешения двух жидкостей и его модификация.

Так же реализовано распараллеливание на несколько областей. Выявлено оптимальное разбиение главной области для наибольшей продуктивности.