

Diplomová práce



České
vysoké
učení technické
v Praze

F2

Fakulta strojní
Ústav technické matematiky

Tvarová optimalizace lopatkové mříže sdruženou metodou

Bc. Pavel Mačák

Vedoucí: doc. Ing. Jiří Fůrst, Ph.D.

Obor: Matematické modelování v technice

Studijní program: Aplikované vědy ve strojním inženýrství

Leden 2022

I. OSOBNÍ A STUDIJNÍ ÚDAJE

Příjmení: **Mačák** Jméno: **Pavel** Osobní číslo: **465509**
Fakulta/ústav: **Fakulta strojní**
Zadávací katedra/ústav: **Ústav technické matematiky**
Studijní program: **Aplikované vědy ve strojním inženýrství**
Specializace: **Matematické modelování v technice**

II. ÚDAJE K DIPLOMOVÉ PRÁCI

Název diplomové práce:

Tvarová optimalizace lopatkové mříže sruženou metodou

Název diplomové práce anglicky:

Shape optimization of blade cascade with adjoint method

Pokyny pro vypracování:

Student se seznámí s principy sružené metody pro tvarovou optimalizaci. V závěrečné práci provede odvození sružené metody a popíše optimalizační cyklus. Pomocí softwarového balíku OpenFOAM provede optimalizaci tvaru lopatky kompresorové mříže pro vhodně zvolenou cenovou funkci. Výsledek optimalizace ověří výpočtem s pokročilejším modelem turbulence.

Seznam doporučené literatury:

- [1] PAPANIMITRIOU, D. I. a K. C. GIANNAKOGLU. A continuous adjoint method with objective function derivatives based on boundary integrals, for inviscid and viscous flows. Computers and Fluids [online]. 2007.
- [2] ZYMARIS, A. S., D. I. PAPANIMITRIOU, K. C. GIANNAKOGLU a C. OTHMER. Continuous adjoint approach to the Spalart-Allmaras turbulence model for incompressible flows. Computers and Fluids [online]. 2009.
- [3] SCHRAMM, M., B. STOEVE SANDT a J. PEINKE. Adjoint optimization of 2D-airfoils in incompressible flows. 11th World Congress on Computational Mechanics, WCCM 2014, 5th European Conference on Computational Mechanics,
- [4] WELLER, Henry G., Gavin TABOR, Hrvoje JASAK a Christer FUREBY. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. Computers in Physics [online]. 1998, 12(6), 620

Jméno a pracoviště vedoucí(ho) diplomové práce:

doc. Ing. Jiří Fürst, Ph.D., ústav technické matematiky FS

Jméno a pracoviště druhé(ho) vedoucí(ho) nebo konzultanta(ky) diplomové práce:

Datum zadání diplomové práce: **21.10.2021**

Termín odevzdání diplomové práce: **16.01.2022**

Platnost zadání diplomové práce: _____

doc. Ing. Jiří Fürst, Ph.D.
podpis vedoucí(ho) práce

doc. Ing. Jiří Fürst, Ph.D.
podpis vedoucí(ho) ústavu/katedry

prof. Ing. Michael Valášek, DrSc.
podpis děkana(ky)

III. PŘEVZETÍ ZADÁNÍ

Diplomant bere na vědomí, že je povinen vypracovat diplomovou práci samostatně, bez cizí pomoci, s výjimkou poskytnutých konzultací. Seznam použité literatury, jiných pramenů a jmen konzultantů je třeba uvést v diplomové práci.

Datum převzetí zadání

Podpis studenta

Poděkování

Chtěl bych poděkovat svému vedoucímu práce doc. Ing. Jiřímu Fürstovi, Ph.D. za odborné vedení, za ochotnou pomoc a rady při zpracování této práce. Zároveň děkuji své rodině a přátelům za jejich podporu při studiu.

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem předloženou práci vypracoval samostatně a uvedl veškerou použitou literaturu.

V Praze, 16. ledna 2022

Abstrakt

Cílem diplomové práce je tvarová optimalizace tvaru lopatky pomocí sdružené metody a numerické simulace proudění metodou konečných objemů. Za tímto účelem jsou zopakovány základy metody konečných objemů a jejího použití pro řešení soustavy Navierových-Stokesových rovnic ve formulaci pro tekutinu s konstantní hustotou. Následně je popsán obecný optimalizační problém a návrh na jeho řešení sdruženou metodou. Ta vyžaduje odvození sdružených rovnic, které je popsáno v části 3.2.3.

V praktické části jsou odvozeny zdrojové členy pro sdružené rovnice na základě formulace nové cenové funkce pro změnu úhlu výstupního proudu. Praktický příklad aplikace využívá knihovnu OpenFOAM a aplikuje optimalizační postup na lopatkovou mříž GHH 1-S1 [1]. Nově získané tvary lopatek jsou pro ověření simulovány s modelem turbulence $k-\omega$ SST [2, 3]. Použitý postup je na základě ověření funkční pro změnu úhlu výstupního proudu $\Delta\alpha_2 \in \langle -2^\circ, +6^\circ \rangle$.

Klíčová slova: Optimalizace, MKO, CFD, OpenFOAM, Lopatková mříž

Vedoucí: doc. Ing. Jiří Fůrst, Ph.D.
Ústav technické matematiky
Karlovo náměstí 13
Praha 2

Abstract

The goal of this work is shape optimisation of airfoil using adjoint method and numerical simulation of fluid flow using finite volume method. Basics of finite volume method for solution of Navier-Stokes equation in their variant for incompressible fluid flow are revised. The general problematic of optimisation is presented and proposition of its solution using adjoint method is made. A derivation of adjoint equations follows in chapter 3.2.3.

In part of application, source terms for adjoint equations are derived for newly formulated target function with purpose of changing the angle of velocity at outlet of airfoil cascade. The example uses OpenFOAM library and airfoil cascade GHH 1-S1 [1]. New airfoil shapes are then verified using a more suitable turbulence model for internal aerodynamic, namely the $k-\omega$ SST [2, 3]. The presented approach is found to be valid based on this verification for changes in outlet velocity angle in $\Delta\alpha_2 \in \langle -2^\circ, +6^\circ \rangle$.

Keywords: Optimization, FVM, CFD, OpenFOAM, Airfoil cascade

Title translation: Shape optimization of blade cascade using adjoint method

Obsah

Část I Teoretická část

1 Úvod	3	2.3.1 Myšlenka segregovaných algoritmů	14
2 Základy numerického řešení Navierových-Stokesových rovnic	5	2.3.2 Relaxace soustavy lineárních rovníc	15
2.1 Základy matematického popisu proudění	5	2.3.3 Varianta algoritmu SIMPLE s rovníci pro tlak	15
2.1.1 Kontrolní objem a obecný zákon zachování	6	2.4 Modelování turbulence metodou RANS	18
2.1.2 Zákon zachování hmoty, rovnice kontinuity	7	2.5 Modely turbulence	18
2.1.3 Zákon zachování hybnosti, rovnice hybnosti	8	2.5.1 Boussinesqova hypotéza	19
2.1.4 Navierovy-Stokesovy rovnice pro tekutinu s konstantní hustotou	9	2.5.2 Spalartův-Allmarasův model	19
2.2 Základy metody konečných objemů	10	2.5.3 $k-\omega$ SST model	20
2.2.1 Konečný objem	10	3 Optimalizace sdruženou metodou	23
2.2.2 Aproximace numerickým tokem	12	3.1 Základy optimalizace	23
2.3 SIMPLE algoritmus	14	3.2 Metoda sdružené optimalizace . .	25
		3.2.1 Systém rovnic optimality	26
		3.2.2 Gradient pomocí sdružené metody	28
		3.2.3 Sdružené rovnice pro proudění tekutiny s konstantní hustotou . .	29
		3.3 Pohyb sítě	34

3.4 Optimalizační cyklus	36
------------------------------------	----

**Část II
Praktická aplikace**

4 Tvarová optimalizace kompresorové mříže	41
--	-----------

4.1 Obecný popis problému	41
-------------------------------------	----

4.2 Cílové funkce	43
-----------------------------	----

4.2.1 Přímá formulace	44
---------------------------------	----

4.2.2 Nepřímá formulace přes sílu .	44
-------------------------------------	----

4.3 Optimalizace mříže GHH 1-S1 . .	45
-------------------------------------	----

4.3.1 Okrajové podmínky	46
-----------------------------------	----

4.3.2 Modelování turbulence	46
---------------------------------------	----

4.3.3 Prostorová diskretizace	47
---	----

4.3.4 Parametry optimalizace	49
--	----

4.3.5 Výsledky optimalizace	49
---------------------------------------	----

4.3.6 Ověření vhodnějším modelem turbulence	56
--	----

5 Závěr	59
----------------	-----------

Přílohy

A Seznam použitých symbolů a zkratk	65
--	-----------

B Literatura	69
---------------------	-----------

Obrázky

2.1	Kontrolní objem	7	4.10	Velikost rychlosti pro původní lopatku	55
2.2	Konečný objem	11	4.11	Velikost rychlosti pro optimalizovanou lopatku	55
2.3	Schéma upwind	14	4.12	Turbulentní vazkost pro původní lopatku	56
3.1	Řídící body objemového B-spline ve 3D	34	4.13	Turbulentní vazkost pro optimalizovanou lopatku	56
3.2	Optimalizační cyklus	37	4.14	Průběh residua Res_{α}^{iSST} , přímá formulace, $k-\omega$ SST	57
4.1	Topologie výpočetní oblasti	42	4.15	Průběh residua Res_{α}^{iSST} , nepřímá formulace, $k-\omega$ SST	57
4.2	Výpočetní síť mříže GHH 1-S1	47	4.16	Rozdíl rychlosti pro modely turbulence	58
4.3	Pozice řídicích bodů	48			
4.4	Průběh residua $Res_{u_y}^i$	51			
4.5	Průběh residua $Res_{F_y}^i$	51			
4.6	Průběh residua Res_{α}^i , přímá formulace	53			
4.7	Průběh residua Res_{α}^i , nepřímá formulace	53			
4.8	Tvar optimalizované lopatky	54			
4.9	Pole posunutí sítě	54			

Tabulky

4.1 Cílové hodnoty pro optimalizaci.	49
--------------------------------------	----



Část I

Teoretická část

Kapitola 1

Úvod

Lopatkové mříže reprezentují základní experimentální techniku pro vyhodnocení kvality tvaru lopatky. Přestože jde o značné zjednodušení oproti reálným provozním podmínkám, mají lopatkové mříže vypovídající hodnotu o kvalitě návrhu lopatky [1]. Lopatky testované pomocí lopatkových mříží najdou uplatnění ve větrných elektrárnách [4] nebo ve vývoji axiálních kompresorů [5], na což se zaměřuje i prezentovaná práce.

Kompresory jsou stroje sloužící ke stlačování vzduchu. Stlačený vzduch je užitečný v nejrůznějších průmyslových aplikacích jako transport zemního plynu, ochranná atmosféra jídla, čištění odpadních vod [6] nebo ve spalovacích motorech, kde stlačený vzduch zvyšuje výkon pomocí přepřívání. Na základě změny směru proudu přes rotor (rotující část kompresoru) je lze rozdělit do dvou skupin - axiální a radiální [7]. Radiální kompresory značně mění směr přitékajícího proudu, neboť jej otáčí ze směru osového do směru radiálního. U axiálního kompresoru si proud obecně zachovává osový směr. Stlačení na jeden stupeň axiálního kompresoru je zpravidla nižší než u radiálního. Axiální kompresory se tedy často navrhují jako vícestupňové, tedy s více navazujícími řadami rotorových a statorových (nehybných) řad lopatek jak uvádí [8]. To je často mnohem náročnější úkol než návrh jednoho stupně radiálního kompresoru. Ty na druhou stranu, krom většího stlačení na stupeň, fungují ve větším rozsahu hmotnostních průtoků [9] a jsou tím pádem spolehlivější v nenávrhových režimech, což hraje velkou roli v leteckém inženýrství [10].

Dnešní axiální kompresory pro průmyslové aplikace jsou charakteristické tím, že jsou vždy navrženy a adaptovány na konkrétní požadavky součástí za nimi, kde je potřeba stlačený vzduch [1]. Vývoj průmyslových axiálních

kompresorů se často soustředí na stabilitu a velkou variabilitu vzhledem k hmotnostnímu toku a stlačení, aby byly použitelné pro větší pásmo operačních podmínek. Dále se důraz klade na účinnost, minimalizaci velikosti lopatky a co největší provozní spolehlivost.

Právě kvůli vysokým požadavkům a běžné praxi navrhovat axiální kompresory jako vícestupňové je potřeba mít efektivní nástroje pro návrh a optimalizaci tvaru lopatky axiálního kompresoru. Pro tvarovou optimalizaci byly v [11] použity genetické algoritmy a trojrozměrný řešič pro úplné Navierovy-Stokesovy rovnice. Vícekriteriální topologickou optimalizací v subsonický návrhových podmínkách se nedávno zabýval [12]. Větší problém pak představuje optimalizace tvaru lopatek pro axiální kompresory s transsonickým prouděním jak dokládá [13].

Metody pro trojrozměrnou analýzu jsou schopny již delší dobu dosáhnout vysoké přesnosti zachycení reality a jsou dnes běžně používány pro předpověď výkonnostních parametrů nejrůznějších geometrií křídel a lopatek v turbostrojích [14]. Tyto, dnes už základní metody, ale nedávají informaci o tom, jak geometrii modifikovat pro dosažení lepších výkonnostních parametrů. Ve vědeckých publikacích se tak stále častěji objevují a používají techniky pro optimalizaci z řad genetických algoritmů [15, 16], heuristických metod [17] a sdružených gradientních metod [14].

Cílem této práce je tvarová optimalizace lopatky v lopatkové mříži pomocí sdružené metody. Rovnice proudění jsou řešeny metodou konečných objemů, jejíž základy jsou v úvodu práce zopakovány. Dále je popsán problém optimalizace se zaměřením na jeho řešení sdruženou metodou. Pro praktickou aplikaci tvarové optimalizace je zvolena lopatková mříž GHH 1-S1 [1]. Nově definované cílové funkce pro optimalizaci jsou implementovány pomocí knihovny OpenFOAM se záměrem měnit výstupní úhel proudu. Výsledky jsou ověřeny výpočtem s vhodnějším modelem turbulence [3].

Kapitola 2

Základy numerického řešení Navierových-Stokesových rovnic

Problém proudění či mechanika tekutin je v rámci této práce chápán jako zkoumání pohybu velkého množství částic a jejich interakce. Velké množství ve smyslu, že zkoumané fluidum má takovou hustotu, že lze použít aproximaci reality pomocí matematického kontinua. To nám říká, že i nekonečně malá (infinitesimální) část tekutiny obsahuje dostatečný počet částic, pro které lze specifikovat střední rychlost a střední kinetickou energii. Jsme tak schopni definovat pojmy rychlost, tlak, teplota, hustota a další důležité veličiny jako spojité funkce v rámci celého kontinua. Tato kapitola vychází různou měrou z publikací [18, 19, 20, 21, 22]

2.1 Základy matematického popisu proudění

Odvození základních rovnic mechaniky tekutin se opírá tzv. zákony zachování. Pro případ obecné tekutiny to jsou

1. zachování hmoty,
2. zachování hybnosti a
3. zachování energie.

Pro případ proudění tekutiny s konstantní hustotou si pak vystačíme pouze s prvními dvěma zmíněnými zákony zachování.

Zachování určité veličiny znamená, že její časovou změnu uvnitř libovolného objemu lze vyjádřit jako množství veličiny proudící přes hranici zvoleného objemu a produkci veličiny uvnitř objemu. Často se také mluví o bilanci veličiny v určitém objemu. Množství veličiny, které proudí přes hranici objemu se nazývá tok. Obecně se tok dá rozdělit na dvě složky. Konvekci, způsobenou konvektivním přenosem veličiny, a difuzi, způsobenou pohybem molekul tekutiny v klidovém stavu. Difuzivní přenos závisí na gradientu dané veličiny a pro případ homogenní distribuce tedy vymizí.

2.1.1 Kontrolní objem a obecný zákon zachování

V předchozí kapitole se o zákonech zachování mluvilo v kontextu jistého objemu. Takovému libovolně zvolitelnému objemu se často říká kontrolní objem, nebo - pro účely numerické matematiky vhodněji - konečný kontrolní objem.

Mějme obecný kontrolní objem Ω s uzavřenou hranicí Γ , který je pevný v prostoru s daným proudovým polem jak naznačuje obrázek 2.1. Zároveň lze definovat element hranice dS a jeho vnější normálu \mathbf{n} .

Pro obecnou zachovávanou veličinu W lze zákon zachování psát jako

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} W \, dV + \int_{\Gamma} \mathbf{F}(W) \cdot \mathbf{n} \, dS = \int_{\Omega} Q_{\Omega}(W) \, dV + \int_{\Gamma} \mathbf{Q}_{\Gamma}(W) \cdot \mathbf{n} \, dS, \quad (2.1)$$

kde $Q_{\Omega}(W)$ jsou objemové a $\mathbf{Q}_{\Gamma}(W)$ povrchové zdroje a $\mathbf{F}(W)$ je vektor hustoty toku veličiny W plochou Γ . Zákon v této formě je formálně platný jak pro skalární veličinu W tak vektorovou \mathbf{W} . Speciálně pak pro skalární veličinu lze člen s tokem přes hranici rozdělit, podle dříve zmíněného dělení, na konvektivní tok

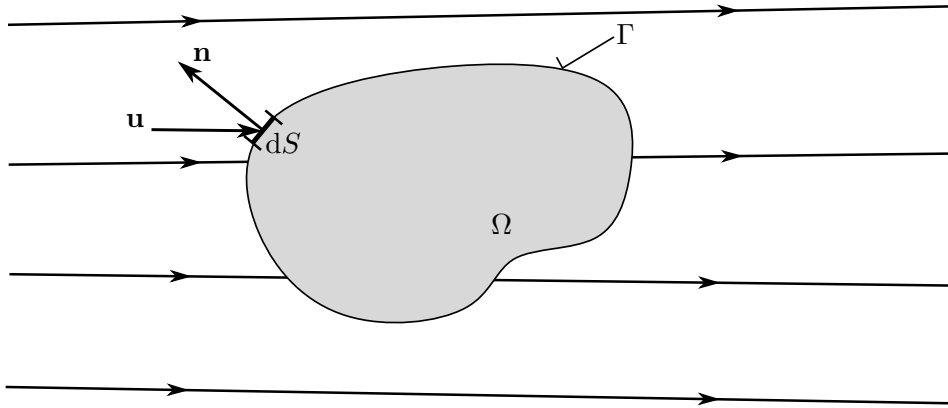
$$\mathbf{F}_{\mathbf{K}}(W) = W\mathbf{u} \quad (2.2)$$

a difuzivní tok vyjádřený pomocí zobecněného Fickova gradientního zákona

$$\mathbf{F}_{\mathbf{D}}(W) = \kappa\rho\nabla(W/\rho), \quad (2.3)$$

kde κ je koeficient difuzivity a dohromady tedy

$$\int_{\Gamma} \mathbf{F}(W) \cdot \mathbf{n} \, dS = \int_{\Gamma} (W(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) - \kappa\rho(\nabla(W/\rho) \cdot \mathbf{n})) \, dS. \quad (2.4)$$



Obrázek 2.1: Pevný kontrolní objem v obecném proudovém poli.

Rovnici 2.1 tak můžeme rozepsat do podoby

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} W \, dV + \int_{\Gamma} (W (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) - \kappa \rho (\nabla(W/\rho) \cdot \mathbf{n})) \, dS = \\ = \int_{\Omega} Q_{\Omega}(W) \, dV + \int_{\Gamma} \mathbf{Q}_{\Gamma}(W) \cdot \mathbf{n} \, dS. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Pro vektorovou veličinu lze udělat velmi podobné rozdělení, pouze s tím rozdílem, že všechny tři funkce W (\mathbf{F} , Q_{Ω} , \mathbf{Q}_{Γ}) budou o jeden tenzorový řád vyšší. Rovnice 2.1 s rozdělením na tenzory konvektivního a difuzivního toku tak dostane podobu

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \mathbf{W} \, dV + \int_{\Gamma} (\mathbb{F}_K(\mathbf{W}) - \mathbb{F}_D(\mathbf{W})) \cdot \mathbf{n} \, dS = \\ = \int_{\Omega} \mathbf{Q}_{\Omega}(\mathbf{W}) \, dV + \int_{\Gamma} \mathbf{Q}_{\Gamma}(\mathbf{W}) \cdot \mathbf{n} \, dS. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Takto formulovaný obecný zákon zachování (někdy taky bilanční rovnici) lze využít pro odvození základních rovnic proudění.

2.1.2 Zákon zachování hmoty, rovnice kontinuity

Pro jednosložkové tekutiny vyjadřuje zákon zachování hmoty, že hmotu v systému nelze vytvořit, ani ztratit, i.e. zdroj hmoty se uvnitř kontrolního nepředpokládá. Musí tedy platit, že změna hmotnosti uvnitř kontrolního objemu musí být rovna toku hmoty přes hranice kontrolního objemu, tedy

$$-\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \, dV = \int_{\Gamma} \rho u_i n_i \, dS = \int_{\Omega} \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} \, dV. \quad (2.7)$$

Po převedení obou integrálů na jednu stranu, záměně operací integrace a derivace a využití distributivity integrálu vzhledem k operaci součet, dostáváme

obecný tvar rovnice kontinuity pro nestacionární proudění tekutiny

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i)}{\partial x_i} = 0. \quad (2.8)$$

Ke stejné rovnici dojdeme, pokud do rovnice zachování 2.5 dosadíme za obecnou skalární veličinu W hustotu ρ , uplatníme předpoklad nulových zdrojů na pravé straně a uvědomíme si, že difuzivní tok z rovnice 2.3 bude nulový, neboť

$$\nabla(W/\rho) = \nabla(\rho/\rho) = \nabla(1) = 0. \quad (2.9)$$

Za předpokladu konstantní hustoty $\rho = konst.$ lze navíc rovnici 2.8 zjednodušit na

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.10)$$

což se běžně označuje jako rovnice kontinuity pro proudění tekutiny s konstantní hustotou (v indexovém a vektorovém zápisu).

2.1.3 Zákon zachování hybnosti, rovnice hybnosti

Odvození rovnice hybnosti vychází z druhého Newtonova zákona, který říká, že změna hybnosti je způsobena součtem sil účinkujících na element hmotnosti. Hybnost nekonečně malé části kontrolního objemu je

$$\rho \mathbf{u} dV \quad (2.11)$$

a tedy změna hybnosti uvnitř kontrolního objemu je

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \mathbf{u} dV. \quad (2.12)$$

Sledovanou zachovávanou vektorovou veličinou \mathbf{W} , z analogie předchozího vztahu s prvním členem rovnice 2.6, je tedy hybnost $\rho \mathbf{u}$. Formálním použitím rovnice 2.2 dostáváme vztah pro tenzor konvektivního toku

$$\mathbb{F}_K(\rho \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} = \rho \mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) \quad (2.13)$$

Difuzivní tok zůstává nulový neboť hybnost nemůže difundovat v tekutině za klidového stavu.

Nejdůležitější částí odvození rovnice hybnosti je interpretace zdrojových členů. Zdroj hybnosti je z hlediska fyziky vždy síla.

1. Objemové síly působí na hmotu v celém kontrolním objemu e.g. síla gravitační, inerciální, Coriolisova či elektromagnetická etc.

2. Povrchové síly působí přímo na povrchu Γ kontrolního objemu. Jedná se o deformační působení vnějších sil. Tensor napětí, kterým se často toto působení vyjadřuje lze rozdělit na sférickou a deviátorovou složku, které v případě tekutin lze interpretovat jako působení tlaku okolí a smykové a normálové napětí vznikající mezi okolím a kontrolním objemem.

Objemové zdroje lze vyjádřit jednoduše. Pokud příslušnou vnější sílu vztáhneme na jednotku objemu lze psát

$$\int_{\Omega} \mathbf{Q}_{\Omega} dV = \int_{\Omega} \rho \mathbf{f}_{\mathbf{e}} dV. \quad (2.14)$$

Povrchové zdroje jsou rozdělené na sférické působení okolního tlaku p a tenzor viskózního napětí τ , tedy

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_{\Gamma} &= -p_s \mathbb{I} + \tau, \\ Q_{\Gamma ij} &= -p_s \delta_{ij} + \tau_{ij}, \end{aligned}$$

kde \mathbb{I} je jednotkový tenzor, případně δ_{ij} Kroneckerovo delta. Pro Newtonskou tekutinu lze tenzor viskózního smykového napětí vyjádřit podle [20] jako

$$\tau_{ij} = \mu \left[\left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \right]. \quad (2.15)$$

Nyní lze již psát soustavu pohybových Navierových-Stokesových (NS) rovnic v integrálním tvaru, tedy

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \mathbf{u} dV + \int_{\Gamma} (\rho \mathbf{u} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) + p \mathbf{n} - \tau \cdot \mathbf{n}) dS = \int_{\Omega} \mathbf{Q}_{\Omega} dV. \quad (2.16)$$

Často lze NS rovnici hybnosti nalézt pro tekutinu s konstantní viskozitou i v diferenciálním tvaru, například v [20] a [19]

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p_s - \mu \left[\Delta \mathbf{u} + \frac{1}{3} \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) \right] = \rho \mathbf{f}_{\mathbf{e}}. \quad (2.17)$$

2.1.4 Navierovy-Stokesovy rovnice pro tekutinu s konstantní hustotou

Obecný systém NS rovnic lze pro speciální případy zjednodušit zanedbáním některých fyzikálních vlivů. V této práci budeme později využívat zjednodušený tvar NS rovnic pro tekutinu s konstantní hustotou. Tedy $\rho = konst.$ čímž dostáváme rovnici kontinuity ve zjednodušeném tvaru 2.10, tedy

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.18)$$

a NS rovnice hybnosti v diferenciálním tvaru podle [20] má podobu

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p_s + \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) + \rho \mathbf{f}_e. \quad (2.19)$$

Rovnici hybnosti jde dále vydělit konstantou hustoty, čímž dostaneme kinematický tlak $p = \frac{p_s}{\rho}$ a viskozitu $\nu = \frac{\mu}{\rho}$ a rovnice 2.19 přejde do tvaru

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot (\nu \nabla \mathbf{u}) + \mathbf{f}_e. \quad (2.20)$$

2.2 Základy metody konečných objemů

Metoda konečných objemů (MKO, anglicky *Finite volume method* - FVM) je jednou z nejpoužívanějších metod pro řešení parciálních diferenciálních rovnic (PDR) proudění - společně s konečnými diferencemi a metodou konečných prvků. Popularita MKO pro numerické řešení problému proudění tkví podle [20] v její obecnosti, srozumitelnosti základních principů a snadnosti implementace pro libovolné sítě i složitější geometrie.

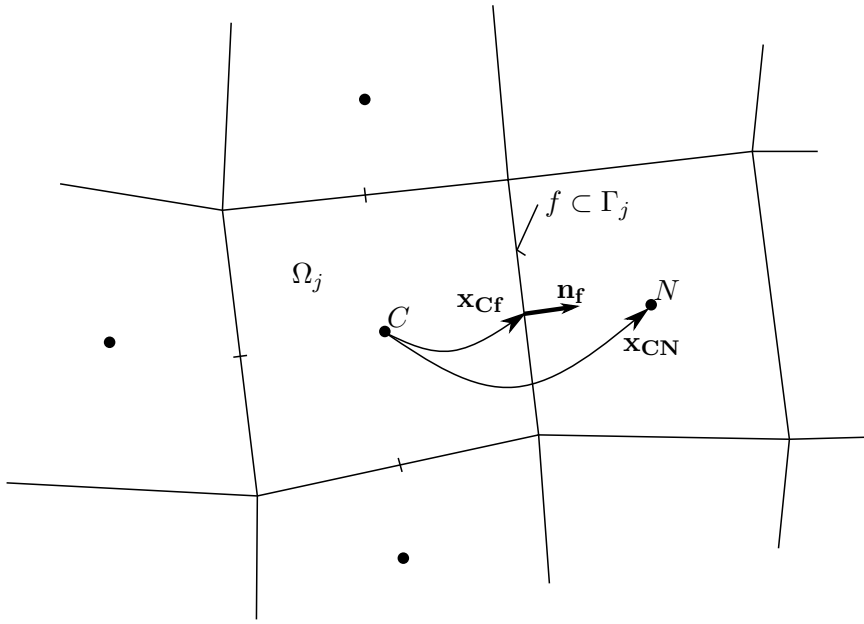
Zásadní výhodou z hlediska přesnosti MKO je pak princip tzv. konzervativní diskretizace (konzervativní ve smyslu zachovávající). Udržet v platnosti základní zákony zachování je důležitý aspekt správnosti řešení. MKO má tu výhodu, že konzervativní diskretizace je podle [20] splněna automaticky díky přímé diskretizaci integrálního tvaru zákonů zachování.

2.2.1 Konečný objem

MKO nese svůj název podle způsobu prostorové diskretizace, tj. rozdělení zkoumané oblasti $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ na vzájemně disjunktní neprázdné otevřené podoblasti Ω_j s konečnou velikostí, matematicky psáno

$$\begin{aligned} \bar{\Omega} &= \cup_{i=1}^n \bar{\Omega}_i, \\ \Omega_i \cap \Omega_j &= \emptyset, \text{ pro } i \neq j. \end{aligned}$$

Tyto konečné objemy (někdy taky buňky) na obrázku 2.2 jsou analogií kontrolního objemů z části 2.1.1. Jakmile máme takto rozdělenou výpočetní oblast, tak na každý konečný objem aplikujeme zákon zachování v integrálním tvaru. To si můžeme dovolit, neboť zákony zachování byly v sekci 2.1 odvozeny



Obrázek 2.2: Náčrt prostorové diskretizace. Buňka se středem C je ohraničena čtyřmi stěnami f a sousedí se čtyřmi dalšími buňkami N . Naznačeny jsou i vektor spojující středy buněk a vektor ze středu buňky C do středu stěny f .

pro libovolný kontrolní objem a lze je tedy aplikovat na každý konečný podobojem zvlášť. Obecný zákon zachování popsany rovnicí 2.1 má pro j -tý kontrolní objem tvar

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_j} W \, dV + \int_{\Gamma_j} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} \, dS = \int_{\Omega_j} Q_{\Omega} \, dV, \quad (2.21)$$

kde pro jednoduchost zápisu ponecháváme jen objemové zdroje na pravé straně. Pro každý konečný objem nyní definujeme prostorově střední hodnotu sledované veličiny

$$\bar{W}|_{\Omega_j} = W_j(t) = \frac{1}{|\Omega_j|} \int_{\Omega_j} W(\mathbf{x}, t) \, dV. \quad (2.22)$$

Stejným způsobem nahradíme i objemové zdroje v rovnici 2.21 a integrál toku \mathbf{F} nahradíme součtem přes hranice. Dostaneme tvar rovnice zachování, napsanou pro j -tý kontrolní konečný objem

$$\frac{\partial}{\partial t} (W_j |\Omega_j|) + \sum_{\forall f} \int_f \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} \, dS = Q_j |\Omega_j|, \quad (2.23)$$

kde stěny f jsou jednotlivé části hranice Γ_j a všechny stěny tvoří vzájemně disjunktí pokrytí příslušné hranice. Stojí za to podotknout, že rovnice 2.23 je stále matematicky ekvivalentní k rovnici 2.21. Prozatím se ještě neprovedly žádné aproximace či přibližné náhrady.

2.2.2 Aproximace numerickým tokem

Nyní se pokusíme aproximovat integrál toku přes hranice z rovnice 2.23. Pro lepší představu teď předpokládejme, že tok zachovávané veličiny je dán z rovnic 2.3 a 2.2 jako

$$\mathbf{F} = \mathbf{u}W - \kappa \nabla W. \quad (2.24)$$

Tok přes stěnu f (část hranice Γ_j) se souřadnicí středu \mathbf{x}_f můžeme aproximovat pomocí

$$\int_f \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} dS = \int_f (\mathbf{u}W - \kappa \nabla W) \cdot \mathbf{n} dS \approx (\mathbf{u}W_f - \kappa \nabla W_f) \cdot \mathbf{S}_f = \mathbf{F}_f \cdot \mathbf{S}_f, \quad (2.25)$$

kde $\mathbf{S}_f = \int_f \mathbf{n} dS$, což je konstantní vlastnost geometrie stěny (pro rovinnou stěnu navíc $\mathbf{S}_f = \mathbf{n}|f|$), $W_f(t) = W(\mathbf{x}_f, t)$ a $\nabla W_f(t) = \nabla W(\mathbf{x}_f, t)$.

Pro řešení úlohy je také potřeba zvolit, kde budou ukládány proměnné. Jinými slovy, jestli v našich rovnicích bude neznámá např. ve středu buňky (bude reprezentovat střední hodnotu v celé buňce) W_j , nebo uprostřed stěny W_f . V praxi se používá více možností i případných kombinací, jak uvádí [18, 20]. Standardně se používá ukládání hodnot ve středu buněk, ve středu stěn či ve vrcholech. V některých případech se objevuje i smíšený způsob (anglicky *staggered*), kde hodnoty různých veličin jsou ukládány na jiných místech. Dále budeme předpokládat, že proměnné uchováváme ve středu buněk (anglicky *cell-centered*), tedy že proměnnou bude hodnota W_j . Pro další postup je tedy potřeba aproximovat hodnoty W_f a $\nabla W_f \cdot \mathbf{S}_f$ pomocí zavedených neznámých ve středech buněk a získat tak $\mathbf{F}_f = \mathbf{F}_f(W_j)$. Poté již můžeme napsat semidiskrétní tvar (ve smyslu MKO) rovnice zachování skalární veličiny

$$\frac{\partial}{\partial t} (W_j |\Omega_j|) + \sum_{\forall f} \mathbf{F}_f \cdot \mathbf{S}_f = Q_j |\Omega_j|. \quad (2.26)$$

Způsobů diskretizace numerického toku je mnoho, neboť jde o jednu ze stěžejních částí MKO. Numerický tok totiž zásadním způsobem ovlivňuje stabilitu a přesnost následného výpočtu. Dále jsou uvedeny pouze základní příklady způsobu diskretizace, neboť jejich rozbor není předmětem této práce.

Diskretizace difuzivního toku

Jak uvádí rovnice 2.25, aproximujeme člen difuzivního toku přes stěnu f jako

$$- \int_f \kappa \nabla W \cdot \mathbf{n} dS \approx \mathbf{F}_D = -\kappa \nabla W_f \cdot \mathbf{S}_f. \quad (2.27)$$

Pro diskretizaci takového členu můžeme vztah upravit na

$$\mathbf{F}_D = -\kappa \frac{\partial W_f}{\partial \mathbf{n}_f} S_f, \quad (2.28)$$

kde $\frac{\partial W_f}{\partial \mathbf{n}_f}$ je tzv. derivace ve směru normály stěny f a S_f je plocha stěny. Pokud stěna f je právě mezi středy buněk $j = C$ a $j = N$, tedy \mathbf{n}_f je vnější normála vzhledem k buňce C a vnitřní vzhledem k N , tak lze derivaci ve směru aproximovat pomocí

$$\frac{\partial W_f}{\partial \mathbf{n}_f} \approx \frac{W_N - W_C}{\|\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_C\|}. \quad (2.29)$$

■ Diskretizace konvektivního toku

Druhou částí toku přes stěnu je konvektivní tok, z rovnice 2.25 tedy

$$\int_f \mathbf{u}W \cdot \mathbf{n} dS \approx \mathbf{F}_K = W_f \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{S}_f = W_f \phi_f, \quad (2.30)$$

kde jsme skalární součin $\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{S}_f$ označili jako ϕ_f , tzv. konvektivní tok přes stěnu f . Interpolace W_f lze pro případ ortogonální sítě s konstantním krokem zapsat jednoduše jako

$$W_f = \frac{W_C + W_N}{2}. \quad (2.31)$$

Interpolaci lze provést i lepšími způsoby, které kompenzují případné nedokonalosti či nerovnoměrnosti v síti. Například pro ortogonální síť s nerovnoměrným krokem je vhodnější formulovat interpolaci jako

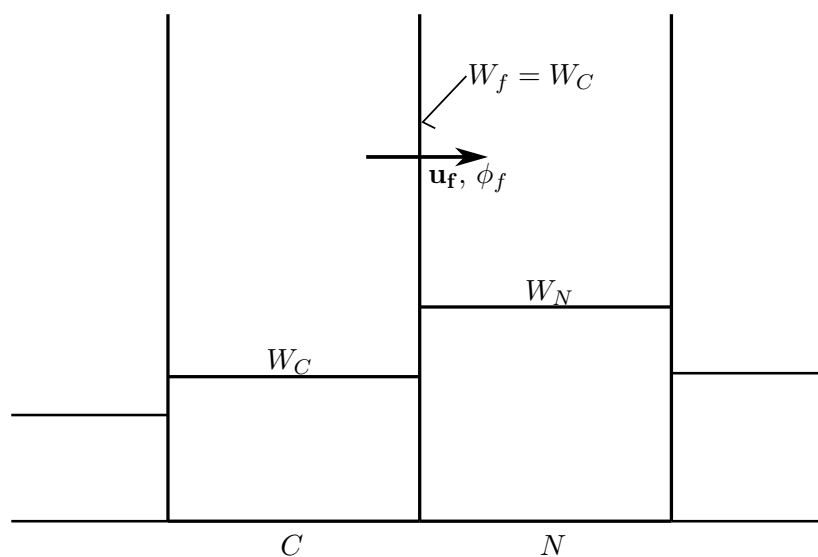
$$W_f \approx \frac{\|\mathbf{x}_{Nf}\|W_C + \|\mathbf{x}_{Cf}\|W_N}{\|\mathbf{x}_{Nf}\| + \|\mathbf{x}_{Cf}\|} = \frac{\|\mathbf{x}_{Nf}\|W_C + \|\mathbf{x}_{Cf}\|W_N}{\|\mathbf{x}_{CN}\|}, \quad (2.32)$$

kde \mathbf{x}_{jf} je vektor mezi středem buňky $j = C, N$ a středem stěny f .

Mnohem spolehlivější variantou jak aproximovat hodnotu W_f pomocí hodnot v buňkách C a N je tzv. protiproudé schéma (anglicky *upwind scheme*). Hodnota W_f je aproximována podle znaménka ϕ_f . Kladné znaménko značí, že unášivá rychlost \mathbf{u}_f směřuje z buňky C do N , jak tomu je i v případě naznačeném na obrázku 2.3. Předpis pro hodnotu W na stěně lze tedy zapsat jako

$$W_f = \begin{cases} W_C & \text{pro } \phi_f > 0, \\ W_N & \text{pro } \phi_f < 0. \end{cases} \quad (2.33)$$

Schéma upwind je pouze prvního řádu přesnosti a v praxi se pak často kombinuje např. s lineární interpolací 2.31 pro zvýšení přesnosti. Příkladem jsou TVD (zkratka anglického *total variation diminishing*) schémata [23, 24] využívající princip monotónnosti [25].



Obrázek 2.3: Aproximace hodnoty W_f pomocí schématu upwind pro případ kladného toku stěnou f .

2.3 SIMPLE algoritmus

Algoritmus SIMPLE (zkratka pro *semi-implicit pressure linked equations*) pro řešení problému proudění tekutiny s konstantní hustotou lze v jeho původní variantě nalézt například v [26]. Od té doby se objevilo spousta úprav a vylepšení jako SIMPLER[27], SIMPLEST nebo SIMPLEC[28].

2.3.1 Myšlenka segregovaných algoritmů

Algoritmus SIMPLE je jeden ze základních příkladů tzv. segregovaných algoritmů. Rovnice ze soustavy NS rovnic se zde neřeší jako jeden celek, ale odděleně každá zvlášť. Výhodou oproti klasickému sdruženému algoritmu je, že se vyhneme řešení rozsáhlé soustavy rovnic se špatně podmíněnou maticí, jak zmiňuje [22].

Segregované algoritmy obecně naráží na problémy s konvergencí či přesností jakmile se zvýší závislost mezi jednotlivými rovnicemi soustavy. Jinými slovy matice soustavy sestavená sdruženou metodou začne být lépe podmíněná. V případě soustavy NS rovnic pro tekutinu o konstantní hustotě může být měřítkem fiktivní Machovo číslo $M = \frac{\|\mathbf{u}\|}{c}$, kde c má význam klidové rychlosti zvuku v tekutině.

2.3.2 Relaxace soustavy lineárních rovnic

V rámci algoritmu SIMPLE se používá relaxace[22] při řešení rovnice pro odhad rychlosti 2.38. Relaxaci soustavy lineárních rovnic lze chápat podle [29] a [22] následovně. Pro soustavu lineárních rovnic $\mathbb{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$ označíme \mathbf{x}^n n -tou iterací iterativního řešení soustavy. Iterační metoda řeší soustavu upravenou násobkem diagonály matice $\mathbb{D} = \text{diag}(\mathbb{A})$, konkrétně

$$\mathbb{A} \cdot \mathbf{x}^{n+1} + \frac{1 - \alpha_r}{\alpha_r} \mathbb{D} \cdot \mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{b} + \frac{1 - \alpha_r}{\alpha_r} \mathbb{D} \cdot \mathbf{x}^n. \quad (2.34)$$

Nová matice soustavy je tedy

$$\mathbb{A}_{relax} = \frac{\mathbb{D}}{\alpha_r} + \mathbb{A} - \mathbb{D}, \quad (2.35)$$

což odpovídá vynásobení diagonálních prvků matice \mathbb{A} koeficientem $\frac{1}{\alpha_r}$. Vhodným zvolením relaxačního koeficientu α_r pak můžeme zajistit, aby matice \mathbb{A}_{relax} byla ostře diagonálně dominantní. Relaxační koeficient α_r se volí z intervalu $(0, 1)$, přičemž $\alpha_r = 1$ odpovídá řešení původní soustavy bez relaxace.

2.3.3 Varianta algoritmu SIMPLE s rovnicí pro tlak

V softwarové knihovně OpenFOAM [30], která je pro potřeby aplikace v rámci této práce využita, je dle [22] algoritmus SIMPLE implementován v následující formě.

Algoritmus řeší Navierovy-Stokesovy rovnice pro proudění tekutiny s konstantní hustotou a vychází ze tvaru

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) - \nabla \cdot (\nu \nabla \mathbf{u}) = -\nabla p, \quad (2.36)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (2.37)$$

Nejprve se stanoví odhad rychlosti \mathbf{u}^* pomocí tlaku z předchozí iterace (případně z počáteční podmínky) z diskretizované rovnice hybnosti 2.20, ve které je konvektivní člen linearizován Picardovou aproximací [22]. Pro odhad rychlosti tak dostáváme rovnici

$$a_C^0 \mathbf{u}_C^* = \underbrace{\sum_{\forall f \in C \cap N} a_{CN}^0 \mathbf{u}_N^* + \mathbf{Q}_C^0 - \nabla p_C^0}_{\mathbf{H}(\mathbf{u}^*)_C}. \quad (2.38)$$

Zde horní indexy označují iteraci, tedy index 0 předchozí iteraci, index * odhad hodnoty nové iterace a později n hodnotu v nové iteraci. Dolní indexy pak označují buňku C , která sdílí stěnu f se sousední buňkou N . Koeficienty a jsou určeny podle metody diskretizace jednotlivých členů rovnice. Pro stabilní řešení rovnice pro odhad tlaku se běžně používá relaxace s koeficientem $\alpha_r = 0.7$.

Označíme část rovnice pro odhad rychlosti

$$\hat{\mathbf{u}}_C^* = \frac{1}{a_C^0} \left(\sum_f a_{CN}^0 \mathbf{u}_N^* + \mathbf{Q}_C^0 \right) = \frac{1}{a_C^0} \mathbf{H}(\mathbf{u}^*)_C \quad (2.39)$$

a odhad rychlosti interpolujeme na stěnu f

$$\mathbf{u}_f^* = \hat{\mathbf{u}}_f^* - \frac{1}{a_f^0} \nabla p_f^0. \quad (2.40)$$

Pro skutečnou novou rychlost (nikoliv už odhad *) pak požadujeme splnění

$$\mathbf{u}_f^n = \hat{\mathbf{u}}_f^* - \frac{1}{a_f^0} \nabla p_f^n \quad (2.41)$$

a zároveň splnění rovnice kontinuity 2.37. Diskrétně tedy

$$0 = \sum_f \phi_f^n = \phi \mathbf{u}_f^n \cdot \mathbf{S}_f = \sum_f \left(\hat{\mathbf{u}}_f^* \cdot \mathbf{S}_f - \frac{1}{a_f^0} \nabla p_f^n \cdot \mathbf{S}_f \right). \quad (2.42)$$

Rovnice pro odhad nového tlaku p_f^* má tedy tvar

$$\sum_f \frac{1}{a_f^0} \nabla p_f^* \cdot \mathbf{S}_f = \sum_f \hat{\mathbf{u}}_f^* \cdot \mathbf{S}_f. \quad (2.43)$$

Při aktualizaci tlaku pro novou iteraci je pak potřeba použít relaxaci s koeficientem β (typicky $\beta = 0.3$ [22]), tedy

$$p_C^n = p_C^0 + \beta(p_C^* - p_C^0). \quad (2.44)$$

Hodnota rychlosti pro další iteraci se pak v analogii ke vztahu 2.41 spočítá jako

$$\mathbf{u}_C^n = \hat{\mathbf{u}}_C^* - \frac{1}{a_f^0} \nabla p_C^n. \quad (2.45)$$

Aktualizuje se i hodnota objemového toku stěnami podle rovnice

$$\phi_f^n = \hat{\mathbf{u}}_f^* \cdot \mathbf{S}_f - \frac{1}{a_f^0} \nabla p_f^n \cdot \mathbf{S}_f. \quad (2.46)$$

Cyklus další iterace pak začíná opět řešením rovnice 2.38.

Jedna celá iterace algoritmu SIMPLE ve variantě s rovnicí pro tlak lze tedy shrnout následovně:

1. Na základě známých hodnot \mathbf{u}^0 a ϕ^0 se sestaví aproximace levé strany rovnice hybnosti 2.36 pro rychlost \mathbf{u}^*

$$\nabla(\mathbf{u}^0 \mathbf{u}^*) - \nabla \cdot (\nu \nabla \mathbf{u}^*) \approx a_C^0 \mathbf{u}_C^* - \mathbf{H}(\mathbf{u}^*)_C. \quad (2.47)$$

2. Rovnici relaxujeme s koeficientem α_r .
3. Vyřešíme rovnici 2.38 s gradientem tlaku na pravé straně, který vyhodnotíme pomocí tlaku z předchozí iterace p^0

$$a_C^0 \mathbf{u}_C^* = \mathbf{H}(\mathbf{u}^*)_C - \nabla p_C^0. \quad (2.48)$$

4. Interpolujeme hodnotu $\hat{\mathbf{u}}_f$ na stěny.
5. Vyřešíme soustavu pro tlak získanou z rovnice kontinuity 2.37

$$\sum_f \frac{1}{a_f^0} \nabla p_f^* \cdot \mathbf{S}_f = \sum_f \hat{\mathbf{u}}_f^* \cdot \mathbf{S}_f. \quad (2.49)$$

6. Výpočet hodnoty nového tlaku relaxujeme s koeficientem β

$$p_C^n = p_C^0 + \beta(p_C^* - p_C^0). \quad (2.50)$$

7. Na závěr aktualizujeme hodnoty rychlosti \mathbf{u}_C^n a objemového toku ϕ_f

$$\mathbf{u}_C^n = \hat{\mathbf{u}}_C^* - \frac{1}{a_f^0} \nabla p_C^n, \quad (2.51)$$

$$\phi_f^n = \hat{\mathbf{u}}_f^* \cdot \mathbf{S}_f - \frac{1}{a_f^0} \nabla p_f^n \cdot \mathbf{S}_f. \quad (2.52)$$

2.4 Modelování turbulence metodou RANS

Numerické řešení Navierových-Stokesových rovnic ve tvaru 2.18, 2.19 vede k přímé numerické simulaci (anglicky *direct numerical simulation* DNS). Výpočetní síť pro DNS musí ale v takovém případě rozlišit jevy měřítka od charakteristického rozměru až po úroveň Kolmogorových měřítek. Počet buněk v síti pro DNS roste s mocninou Reynoldsova čísla $Re^{\frac{3}{4}}$. Pro inženýrské aplikace s Reynoldsovými čísly v řádu milionů se tak naráží na limitaci výpočetního výkonu. Tento problém se často obchází statistickým přístupem, takzvaným Reynoldsovým středěním [19]. Tento způsob, často označovaný jako RANS či RAS, je založen na definici časového středění

$$\bar{W} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} W(\tau) d\tau. \quad (2.53)$$

Dále se předpokládá, že časově závislé hodnoty proudových proměnných můžeme rozdělit na střední (časově středěnou) a flukтуаční složku, tedy

$$p = \bar{p} + p', \quad (2.54)$$

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}'. \quad (2.55)$$

Při aplikaci tohoto středění na rovnici kontinuity pro tekutinu s konstantní hustotou, dostaneme stejný tvar jako 2.18 jen pro časově střední hodnoty [19], tedy

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} = 0. \quad (2.56)$$

Aplikací časového středění na rovnici hybnosti pro tekutinu s konstantní hustotou dostáváme [19]

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{\mathbf{u}} = -\nabla \bar{p} + \nabla \cdot (2\nu \mathbb{D}(\bar{\mathbf{u}}) - \overline{\mathbf{u}\mathbf{u}}), \quad (2.57)$$

kde operátor $\mathbb{D}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$. V indexovém zápisu pak

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (2\nu \bar{D}_{ij} - \overline{u'_i u'_j}). \quad (2.58)$$

2.5 Modely turbulence

Ve středěné rovnici 2.57 přibyl oproti původní rovnici hybnosti neznámý člen $-\overline{u'_i u'_j}$ nazývaný turbulentní Reynoldsovo napětí. Výraz $\frac{\partial}{\partial x_j} \overline{u'_i u'_j}$ vyjadřuje výměnu hybnosti mezi turbulencí a časově středním prouděním [19]. Reynoldsovo turbulentní napětí je druhý statistický moment a systém PDR tak v

této formě není uzavřený. Pokud bychom vynásobili původní rovnici $\cdot u_j$ ve snaze získat rovnici pro tento druhý statistický moment, tak by vznikl opět člen vyššího statistického momentu a tak dále. Pro uzavření RANS rovnic je tedy potřeba doplnit vztah pro výpočet šesti složek turbulentního Reynoldsova napětí. Existují dva základní principy. První způsob aproximuje rovnou složky tenzoru Reynoldsových napětí, takové aproximace nazýváme modely turbulence prvního řádu. Druhý způsob naopak aproximuje až třetí statistický moment vystupující v transportní rovnici pro turbulentní Reynoldsovo napětí. Takovéto aproximace nazýváme modely turbulence druhého řádu. V této práci se používají modely turbulence prvního řádu a jsou dále rozvedeny.

■ 2.5.1 Boussinesqova hypotéza

Modely turbulence prvního řádu jsou často založeny na Boussinesqově hypotéze. Tato hypotéza aproximuje tenzor Reynoldsových napětí, který je, podobně jako v případě běžného tenzoru vazkých napětí, pomocí nově zavedené turbulentní viskozity ν_t , středovaného tenzoru rychlosti deformace \bar{D}_{ij} a turbulentní kinetické energie $k = \frac{1}{2}\overline{u'_i u'_i}$. Finální vyjádření tenzoru Reynoldsových napětí podle Boussinesqovy hypotézy je následující

$$-\overline{u'_i u'_j} = 2\nu_t \bar{S}_{ij} - \frac{2}{3}k\delta_{ij}. \quad (2.59)$$

Takto byl problém uzavření systému RANS rovnic přenesen na problém hledání ν_t a k . Modely turbulence prvního řádu se tedy liší ve způsobu jakým turbulentní vazkost počítají. V této práci bude následně použit Spalartův-Allmarasův model a k - ω SST, které jsou popsány ve zbytku této kapitoly.

■ 2.5.2 Spalartův-Allmarasův model

Tento model turbulence je zástupcem jednorovnicových modelů turbulence a byl poprvé publikován Spalartem a Allmarasem v [31]. Tento jednorovnicový model je založen na transportu pomocné proměnné $\tilde{\nu}$ (někdy také nazývané Spalartova-Allmarasova proměnná). V tomto případě je z Boussinesqovy hypotézy vynechán člen s kinetickou energií turbulence

$$-\overline{u'_i u'_j} = 2\nu_T \bar{S}_{ij}. \quad (2.60)$$

Turbulentní viskozita se poté vyhodnocuje z následujících vztahů

$$\nu_t = \tilde{\nu} f_{v1}, \quad (2.61)$$

$$f_{v1} = \frac{\chi^3}{\chi^3 + c_{v1}^3}, \quad (2.62)$$

$$\chi = \frac{\tilde{\nu}}{\nu} \quad (2.63)$$

a pro $\tilde{\nu}$ je definována transportní rovnice

$$\frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_j} = c_{b1}(1 - f_{t2}) \tilde{S} \tilde{\nu} + \frac{1}{\sigma} \frac{\partial}{\partial x_j} \left((\nu + \tilde{\nu}) \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_j} \right) + \frac{c_{b2}}{\sigma} \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_j} - \left[c_{w1} f_w - \frac{c_{b1}}{\kappa^2} f_{t2} \right] \left(\frac{\tilde{\nu}}{d} \right)^2. \quad (2.64)$$

kde d je vzdálenost k nejbližší stěně. Další použité pomocné funkce jsou

$$\begin{aligned} f_{v2} &= 1 - \frac{\chi}{1 + \chi f_{v1}}, & f_w &= g \left(\frac{1 + c_{w3}^6}{g^6 + c_{w3}^6} \right)^{\frac{1}{6}}, \\ f_{t2} &= c_{t3} e^{-c_{t4} \chi^2}, & g &= r + c_{w2}(r^6 - r), \\ r &= \frac{\tilde{\nu}}{\tilde{S} \kappa^2 d^2}, & \tilde{S} &= S + \frac{\tilde{\nu} f_{v2}}{\kappa^2 d^2}, \\ S &= \sqrt{2 \Omega_{ij} \Omega_{ij}}, & \Omega_{ij} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right). \end{aligned}$$

A nakonec konstanty vystupující v tomto modelu nabývají hodnot

$$\begin{aligned} c_{b1} &= 0.1355, & c_{b2} &= 0.622, & c_{v1} &= 7.1, & c_{t3} &= 1.2, & c_{t4} &= 0.5, \\ c_{w1} &= \frac{c_{b1}}{\kappa^2} + \frac{1 + c_{b2}}{\sigma}, & c_{w2} &= 0.3, & c_{w3} &= 2, & \kappa &= 0.41, & \sigma &= 2/3. \end{aligned}$$

Spalartův-Allmarasův model turbulence není výpočetně nějak zvlášt náročný, neb je jen jednorovnicový. Na druhou stranu byl vyvinut pro aplikaci ve vnější aerodynamice (obtékání profilů křídel) a pro jiné aplikace tak není zaručena jeho spolehlivost.

2.5.3 k - ω SST model

Tento model turbulence je zástupcem dvourovnicových modelů turbulence a byl poprvé publikován Menterem v [2] a posléze vylepšen v [3]. Tento model řeší dvě transportní rovnice pro turbulentní kinetickou energii k a pro míru

turbulentní disipace ω . Platí tedy standardní tvar Boussinesqovy hypotézy 2.59 a turbulentní viskozita je vyhodnocována podle

$$\nu_t = \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega, SF_2)}. \quad (2.65)$$

Pro k a ω jsou definované transportní rovnice

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \tau_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{x_j} - \beta^* \omega k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\nu + \sigma_k \nu_T) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (2.66)$$

a

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \omega}{\partial x_j} = \frac{\gamma}{\mu_T} \tau_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{x_j} - \beta^{k-\omega} \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\nu + \sigma_\omega \nu_T) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + \\ 2(1 - F_1) \frac{\sigma_{\omega 2}}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}. \end{aligned} \quad (2.67)$$

Konstanty v předešlých rovnicích se získávají podle následujícího pravidla

$$w = F_1 w_1 + (1 - F_1) w_2, \quad (2.68)$$

kde w je některá z konstant a $w_{1,2}$ jsou její dolní, respektive horní mez. Další vztahy použité v rovnicích jsou

$$\begin{aligned} \tau_{ij} &= \nu_T \left(2\bar{S}_{ij} - \frac{2}{3} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{ij}, \\ F_1 &= \tanh(\text{arg}_1^4), \quad \text{arg}_1 = \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k}}{\beta^* \omega d}, \frac{500\nu}{d^2 \omega} \right), \frac{4\sigma_{\omega 2} k}{CD_{k\omega} d^2} \right], \\ CD_{k\omega} &= \max \left(2\sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, 10^{-20} \right), \\ F_2 &= \tanh(\text{arg}_2^2), \quad \text{arg}_2 = \max \left(2 \frac{\sqrt{k}}{\beta^* \omega d}, \frac{500\nu}{d^2 \omega} \right). \end{aligned}$$

Konstanty tohoto modelu nabývají hodnot

$$\begin{aligned} \sigma_{k1} &= 0.85, & \sigma_{\omega 1} &= 0.5, & \beta_1^{k-\omega} &= 0.075, & \gamma_1 &= \frac{\beta_1^{k-\omega}}{\beta^*} - \frac{\sigma_{\omega 1} \kappa^2}{\sqrt{\beta^*}}, \\ \sigma_{k2} &= 1, & \sigma_{\omega 2} &= 0.856, & \beta_2^{k-\omega} &= 0.0828, & \gamma_2 &= \frac{\beta_2^{k-\omega}}{\beta^*} - \frac{\sigma_{\omega 2} \kappa^2}{\sqrt{\beta^*}}, \\ \beta^* &= 0.09, & \kappa &= 0.41, & a_1 &= 0.31. \end{aligned}$$

Menterův model $k-\omega$ SST vyšel z kombinace modelů $k-\omega$ a $k-\epsilon$ jako funkce vzdálenosti od stěny d přes vážící funkce F_1 a F_2 . $k-\omega$ funguje totiž lépe blízko stěny a $k-\epsilon$ naopak lépe modeluje turbulenci ve volném proudu. Model $k-\omega$ SST se na rozdíl od Spalartova-Allmarasova modelu běžně používá v aplikacích vnitřní aerodynamiky. Dalším zlepšením modelu $k-\omega$ SST je jeho varianta přechodová, i.e. rozlišující mezi laminárním a turbulentním regionem. Tento Langtryho a Menterův model $k-\omega$ SST, někdy označovaný jako $\gamma-Re_\theta$, je pokročilý čtyř-rovnicový model a může tak značně zatížit výpočetní čas.

Kapitola 3

Optimalizace sdruženou metodou

Zájem o optimalizaci v proudění tekutin je od nepaměti a předmětem vědeckého bádání minimálně od doby vynalezení integrálního počtu [14]. Tato kapitola se zabývá základní definicí problému optimalizace a představuje známou, avšak v oblasti proudění tekutiny prozatím nepříliš hojně užívanou, metodu optimalizace. Dále jsou odvozeny základy této metody pro její aplikaci v druhé části této práce.

3.1 Základy optimalizace

Pro popis problému optimalizace se používají pojmy:

- *primární proměnné* ϕ nebo také fyzikální veličiny jako tlak, rychlost, teplota atd. dané většinou z konkrétních rovnic,
- *sdružené proměnné* ξ nebo také sdružené veličiny odpovídající primárním, tedy například sdružený tlak, sdružená rychlost,
- *návrhové parametry* g jako jsou materiálové vlastnosti, vstupní rychlost, tvar geometrie nebo hranice,
- *cílová funkce/funkcionál* $J(\phi, g)$ hodnocení kombinace primárních a návrhových parametrů, jako je tlaková ztráta, stlačení nebo vztlak,
- *vazební rovnice* $R(\phi, g) = 0$ jsou rovnice proudění.

Problém optimalizace lze pak podle [14] matematicky formulovat následovně.

Problém 1. Necht' je dána množina parametrů $g = \{g_n, n = 1, \dots, N\}$, cílová funkce $J(\phi, g)$ a vazební rovnice $R(\phi, g) = 0$. Najděte takovou kombinaci parametrů g a ϕ , která minimalizuje funkci $J(\phi, g)$ a zároveň splňuje platnost podmiňujících rovnic $R(\phi, g) = 0$.

Metod na řešení optimalizačního problému je hned několik. Obecně je lze rozlišit na obecné a lokální optimalizační metody. Mezi všeobecně známe patří například metoda genetických algoritmů (obecná) a gradientní optimalizační metody (lokální). Základní rozdíl mezi těmito metodami je, že obecné optimalizační metody se zpravidla snaží přiblížit globálnímu optimu v celém prostoru přípustných parametrů, kdežto lokální metody na základě počátečního odhadu spadají do nejbližšího lokálního minima.

Typický optimalizační cyklus lokální metody lze zapsat následovně:

Mějme počáteční odhad $g^{(0)}$.

Pro $n = 0, 1, 2, \dots$

1. Vyřešit $R(\phi^{(n)}, g^{(n)})$ pro zjištění $\phi^{(n)}$.
2. Spočítat $\frac{dJ}{dg}(\phi^{(n)}, g^{(n)})$.
3. Pomocí výsledků 1 a 2 zjistit optimální krok δg - např.

$$\delta g = -\alpha \frac{dJ}{dg}(\phi^{(n)}, g^{(n)}).$$
4. Změnit návrhové proměnné $g^{(n+1)} = g^{(n)} + \delta g$.

Různé algoritmy se odlišují ve způsobu vyhodnocení gradientu ve druhém kroku (citlivostní gradient, sdružená metoda) a následně se větví podle práce s tímto gradientem. Jsou to například metoda konjugovaných gradientů (CGM)[32], algoritmus Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno (BFGS)[33] nebo projekce omezení [34] pro dodatečně podmíněnou optimalizaci.

3.2 Metoda sdružené optimalizace

Metoda sdružené optimalizace se snaží vyřešit problém popsany v sekci 3.1. Jde o speciální případ optimalizace gradientní metodou, a tedy se předpokládá, že původní výběr optimalizovaných parametrů se nachází poměrně blízko hledaného optima. Nové optimálnější řešení se dostane podle předpisu

$$g^{(n+1)} = g^{(n)} - \alpha \cdot \frac{dJ}{dg}(\phi^{(n)}, g^{(n)}), \quad (3.1)$$

kde $\alpha < 0$ je délka kroku. Co se týče znaménka v rovnici 3.1, tak to je v tomto případě $-$, neboť dle problému 1 hledáme minimum funkcionálu J a tedy musíme dělat krok proti směru nejvyššího růstu i.e. ve směru opačném ke gradientu.

Hlavním znakem sdružené gradientní optimalizace je způsob vyhodnocení gradientu cílové funkce vzhledem návrhovým parametrům, tedy $\frac{dJ}{dg}$. Pro vyhodnocení tohoto gradientu jsou odvozeny nové parciální diferenciální rovnice (PDR). Proces odvození nových PDR vychází z metody Lagrangeových multiplikátorů. Ta specifikuje novou cílovou funkci, která v sobě bude zahrnovat podmiňující rovnice. Definujeme tak novou cílovou funkci

$$L(\phi, g, \xi) = J(\phi, g) + \langle R(\phi, g), \xi \rangle, \quad (3.2)$$

kde ξ jsou tzv. sdružené proměnné (sdružené k primárním proměnným) a $\langle \cdot, \cdot \rangle$ je symetrická, bilineární forma, jejíž podoba je zpravidla jasná až z konkrétně řešeného problému. Dostáváme tak nový problém, jehož řešení je však podle [14] ekvivalentní s problémem 1.

Problém 2. *Nechť je dána množina parametrů $g = \{g_n, n = 1, \dots, N\}$, cílová funkce $J(\phi, g)$ a vazební rovnice $R(\phi, g) = 0$. Najděte takovou kombinaci parametrů g , primárních proměnných ϕ a sdružených proměnných ξ tak, aby $L(\phi, g, \xi) = J(\phi, g) + \langle R(\phi, g), \xi \rangle$ bylo stacionární.*

Z matematického hlediska je dobré podotknout, že všechny argumenty L jsou na sobě nezávislé. Pro J tomu tak nebylo, protože ξ a g spolu byli svázané přes podmiňující rovnice $R(\phi, g) = 0$ a nešlo je tak volit nezávisle. Abychom splnili podmínku stacionarity, jak požaduje problém 2, musí být variance L podle všech proměnných rovna nule.

3.2.1 Systém rovnic optimality

V této části jsou ukázány jednotlivé variace

$$\delta L = \delta_\xi L + \delta_\phi L + \delta_g L \quad (3.3)$$

pro cílovou funkci L definovanou rovnicí 3.2.

Variace sdružených proměnných

Nulovost variace podle sdružených proměnných ξ lze zapsat jako

$$\delta_\xi L = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{L(\phi, g, \xi + \epsilon \delta \xi) - L(\phi, g, \xi)}{\epsilon} = 0, \quad (3.4)$$

kde variace $\delta \xi$ je libovolná. Po dosazení za L z rovnice 3.2, dostáváme

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{J(\phi, g) + \langle \xi + \epsilon \delta \xi, R(\phi, g) \rangle - (J(\phi, g) + \langle \xi, R(\phi, g) \rangle)}{\epsilon} = 0, \quad (3.5)$$

tedy

$$\langle \delta \xi, R(\phi, g) \rangle = 0. \quad (3.6)$$

Díky libovolnosti variace $\delta \xi$ dostáváme původní vazební rovnici

$$R(\phi, g) = 0, \quad (3.7)$$

která tvoří první část systému rovnic optimality. Variace podle sdružených proměnných ukázala, že stacionární bod rozšířeného funkcionálu $L(\phi, g, \xi)$ splňuje vazební rovnice [14].

Variace primárních proměnných

Dále vezměme variaci vzhledem k primárním proměnným ϕ , tedy

$$\delta_\phi L = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{L(\phi + \epsilon \delta \phi, g, \xi) - L(\phi, g, \xi)}{\epsilon} = 0 \quad (3.8)$$

a opět po dosazení rovnice 3.2

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{J(\phi + \epsilon \delta \phi, g) + \langle \xi, R(\phi + \epsilon \delta \phi, g) \rangle - (J(\phi, g) + \langle \xi, R(\phi, g) \rangle)}{\epsilon} = 0, \quad (3.9)$$

neboli

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{J(\phi + \epsilon \delta \phi, g) - J(\phi, g)}{\epsilon} + \frac{\langle \xi, R(\phi + \epsilon \delta \phi, g) - R(\phi, g) \rangle}{\epsilon} \right) = 0. \quad (3.10)$$

Členy ve jmenovateli obsahující ϵ přepíšeme pomocí Taylorova rozvoje okolo bodu ϕ

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{J(\phi, g) + \frac{\partial J}{\partial \phi} \epsilon \delta \phi + O(\epsilon^2) - J(\phi, g)}{\epsilon} + \frac{\left\langle \xi, R(\phi, g) + \frac{\partial R}{\partial \phi} \epsilon \delta \phi + O(\epsilon^2) - R(\phi, g) \right\rangle}{\epsilon} \right) = 0. \quad (3.11)$$

Členy bez derivací se odečtou, a po zkrácení ϵ dostáváme

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{\partial J}{\partial \phi} \delta \phi + \left\langle \xi, \frac{\partial R}{\partial \phi} \delta \phi \right\rangle + O(\epsilon) \right) = 0. \quad (3.12)$$

Provedeme limitu

$$\frac{\partial J}{\partial \phi} \delta \phi + \left\langle \xi, \frac{\partial R}{\partial \phi} \delta \phi \right\rangle = 0, \quad (3.13)$$

použijeme

$$\frac{\partial J}{\partial \phi} \delta \phi = \left\langle 1, \frac{\partial J}{\partial \phi} \delta \phi \right\rangle \quad (3.14)$$

a označíme $(\cdot)^*$ sdružený operátor vzhledem k $\langle \cdot, \cdot \rangle$, tedy

$$\left\langle \left(\frac{\partial J}{\partial \phi} \right)^*, \delta \phi \right\rangle + \left\langle \left(\frac{\partial R}{\partial \phi} \right)^* \xi, \delta \phi \right\rangle = 0. \quad (3.15)$$

Další část systému rovnic optimality jsou tedy tzv. sdružené rovnice [14]

$$\left(\frac{\partial R}{\partial \phi} \right)^* \xi = - \left(\frac{\partial J}{\partial \phi} \right)^*. \quad (3.16)$$

■ Variace návrhových parametrů

Poslední část variace δL je vzhledem k návrhovým parametrům g , tedy

$$\delta_g L = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{L(\phi, g + \epsilon \delta g, \xi) - L(\phi, g, \xi)}{\epsilon} = 0, \quad (3.17)$$

kde obdobně jako pro primární proměnné po dosazení z rovnice 3.2 dostaneme

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{J(\phi, g + \epsilon \delta g) + \langle \xi, R(\phi, g + \epsilon \delta g) \rangle - (J(\phi, g) + \langle \xi, R(\phi, g) \rangle)}{\epsilon} = 0 \quad (3.18)$$

a po aplikování stejného postupu jako pro vztah 3.16, dostaneme poslední část systému rovnic optimality, tzv. podmínky optimality [14]

$$\left(\frac{\partial R}{\partial g} \right)^* \xi = - \left(\frac{\partial J}{\partial g} \right)^*. \quad (3.19)$$

■ Řešení systému rovnic optimality

Vyřešením soustavy rovnic optimality 3.7, 3.16 a 3.19 získáme řešení problému 2 a tedy i 1. Analyticky lze systém vyřešit pouze ve speciálních případech a oproti základnímu systému, tedy vazebním rovnicím, je tento nesegregovaný systém často masivní, jak upozorňuje [14]. Vyřešením této soustavy jako nesegregované dostaneme přímo optimální hodnoty návrhových parametrů, bohužel to v mnoha případech není možné. Řešení soustavy rovnic segregovaným způsobem už je schůdnější varianta, vyžaduje však iterativní proces a lze ukázat, že iterační metoda řešící každou z tří částí odděleně je ekvivalentní k metodě nejvyššího spádu [14], jejíž rychlost konvergence je často nedostačující. Jak bylo již řečeno v úvodu této sekce, lze sdruženou metodu použít i jiným způsobem a to pro výpočet gradientu/variace $\frac{dJ}{dg}$, který je posléze použit v optimalizačním cyklu podle předpisu 3.1.

■ 3.2.2 Gradient pomocí sdružené metody

Získat gradient cílové funkce je v rámci optimalizačního cyklu, nastíněného na začátku této sekce, typicky nejnáročnější operace. Gradient cílové funkce lze za použití řetízkového pravidla zapsat jako

$$\frac{dJ}{dg}(\phi^{(n)}, g^{(n)}) = \frac{\partial J}{\partial \phi}(\phi^{(n)}, g^{(n)}) \frac{d\phi}{dg}(\phi^{(n)}, g^{(n)}) + \frac{\partial J}{\partial g}(\phi^{(n)}, g^{(n)}). \quad (3.20)$$

Mějme řešení sdružených rovnic 3.16 v n -té iteraci, i.e. mějme $\xi^{(n)}$, které řeší

$$\xi^{(n)} \cdot \frac{\partial R}{\partial \phi}(\phi^{(n)}, g^{(n)}) = \frac{\partial J}{\partial \phi}(\phi^{(n)}, g^{(n)}). \quad (3.21)$$

Dosazením 3.21 do rovnice 3.20 dostaneme

$$\frac{dJ}{dg}(\phi^{(n)}, g^{(n)}) = \xi^{(n)} \cdot \left(\frac{\partial R}{\partial \phi}(\phi^{(n)}, g^{(n)}) \right) \frac{d\phi}{dg}(\phi^{(n)}, g^{(n)}) + \frac{\partial J}{\partial g}(\phi^{(n)}, g^{(n)}), \quad (3.22)$$

kam dosadíme variaci vazebních rovnic $R(\phi, g) = 0$

$$\left(\frac{\partial R}{\partial \phi}(\phi^{(n)}, g^{(n)}) \right) \frac{d\phi}{dg}(\phi^{(n)}, g^{(n)}) = -\frac{\partial R}{\partial g}(\phi^{(n)}, g^{(n)}), \quad (3.23)$$

čímž se dopracujeme k hledanému vztahu

$$\frac{dJ}{dg}(\phi^{(n)}, g^{(n)}) = -\xi^{(n)} \cdot \frac{\partial R}{\partial g}(\phi^{(n)}, g^{(n)}) + \frac{\partial J}{\partial g}(\phi^{(n)}, g^{(n)}), \quad (3.24)$$

V optimalizačních úlohách, kde se ke zjištění gradientů používá metoda konečných diferencí, roste náročnost výpočtu úměrně k počtu návrhových

parametrů. Ve sdružené metodě závisí vyhodnocení gradientu převážně na rychlosti řešení sdružených PDR. Ve sdružené metodě je ale navíc potřeba předem odvodit příslušné PDR a to teoreticky pro každou cílovou funkci. Prakticky lze ale určit dostatečně obecný předpis pro cílovou funkci, odvodit rovnice pro něj a konkrétní předpis dosadit až později, jak je ukázáno v následující části.

3.2.3 Sdružené rovnice pro proudění tekutiny s konstantní hustotou

V této podsececi budou odvozeny sdružené rovnice pro tvarovou optimalizaci v proudění tekutiny s konstantní hustotou podle [35, 22]. Podmiňující rovnice budou tedy NS rovnice pro stacionární stav s tekutinou o konstantní hustotě, tedy rovnice hybnosti

$$\mathbf{R}^{\mathbf{u}} = (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \nabla \cdot 2\nu \mathbb{D}(\mathbf{u}), \quad (3.25)$$

kde operátor $\mathbb{D}(\mathbf{u})$ má stejný význam jako v případě rovnice 2.57, a rovnice kontinuity

$$R^p = -\nabla \cdot \mathbf{u}. \quad (3.26)$$

Primární proměnné jsou tedy v tomto případě rychlost \mathbf{u} a kinematický tlak ve smyslu rovnice 2.20, tedy $p = \frac{p_s}{\rho}$. K nim budou odpovídat sdružené proměnné $\xi = (\mathbf{v}, q)$. Obecnou cílovou funkci lze v rámci mnoha inženýrských aplikací zapsat pomocí integrálu přes výpočetní oblast a integrálu přes hranici, tedy

$$J(\mathbf{u}, p, g) = \int_{\Omega} J_{\Omega}(\mathbf{u}, p, g) dV + \int_{\Gamma} J_{\Gamma}(\mathbf{u}, p, g) dS. \quad (3.27)$$

S takto definovanými proměnnými, vazebními rovnicemi a cenovou funkcí lze definovat upravenou cenovou funkci

$$L = J + \int_{\Omega} \xi \cdot \mathbf{R} d\Omega = \int_{\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{R}^{\mathbf{u}} + qR^p + J_{\Omega}) d\Omega + \int_{\Gamma} J_{\Gamma} dS. \quad (3.28)$$

K odvození sdružených rovnic a definujeme vhodnou bilineární formu

$$\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle = \int_{\Omega} \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} dV. \quad (3.29)$$

Vyjdeme předpisu 3.13 pro variaci upravené cenové funkce podle primárních proměnných

$$\delta_{\phi} L = \frac{\partial J}{\partial \phi} \delta \phi + \int_{\Omega} \xi \cdot \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \phi} \delta \phi dV = 0. \quad (3.30)$$

Pro člen s J můžeme přímo psát

$$\frac{\partial J}{\partial u_i} \delta u_i = \int_{\Omega} \frac{\partial J_{\Omega}}{\partial u_i} \delta u_i dV + \int_{\Gamma} \frac{\partial J_{\Gamma}}{\partial u_i} \delta u_i dS, \quad (3.31)$$

$$\frac{\partial J}{\partial p} \delta p = \int_{\Omega} \frac{\partial J_{\Omega}}{\partial p} \delta p dV + \int_{\Gamma} \frac{\partial J_{\Gamma}}{\partial p} \delta p dS. \quad (3.32)$$

Pro člen se sdruženými proměnnými $\xi \cdot \frac{\partial R}{\partial \phi}$ provedeme variaci $\delta\phi$ postupně pro každou rovnici

$$\delta_{\mathbf{u}}\mathbf{R}^{\mathbf{u}} = (\delta\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\delta\mathbf{u} - \nabla \cdot (2\nu\mathbb{D}(\delta\mathbf{u})), \quad (3.33)$$

$$\delta_p\mathbf{R}^{\mathbf{u}} = \nabla\delta p, \quad (3.34)$$

$$\delta_{\mathbf{u}}R^p = -\nabla \cdot \delta\mathbf{u}, \quad (3.35)$$

$$\delta_pR^p = 0. \quad (3.36)$$

Pro úplnost je potřeba podotknout, že jsme vynechali variaci kinematické viskozity ν . Pro laminární proudění je to naprosto platný postup. Pokud ale budeme modelovat turbulenci za pomoci přídatné turbulentní vazkosti $\nu = \nu_t + \nu_l$, tak buďto musíme udělat předpoklad tzv. zmražené turbulence (anglicky *frozen turbulence*) a nebo rozepsat i variace rovnic turbulence. Zkoumání variace modelů turbulence je nad rámec této práce a detailněji se o něm píše v [36], kde se rozebírá i vliv zjednodušujícího předpokladu zmražené turbulence na výsledek simulace pro případ různých Reynoldsových čísel.

Odvozené vztahy nyní dosadíme do předpisu 3.30

$$\begin{aligned} \delta_{\phi}L = & \int_{\Omega} \frac{\partial J_{\Omega}}{\partial u_i} \delta u_i dV + \int_{\Gamma} \frac{\partial J_{\Gamma}}{\partial u_i} \delta u_i dS + \int_{\Omega} \frac{\partial J_{\Omega}}{\partial p} \delta p dV + \int_{\Gamma} \frac{\partial J_{\Gamma}}{\partial p} \delta p dS + \\ & + \int_{\Omega} \left(\underbrace{\mathbf{v} \cdot (\delta\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}}_{\text{I}} + \underbrace{\mathbf{v} \cdot (\mathbf{u} \cdot \nabla)\delta\mathbf{u}}_{\text{II}} - \underbrace{\mathbf{v} \cdot (\nabla \cdot (2\nu\mathbb{D}(\delta\mathbf{u})))}_{\text{III}} \right) dV + \\ & + \underbrace{\int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \nabla\delta p dV}_{\text{IV}} + \underbrace{\int_{\Omega} -q\nabla \cdot \delta\mathbf{u} dV}_{\text{V}}. \quad (3.37) \end{aligned}$$

Postupně teď pomocí Gaussovy věty (integrace per-partes) přesuneme derivace na sdružené proměnné, tak abychom mohli vytknout variace primárních proměnných. Pro odvození některých členů je výhodnější použít indexový zápis s Einsteinovou sumační konvencí, tedy

$$\text{I} = \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot (\delta\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} dV = \int_{\Omega} v_j \delta u_i \frac{\partial u_j}{\partial x_i} dV \quad (3.38)$$

a po aplikaci Gaussovy věty

$$\text{I} = \int_{\Gamma} v_j \delta u_i u_j n_i dS - \int_{\Omega} \frac{\partial(v_j \delta u_i)}{\partial x_i} u_j dV, \quad (3.39)$$

lze rozepsat derivaci součinu jako

$$\text{I} = \int_{\Gamma} v_j \delta u_i u_j n_i dS - \int_{\Omega} v_j \underbrace{\frac{\partial(\delta u_i)}{\partial x_i} u_j}_{=0 \text{ z kontinuity}} dV, - \int_{\Omega} \delta u_i \frac{\partial v_j}{\partial x_i} u_j dV \quad (3.40)$$

a tedy

$$I = \int_{\Gamma} v_j u_j n_i \delta u_i \, dS - \int_{\Omega} \frac{\partial v_j}{\partial x_i} u_j \delta u_i \, dV = \int_{\Gamma} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{n} \cdot \delta \mathbf{u} \, dS - \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{u}) \cdot \delta \mathbf{u} \, dV. \quad (3.41)$$

Pro druhý člen můžeme psát

$$II = \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot (\mathbf{u} \cdot \nabla) \delta \mathbf{u} \, dV = \int_{\Omega} v_j u_i \frac{\partial (\delta u_j)}{\partial x_i} \, dV \quad (3.42)$$

a stejným postupem jako v předchozím případě (Gaussova věta, derivace součinu, rovnice kontinuity) dostáváme

$$II = \int_{\Gamma} v_j u_i n_i \delta u_j \, dS - \int_{\Omega} u_i \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \delta u_j \, dV = \int_{\Gamma} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{v} \cdot \delta \mathbf{u} \, dS - \int_{\Omega} (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{v} \cdot \delta \mathbf{u} \, dV. \quad (3.43)$$

Nejpracnější je pak člen číslo tři, tedy

$$III = \int_{\Omega} -\mathbf{v} \cdot (\nabla \cdot (2\nu \mathbb{D}(\delta \mathbf{u}))) \, dV = \int_{\Omega} -v_i \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \left(\frac{\partial (\delta u_i)}{\partial x_j} + \frac{\partial (\delta u_j)}{\partial x_i} \right) \right) \, dV,$$

použijeme Gaussovu větu poprvé

$$III = \int_{\Gamma} -v_i \left(\nu \left(\frac{\partial (\delta u_i)}{\partial x_j} + \frac{\partial (\delta u_j)}{\partial x_i} \right) \right) n_j \, dS + \int_{\Omega} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \nu \left(\frac{\partial (\delta u_i)}{\partial x_j} + \frac{\partial (\delta u_j)}{\partial x_i} \right) \, dV$$

a podruhé, zvlášť na oba členy v objemovém integrálu,

$$III = \int_{\Gamma} -2\nu \mathbf{v} \cdot \mathbb{D}(\delta \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} \, dS + \int_{\Gamma} \nu \frac{\partial v_i}{\partial x_j} (n_j \delta u_i + n_i \delta u_j) \, dS - \int_{\Omega} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) \delta u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\nu \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) \delta u_j \right) \, dV,$$

čímž dostáváme výraz

$$III = \int_{\Gamma} 2\nu \mathbf{n} \cdot \mathbb{D}(\mathbf{v}) \cdot \delta \mathbf{u} \, dS - \int_{\Gamma} 2\nu \mathbf{v} \cdot \mathbb{D}(\delta \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} \, dS - \int_{\Omega} \nabla \cdot (2\nu \mathbb{D}(\mathbf{v})) \cdot \delta \mathbf{u} \, dV. \quad (3.44)$$

Dále

$$IV = \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \nabla \delta p \, dV = \int_{\Omega} v_i \frac{\partial (\delta p)}{\partial x_i} \, dV = \int_{\Gamma} v_i n_i \delta p \, dS - \int_{\Omega} \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \delta p \, dV \quad (3.45)$$

a

$$IV = \int_{\Gamma} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \delta p \, dS - \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{v} \delta p \, dV. \quad (3.46)$$

Pro poslední člen pak

$$V = \int_{\Omega} -q \nabla \cdot \delta \mathbf{u} \, dV = \int_{\Omega} -q \frac{\partial (\delta u_i)}{\partial x_i} \, dV = \int_{\Gamma} -q \delta u_i n_i \, dS + \int_{\Omega} \frac{\partial q}{\partial x_i} \delta u_i \, dV$$

a vektorově tedy

$$V = \int_{\Gamma} -q \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, dS + \int_{\Omega} \nabla q \cdot \delta \mathbf{u} \, dV. \quad (3.47)$$

Konečně lze tedy rozepsat rovnici 3.30 pomocí odvozených členů

$$\begin{aligned} \delta_\phi L = & \int_\Omega \frac{\partial J_\Omega}{\partial u_i} \delta u_i dV + \int_\Gamma \frac{\partial J_\Gamma}{\partial u_i} \delta u_i dS + \int_\Omega \frac{\partial J_\Omega}{\partial p} \delta p dV + \int_\Gamma \frac{\partial J_\Gamma}{\partial p} \delta p dS + \\ & + \int_\Gamma (\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{n} \cdot \delta \mathbf{u} dS - \int_\Omega (\nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{u}) \cdot \delta \mathbf{u} dV + \int_\Gamma (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{v} \cdot \delta \mathbf{u} dS - \int_\Omega (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{v} \cdot \delta \mathbf{u} dV + \\ & + \int_\Gamma 2\nu \mathbf{n} \cdot \mathbb{D}(\mathbf{v}) \cdot \delta \mathbf{u} dS - \int_\Gamma 2\nu \mathbf{v} \cdot \mathbb{D}(\delta \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} dS - \int_\Omega \nabla \cdot (2\nu \mathbb{D}(\mathbf{v})) \cdot \delta \mathbf{u} dV + \\ & + \int_\Gamma \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \delta p dS - \int_\Omega \nabla \cdot \mathbf{v} \delta p dV + \int_\Gamma -q \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS + \int_\Omega \nabla q \cdot \delta \mathbf{u} dV \end{aligned}$$

a poté co dáme k sobě členy se stejnou variací a typem integrálu

$$\begin{aligned} \delta_\phi L = & \int_\Omega \left(\frac{\partial J_\Omega}{\partial \mathbf{u}} - \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{u} - (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{v} - \nabla \cdot (2\nu \mathbb{D}(\mathbf{v})) + \nabla q \right) \cdot \delta \mathbf{u} dV \\ & + \int_\Gamma \left(\frac{\partial J_\Gamma}{\partial \mathbf{u}} + (\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{n} + (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{v} + 2\nu \mathbf{n} \cdot \mathbb{D}(\mathbf{v}) - q \mathbf{n} \right) \cdot \delta \mathbf{u} dS \\ & - \int_\Gamma 2\nu \mathbf{v} \cdot \mathbb{D}(\delta \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} dS \\ & + \int_\Omega \left(\frac{\partial J_\Omega}{\partial p} - \nabla \cdot \mathbf{v} \right) \delta p dV \\ & + \int_\Gamma \left(\frac{\partial J_\Gamma}{\partial p} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \right) \delta p dS, \end{aligned}$$

dostáváme stejný výraz jako je odvozen v [37]. Podmínka $\delta_\phi L$ musí být splněna pro libovolnou variaci primárních proměnných. Z objemových integrálů nám tedy vychází sdružené NS rovnice pro tekutinu s konstantní hustotou ve stacionárním stavu, které můžeme zapsat jako

$$2\mathbb{D}(\mathbf{v})\mathbf{u} + \nabla \cdot (2\nu \mathbb{D}(\mathbf{v})) - \nabla q = \frac{\partial J_\Omega}{\partial \mathbf{u}}, \quad (3.48)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{\partial J_\Omega}{\partial p}, \quad (3.49)$$

kde jsme použili

$$\nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{v} = \frac{\partial v_j}{\partial x_i} u_j + u_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} = 2 \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) u_j = 2\mathbb{D}(\mathbf{v})\mathbf{u}. \quad (3.50)$$

Hraniční integrály nám pak dávají návod na sestavení okrajových podmínek pro sdružené rovnice a to tak, aby

$$\begin{aligned} \int_\Gamma \left(\frac{\partial J_\Gamma}{\partial \mathbf{u}} + (\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{n} + (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{v} + 2\nu \mathbf{n} \cdot \mathbb{D}(\mathbf{v}) - q \mathbf{n} \right) \cdot \delta \mathbf{u} dS = \\ = \int_\Gamma 2\nu \mathbf{v} \cdot \mathbb{D}(\delta \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} dS, \quad (3.51) \end{aligned}$$

$$\int_\Gamma \left(\frac{\partial J_\Gamma}{\partial p} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \right) \delta p dS = 0. \quad (3.52)$$

Pro vstupní hranici s Dirichletovou okrajovou podmínkou pro rychlost a nulovou Neumannovou pro tlak se pro sdružený tlak použije taktéž podmínka nulového gradientu

$$\frac{\partial q}{\partial n} = 0. \quad (3.53)$$

Pro normálovou složku sdružené rychlosti \mathbf{v} je předepsáno

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = -\frac{\partial J_\Gamma}{\partial p} \quad (3.54)$$

a složky tečné jsou nulové [36].

Na výstupu, kde je tlak fixován Dirichletovou okrajovou podmínkou a rychlost má předepsaný nulový gradient, je situace složitější a okrajová podmínka úzce souvisí se zvoleným modelem turbulence. Odvození sdružených rovnic pro model turbulence je ale nad rámec této práce a konkrétní podoba okrajové podmínky použité v části aplikace je odvozena v [36]. Pro q na výstupu bez sdružené turbulentní proměnné tak plyne Dirichletova okrajová podmínka

$$q = v_i u_i + u_i n_i v_j n_j + \nu \frac{\partial(v_i n_i)}{\partial x_j} n_j + \frac{\partial J_\Gamma}{\partial u_i} n_i \quad (3.55)$$

a pro \mathbf{v} pak

$$0 = \mathbf{v}_t u_i n_i + \nu \frac{\partial \mathbf{v}_t}{\partial x_j} n_j + \frac{\partial J_\Gamma}{\partial \mathbf{u}_t}, \quad (3.56)$$

kde $\mathbf{u}_t = \mathbf{u} - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}$ a stejně pro sdruženou rychlost. Zbývající normálová složka $v_n = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}$ pak musí splnit rovnici kontinuity

$$\int_\Gamma v_n dS = \int_\Omega \frac{\partial J_\Omega}{\partial p}. \quad (3.57)$$

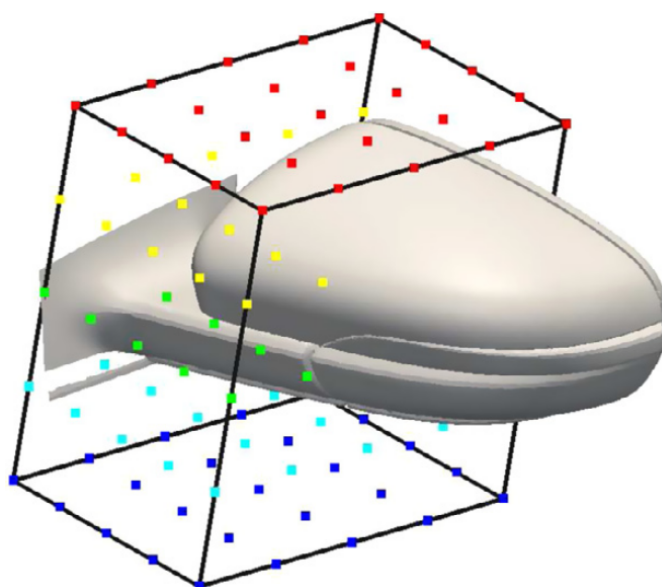
Na stěně, kde je nulová Dirichletova podmínka pro rychlost a nulový gradient pro tlak, je nulová Neumannova podmínka i pro sdružený tlak

$$\frac{\partial q}{\partial n} = 0 \quad (3.58)$$

a pro rychlost

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = -\frac{\partial J}{\partial p}. \quad (3.59)$$

Systém sdružených rovnic nápadně připomíná původní systém NS rovnic pro tekutinu s konstantní hustotou. Mezi zásadní rozdíly patří linearita rovnic a také, že v porovnání s původními NS rovnicemi má konvektivní člen opačné znaménko. To značí, že informace se šíří proti směru primární rychlosti \mathbf{u} namísto po směru proudu. Sdružené rovnice často bývají o něco jednodušší, neboť existuje celá řada cenových funkcí, které závisí pouze na hraničních hodnotách. Ku příkladu třecí ztráty, výslednice sil na těleso nebo stlačení. Pro takové cílové funkce pak odpadávají pravé strany sdružených rovnic, neboť $J_\Omega = 0$.



Obrázek 3.1: Řídící body objemového B-spline okolo automobilového zrcátka. Převzato z [38].

3.3 Pohyb sítě

Prozatím jsme pracovali s obecnými návrhovými parametry g . V rámci zaměření a cíle této práce je nyní konkretizujeme. Pro tvarovou optimalizaci má smysl definovat návrhové parametry svázané s tvarem výpočetní oblasti. Například pro křídlo letadla budeme chtít měnit profil, pro optimalizaci ztrát v koleni potrubí pak tvar samotného kolene atp. V této práci budeme později uvažovat kompresorovou lopatkovou mříž a měnit se tedy bude tvar lopatky.

První přístup, co přichází v úvahu, je brát jako návrhové parametry přímo souřadnice bodů profilu. To ovšem znamená spoustu návrhových parametrů, jejichž počet při zjemňování sítě roste. V případě metody sdružené optimalizace to vlastně nevedí. Právě naopak bychom těžili tu největší výhodu sdružené optimalizace, tedy (téměř) nezávislost rychlosti výpočtu gradientu na počtu návrhových proměnných. Druhým, už horším avšak stále řešitelným problémem, je zachování platnosti a funkčnosti výpočetní sítě. Snadno se dá představit, že při pohybu pouze hranice, se mohou začít stěny křížit, vznikat záporné objemy etc. Takovou situaci lze řešit dodatečným výpočtem a posunem i ostatních ovlivněných bodů. Lepším a obecně lépe fungujícím způsobem je podle [39] využít parametrizace oblasti pomocí objemových B-spline. Po vydefinování sítě řídicích bodů jak ukazuje například obrázek 3.1, je každý z bodů sítě namapován z kartézského prostoru $\mathcal{R}^3(x, y, z)$ do parametrického prostoru $\mathcal{R}^3(u, v, w)$. Objemové B-spline pak definují zobrazení z parametrického prostoru do kartézského. Matematický popis tohoto

postupu je detailněji popsán v [38].

V rámci optimalizace jsou jako návrhové parametry brány souřadnice řídicích bodů objemových B-spline. Na základě získaných gradientů se nejprve pohne s řídicími body a následně se změna propaguje na každý parametrizovaný bod v kartézském prostoru sítě.

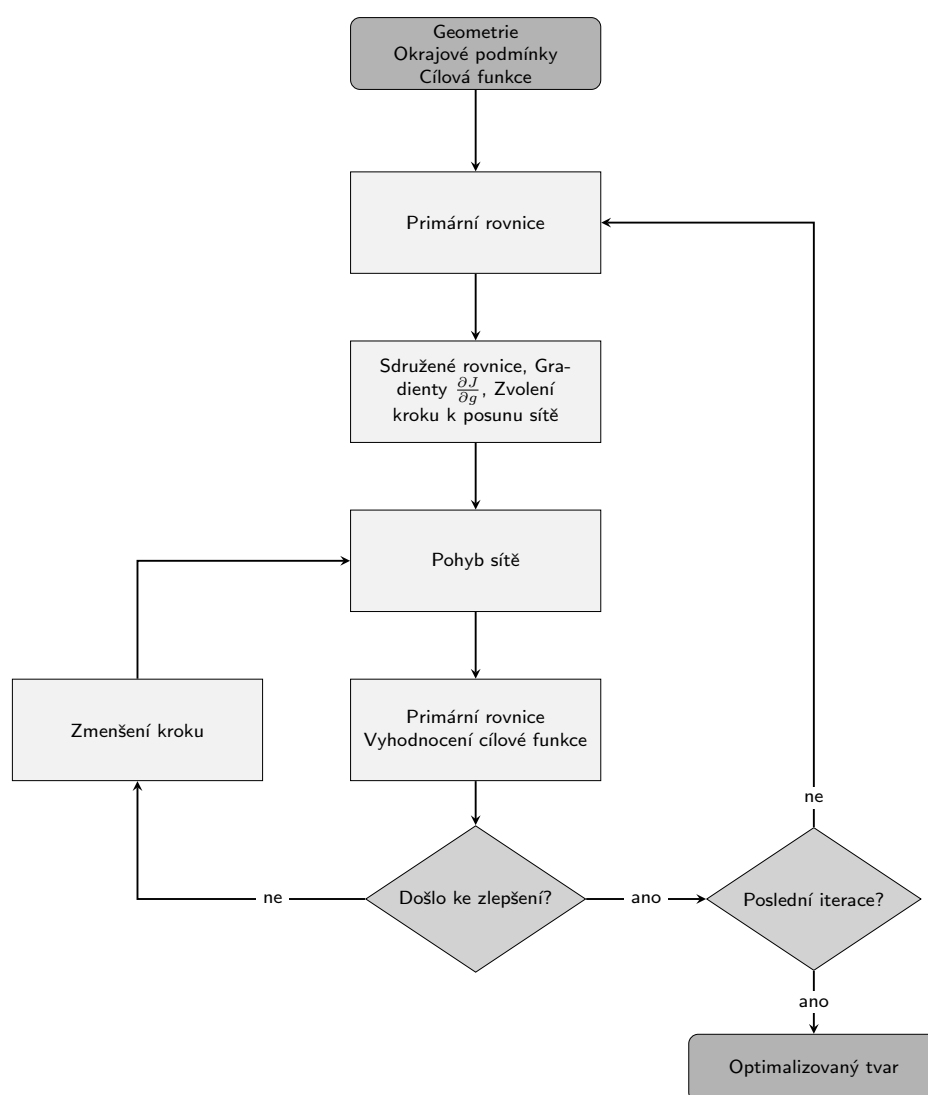
3.4 Optimalizační cyklus

Na obrázku 3.2 je vizualizován průběh optimalizace. Před zahájením optimalizace je potřeba krom geometrie vytvořit výpočetní síť, definovat způsob diskretizace členů v primárních i sdružených rovnicích, zvolit řešiče soustav lineárních rovnic, definovat okrajové podmínky pro všechny proměnné, nastavit parametry optimalizace včetně cílové funkce atd.

V jedné iteraci optimalizačního algoritmu je pak potřeba nejprve vyřešit primární rovnice a vyhodnotit cílovou funkci. Řešení primárních rovnic se pak promítne ve zdrojových členech sdružených rovnic. Ty se pak vyřeší a v závislosti na návrhových parametrech se vyhodnotí gradient $\frac{\partial J}{\partial g}$. Optimalizační krok η ve smyslu rovnice 3.1 se pro první iteraci musí zvolit nebo jinak určit, například na základě podmínky maximálního pohybu sítě.

Následně se zvoleným způsobem pohne se sítí (či se změní jiné návrhové parametry g), znovu se vyřeší primární rovnice a vyhodnotí cílová funkce. Následně je možné aplikovat postup hledání nejlepšího kroku (anglicky *line search*), který zmenšuje krok η , tak aby došlo ke zlepšení cílové funkce. Hledání nejlepšího kroku je iterační proces, který vyžaduje vyřešit primární rovnice v každé iteraci, což může být v některých případech náročná operace a maximální počet hledacích iterací se tak často omezuje.

Po přijetí nových návrhových parametrů lze optimalizaci ukončit, či přejít k další iteraci optimalizačního cyklu.



Obrázek 3.2: Diagram průběhu optimalizačního algoritmu pro sdruženou metodu.



Část II

Praktická aplikace

Kapitola 4

Tvarová optimalizace kompresorové mříže

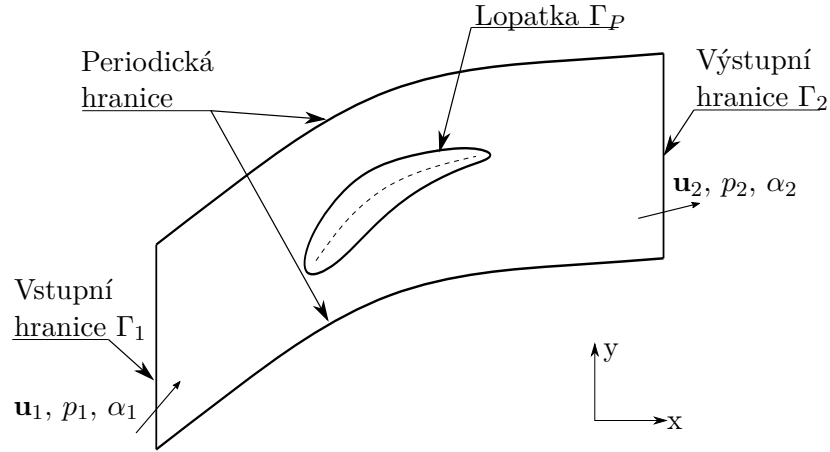
Tato kapitola prezentuje použitou metodiku pro optimalizaci tvaru lopatky v kompresorové mříži pomocí sdružené metody a knihovny OpenFOAM pro simulace metodou konečných objemů.

4.1 Obecný popis problému

Simulace prováděné v rámci této práce zjednodušeně reprezentují kompresorovou lopatkovou mříž. Pro lopatkové mříže jsou určující zejména geometrie samotné lopatky, rozteč t jednotlivých lopatek a stav proudu před a za mříží.

V rámci numerické simulace je topologie výpočetní oblasti naznačena na obrázku 4.1. Vstupní a výstupní hranice jsou rovnoběžné s osou y a jejich výška je právě zmiňovaný parametr rozteče t . Uprostřed oblasti se nachází uzavřená hranice reprezentující geometrii lopatky. Vrchní a spodní hranice jsou brány jako periodické, tedy to co vyteče spodem, vteče vrchem a naopak. Prostorová diskretizace (sít) je v této práci vždy dělána tak, aby si stěny buněk na obou stranách periodické hranice odpovídali 1 : 1, pouze s posunutím t .

Krom periodicity jsou další okrajové podmínky následující. Na vstupu je předepsána Dirichletova okrajová podmínka pro vektor rychlosti a turbulentní proměnné. Tlak zde má nulovou Neumanovu podmínku. Na výstupu je naopak pro kinematický tlak předepsána Dirichletova podmínka a rychlost je



Obrázek 4.1: Náčrt topologie výpočetní oblasti pro standardní axiální kompresorovou mříž.

zde předepsána pomocí nulového gradientu. Hranice lopatky je brána jako nepropustná stěna s nulovou Dirichletovou podmínkou pro rychlost a nulovým gradientem pro tlak.

Při modelování turbulence Spalartovým-Allmarasovým modelem turbulence je $\tilde{\nu}$ na vstupu předepsána hodnotou, na výstupu nulovým gradientem a na lopatce nulovou Dirichletovou podmínkou. Prostorová diskretizace bude dělána tak aby $y^+ < 1$ a pro ν_t je použita Spaldingova stěnová funkce $\text{SWF}_{\nu_t}(\mathbf{u})$ podle [40]. Pro proměnné k a ω příslušící modelu $k-\omega$ SST je situace na $\Gamma_{1,2}$ stejná jako pro Spalartovu-Allmarasovu proměnnou a na stěně je použito stěnových funkcí [41] vhodných pro $y^+ < 1$.

Symbolicky lze tedy okrajové podmínky zapsat tak, že

$$\text{na } \Gamma_1 : \mathbf{u} = \mathbf{u}_\infty,$$

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0,$$

$$\tilde{\nu} = \tilde{\nu}_\infty,$$

$$\text{na } \Gamma_P : \mathbf{u} = \mathbf{0},$$

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0,$$

$$\tilde{\nu} = 0,$$

$$\nu_t = \text{SWF}_{\nu_t}(\mathbf{u}),$$

$$\text{na } \Gamma_2 : \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0,$$

$$p = p_2,$$

$$\frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial n} = 0.$$

4.2 Cílové funkce

V rámci aplikace sdružené optimalizace na tvar lopatky kompresorové mříže lze vymyslet hned několik cílů. V jednom stupni axiálního kompresoru se běžně sledují veličiny stlačení, účinnost (respektive ztráty) a výstupní úhel proudu. Pro tuto práci se jako sledovaná a optimalizovaná veličina bere ta poslední, tedy výstupní úhel proudu α_2 .

K dosažení cílového úhlu na výstupu z lopatkové mříže α_{2tar} jsou použity dva postupy. Oba vycházejí z definice úhlu výstupního proudu

$$\alpha_2 = \arctan\left(\frac{u_{y2}}{u_{x2}}\right). \quad (4.1)$$

Ze zákona zachování hmotnosti pro proudění tekutiny s konstantní hustotou vyplývá, že to co do kontrolní oblasti vteče, musí i vytéct. Jinými slovy toky vstupní a výstupní hranicí se musejí rovnat

$$\dot{m}_1 = \dot{m}_2, \quad (4.2)$$

což pro proudění tekutiny s konstantní hustotou $\rho_1 = \rho_2 = \rho$ skrz kontrolní oblast se vstupní a výstupní hranicí rovnoběžnou s osou y znamená, že

$$u_{x1} = u_{x2}. \quad (4.3)$$

Okrajové podmínky definují na vstupu konstantní uniformní vektor rychlosti \mathbf{u}_1 a přeneseně tedy i x-ovou složku rychlosti na výstupu. Z toho vyplývá, že pro zadané α_{2tar} můžeme apriori spočítat

$$u_{y2tar} = \tan(\alpha_{2tar}) \cdot u_{x2}, \quad (4.4)$$

tedy jistou cílovou rychlost na výstupu a cílovou funkci formulovat pomocí ní.

Dále jsou srovnány dvě formulace cílové funkce. První formulace optimalizuje přímo výstupní složku rychlosti. Druhá optimalizuje nepřímo přes cílovou sílu na lopatku, která odpovídá dané změně výstupní složky rychlosti ve směru y .

Zatímco přímá formulace ovlivňuje přes derivaci cílové funkce okrajovou podmínku sdružených rovnic pouze na výstupní hranici Γ_2 , cílová funkce přes sílu ovlivňuje okrajovou podmínku na lopatce Γ_P . Druhým rozdílem je pak, že v přímé formulaci se objevuje jediná primární proměnná, kdežto pro integraci síly na lopatce jsou potřeba všechny proměnné, včetně turbulentní proměnné \tilde{v} . Tyto rozdíly završují dostatečný důvod pro zkoumání a porovnání těchto dvou formulací ve smyslu rychlosti konvergence a přesnosti.

4.2.1 Přímá formulace

V přímé formulaci se snažíme aby

$$u_{y2tar} = \frac{1}{\phi_2} \sum_{f \in \Gamma_2} \phi_f u_{yf}, \quad (4.5)$$

tedy aby průměr u_y na výstupu vážený přes hmotnostní tok byl roven zadané cílové rychlosti. Minimalizovanou cílovou funkci formulujeme jako

$$J = \int_{\Gamma_2} (u_y(y) - u_{y2tar})^2 dS = \int_{\Gamma_2} J_\Gamma dS. \quad (4.6)$$

Ve smyslu vztahu 3.27 má takto definovaná cílová funkce pouze hraniční složku J_Γ a pro sdužené rovnice tak bude figurovat pouze v hraničních členech, tedy v rovnicích 3.51 a 3.52. Potřebujeme tedy vydefinovat parciální derivace podle primárních proměnných \mathbf{u} a p . Pro implementaci v rámci knihovny OpenFOAM je pak navíc potřeba vydefinovat ještě derivace podle u_n a u_t , což pro dříve definovanou úlohu znamená podle složek u_x a u_y .

Parciální derivace podle primárního tlaku $\frac{\partial}{\partial p}$ je nulová, neboť tlak v cílové funkci nefiguruje.

Pro parciální derivaci podle primární rychlosti \mathbf{u} je lepší se dívat na složku u_y jako na skalární součin $\mathbf{u} \cdot \mathbf{j} = \mathbf{u} \cdot (0, 1, 0) = u_y$ a derivaci tedy provést jako

$$\frac{\partial J_\Gamma}{\partial \mathbf{u}} = \frac{\partial (\mathbf{u} \cdot \mathbf{j} - u_{y2tar})^2}{\partial \mathbf{u}} = 2(\mathbf{u} \cdot \mathbf{j} - u_{y2tar}) \mathbf{j} = 2(u_y - u_{y2tar}) \mathbf{j}. \quad (4.7)$$

U dodatečných derivací pro OpenFOAM vychází $\frac{\partial}{\partial u_n} = 0$ a $\frac{\partial}{\partial u_t}$ je stejná jako derivace podle \mathbf{u} .

4.2.2 Nepřímá formulace přes sílu

Druhou možností jak dosáhnout zadaného úhlu výstupního proudu je použít optimalizaci přes cílovou sílu. Optimalizace síly na stěnu ve smyslu její minimalizace v předepsaném směru je v balíku OpenFOAM formulována jako

$$J_{OF} = \frac{\int_{\Gamma} \rho (-\tau_{ij} n_j + p n_i) r_i dS}{\frac{1}{2} \rho A U_\infty^2}, \quad (4.8)$$

kde τ_{ij} jsou složky tenzoru napětí, p tlak dělený konstantní hustotou ρ a \mathbf{n} jednotkový normálový vektor. Vektor \mathbf{r} pak definuje směr projekce vektoru

síly (směr ve kterém se minimalizuje). A je referenční plocha a U_∞ je rychlost volného proudu. Takto definovaná cílová funkce tedy svou velikostí odpovídá koeficientu síly C_f .

Pro potřeby optimalizace na cílovou sílu F_{yPtar} bylo vhodnější použít přímo samotnou sílu, tedy pouze číselník v rovnici 4.8, a za vektor projekce brát jednotkový vektor ve směru osy y . Pro celkovou sílu působící na lopatku ve směru y tak lze psát

$$F_{yP} = \int_{\Gamma_P} \rho(-\tau_{ij}n_j + pn_i)\delta_{i2} dS. \quad (4.9)$$

Absolutní velikost takto vyhodnocené síly samozřejmě závisí i na rozměru lopatky v ose z . Číselné výsledky uváděné později jsou uváděny vždy relativní, takže nezávisí na libovolné konstantní výšce lopatky. Cílovou funkci pro cílovou sílu tak definujeme podobně jako pro rychlost přes kvadrát rozdílu, tedy

$$J = (F_{yP} - F_{yPtar})^2. \quad (4.10)$$

Pro derivaci této cílové funkce podle libovolné proměnné w pak platí

$$\frac{\partial J}{\partial w} = 2(F_{yP} - F_{yPtar}) \cdot \frac{\partial F_{yP}}{\partial w}. \quad (4.11)$$

Výraz $\frac{\partial F_{yP}}{\partial w}$ odpovídá derivaci číselníku (anglicky *nominator*, `nom()`) cílové funkce definované rovnicí 4.8, tedy

$$\frac{\partial F_{yP}}{\partial w} = \frac{\partial(\text{nom}(J_{OF}))}{\partial w}. \quad (4.12)$$

Pro tuto cílovou funkci tedy nebylo potřeba odvozovat potřebné derivace a stačilo pouze vynásobit příslušné výrazy definované v kódu knihovny OpenFOAM výrazem $2(F_{yP} - F_{yPtar})$.

4.3 Optimalizace mříže GHH 1-S1

Pro aplikaci nově zpracovaných cílových funkcí byla zvolena axiální kompresorová mříž MAN GHH 1-S1 publikovaná v [1]. Výpočetní oblast topologicky odpovídá náčrtu na obrázku 4.1. Rozteč lopatek v mříži je $t = 0.0476$ m. Hustota tekutiny používaná při vyhodnocení síly je $\rho = 1.225 \text{ kg m}^{-3}$ a kinematická viskozita $\nu = 1.5 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$.

4.3.1 Okrajové podmínky

Na vstupu je Machovo číslo $M = 0.62$ a úhel proudu $\alpha_1 = 47^\circ$, což při klidové rychlosti vzduchu $c = 340 \text{ m s}^{-1}$ vede na okrajovou podmínku pro vstupní rychlost

$$\mathbf{u}_1 = M \cdot c \cdot (\cos(\alpha_1), \sin(\alpha_1), 0) \doteq (143.8, 154.2, 0) \text{ m s}^{-1}. \quad (4.13)$$

Kinematický tlak na výstupu je $p_2 = 0 \text{ m}^2 \text{ s}^{-2}$.

4.3.2 Modelování turbulence

Modelování turbulence se realizuje pomocí přídavné turbulentní vazkosti. Pro zjištění turbulentní vazkosti ν_t je v optimalizačním algoritmu použit Spalartův-Allmarasův model [31]. Jelikož ale tento model je původně navržen pro obtékání profilu křídla ve volném proudu, není ve své původní variantě vhodný pro modelování turbulence ve vnitřní aerodynamice, kam kompresorové mříže spadají. Knihovna OpenFOAM prozatím ale neobsahuje sdružené rovnice pro žádný jiný model turbulence než Spalartův-Allmarasův a odvození sdružených rovnic pro pokročilejší model turbulence je nad rámec této práce, byl použit následující postup.

Ve výchozí konfiguraci byla provedena simulace s vhodnějším modelem k - ω SST implementovaným v knihovně OpenFOAM na základě [2, 3, 42] s následujícími okrajovými podmínkami na vstupu. Intenzita turbulence na vstupu $I = 2\%$, odkud plyne Dirichletova podmínka pro turbulentní kinetickou energii k ze vztahu

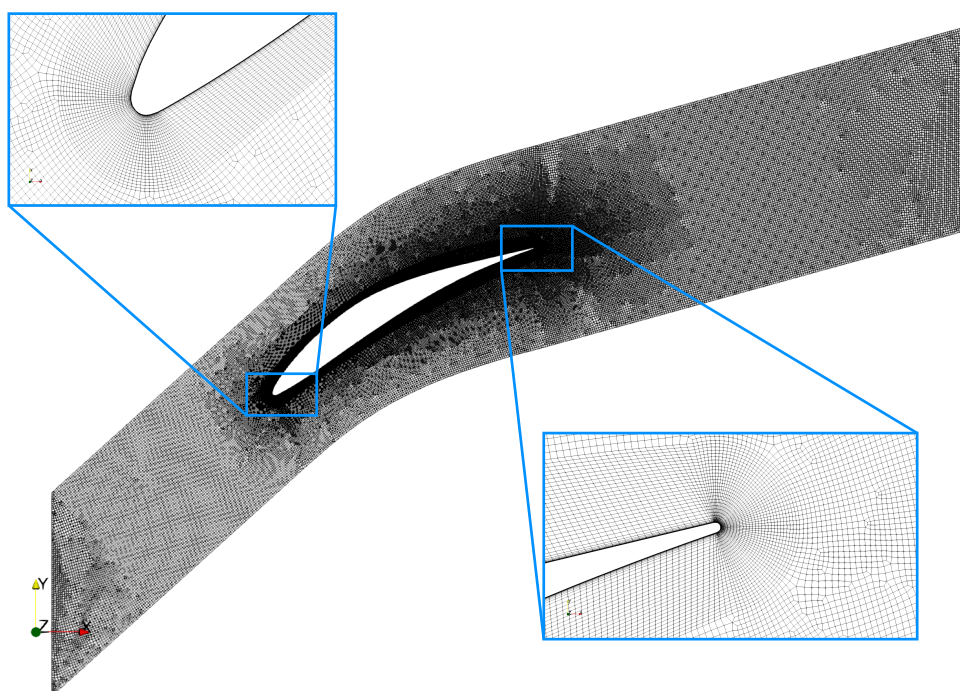
$$k = 1.5(I|\mathbf{u}|)^2. \quad (4.14)$$

Turbulentní směřovací délka $L_t = 0.002 \text{ m}$, odkud plyne Dirichletova okrajová podmínka pro ω ze vztahu

$$\omega = \frac{k^{0.5}}{C_\mu^{0.25} L_t}, \quad C_\mu = 0.09. \quad (4.15)$$

Ve výchozí konfiguraci bylo následně provedeno několik simulací s Spalartovým-Allmarasovým modelem, kde se variovala vstupní hodnota turbulentní proměnné tohoto modelu $\tilde{\nu}_1$ z intervalu $\langle 10^{-6}, 10 \rangle$. Pro každý výpočet byl vyhodnocen koeficient ztráty celkového tlaku podle vztahu z [1]

$$\omega = \frac{p_{t1} - p_{t2}}{p_{t1} - p_1} \quad (4.16)$$



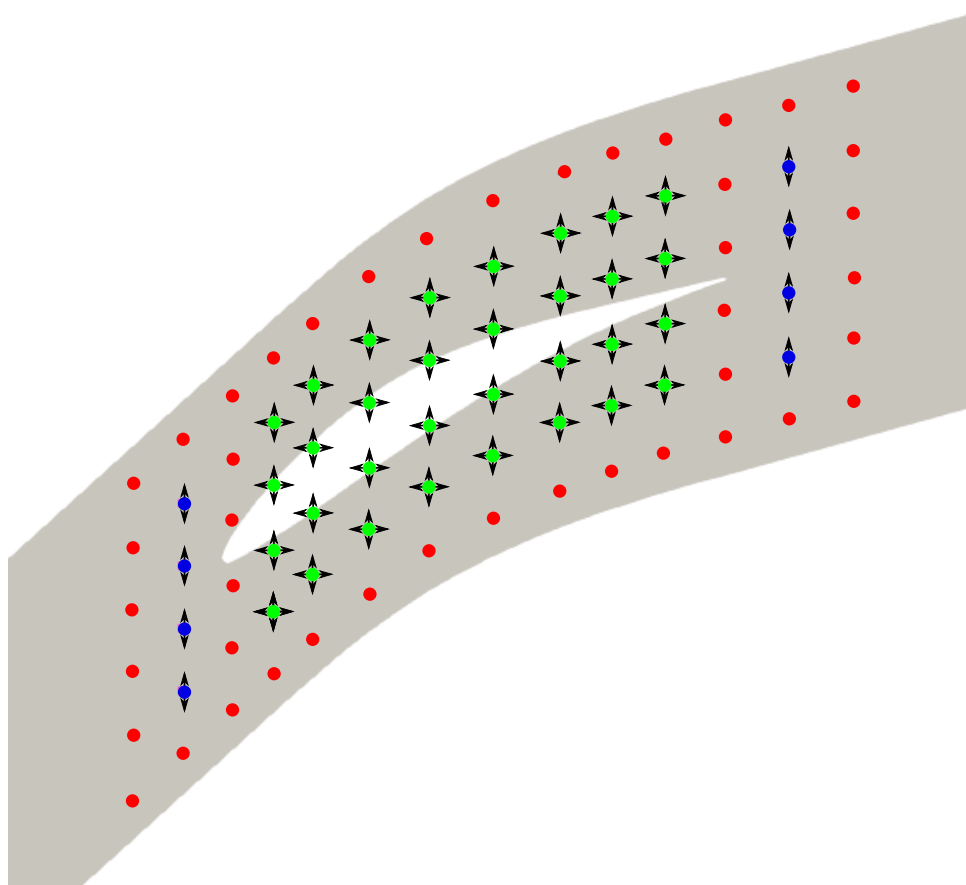
Obrázek 4.2: Výpočetní síť pro lopatkovou mříž GHH 1-S1 s detailem náběžné a odtokové hrany. Síť sestává z celkem 85 tisíc hexahedrálních buněk.

a poměr celkových tlaků $\frac{p_{t1}}{p_{t2}}$. Pro další simulace této lopatkové mříže pak byla na vstupu zvolena Dirichletova podmínka $\tilde{\nu} = 3.4 \cdot 10^{-4}$ neboť pro tuto hodnotu vyšel relativní rozdíl v předpovědi Spalartova-Allmarasova modelu oproti $k-\omega$ SST pro obě vyhodnocované veličiny pod 1%.

4.3.3 Prostorová diskretizace

Výpočetní oblast byla diskretizována na množinu vzájemně disjunktálních objemů. Dvourozměrná síť byla vytvořena v softwaru ANSYS ICEM a její detail je ukázán na obrázku 4.2. Následný převod sítě do formátu pro OpenFOAM (2D síť na pseudo-3D) byl proveden s parametrem 0.01 pro souřadnice z .

Síť byla tvořena s důrazem na co nejlepší zachycení mezní vrstvy. Buňky v oblasti okolo lopatky jsou exponenciálně zmenšovány, aby se dosáhlo $y^+ < 1$. S touto sítí ve výchozí konfiguraci s modelem $k-\omega$ SST je dosaženo $\max_{\Gamma_P}(y^+) \doteq 0.39$. Validita této konkrétní sítě byla ověřena metodou *Grid convergence index* (zkráceně GCI) v [43].



Obrázek 4.3: Pozice řídicích bodů objemových B-spline ve výpočetní oblasti pro lopatkovou mříž GHH 1-S1. Zelené body se mohou pohybovat libovolně, modré pouze ve směru osy y a červené vůbec.

■ Řídicí body objemových B-spline

Pro transformaci tvaru lopatky a pohybu se sítí pomocí objemových B-spline je potřeba vydefinovat řídicí body. Z experimentů s různým rozdělením řídicích bodů a jejich fixací v průběhu optimalizačních cyklů vzešlo, že stabilita řešení sdružených rovnic i konečný výsledek optimalizace na rozdělení řídicích bodů závisí víc než by se dalo označit za uživatelsky příjemné. Konečné rozdělení řídicích bodů je ukázáno na 4.3. Ve směru u , který koresponduje se směrem osy x , bylo zvoleno 14 vrstev bodů a ve směru v pak 6. Fixované v průběhu simulace byly všechny krajní body. Druhá a předposlední vrstva ve směru u (sloupec) má pak zakázán pohyb ve směru osy x . Vrstvy ve směru u procházející náběžnou a odtokovou hranou profilu mají zakázán pohyb úplně. Cílem těchto omezení je fixovat pozici začátku a konce lopatky, aby nedošlo k natahování lopatky a deformaci odtokové hrany. Tento nechtěný efekt měl tendenci nastat pokud se fixovaly například pouze vnější body.

4.3.4 Parametry optimalizace

Cílové funkce používané pro optimalizaci jsou definovány rovnicemi 4.6 a 4.10, tedy optimalizace přímá na u_{y2tar} a nepřímá na F_{yPtar} . Optimalizace tvaru lopatky byla dodatečně omezena, tak aby průřez lopatky zůstal konstantní, což lze pro trojrozměrný prostor matematicky formulovat jako [39]

$$V = -1/3 \int_{\Gamma_P} x_k n_k dS. \quad (4.17)$$

Kvůli přidané podmínce konstantního průřezu byla jako metoda aktualizace zvolena metoda projekce omezení (anglicky *constraint projection*). Výchozí krok ve směru gradientu η je v první iteraci spočítán podle maximálního povoleného pohybu sítě, který byl nastaven na $5 \cdot 10^{-4}$ m. Velikost kroku η se posléze v jednotlivých iteracích zmenšuje podle Armijo podmínky jak definuje [44]. Tento cyklus zmenšuje krok $\eta^{k+1} = 0.75 \cdot \eta^k$ a vyhodnocuje hodnotu cílové funkce J (tedy simuluje primární rovnice), než jsou splněny dané podmínky. Pro Armijo podmínky je důležitý koeficient $c1$, který byl zvolen 10^{-3} .

Výstupní úhel proudu byl ve výchozí konfiguraci se Spalartovým-Allmarasovým modelem $\alpha_2^0 = 21.46^\circ$. Cílové výstupní úhly byly zvoleny z množiny $\langle \alpha_2^0 - 4^\circ, \alpha_2^0 + 8^\circ \rangle$ s krokem 2° . Celkem tedy 6 různých cílových úhlů.

4.3.5 Výsledky optimalizace

K dosažení cílového úhlu výstupního proudu byla použita nejdříve přímá formulace cílové funkce. Následně, když optimalizace bylo nalezeno optimální řešení, byla vyhodnocena síla F_{yP} působící na lopatku. Tato síla pak byla použita jako cílová síla F_{yPtar} pro nepřímou formulaci cílové funkce. Konkrétní cílové hodnoty s odpovídajícími cílovými úhly jsou uvedeny v tabulce 4.1.

$\Delta\alpha_2$	α_{2tar}	u_{y2tar} [ms ⁻¹]	F_{yPtar} [N]
-4°	17.46°	45.32	9.12
-2°	19.46°	50.91	8.65
+2°	23.46°	62.53	7.69
+4°	25.46°	68.60	7.17
+6°	27.46°	74.87	6.65
+8°	29.46°	81.38	6.10

Tabulka 4.1: Cílové hodnoty pro optimalizaci.

■ Optimalizace u_{y2}

Pro vyhodnocení konvergence optimalizace s přímou formulací cílové funkce je jako určující norma (residuum) pro každou iteraci i brán relativní rozdíl

$$Res_{u_y}^i = \frac{|u_{y2}^i - u_{y2tar}|}{|u_{y2}^0|}. \quad (4.18)$$

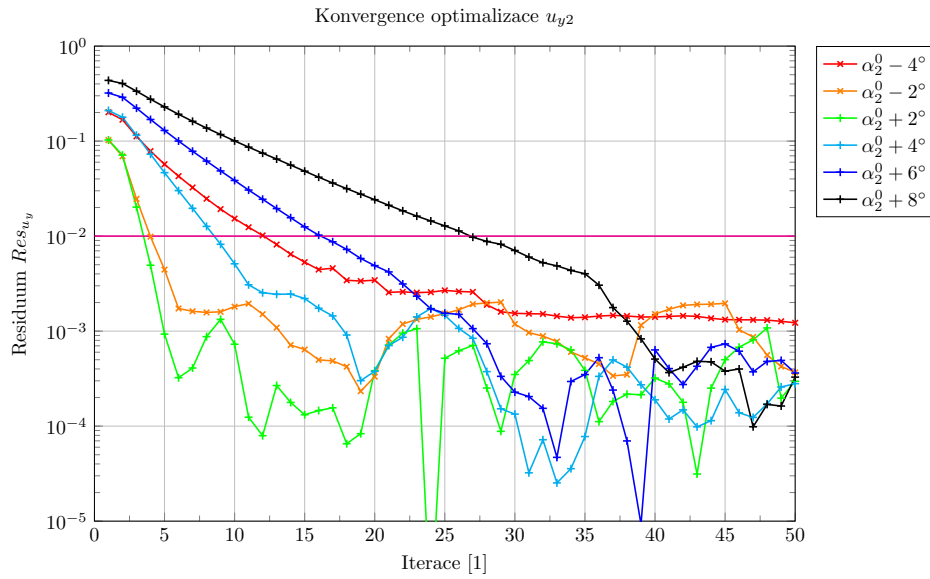
Residua pro všechny cílové hodnoty v průběhu optimalizačních cyklů jsou ukázány na obrázku 4.4. Optimalizaci pak považujeme za zkonvergovanou, pokud residuum klesne pod jedno procento. Na obrázku 4.4 je hranice konvergence naznačena růžovou čarou.

Jelikož ale ve výsledku chceme optimalizovat hodnotu výstupního úhlu, je rozumné se dívat i na residuum vzhledem k α_2 , tedy na

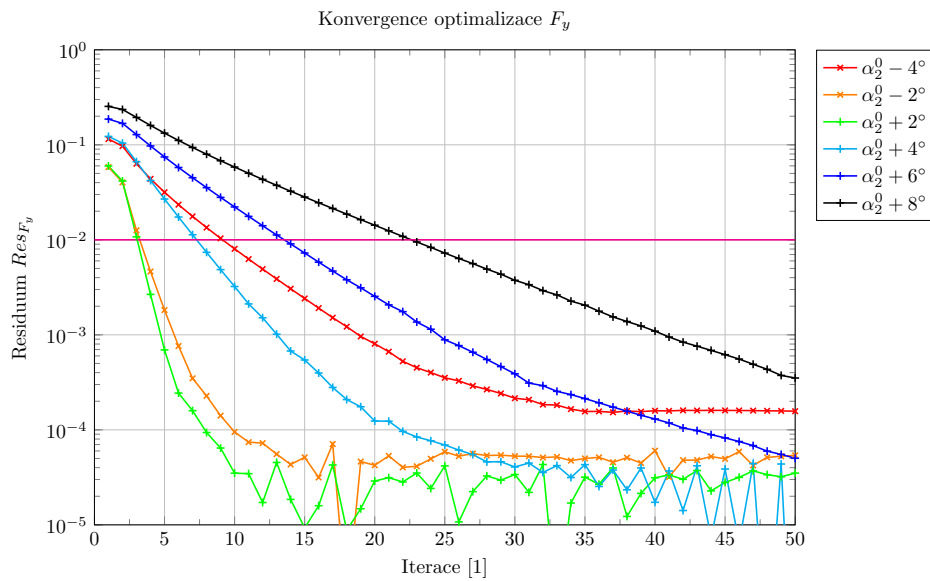
$$Res_{\alpha}^i = \frac{|\alpha_2^i - \alpha_{2tar}|}{|\alpha_2^0|}. \quad (4.19)$$

Graf residuí Res_{α}^i na obrázku 4.6 je samozřejmě pro přímou formulaci velice podobný grafu residua samotné optimalizace, neboť α_2 se z u_{y2} přímo vyhodnocuje podle vztahu 4.1. Teoreticky by měly být grafy naprosto stejné, neboť u_{x2} by mělo být podle vztahu 4.3 pro všechny případy stejné. Vlivem chyb diskretizace tomu tak úplně není a grafy se tak pro malé hodnoty residua drobně liší.

Dále lze z grafu residuí vypočítat, že čím větší je rozdíl $\Delta\alpha_2 = \alpha_{2tar} - \alpha_2^0$, tím déle trvá optimalizaci zkonvergovat. To samozřejmě odpovídá očekávání. Při porovnání rychlosti konvergence optimalizace do záporných versus do kladných úhlu výstupního proudu lze říci, že optimalizovat do kladných úhlů je pro takto nastavený optimalizační algoritmus jednodušší. Optimalizace do kladných úhlů odpovídá napřimování tvaru lopatky, kdežto při optimalizaci do záporných úhlů je pro dosažení cílové hodnoty úhlu výstupního proudu potřeba lopatku ohnout více. Tento zmiňovaný rozdíl lze nejlépe vidět při porovnání případů $\alpha_{2tar} = \pm 4^\circ$. Pro kladný úhel $+4^\circ$ je optimální řešení nalezeno už v 9. iteraci, kdežto při ohýbání lopatky k dosažení záporného $\Delta\alpha$ je potřeba optimalizačních cyklů 12.



Obrázek 4.4: Průběh residua $Res_{u_y}^i$ 4.18 pro přímou formulaci cílové funkce J v průběhu iteračních cyklů. Hranice optimálního řešení 1% je naznačena růžovou čarou.



Obrázek 4.5: Průběh residua $Res_{F_y}^i$ 4.20 pro nepřímou formulaci cílové funkce J v průběhu iteračních cyklů. Hranice optimálního řešení 1% je naznačena růžovou čarou.

■ Optimalizace F_{yP}

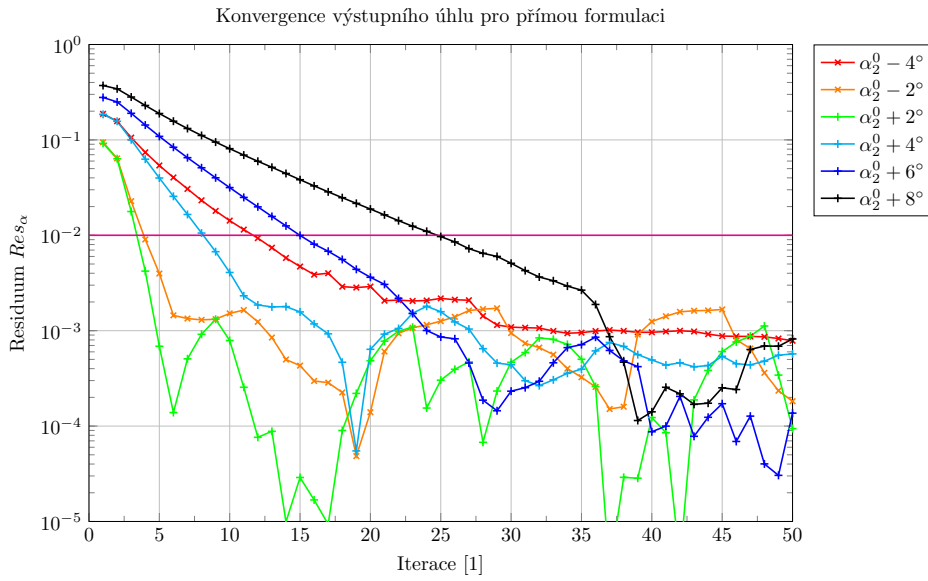
Pro vyhodnocení optimálnosti řešení pro nepřímou formulaci cílové funkce je jako residuum pro každou iteraci i brán relativní rozdíl

$$Res_{F_y}^i = \frac{|F_{yP}^i - F_{yPtar}|}{|F_{yP}^0|}. \quad (4.20)$$

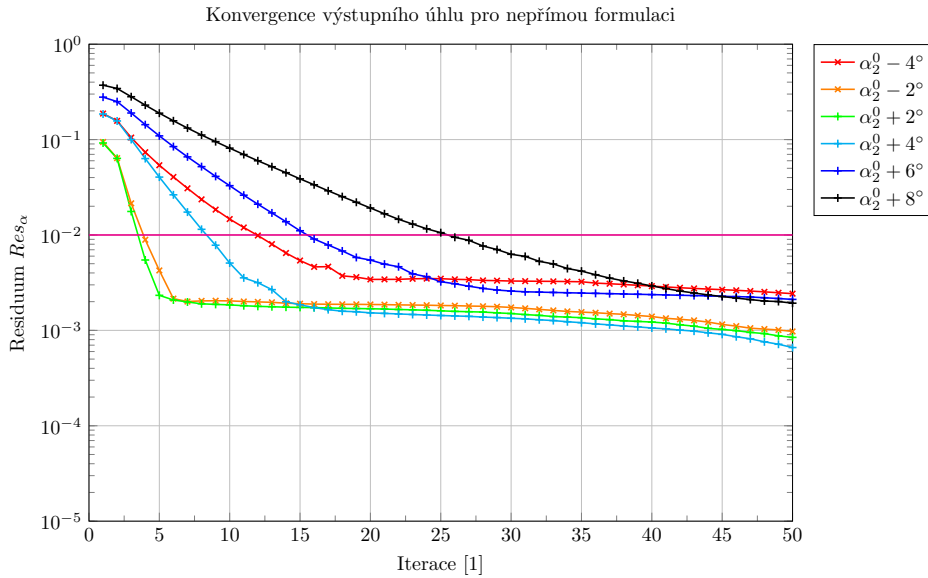
Stejně jako pro přímou formulaci bereme hranici optimálního řešení jedno procento. Residua pro všechny cílové hodnoty v průběhu optimalizačních cyklů pro nepřímou formulaci cílové funkce jsou ukázány na obrázku 4.5 s naznačenou hranicí konvergence.

V porovnání s grafem konvergence 4.4 pro přímou formulaci cílové funkce průběh residua 4.5 o poznání méně osciluje. To si lze vysvětlit tím, že pro vyhodnocení cílové funkce pro sílu (a jejich derivací) jsou použity všechny primární proměnné a tedy se využívá více informací z proudového pole pro předpověď gradientu. Na základě tohoto pozorování lze s opatrností usoudit, že optimalizace na cílovou sílu je značně stabilnější než optimalizace na cílovou výstupní rychlost. Zároveň optimalizační algoritmus zkonverguje v méně iteracích než tomu bylo pro přímou formulaci cílové funkce. Například pro případ $\Delta\alpha = +8^\circ$ stačilo o pět iterací méně. V tomto smyslu by bylo zajímavé i porovnání průběhu residuí jako funkce výpočetního času. V současné konfiguraci optimalizačních algoritmů byl celkový čas výpočtu (pro 50 iterací) vždy nižší pro přímou formulaci. Ve zmiňovaném případě $\Delta\alpha = +8^\circ$ byl celkový výpočetní čas pro přímou formulaci 2265 s a pro nepřímou formulaci 2927 s.

Optimalizaci na cílovou sílu používáme k nepřímému dosažení žádaného výstupního úhlu proudu. Proto je důležitější podívat se na graf konvergence ve smyslu vztahu 4.19, který je na obrázku 4.7. Nejmarkantnějším rozdílem v porovnání s grafem 4.6 je průběh residua pod hranicí konvergence, který je opět hladší. Nejdůležitější srovnání je ale v počtu iterací potřebných ke zkonvergování α_2 . Na rozdíl od porovnání cílových residuí $Res_{u_y}^i$ a $Res_{F_y}^i$ je počet potřebných iterací pro všechny případy $\Delta\alpha_2$ stejný. Jak bylo ale zmíněno v předchozím odstavci, optimalizace s přímou formulací cílové funkce je ve všech případech rychlejší. Na základě tohoto porovnání lze bezpečně říci, že pro případ optimalizace lopatky GHH 1-S1 na takto kvalitní síti nepřináší nepřímá formulace žádné benefity. Pro jiné případy tomu tak ovšem být nemusí, neb z průběhu cílových residuí 4.18 a 4.20 lze usoudit, že optimalizace na cílovou sílu je mnohem stabilnější, což může hrát ve složitějších aplikacích důležitou roli.



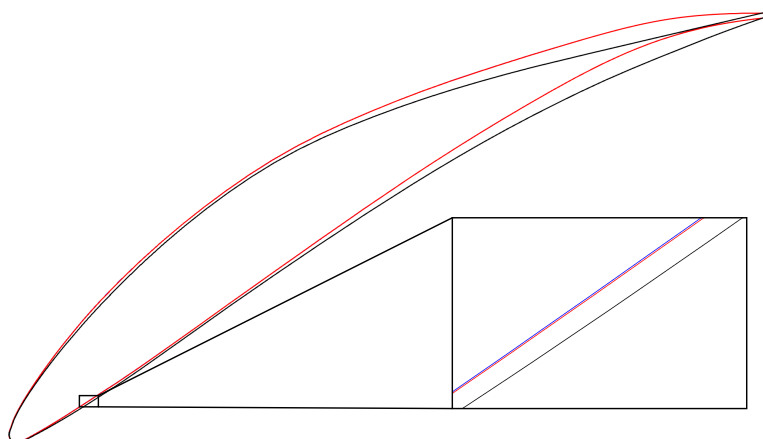
Obrázek 4.6: Průběh residua Res_α^i 4.19 pro přímou formulaci cílové funkce J v průběhu iteračních cyklů. Hranice optimálního řešení 1% je naznačena růžovou čarou.



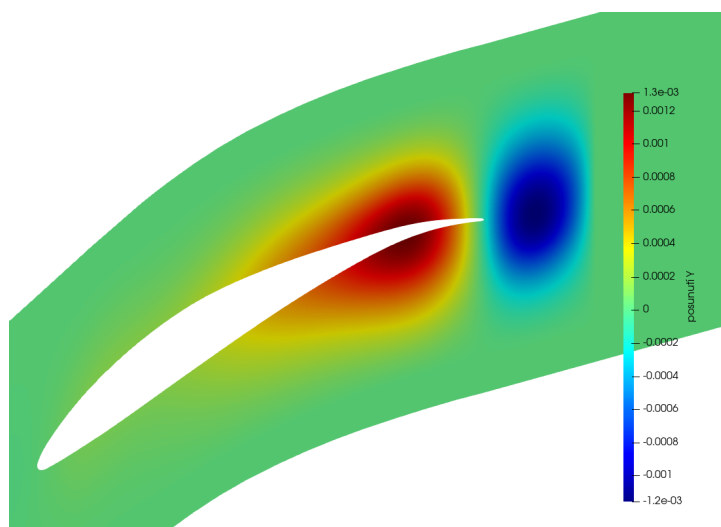
Obrázek 4.7: Průběh residua Res_α^i 4.19 pro nepřímou formulaci cílové funkce J v průběhu iteračních cyklů. Hranice optimálního řešení 1% je naznačena růžovou čarou.

■ Srovnání pro $\Delta\alpha_2 = -4^\circ$

Porovnání tvaru lopatky je provedeno mezi původním tvarem profilu a profilem z optimalizace zkorvergované ve smyslu Res_α^i . Pro $\alpha_2 = -4^\circ$ to je profil ze 12. iterace optimalizačního algoritmu. Hodnoty veličin na obrázcích jsou v SI jednotkách.



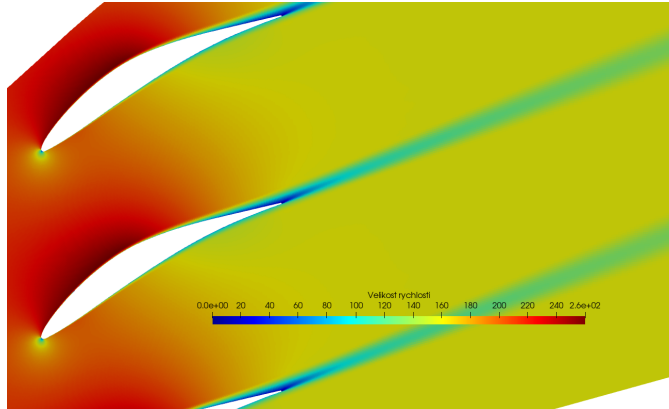
Obrázek 4.8: Obrys tvaru lopatky před optimalizací (černě) a po optimalizaci s přímou (modře) a nepřímou (červeně) formulací cílové funkce. Červená křivka na většině obrázku překrývá modrou.



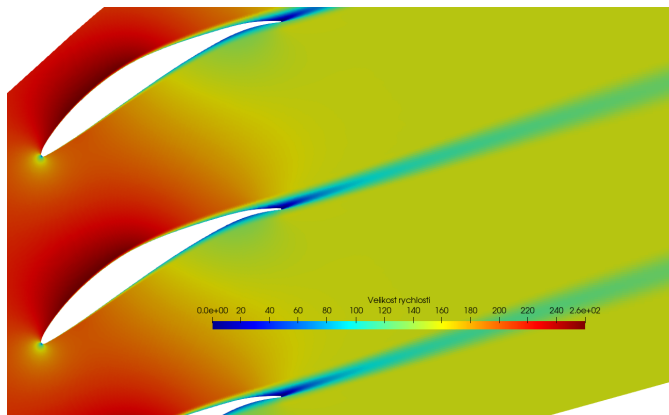
Obrázek 4.9: Vizualizace pole posunu bodů sítě ve směru osy y .

Zajímavé je srovnání optimalizovaných tvarů lopatky získaných přímou a nepřímou formulací. Jak je vidět na obrázku 4.8, tvar optimalizovaných profilu je v podstatě totožný. Obě formulace pohybují především s částí lopatky v

blízkosti odtokové hrany jak je vidět z obrázku 4.9. To dává smysl, neboť koncová část lopatky má často mnohem větší vliv na směr proudu na výstupu než část u náběžné hrany.

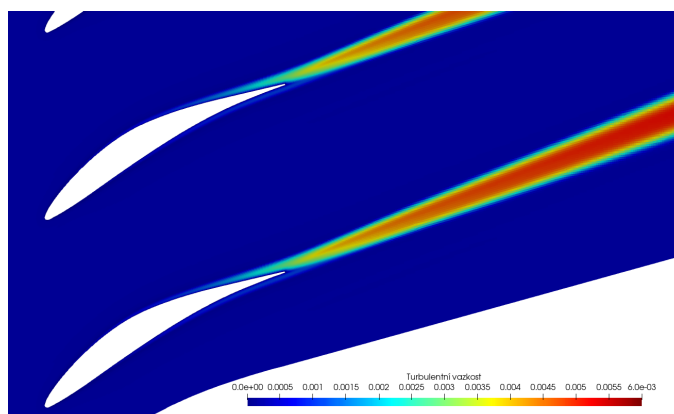


Obrázek 4.10: Pole velikosti vektoru rychlosti $\|\mathbf{u}\|$ pro původní profil lopatky.

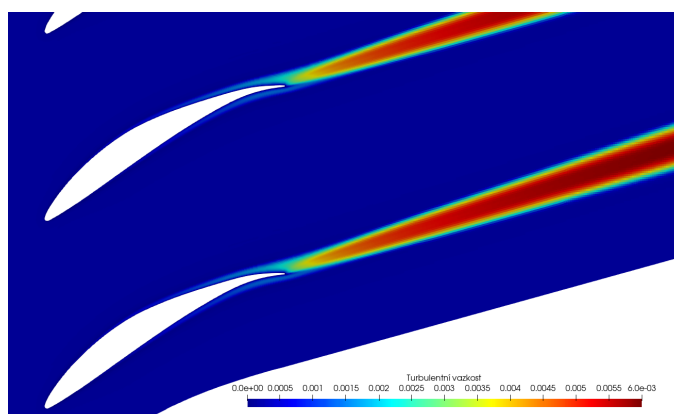


Obrázek 4.11: Pole velikosti vektoru rychlosti $\|\mathbf{u}\|$ pro optimalizovaný profil lopatky.

Pro detailnější představu o vlivu změny tvaru lopatky je nyní uvedeno několik obrázků. Nejprve lze porovnat pole velikosti rychlosti pro původní 4.10 a optimalizovaný 4.11 tvar lopatky. Za koncem lopatky lze vidět pruh nižší velikosti rychlosti, což je úplav. Směr úplavu vizuálně naznačuje směr proudu na výstupu. Při porovnání stavu před a po lze jasně vidět, že směr úplavu změnil. Přesněji se proud ohnul dolů, což odpovídá zmenšení úhlu proudu na výstupu. Zároveň je u optimalizované lopatky vidět větší oblast odtržení proudu u odtokové hrany. Tento efekt potvrzuje i porovnání pole přídavné turbulentní vazkosti ν_t na obrázcích 4.12 a 4.13. Maximální velikost přídavné vazkosti v oblasti úplavu za optimalizovanou lopatkou je vyšší a úplav jako takový je širší. To ve výsledku vede na větší ztráty, což dokládá například i zvýšení velikosti síly působící na lopatku ve směru osy x . Optimalizovaná



Obrázek 4.12: Pole přídavné turbulentní vazkosti ν_t pro původní profil lopatky $\alpha_2 = \alpha_2^0$.



Obrázek 4.13: Pole přídavné turbulentní vazkosti ν_t pro optimalizovaný profil lopatky.

lopatka tedy splňuje cílové ohnutí proudu, z hlediska účinnosti ale tento tvar optimální není.

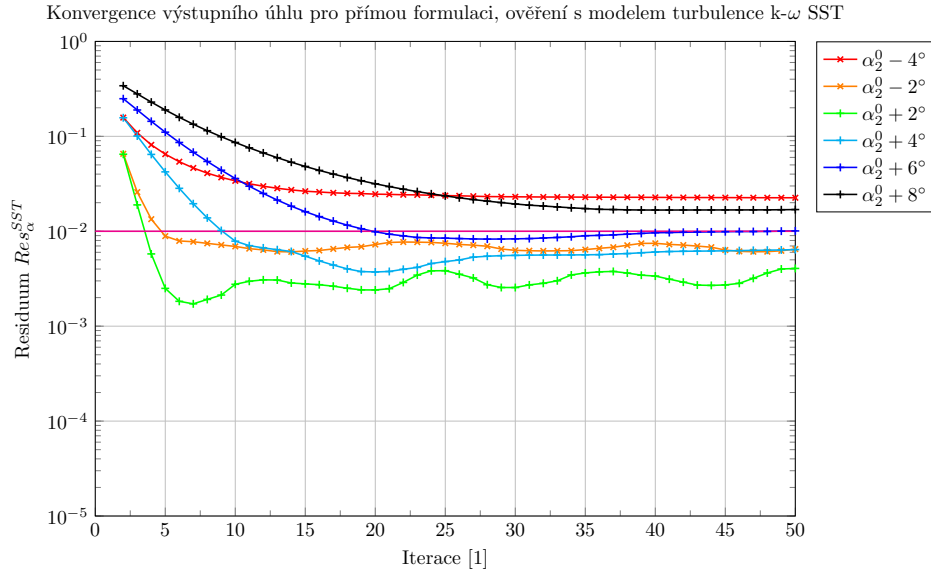
4.3.6 Ověření vhodnějším modelem turbulence

Pro ověření výsledků optimalizace byl zvolen model $k-\omega$ SST, který je pro simulace v kompresorech i lopatkových mřížích vhodnější než Spalartův-Allmarasův model. Nejdříve budou ukázány grafy residuí a následně bude podrobněji rozebrán případ $\Delta\alpha = -4^\circ$.

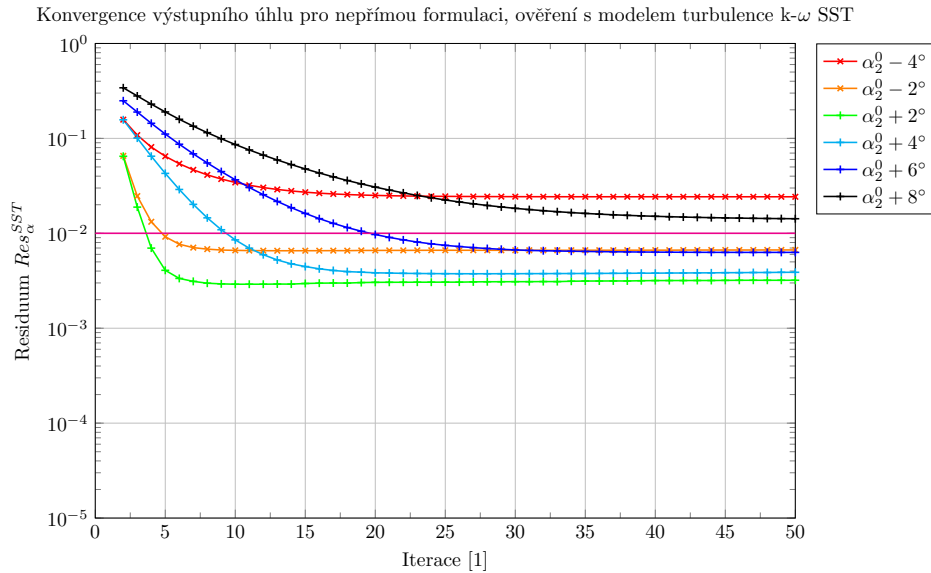
Pro vyhodnocení residua Res_α^{iSST} (horní index SST značí vyhodnocení ze simulace s modelem $k-\omega$ SST) na obrázcích 4.14 a 4.15 je na rozdíl od Res_α^i

definovaném rovnicí 4.19 použito pro vyhodnocení α_2^{0SST} namísto α_2^0 , tedy

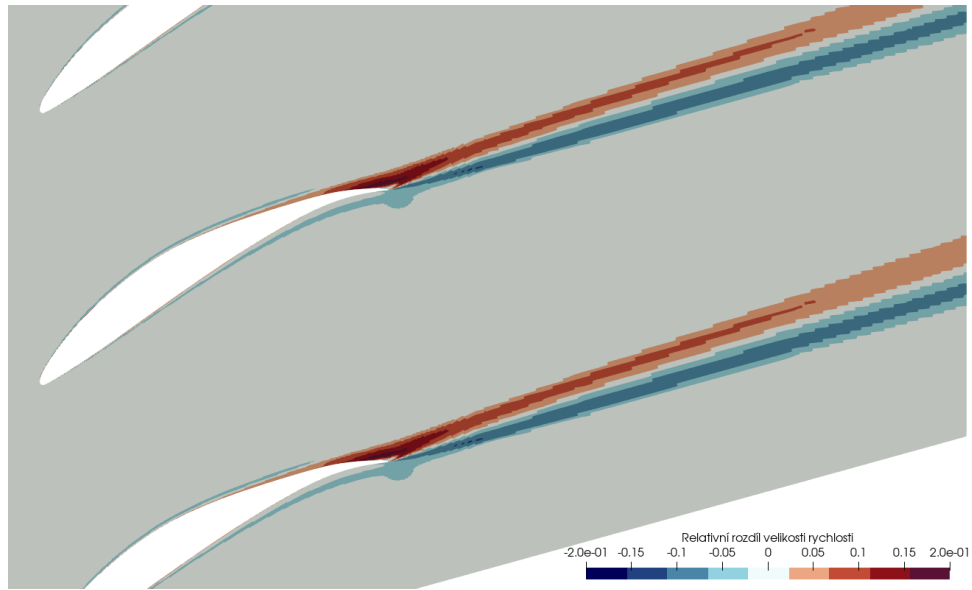
$$Res_{\alpha}^{iSST} = \frac{|\alpha_2^{iSST} - (\alpha_2^{0SST} + \Delta\alpha_2)|}{|\alpha_2^{0SST}|}. \quad (4.21)$$



Obrázek 4.14: Průběh residua Res_{α}^{iSST} 4.19 pro přímou formulaci cílové funkce J v průběhu iteračních cyklů. Hranice optimálního řešení 1% je naznačena růžovou čarou. Výpočty používají model turbulence k - ω SST.



Obrázek 4.15: Průběh residua Res_{α}^{iSST} 4.19 pro nepřímou formulaci cílové funkce J v průběhu iteračních cyklů. Hranice optimálního řešení 1% je naznačena růžovou čarou. Výpočty používají model turbulence k - ω SST.



Obrázek 4.16: Rozdíl velikosti rychlosti pro simulaci se Spalartovým-Allmarasovým modelem a s modelem $k-\omega$ SST. V červené oblasti předpovídá simulace $S-A$ vyšší velikost rychlosti, v modré oblasti pak menší, než simulace SST.

Na základě grafů průběhu residua 4.14 a 4.15 lze říci, že přestože se v rámci optimalizačního cyklu používá jednodušší model turbulence, tak nový tvar lopatky funguje pro změnu úhlu $\Delta\alpha \in \langle -2^\circ, +4^\circ \rangle$ i v případě simulace s vhodnějším modelem. Pro větší změny úhlu, konkrétně -4° a $+8^\circ$, je ale natočení proudu nesprávné. Pro záporné změny úhlu je tedy předpověď Spalartova-Allmarasova modelu horší než pro kladné změny úhlu. Částečné vysvětlení tohoto rozdílu plyne z obrázku 4.16, který ukazuje relativní rozdíl velikosti rychlosti předpovídané Spalartovým-Allmarasovým modelem turbulence ($S-A$) a modelem $k-\omega$ SST (SST), podle předpisu

$$\frac{\|\mathbf{u}^{S-A}\| - \|\mathbf{u}^{SST}\|}{\|\mathbf{u}_1\|}. \quad (4.22)$$

Největší rozdíl je v blízkosti odtokové hrany na podtlakové straně, kde dochází k odtržení proudu. Simulace se Spalartovým-Allmarasovým modelem zde předpovídá mnohem větší velikost rychlosti a lze tedy usoudit, že nezachycuje odtržení správným způsobem. Z obrázku 4.16 je mimo jiné vidět, že výpočet s modelem $k-\omega$ SST předpovídá, že změna úhlu proudu bude větší než žádané 4° . Z grafu průběhu residua 4.14 nešlo říct, jestli je podle $k-\omega$ SST ohnutí proudu větší či menší, protože rozdíl v čitateli 4.21 je v absolutní hodnotě.

Kapitola 5

Závěr

V první části této práce je představen teoretický základ numerického modelování problému proudění pomocí metody konečných objemů se zaměřením na proudění tekutiny s konstantní hustotou. Dále je rozebrán základ matematické teorie okolo problému optimalizace a jeho řešení sdruženou metodou. Pro potřeby aplikace je zmíněn i způsob manipulace s výpočetní sítí a shrnutí obecného optimalizačního cyklu.

V druhé části je představena metodika využití optimalizace tvaru lopatky kompresorové mříže sdruženou metodou za pomoci knihovny OpenFOAM v2106 a je uveden základní popis problematiky simulací proudění v kompresorových mřížích. Geometrie zkoumané mříže je vytvořena pomocí souřadnic lopatky GHH 1-S1 publikované v [1].

Přínosem v části aplikace je zejména odvození a implementace nových cílových funkcí pro sdruženou metodu optimalizace. Obě nové funkce mají za cíl měnit směr proudu na výstupu z kompresorové mříže. První cílová funkce optimalizuje velikost rychlosti na výstupu ve směru osy y , takzvaná přímá formulace cílové funkce. Druhá cílová funkce optimalizuje velikost síly působící na lopatku ve směru osy y , takzvaná nepřímá formulace. Hodnoty cílové rychlosti a cílové síly jsou voleny tak, aby odpovídaly dané změně úhlu výstupního proudu $\Delta\alpha_2$. Záminkou pro následné srovnání těchto formulací je, že přímá formulace pracuje jen s jednou primární proměnnou a je definovaná integrálem pouze po výstupní hranici. Nepřímá formulace definuje cílovou funkci pomocí integrálu přímo na lopatce, tedy na měněné geometrii. Navíc pro vyhodnocení působící síly jsou použity všechny proměnné primárních rovnic a využívá tedy více informací z proudového pole.

Výsledky optimalizace získané pomocí obou formulací cílové funkce jsou následně srovnány. Z porovnání průběhů residuí v sekci 4.3.5 byly vyvozeny následující závěry:

1. Obě metody potřebují stejný počet iterací pro dosažení cílového úhlu výstupního proudu. Přímá formulace vede ale na znatelně nižší časy výpočtu.
2. Průběh residuí naznačuje, že nepřímá formulace je stabilnější. To by mohlo hrát roli pro složitější aplikace, ale v rámci této práce se na problémy se stabilitou vlivem formulace cílové nenarazilo.
3. Přímá formulace je schopna zkonvergovat blíže cílovému úhlu výstupního proudu než nepřímá. V rámci celkové přesnosti numerických simulací zatížených chybami diskretizace, ale mají vylepšení v rámci desetin procent malou důvěryhodnost.

V rámci optimalizačních cyklů byl použit Spalartův-Allmarasův model turbulence. Ten byl ale původně vyvinut pro vnější aerodynamiku, konkrétně obtékání profilu křídla ve volném proudu. Proto byly výsledky dodatečně ověřeny simulací s modelem $k-\omega$ SST, který je pro vnitřní aerodynamiku turbostrojů vhodnější. V rámci malých změn výstupního úhlu $\Delta\alpha_2 \in \langle -2^\circ, +4^\circ \rangle$ splňují získané tvary lopatky cílovou změnu výstupního úhlu s přesností jednoho procenta. Ve smyslu tohoto ověření lze tedy říci, že navržená metodika má smysl, přestože využívá méně vhodného modelu turbulence.

Navázat na publikované postupy lze vícero způsoby. Výsledky optimalizace by šlo verifikovat simulací úplných Navierových-Stokesových rovnic pro stlačitelnou tekutinu. Machovo číslo na vstupu mříže GHH 1-S1 $M_1 = 0.62$ je přece jen blízko hranice, kdy se ještě dá předpokladu konstantní hustoty věřit. Pro špatné úhly náběhu byla již v původní publikaci [1] zjištěna přítomnost rázových vln. Nejlepší by ale bylo validovat výsledky experimentálně.

V rámci pokroku simulačních postupů se pak nabízí odvodit sdružené rovnice i pro pokročilejší modely turbulence než Spalar-Allmaras. Odvození takových rovnic je ale zdlouhavý proces náchylný k chybám, ale možné to je, jak ukazuje například [45]. Pro aplikaci na kompresorové mříže či dokonce na trojrozměrnou optimalizaci geometrie kompresorového stupně by se zajisté vyplatilo odvodit a implementovat sdruženou metodu pro úplné Navier-Stokesovy rovnice pro proudění tekutiny s nekonstantní hustotou.



Přílohy

Příloha A

Seznam použitých symbolů a zkratk

\approx	Přibližně
\doteq	Zaokrouhleně
α_1, α_2	Úhel proudu na vstupu do, respektive výstupu z kompresové mříže
α_r	Relaxační koeficient soustavy lineárních rovnic
\mathbf{A}	Matice soustavy lineárních rovnic
β	Relaxační koeficient pro explicitní relaxaci
\mathbf{b}	Pravá strana soustavy lineárních rovnic
c	Rychlost zvuku
δ_w	Variace podle veličiny w
dS	Element hranice Γ
dV	Element objemu Ω
δ_{ij}	Kroneckerovo delta
$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \frac{\partial}{\partial x_i}$	Parciální derivace podle vektorové veličiny \mathbf{x} , x_i
$\frac{\partial}{\partial x}$	Parciální derivace podle skalární veličiny x
$\mathbb{F}(\mathbf{W})$	Tenzor hustoty toku vektorové veličiny \mathbf{W}
$\mathbb{F}_D(\mathbf{W})$	Difuzivní část tenzoru hustoty toku vektorové veličiny \mathbf{W}

$\mathbb{F}_K(\mathbf{W})$	Konvektivní část tenzoru hustoty toku vektorové veličiny \mathbf{W}
$\mathbf{F}_D(W)$	Difuzivní část vektoru hustoty toku veličiny W
$\mathbf{F}_K(W)$	Konvektivní část vektoru hustoty toku veličiny W
$\mathbf{F}(W)$	Vektor hustoty toku veličiny W
f	Část hranice Γ_j , stěna
F_{yP}	Celková síla působící na lopatku ve směru osy y
\mathbf{f}_e	Vektor vnější síly vztážený k jednotce hmotnosti
Γ	Uzavřená hranice kontrolního objemu
$\Gamma_1, \Gamma_P, \Gamma_2$	Hranice vstupu do kompresové mříže, hranice lopatky a hranice výstupu ze mříže
Γ_j	Uzavřená hranice konečného objemu
g	Návrhové parametry
\mathbb{I}	Jednotkový tenzor/matice
$J, J(\phi, g)$	Cílová funkce/funkcionál
J_Γ	Hraniční část cílové funkce odpovídající předpisu 3.27
J_Ω	Objemová část cílové funkce odpovídající předpisu 3.27
κ	Koeficient difuzivity
k	Turbulentní kinetická energie
L	Rozšířená cenová funkce/funkcionál
L_t	Turbulentní směřovací délka
M	Machovo číslo
MKO	Metoda konečných objemů
\mathbf{n}_f	Jednotkový normálový vektor stěny f
\mathbf{n}, n_i	Vektor jednotkové normály
ν	Kinematická viskozita
ν_t	Turbulentní viskozita/vazkost
$\tilde{\nu}$	Spalartova-Allmarasova turbulentní proměnná
NS	Navierovy-Stokesovy (rovnice)
Ω	Kontrolní objem

ω	Míra turbulentní disipace
Ω_j	Konečný objem, buňka
ϕ	Primární proměnné
ϕ_f	Objemový tok stěnou f
p_1, p_2	Kinematický tlak na vstupu do, respektive výstupu z kompresové mříže
p	Kinematický tlak $p = \frac{p_s}{\rho}$ [$\text{m}^2 \text{s}^{-2}$]
p_s	Statický tlak [$\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}$]
PDR	Parciální diferenciální rovnice
$\mathbf{Q}_\Gamma(\mathbf{W})$	Povrchový zdroj vektorové veličiny \mathbf{W}
$\mathbf{Q}_\Omega(\mathbf{W})$	Objemový zdroj vektorové veličiny \mathbf{W}
$\mathbf{Q}_\Gamma(W)$	Povrchový zdroj veličiny W
q	Sdružený tlak
$Q_\Omega(W)$	Objemový zdroj veličiny W
ρ	Hustota tekutiny
$R, R(\phi, g)$	Vazební rovnice
$\text{SWF}_{\nu_t}(\mathbf{u})$	Zkratka anglického <i>Spalding Wall Function</i> [40]
SA	Spalartův-Alamarsův (model turbulence) [31]
SIMPLE	Zkratka anglického <i>Semi-implicit pressure linked equations</i> [26]
SST	Zkratka anglického <i>Shear Stress Transport</i> [2, 3]
τ_{ij}, τ	Tenzor napětí
t	Čas
$\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2$	Vektor rychlosti na vstupu do, respektive výstupu z kompresové mříže
\mathbf{u}, u_i	Vektor rychlosti
\mathbf{v}	Sdružená rychlost
\mathbf{W}	Obecná vektorová veličina
W	Obecná skalární veličina
W_C, W_N	Střední hodnota veličiny W v buňce C , respektive sousední buňce N

A. Seznam použitých symbolů a zkratk

W_f	Hodnota veličiny W ve středu stěny f
\mathbf{x}_f	Souřadnice středu stěny f
ξ	Sdružené proměnné



Příloha B

Literatura

- [1] W. Steinert, B. Eisenberg, and H. Starcken, “Design and testing of a controlled diffusion airfoil cascade for industrial axial flow compressor application,” in *Turbo Expo: Power for Land, Sea, and Air*, vol. 79047, p. V001T01A044, American Society of Mechanical Engineers, 1990.
- [2] F. R. Menter, “Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications,” *AIAA journal*, vol. 32, no. 8, pp. 1598–1605, 1994.
- [3] F. R. Menter, M. Kuntz, and R. Langtry, “Ten years of industrial experience with the sst turbulence model,” *Turbulence, heat and mass transfer*, vol. 4, no. 1, pp. 625–632, 2003.
- [4] S. Jafari, K. C. Kwok, F. Safaei, and B. Kosasih, “Aerodynamic analysis of a linear cascade wind turbine,” *Wind Energy*, vol. 21, no. 11, pp. 1141–1154, 2018.
- [5] D. Hobbs and H. Weingold, “Development of controlled diffusion airfoils for multistage compressor application,” in *Turbo Expo: Power for Land, Sea, and Air*, vol. 79511, p. V001T01A058, American Society of Mechanical Engineers, 1983.
- [6] P. Dalbert, B. Ribi, T. Kmeci, and M. Casey, “Radial compressor design for industrial compressors,” *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science*, vol. 213, no. 1, pp. 71–83, 1999.
- [7] N. A. Cumpsty, “Compressor aerodynamics,” *Longman Scientific & Technical*, 1989.

- [23] A. Harten, “High resolution schemes for hyperbolic conservation laws,” *Journal of computational physics*, vol. 49, p. 357–393, 1983.
- [24] A. Harten, “On a class of high resolution total-variation-stable finite-difference schemes,” *SIAM Journal on Numerical Analysis*, vol. 21, pp. 1–23, 1984.
- [25] S. K. Godunov, “A difference scheme for numerical solution of discontinuous solution of hydrodynamic equations,” *Math. Sbornik*, vol. 47, pp. 271–306, 1959.
- [26] S. V. Patankar and D. B. Spalding, “A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows,” in *Numerical prediction of flow, heat transfer, turbulence and combustion*, pp. 54–73, Elsevier, 1983.
- [27] D. A. Anderson, J. C. Tannehill, and R. H. Pletcher, *Computational fluid mechanics and heat transfer*. Taylor & Francis, 1997.
- [28] J. P. Van Doormaal and G. D. Raithby, “Enhancements of the simple method for predicting incompressible fluid flows,” *Numerical heat transfer*, vol. 7, no. 2, pp. 147–163, 1984.
- [29] Y. Saad, *Iterative methods for sparse linear systems*. SIAM, 2003.
- [30] H. G. Weller, G. Tabor, H. Jasak, and C. Fureby, “A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques,” *Computers in physics*, vol. 12, no. 6, pp. 620–631, 1998.
- [31] P. Spalart and S. Allmaras, “A one-equation turbulence model for aerodynamic flows,” in *30th aerospace sciences meeting and exhibit*, p. 439, 1992.
- [32] M. R. Hestenes, E. Stiefel, *et al.*, *Methods of conjugate gradients for solving linear systems*, vol. 49. NBS Washington, DC, 1952.
- [33] R. Fletcher, “Practical methods of optimization john wiley & sons,” *New York*, vol. 80, p. 4, 1987.
- [34] J. B. Rosen, “The gradient projection method for nonlinear programming. part i. linear constraints,” *Journal of the society for industrial and applied mathematics*, vol. 8, no. 1, pp. 181–217, 1960.
- [35] D. Papadimitriou and K. Giannakoglou, “A continuous adjoint method with objective function derivatives based on boundary integrals, for inviscid and viscous flows,” *Computers & Fluids*, vol. 36, no. 2, pp. 325–341, 2007.
- [36] A. Zymaris, D. Papadimitriou, K. Giannakoglou, and C. Othmer, “Continuous adjoint approach to the spalart–allmaras turbulence model for incompressible flows,” *Computers & Fluids*, vol. 38, no. 8, pp. 1528–1538, 2009.

- [37] C. Othmer, “A continuous adjoint formulation for the computation of topological and surface sensitivities of ducted flows,” *International journal for numerical methods in fluids*, vol. 58, no. 8, pp. 861–877, 2008.
- [38] E. Papoutsis-Kiachagias, N. Magoulas, J. Mueller, C. Othmer, and K. Giannakoglou, “Noise reduction in car aerodynamics using a surrogate objective function and the continuous adjoint method with wall functions,” *Computers & Fluids*, vol. 122, pp. 223–232, 2015.
- [39] G. K. Giannakoglou K.C., Papoutsis-Kiachagias E.M., *adjointOptimizationFoam, an OpenFOAM-based optimisation tool*.
- [40] D. Spalding, “A single formula for the “law of the wall”,” 1961.
- [41] G. Kalitzin, G. Medic, G. Iaccarino, and P. Durbin, “Near-wall behavior of rans turbulence models and implications for wall functions,” *Journal of Computational Physics*, vol. 204, no. 1, pp. 265–291, 2005.
- [42] C. Rumsey, “The menter shear stress transport turbulence model,” *Web Article*, 2013.
- [43] A. Tater, P. Mačák, P. Kovář, T. Kaňka, and T. Vampola, “Mesh suitability for cfd simulations performed on axialcompressor airfoil cascades,” *Journal of the Serbian Society for Computational Mechanics*, předloženo 2021.
- [44] J. Nocedal and S. Wright, *Numerical optimization*. Springer Science & Business Media, 1999.
- [45] I. Kavvadias, E. Papoutsis-Kiachagias, G. Dimitrakopoulos, and K. Giannakoglou, “The continuous adjoint approach to the k- ω sst turbulence model with applications in shape optimization,” *Engineering Optimization*, vol. 47, no. 11, pp. 1523–1542, 2015.