

Artturi Karjalainen

NUMEERISEN VIRTAUSLASKENNAN LUOTETTAVUUS JA KÄYTETTÄVYYS

Kandidaatintyö
Konetekniikka, Tekniikan ja luonnontieteiden tiedekunta
Mikko Vanhatalo
Toukokuu 2021

TIIVISTELMÄ

Artturi Karjalainen: Numeerisen virtauslaskennan luotettavuus ja käytettävyys (Reliability and usability of computational fluid dynamics)

Tampereen yliopisto

Konetekniikan tutkinto-ohjelma

Kandidaatintyö

Toukokuu 2021

Tässä kandidaatintyössä tehdään nykytila-analyysi numeeriselle virtauslaskennalle eli CFD:lle (computational fluid dynamics). Pääpaino työssä on numeerisen virtauslaskennan luotettavuuden ja siihen vaikuttavien tekijöiden tutkiminen. Aiheen tutkimiseen käytettiin kirjallisuusselvitystä ja lähteiden hankinnassa käytettiin Tampereen yliopiston kirjaston Andor -järjestelmää.

Työ alkoi numeeriseen virtauslaskentaan tutustumisella. Aluksi siis selvitetään, mitä numeerisen virtauslaskennan käyttö käytännössä on, ja selvitetään mitä virtauslaskennassa käytettävä perusteoria pitää sisällään. Työssä esitellään joitakin numeerisen virtauslaskennan ohjelmistoja ja yleisimpiä virtausmalleja.

Numeerisen virtauslaskennan luotettavuutta tarkastellaan yleisimpien epävarmuustekijöiden näkökulmasta ja kahdelle yleiselle virtausmallille tehdään tarkempi tarkastelu niiden epävarmuustekijöistä. Yleisimpiä epävarmuustekijöitä olivat virtausongelman määrittely, laskentaverkosto, lähtötiedot ja rajaehdot sekä virtausmallin varmennus ja tulosten validointi. Virtausmallit, joiden luotettavuutta tarkastellaan erikseen, ovat Reynoldin keskiarvotettu Navierin–Stokesin yhtälö -malli ja Suurten pyörteiden simulaatio -malli.

Lopuksi eri epävarmuustekijät ja niiden yleisimmät virhelähteet on koottu taulukoksi, josta tarkastellaan epävarmuustekijöiden ja yleisimpien virhelähteiden yhteyksiä. Eri lähteiden luettelemista CFD:n hyödyistä ja sovelluskohteista tehtiin myös taulukko, josta tehdään erilaisia päätelmiä. Johtopäätelmissä on vielä koottu koko työn ajatukset yhteen sekä pohdittu, onko numeerisella virtauslaskennalla käyttöä tulevaisuudessa. Työn perusteella voidaan sanoa, että CFD:llä on paljon epävarmuustekijöitä. Ne ottamalla kunnolla huomioon, on CFD:n käytöllä paljon käyttömahdollisuuksia. Esimerkkejä näistä käyttömahdollisuuksista ovat suunnitelmien testaus ja optimointi. Tietokoneiden laskentatehon kasvaessa myös CFD-ohjelmistot parantuvat ja nopeutuvat, joten CFD:n tulevaisuus näyttää valoisalta.

Avainsanat: Numeerinen virtauslaskenta (CFD), luotettavuus, epävarmuustekijä ja virtausmalli ja mahdollisuus

Tämän julkaisun alkuperäisyys on tarkastettu Turnitin OriginalityCheck -ohjelmalla.

SISÄLLYSLUETTELO

1. JOHDANTO	1
2. NUMEERISEN VIRTAUSLASKENNAN PERUSTEITA	3
2.1 Numeerinen virtauslaskenta käytännössä	3
2.2 Virtauslaskennan perusteoria	7
2.3 Matemaattinen malli	8
2.3.1 Malli ja sen numeerinen simulointi	8
2.3.2 Erilaisia malleja	9
3. LUOTETTAVUUS	12
3.1 Virtausongelman määrittely	12
3.2 Yleisiä numeerisen virtauslaskennan ongelmia	13
3.2.1 Laskentaverkoston ongelmakohtat	13
3.2.2 Lähtötietojen ja rajaehtojen määrittely	14
3.2.3 Virtausmallin varmennus ja tulosten vahvistus	15
3.3 Virtauslaskentamallien ongelmakohtia	16
3.3.1 Reynoldsin keskiarvotettu Navierin–Stokesin yhtälöt -malli	16
3.3.2 Suurten pyörteiden simulaatio -malli	17
4. MIKSI KÄYTTÄÄ NUMEERISTA VIRTAUSLASKENTAA	19
4.1 Käyttöesimerkkejä	19
4.1.1 Sekoitussäiliöreaktorin onnettomuuksien simulointi	19
4.1.2 Luisti- ja logiikkaventtiilien painehäviöiden vertailu	21
4.2 Käytettävyys	22
5. JOHTOPÄÄTÖKSET	25
LÄHTEET	27

LYHENTEET JA MERKINNÄT

AHA	anisotropic hierarchical adaptive
CFD	computational fluid dynamics
CPU	central processing unit
DNS	direct numerical simulation
EARSM	explicit algebraic Reynolds stress model
GPU	graphic processing unit
HIREF	hierarchical refinement
LES	large eddy simulation, suurten pyörteiden simulaatio
RANS	Reynolds averaged Navier–Stokes equation
RNG	renormalized group
RNG	Reynolds stress model
SGS	subgrid-scale
SPH	smoothed particle hydrodynamics
SST	shear stress transport
UQ	uncertainty quantification

\bar{I}	neliömomentin tensori
W_f	ulkoisten voimien työ
f_e	tilavuusvoimien summa
q_H	lämmönsiirtymiskerroin
$\bar{\tau}$	leikkausjännityksen tensori
∇	nabla-operaattori
E	fluidin kokonaisenergia
H	kokonaisentalpia
k	turbulenttinen liike-energia
p	paine
t	aika
v	nopeus
ε	turbulenttinen hukka-aste
ρ	aineen tiheys
ω	turbulenssin taajuus
μ	dynaaminen viskositeetti

1. JOHDANTO

Tietokoneiden laskentatehon noustessa myös erilaiset simulointiohjelmit kehittyvät ja niiden tulokset parantuvat. Tämän ansiosta voidaan suorittaa enemmän laskuja, mikä vähentää saatujen tuloksien virheiden määrää. Numeerinen virtauslaskenta eli CFD (computational fluid dynamics) kuuluu näihin kehittyneisiin simulointiohjelmitoihin. Simulointiohjelmit hyötyvät kasvavasta laskentatehosta, sillä siten saadaan tarkempia ja nopeampia tuloksia. Esimerkiksi CFD vaatii erittäin paljon laskuja antaakseen riittävän hyvän ratkaisun, joten laskentatehon kasvu on tärkeässä roolissa CFD-ohjelmistojen kehityksessä. CFD:n tuloksiin vaikuttaa myös moni muu asia kuin vain suoritettujen laskujen määrä, kuten mitä ohjelmistoa tai mitä virtauslaskentamallia käytetään tai miten sitä osataan käyttää.

CFD-ohjelmit ovat kehittyneet jo siihen pisteeseen, että näitä sovelluksia käyttävien suunnittelijoiden ei tarvitse olla virtaustekniikkaan erikoistuneita asiantuntijoita, vaan heille riittää vähäisempikin ymmärrys virtaustekniikasta. Perinteisten testausmenetelmien ja prototyypin ohella CFD on kasvanut niiden varteenotettavaksi kilpailijaksi, koska CFD:n käyttö on suhteellisen halpaa ja nopeaa. Esimerkiksi erillisen prototyypin rakentaminen ja testaaminen tuulitunnelissa on huomattavasti monimutkaisempi ja hitaampi prosessi kuin CFD-simulointi. (Bakker 2001, s. 45–46; Nopens et al. 2012 s. 7403–7404; Al-Baghdadi 2019, s. 3–10) Vaikka CFD on noussut yleiseksi suunnittelu työkaluksi, on sen luotettavuudessa ja tuloksissa vielä parannettavaa.

Tämän työn tavoitteena on tehdä numeeriselle virtauslaskennalle nykytila-analyysi ja työn tutkimusongelmaksi valikoitui, miten CFD soveltuu nykypäivän suunnittelijan työkaluksi. Nykytila-analyysissä keskitytään CFD:n luotettavuuden epävarmuustekijöiden selvittämiseen ja näiden yleisimpien virhelähteiden tutkintaan. CFD:n käytettävyyttä varten kootaan useiden lähteiden pohjalta syitä käyttää CFD:tä ja aloja, jotka hyödyntävät CFD:tä. Esimerkkejä näistä aloista ovat prosessiteollisuus, ilmanvaihtotekniikkaa ja aerodynamiikkaa soveltavat alat.

CFD on aiheena hyvin laaja ja sitä voisi tarkastella monesta eri näkökulmasta, mutta tässä työssä aihetta on rajattu suunnittelijan näkökulmaan. Lähteiden rajauksessa on myös keskitytty mahdollisimman uusiin lähteisiin, koska CFD on kehittynyt paljon viime vuosikymmeninä. Virtauslaskenta liittyy hyvin läheisesti lämmönsiirtoon ja sitä voidaan CFD:llä myös simuloida, mutta sitä osa-aluetta ei tässä työssä tarkastella.

Työssä käsitellään CFD:n luotettavuutta ja mahdollisuuksia. Työ aloitetaan ensin aihetta pohjustamalla eli kerrotaan CFD:n perusidea ja teoriaa, ja mitä simulointien suorittamiseen tarvitaan. Kun aihe on pohjustettu, perehdytään tarkemmin CFD:n luotettavuuteen pienemmissä osakokonaisuuksissa, joita ovat virtausongelman määrittelyvaihe, laskennan mahdolliset ongelmakohdat, tulosten arviointi ja validointi sekä keskitytään muuttaman virtausmallin ominaisiin luotettavuustekijöihin. Seuraavaksi tarkastellaan CFD:n mahdollisuuksia esittelemällä sen käyttökohteita ja -aloja sekä erilaisia ohjelmistoja ja esimerkkejä CFD:n käytöstä, kuten kahden venttiilin painehäviöiden vertailua CFD-analyysillä. Lopuksi esitellään lyhyet johtopäätökset CFD:n nykytila-analyysistä.

Aiheeseen lähdetään perehtymään hyvin yleiseltä tasolta ja edetään aiheen tarkempaan tarkasteluun. Työn tutkimusmenetelmänä toimii kirjallisuustutkimus, koska ajankohtaiset tutkimusraportit ja selvitykset sopivat hyvin tämän työn tutkimusongelman tarkastelemiseksi. Työ pohjautuu tieteellisiin artikkeleihin, konferenssijulkaisuihin ja kirjoihin, ja niiden antamiin tuloksiin. Näiden lähteiden julkaisuaikankohdat on rajattu noin 2000-vuodesta eteenpäin ja lähteitä tarkasteltaessa pitää olla lähdekriittinen, ettei työssä käytetä vanhentunutta tietoa.

2. NUMEERISEN VIRTAUSLASKENNAN PERUSTEITA

Numeerinen virtauslaskenta perustuu tietokoneen ohjelmiston suorittamiin laskuihin, ja käytetyt laskut määräytyvät käytettävän numeerisen mallin mukaan. Erilaisia virtaustilanteita on paljon, joten virtausmalli valitaan aina vaadittavan tilanteen mukaan.

2.1 Numeerinen virtauslaskenta käytännössä

Numeerinen virtauslaskenta on käytännössä sovelluksessa esiintyvien virtausten tutkimista tietokoneohjelmistolla, esimerkiksi putkivirtauksen tutkiminen. Virtausten tutkimiseen suunnittelija tarvitsee vain tietokoneen ja sopivan ohjelmiston. Tietokoneelle asetettuja vaatimuksia ei tarkalleen ottaen ole, mutta suuremmalla laskentateholla simuloinnit saadaan suoritettua nopeammin. Esimerkkejä CFD-ohjelmistoista ovat Ansys Fluent, Solidworks flow ja Openfoam. Lyhyesti kerrottuna Ansys Fluent on pelkkä CFD-ohjelmisto, eli malligeometria pitää tehdä muulla ohjelmistolla tai saada jostain valmiina. Solidworks on enemmän mallinnusohjelma, johon Solidworks flow on vain lisäosa, joten simulointi- tai analysointituloksien tarkkuus ei ole paras mahdollinen, mutta on riittävä tietyllä tasolla. Openfoam on myös pelkkä simulointiohjelmisto, mutta eroaa Ansysistä siinä suhteessa, että se on ilmainen. Openfoamilla saadaan myös hyviä tuloksia, mutta se ei ole kaikista käyttäjäystävällisin ohjelmisto. (Ansys Fluent; OpenFOAM; SOLIDWORKS Flow Simulation)

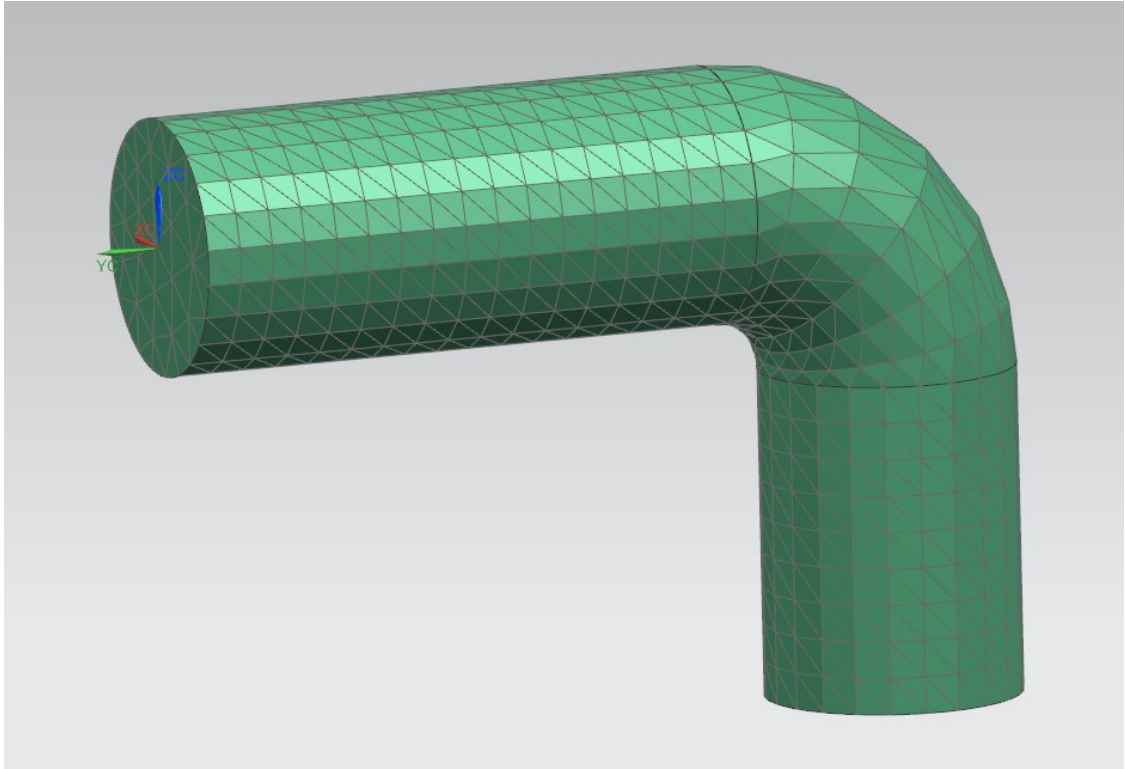
Runchal (2012, s. 523) esittelee artikkelissaan suunnitteluinsinöörin suunnitteluprosessia, kun suunnitellaan jotain ja apuna käytetään CFD:tä. Prosessi alkaa laskentaverkoston rakentamisella annettuun geometriaan. Laskentaverkoston rakentamisen toteuttaa verkostoasiantuntija erityisellä verkoston luontiohjelmistolla. Laskentaverkoston luonnin jälkeen asiantuntija suorittaa esikäsittelyn. Tämän jälkeen alkuvalmistelut ovat valmiit ja päästään itse simulointivaiheeseen, jonka toteuttaa CFD-asiantuntija. Simuloinnin valmistuttua graafinen suunnittelija muokkaa tulokset helposti tulkittavaan muotoon, josta geometrian tuottanut suunnittelija tekee omat johtopäätöksensä. Jos tämä suunnittelija ei ole tyytyväinen saatuihin tuloksiin, edellä esitelty prosessi joudutaan tekemään uudestaan. (Runchal 2012, s. 523)

Vastaavasti Jamshed (2015) esittää CFD:n käytön kolmivaiheiseksi prosessiksi, joka koostuu esikäsittelystä, simuloinnista ja jälkikäsittelystä. Jamshed'in esikäsittelyvaihe siis

yhdistää Runchalin (2012) kaksi ensimmäistä prosessin vaihetta. Vastaavasti Runchalin prosessin kaksi viimeistä vaihetta Jamshed on yhdistänyt yhdeksi jälkikäsittelevävaiheeksi. Jamshedin ja Runchalin prosessit ovat muuten hyvin samanlaisia, mutta suurin ero tulee prosessiin tarvittavien henkilöiden määrästä. Runchalin prosessi tarvitsee viisi eri henkilöä tai asiantuntijaa eli jokaiselle kohdalle tarvitaan oma toteuttaja. Jamshed ei missään vaiheessa puhu eri henkilöistä tai asiantuntijoista, joten käsitykseksi jää, että yksi henkilö tekee prosessin kaikki vaiheet yksin.

Al-baghdadi (2019) tarkastelee artikkelissaan myös CFD:n käyttöprosessia. Hänen näkemyksensä on rakenteellaan samanlainen kuin Runchalin ja Jamshedin, mutta hän on avannut Jamshedin esikäsittelevävaiheen kuuteen pienempään kokonaisuuteen. Nämä osat ovat mallin tavoitteiden määrittäminen, malligeometrian luominen, johtavien yhtälöiden määrittäminen, käytettyjen materiaalien ja niiden ominaisuuksien määrittäminen, olosuhteiden määrittäminen sekä rajaehdojen määrittelemineen. Al-baghdadin (2019) artikkelista saa myös käsityksen, että CFD:n käyttöön tarvitaan vain yksi ihminen. CFD:n käyttö voidaan siis toteuttaa yhden tekijän voimin, mutta se on myös mahdollista toteuttaa hyödyntämällä useampaa ihmistä.

Runchalin (2012), Jamshedin (2015) ja Al-baghdadin (2019) artikkeleiden perusteella voidaan yleinen CFD:n käyttöprosessi voidaan jakaa kolmeen vaiheeseen: esikäsittelevä, simulointi tai laskenta ja loppukäsittelevä. Esikäsittelevävaiheessa valitaan sopiva numeerinen malli, määritellään lähtötiedot ja rajaehdot, ja tehdään laskentaverkosto tarpeen vaatiessa. Laskentaverkostoa tarkastellaan lisää luvussa 3.2.1. Lähtötiedoilla tarkoitetaan esimerkiksi virtauksen lähtönopeutta ja aineen fyysisiä ominaisuuksia kuten nesteiden viskositeettia. Rajaehdoilla puolestaan tarkoitetaan, esimerkiksi miten virtaava aine käyttäytyy lähellä laskentaverkoston seinämää (Andersson 2011, s. 36).

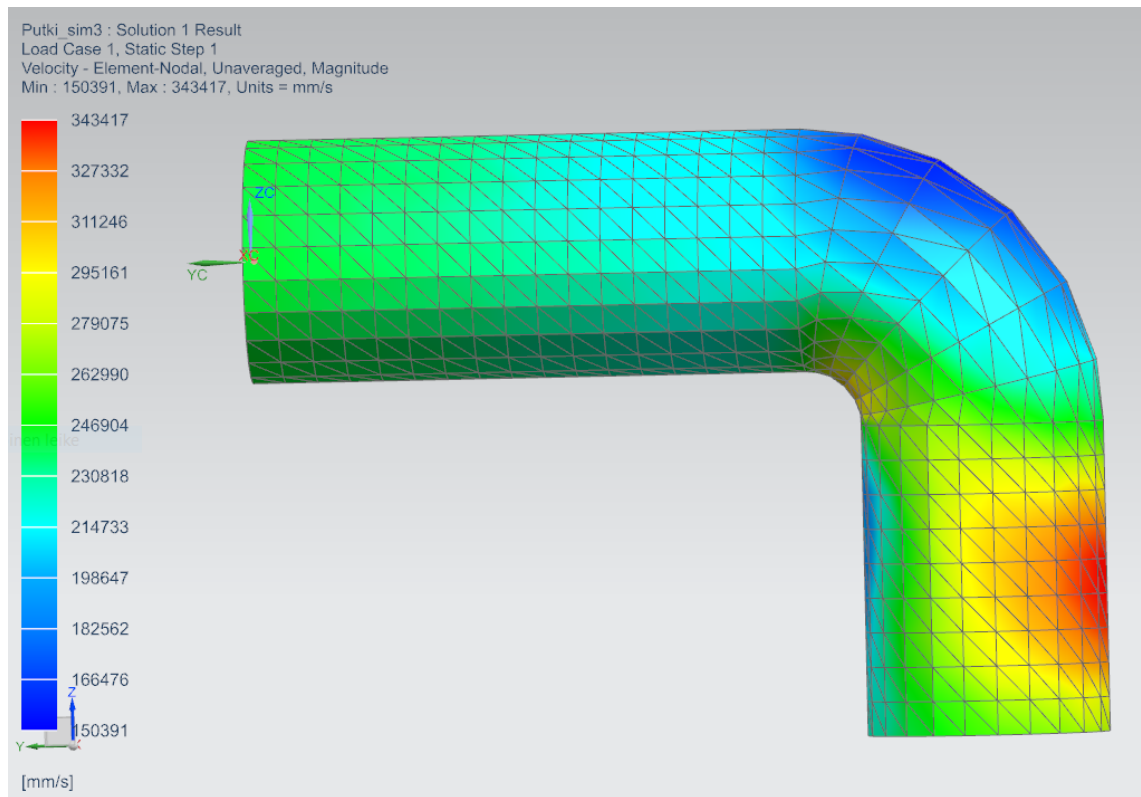


Kuva 1. laskentaverkosto esimerkki, jossa verkosto koostuu tetraedrien muotoisista soluista.

Ennen simulointiosuutta täytyy useimmille numeerisille malleille tehdä kappaleen geometriaan laskentaverkosto (englanniksi mesh tai grid), josta numeerinen malli saa tarvitsemansa reunaehdot. Laskentaverkosto koostuu soluista, jotka ovat muodoltaan mahdollisimman yksinkertaisia, kuten kolmioita tai nelikulmioita 2D-geometriassa tai 3D:nä tetraedreja tai kuutioita. Kuvassa 1 on tehty yksinkertainen 3D-geometria, johon on tehty laskentaverkosto tetraedreistä. ”Hyvä” laskentaverkosto määritellään aina tapauskohtaisesti, ja sen rakentaminen voi olla hyvinkin työlästä. Yleisesti voidaan sanoa, että mitä enemmän verkostossa on soluja, sitä tarkempia ratkaisuja saadaan. (Allmaras et al. 2009, s.2–4) Laskentaverkoston luominen on koko CFD:n käytön työläin ja aikaa vievin vaihe, se vie melkein 90 % koko CFD-prosessin ajasta (Jamshed 2015, s. 5).

CFD:n käyttöprosessin toinen vaihe on simulointi eli tietokoneen laskentaosuus esikäsittelyvaiheen tietojen perusteella. Itse laskentaosuus tapahtuu tietokoneen CPU:ssa (central processing unit) tai vaihtoehtoisesti GPU:ssa (graphic processing unit) (Crespo et al. 2011, s.4; Jamshed 2015). Crespo et al. (2011) artikkeli käsitteli tutkimusta, jossa mallinnettiin aallon iskeytymistä pieneen kuutioon ja sen takana olevaan seinään. Tutkimuksessa käytettiin SPH (smoothed particle hydrodynamics) -mallia, suomeksi tasoi- tettu hiukkasen hydrodynamiikka. Tutkimuksen tarkoituksena oli vertailla CPU:n ja GPU:n tehokkuutta. Tutkimuksen CPU:na toimi Intelin i7 940 ja GPU:na toimi GTX 480. SPH-mallia ajettiin miljoonan partikkelin tarkkuudella ja koko simuloinnin ajaksi saatiin

noin 5 päivää CPU:lla ja noin 2 tuntia GPU:lla. Vaikka GPU oli CPU:ta tehokkaampi SPH-mallin käytössä, se ei tarkoita, että se soveltuisi muille CFD-malleille yhtä hyvin. (Crespo et al. 2011, s. 6–11)



Kuva 2. Valmis simulointi virtauksesta kuvan 1 putkessa, jossa eri värit kuvaavat virtauksen eri nopeuksia.

Viimeinen vaihe CFD:n käyttöprosessissa on loppukäsittely, jossa tarkastellaan simulointivaiheen antamia tuloksia ja lopuksi tehdään helposti tulkittavissa oleva esitys saaduista tuloksista. Kuvassa 2 on esimerkki CFD-simuloinnin tuloksesta, jossa virtaus lähtee putken vasemmasta päästä ja virtauksen eri nopeudet on esitetty eri värein. Simulointivaiheen tuloksille tehdään validointi eli arvioidaan tulosten pätevyyttä ja kelvollisuutta. Validoinnissa simuloinnin tuloksia verrataan koetuloksiin, jos koetuloksia samantilanteesta on saatavilla. Jos validointiin tarvittavia koetuloksia ei ole saatavilla, laskentaverkostoa hiotaan paremmaksi, ja simulointi suoritetaan uudestaan muutamia kertoja tulosten samankaltaisuuden saavuttamiseksi. Kun simulointitulosten validointi on saatu päätökseen, saaduista tuloksista tehdään helposti tulkittava esitys. (Jamshed 2015, s. 4–5; Al-Baghdadi 2019, s. 10–11)

2.2 Virtauslaskennan perusteoria

Fluidien liikkeen eli virtauksen kuvaamiseen tarvitaan kolme säilymlakia, jotka ovat massan, liikemäärän ja energian säilymlait. Ainoaksi lisätiedoksi tarvitaan vain fluidin aineominaisuudet, kuten nesteen kokoon puristumattomuus. (Hirsch 2007, s. 39; Crespo et al. 2011, s. 2; Tu 2018, s. 65–97) Teoriaa esitellään hyvin lyhyesti, koska työn pääpaino ei ole selvittää virtauslaskennan teoriaa vaan keskittyä numeerisen virtauslaskennan luotettavuuteen ja käytettävyyteen.

Edellä mainitut kolme säilymlakia, massan, liikemäärän ja energian säilymlait voidaan esittää eri tavoilla tilanteen mukaan. Hirsch (2007, s. 37–43) esittelee ne yleisessä muodossa, ja yleistetään vielä sen verran, että tämä muoto on tarkoitettu vain paikalleen asetettuun koordinaatistoon. Hirschiä seuraten aloitetaan massan säilymlailla, eli toiselta nimeltään jatkuvuusyhtälöllä, ja ulkoisen massan lähteen poissaollessa kaava saadaan yleiseen differentiaalimuotoon

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0, \quad (1)$$

jossa ρ on aineen tiheys, \vec{v} on nopeus, t on aika ja nabla-operaattori ∇ kuvaa divergenssiä. Jatkuvuusyhtälön erikoistapauksessa neste on kokoonpuristumatonta eli nesteen tiheys on vakio, joten lähteen mukaan yhtälö (1) sievenee muotoon

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0. \quad (2)$$

Seuraavaksi Hirsch (2007, s.43) esittelee liikemäärän säilymlain differentiaalimuodossa

$$\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} \otimes \vec{v} + p \vec{I} - \vec{\tau}) = \rho \vec{f}_e, \quad (3)$$

jossa p on paine, \vec{I} on neliömomentin tensori ja $\vec{\tau}$ on leikkausjännityksen tensori ja \vec{f}_e koostuu ulkoisista tilavuusvoimista. Leikkausjännityksen tensori voidaan määrittää seuraavasti:

$$\tau_{ij} = \mu \left[\left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \delta_{ij} \right], \quad (4)$$

jossa μ on dynaaminen viskositeetti. Kun yhtälöä (3) järjestellään uudelleen ja siihen sijoitetaan leikkausjännityksen tensori, jossa viskositeetti on vakio, saadaan tulokseksi Navierin–Stokesin liikeyhtälö

$$\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \rho (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} = -\vec{\nabla} p + \mu \left[\Delta \vec{v} + \frac{1}{3} \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \right] + \rho \vec{f}_e. \quad (5)$$

Yhtälöä 5 voitaisiin yleistää vielä kokoonpuristuville nesteille ja siitä vielä ideaalines-teelle. Reynoldsin luvusta mainitaan, että se kuvaa liikemäärän konvektion ja diffuusion välistä suhdetta ja yleisimmin siitä voidaan päätellä, onko virtaus laminaarista vai turbu-lenssia.

Kolmas säilymlaki on energian säilymlaki ja Hirsch (2007, s. 49) esittelee sen seu-raavanlaisesti

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} H - k \vec{\nabla} T - \bar{\tau} \cdot \vec{v}) = W_f + q_H, \quad (6)$$

jossa E on fluidin kokonaisenergia, H on kokonaisentalpia, W_f on ulkoisten tilavuusvoi-mien työ ja q_H on kerroin, joka kuvastaa muuta lämmönlähdettä kuin johtuminen, esi-merkiksi säteilyä. Nämä kaikki kolme yllä mainittua säilymlakia yhdessä muodostavat Navierin–Stokesin yhtälöt. (Hirsch 2007, s. 37–49)

2.3 Matemaattinen malli

Matemaattiset mallit ovat osa ohjelmistoja, joiden tehtävä on kuvata fysikaalisia ilmiöitä. Nämä mallit ratkaistaan jotain numeerista menetelmää käyttäen. Mallit ovat aina malleja ja niissä on aina joitain yleistyksiä, varsinkin silloin, kun mallinnettava asia muuttuu mo-nimutkaiseksi. Oikean mallin valinta on tärkeää onnistumisen kannalta ja sen valinnassa auttaa esimerkiksi fysiikan ja tutkittavan sovelluksen hyvä ymmärrys.

2.3.1 Malli ja sen numeerinen simulointi

Matemaattisilla malleilla pyritään kuvaamaan reaalimaailman ilmiöitä tai asioita (Allaire & Craig 2007, s. 1). Näistä malleista esimerkkejä ovat heiluri, putkivirtaus tai sääennus-tus. Yleensä näiden mallien ratkaisemiseksi ja simuloimiseksi käytetään erilaisia numee-risia menetelmiä, esimerkiksi yksinkertaisin numeerinen menetelmä on Eulerin mene-telmä. Erikoistapauksissa malleille voi löytyä analyyttinen ratkaisu ja numeerista mene-telmää ei tarvita. Numeeriset menetelmät toteutetaan tietokoneilla niiden suuren lasken-tatarpeen vuoksi. (Allaire & Craig 2007, s. 1–14; Epperson 2013, s. 20)

Numeeristen menetelmien toimintaperiaate on löytää jollakin matemaattisella tavalla rat-kaisu, joka on tarpeeksi lähellä oikeaa ratkaisua. Tätä ratkaisua voidaan kutsua approk-simaatioksi. Numeerisia menetelmiä on erilaisia, mutta tavoite on aina sama eli löytää

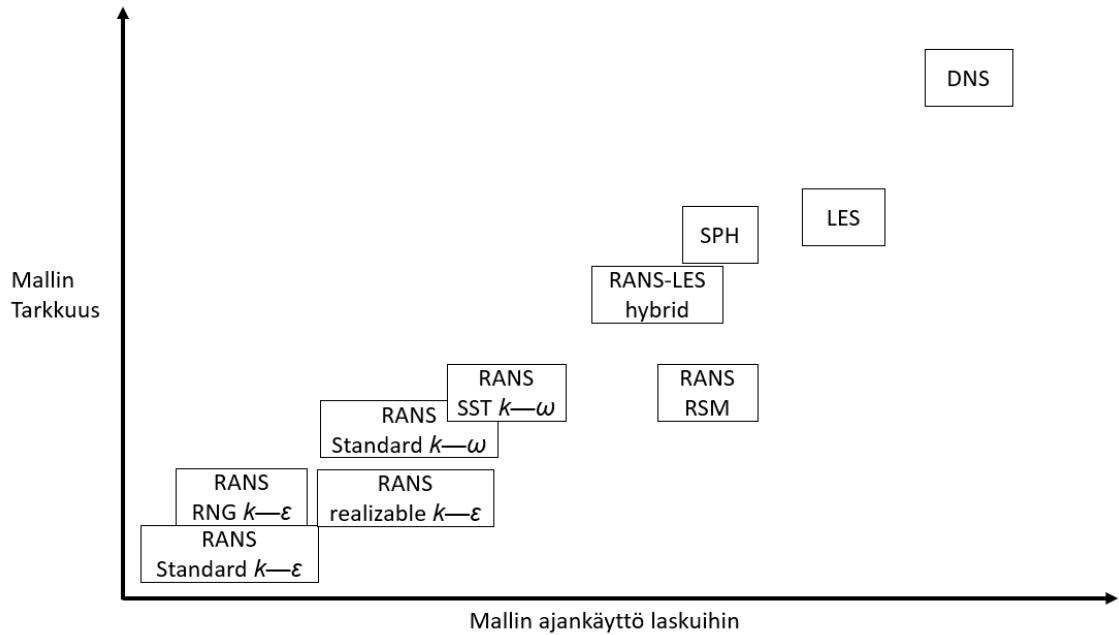
mahdollisimman tarkka arvio oikeasta tuloksesta. Näitä matemaattisia tapoja löytää ratkaisu ovat esimerkiksi differentiaali- ja integraalilaskenta. Esimerkki integraalisesta ratkaisutavasta on Eulerin menetelmä. (Allaire & Craig 2007, s. 20–23; Epperson 2013, s. 74–78)

Numeerisen menetelmän valinnassa tulosten tarkkuus ja menetelmän tehokkuus ovat jatkuvassa kilpailussa keskenään. Jos tarkkuutta halutaan parantaa, niin tehokkuus karsii ja päinvastoin. Kolmas asia numeerisen menetelmän valinnassa on menetelmän vaaka eli pienillä lähtötietojen muutoksilla ratkaisut ovat samankaltaisia eikä suuria poikkeamia ratkaisujen välillä tapahdu. (Epperson 2013, s. 21)

2.3.2 Erilaisia malleja

Numeerisessa virtauslaskennassa käytettäviä malleja on monia ja niitä voidaan jakaa eri käyttökohteiden perusteella, esimerkiksi turbulenteille virtauksille on kehitelty omat mallinsa, mutta laminaarisille malleille ei (Bakker 2001, s. 47; Hirsh 2007, s.69, Karpinska 2016, s.865). Yleisimmin käytettyjen mallien yhteydessä kappaleen malligeometriaan täytyy rakentaa laskentaverkosto, joka toimii mallien yhtenä rajaehtona. Yhdeksi virtausmalliehdokkaaksi on noussut SPH, joka ei tarvitse laskentaverkostoa simuloinnin suoritukseen (Crespo et al. 2011, s. 1).

Laminaarinen virtaus on paljon yksinkertaisempi kuin turbulenttinen virtaus, joten laminaarinen virtausten mallintaminen on melko helppoa verrattuna turbulenttisen virtauksen mallintamiseen. Tästä johtuen laminaarinen virtaus ei tarvitse omia malleja, vaan laminaarista virtausta voidaan mallintaa turbulenttisten virtausten malleilla. Luonnossa ja teollisuudessa virtausilanteet ovat usein turbulenttisia, joten niihin soveltuvia malleja on kehitetty paljon. Käytetyimpiä turbulenttimalleja ovat esimerkiksi eri versiot Reynolds averaged Navier–Stokes equation (RANS) malleista, suomeksi Reynoldin keskiarvotettu Navierin–Stokesin yhtälömallit. Muita vaihtoehtoisia malleja ovat Large eddy simulation (LES), eli suomeksi suurten pyörteiden simulaatio, ja Direct numerical simulation (DNS), eli suomeksi suora numeerinen simulointi. Näillä malleilla on kuitenkin omat ongelmansa, ja siksi ne ovat vähemmän käytettyjä kuin RANS-mallit. (Hirsh 2007 s. 69; Karpinska 2016, s.865) Kuvassa 3 on koottu kuvaaja eri lähteistä, jossa on esitetty erilaisia virtausmalleja tarkkuuden ja ajankäytön suhteen.



Kuva 3. Erilaisia turbulenssimalleja vertailtuna toisiinsa mallin tarkkuuden ja laskuihin käytetyn ajan suhteen (mukaillen Hirsh 2007; Crespo et al. 2011; Karpinska 2016; Xiao & Cinnella 2019).

Seuraavaksi tarkastellaan tunnetumpia turbulentsivirtausmalleja tarkimmasta epätarkimpaan. Tarkin CFD-malli on DNS, koska sen laskuissa ei ole tehty yhtään laskuja helpottavia yleistyksiä (Xiao 2019, s. 3). Teollisuudessa DNS:n käyttö ei ole järkevää, koska mallin käyttöön liittyvä laskenta kestää vielä liian kauan. LES puolestaan on hiukan epätarkempi kuin DNS. LES vaatii myös raskasta laskentaa, mutta ei niin paljon kuin DNS vaatii. LES-malli suodattaa asetetun asteikon alle jääneet turbulenssi pyörteet pois ja yleistää ne yhtenäisemmäksi pyörteeksi, jolloin laskenta vähenee (Hirsh 2007, s.69; Karpinska 2016, s. 865; Xiao 2019, s. 3). LES:iä voidaan käyttää kohteissa, joissa RANS-mallit eivät anna tarpeeksi tarkkaa ratkaisua (Karpinska 2016, s.865).

Luvussa 1.1 mainittu SPH on noussut yhdeksi virtausmallinnuksen metodiksi. Malli perustuu myös virtauslaskennan perusyhtälöihin, mutta eroaa muista malleista siten, että se ei tarvitse laskentaverkostoa, kuten Navierin–Stokesin yhtälöihin perustuvat mallit. Laskentaverkoston sijasta SPH:n laskenta perustuu tasolle satunnaisesti levitettyihin pisteisiin (partikkeleihin), jossa jokaisella aikajaksolla taso liikkuu eteenpäin. Vierekkäiset pisteet vaikuttavat toisiinsa, joten niiden fyysiset ominaisuudet vaihtelevat simuloidun ajan. Tämä metodi on hyvin vaativaa laskennallisesti, koska jokaisella aikajaksolla jokaiselle tehdylle pisteelle pitää laskea uudet arvot. SPH:n etuna laskentaverkostopohjaiseen menetelmään verrattuna on se, että sillä voidaan tutkia helpommin monimutkaisempia geometrioita, koska vaikeaan geometriaan ei tarvitse luoda laskentaverkostoa. (Crespo 2011).

Vielä ennen RANS-malleja ovat RANS- ja LES-malleista tehdyt hybridimallit, jotka yhdistävät näiden molempien mallien parhaat puolet (Xiao 2019, s. 3). RANS-mallit ovat yleisimmin käytettyjä CFD-malleja, mutta ne ovat samalla epätarkimpia verrattuna edellä mainittuihin malleihin. Karpinska (2016) on listannut käytetyimpiä turbulenssimalleja, jotka pohjautuvat RANS:iin. Näitä ovat standard $k-\varepsilon$, RNG (renormalized group) $k-\varepsilon$, realizable $k-\varepsilon$, standard $k-\omega$, SST (shear stress transport) $k-\omega$ ja RSM (Reynolds stress model). Näitä yhtälöitä, paitsi RSM, kutsutaan myös nimellä kaksiyhtälömallit, koska niissä käytetään kahta suuretta kuvaamaan fluidin turbulentsisuutta. Näissä yhtälöissä k tarkoittaa turbulentsista liike-energiaa, ε tarkoittaa turbulentsista hukka-astetta ja ω tarkoittaa turbulentsin taajuutta (Johannes et al. 2020, s. 3).

3. LUOTETTAVUUS

Vaikka CFD on kehittynyt viime vuosikymmeninä, niin silti sen kaikkia ongelmakohtia ei ole saatu ratkaistua. Tästä syystä CFD-simuloinnin tuloksia kannattaa aina tarkastella kriittisesti. Tässä luvussa tarkastellaan yleisimpiä virtausmallien ongelmakohtia ja muutamia käytetyimpiä CFD-malleja kuten RANS- ja LES-mallit.

3.1 Virtausongelman määrittely

Virtausmallin valinta on aina kompromissi laskentakustannusten ja virtausennusteen tarkkuuden välillä. Jos halutaan tarkka ennuste virtauksesta, niin laskentakustannukset ovat suuria, ja toisinpäin, eli jos uhrataan tarkkuutta, niin laskentakustannukset vähenevät.

Kun lähdetään suunnittelemaan järjestelmää tai osaa, jossa on virtausta mukana, pitää tietää mitä tavoitteita ja vaatimuksia järjestelmälle asetetaan. Näillä tiedoilla on kriittinen vaikutus suunnittelun jatkolle. (Nopens et al. 2012, s. 7401–7402) Kun tavoitteet ja vaatimukset on esitetty, voidaan miettiä mallin ulottuvuuden valintaa, eli valitaanko 2D- vai 3D-malli. 2D- ja 3D-mallit ovat yleisesti yhtä haastavia, mutta 3D-mallissa laskentakustannukset kasvavat todella suureksi verrattuna 2D-malleihin. Kannattaakin miettiä voidaanko kappaleen symmetriaa hyödyntää, jotta saataisiin 2D-malli. Symmetrian hyödyntämistä voi ajatella esimerkiksi pyörähdyssymmetrisen kappaleen avulla. 2D-muodon voidaan ajatella pyörähtävän tietyn akselin ympäri ja muodostaen näin 3D-kappaleen, esimerkiksi ympyrän muotoisen putken. Näin siis ei tarvitse käyttää 3D-mallia vaan voidaan käyttää 2D-mallia virtauksen simulointiin. (Andersson 2011, s. 36; Nopens et al. 2012 s. 7400–7402; Al-Baghdadi 2019, s. 10–11)

Kun kappaleen geometria on tehty ja valittu missä ulottuvuudessa sitä mallinnetaan, täytyy seuraavaksi valita virtaava fluidi tai fluidit eli tarkentaa virtaavan aineen fysikaaliset ominaisuudet (Al-baghdadi 2019, s. 10–11). Fluidina voi toimia neste, kaasu tai näiden sekoitus. Laskennallisesti helpoin ratkaisu on valita pelkkä neste tai kaasu. Erilaiset sekoitukset eri fluidien kanssa yleisesti vaikeuttavat laskuja. Esimerkiksi sekoituksissa pitää huomioida eri aineiden mahdolliset reaktiot toisen aineen kanssa. Fluidin valinnan jälkeen lähdetään valitsemaan sopivaa mallia, jolla saavutetaan tavoitetarkkuus virtauksen ominaisuuksista. Etukäteen voidaan myös tehdä harkittuja yleistyksiä, joilla voidaan vaikuttaa mallin valintaan ja samalla laskentavaatimuksiin. Esimerkiksi, jos valittu fluidi

on neste, niin yleistyksiksi voidaan olettaa nesteen kokoonpuristumattomuus. (Nopens et al. 2012, s. 7402–7403; Al-Baghdadi 2019, s. 10–11)

3.2 Yleisiä numeerisen virtauslaskennan ongelmia

Numeerisen virtauslaskennan virheitä aiheuttavia tekijöitä on monenlaisia, mutta yleisimpiä niistä ovat lähtötiedot ja rajaehdot, mallien varmennus ja tulosten vahvistus sekä laskentaverkosto (Oberkampf & Trucano 2002; Blazek 2005; Rebba et al. 2006; Allmaras 2009; Andersson 2011; Sanderse et al. 2011). Näitä yleisimpiä tekijöitä käsitellään seuraavissa kappaleissa.

3.2.1 Laskentaverkoston ongelmakohdat

RANS- ja LES-mallit tarvitsevat kappaleessa 1.1 mainitun laskentaverkoston, joka vaikuttaa käytetyn virtausmallin antamiin tuloksiin. Laskentaverkoston vaikutukset CFD-simuloinnin tuloksiin ovat tulosten tarkkuus ja ajallinen kesto ratkaisujen laskentaan. Terziev et al. (2020) esittävät laskentaverkoston tarkkuuden olevan suurin virhelähde numeerisessa virtauslaskennassa. Esimerkiksi liian tiheällä verkostolla laskennallinen kesto voi kasvaa todella suureksi ja samalla saatava tarkkuus ei ole hyödyksi suunnittelijalle, vaan erilaisella verkostolla olisi säästetty aikaa ja saavutettu tavoiteltu tarkkuus. (Allmaras et al. 2009, s. 1–5)

Kirjan osassa (Allmaras 2009, s. 2–3) kerrotaan, että Boeing käyttää heidän itse kehittämänsä TRANAIR CFD-koodia, jossa laskentaverkoston luonnissa käytetään automaattisesti ajoneuvon geometriaan mukautuvaa verkostoa. Tällaisen automaattisen mukautuvan verkoston luonti on välttämätöntä ympäristöissä, joissa tehdään tuhansia simulaatioita. Mukautuvan laskentaverkoston etuja ovat sen tarkkuus, epälineaarinen konvergenssi ja itse laskentaverkoston luontiprosessi. TRANAIR-koodin käyttämässä menetelmässä laskentaverkosto on hierarkkisessa järjestyksessä. Vastaavasti Navierin–Stokesin virtauksiin TRANAIR:in menetelmä ei suoraan sovi, koska Navierin–Stokesin virtaukset tarvitsevat sattumanvaraisesti järjestäytyneet leikkauskerrokset. Tähän ongelmaan Allmaras et al. (2009) esittelee kaksi kehitteillä olevaa ratkaisua, joita ovat anisotropic hierarchical adaptive (AHA) eli anisotrooppinen hierarkkinen mukautuvuus ja hierarchical refinement (HIREF) eli hierarkkinen jalostusmenetelmä (Allmaras et al. 2009, s. 3–4).

AHA-menetelmässä luodaan ensin makrosoluista koostuva laskentaverkosto. Makrosoluihin aletaan seuraavaksi jalostaa verkostoa kolmioista (2D) tai tetraedreistä (3D). Jalostuksessa virheindikaattorit siirtävät risteämiskohtia solun reunoille, minkä jälkeen virhe-estimaattori järjestää solut sopivaan järjestykseen reunoja tai tasoja vaihtelemalla. Viitegeometriaa käytetään rajojen määrittelemisen apuna, jotta saadaan parannettua rajojen resoluutiota. AHA-menetelmä on todistettu olevan luotettava ja vakaa 2D-ulottuvuudessa, mutta 3D-ulottuvuudessa menetelmän kehitys on vielä kesken. HIREF-menetelmässä kaikki mahdolliset binääriset solujalostukset tarkistetaan mahdollisten virheiden varalta. Solut jalostetaan kuten AHA-menetelmässä. Tarkistuksen jälkeen solut asetellaan sopivien solujen viereen. Näistä menetelmistä AHA on tehokkaampi kuin HIREF, mutta HIREF-menetelmällä on helpompi tehdä verkostoja 3D:nä. (Allmaras et al. 2009, s. 4–5)

3.2.2 Lähtötietojen ja rajaehdojen määrittely

Lähtötiedoilla ja rajaehdoilla tarkoitetaan virtausmallin yhtälöihin sijoitettavia vakioita, jotka ovat ennalta määriteltäviä tai ne on saatu kokeellisista mittauksista. Numeeristen mallien ratkaisu lähtee liikkeelle alkuarvauksilla, jotka numeerisessa virtauslaskennassa ovat lähtötiedot ja rajaehdot (Andersson 2011, s. 37). Lähtötiedot ja rajaehdot ajatellaan olevan yhtä tärkeitä numeerisessa virtausmallissa kuin mallissa käytetyt yhtälöt, koska niillä on suuri vaikutus tuloksiin ja ratkaisunopeuteen (Blazek 2005, s. 56; Andersson 2011, s. 35). Mitä parempi alkuarvaus mallille saadaan, sitä nopeammin saadaan myös tulokset selville (Blazek 2005, s. 56; Anderson 2011, s. 37).

Ennalta määritellyissä arvoissa on määriteltävä itse lähtötietojen tai rajaehdojen arvoja. Tämä ei kuitenkaan sovellu kaikille arvoille ja itse näitä arvoja määrittäessä kannattaa olla hyvin huolellinen. Tilanne, jossa itse voi määrittää joitakin lähtötietoja tai rajaehdoja, on esimerkiksi alkuarvaus järjestelmän maksimipaineelle, jos on paljon kokemusta järjestelmästä. Kokeellisesti mitatut arvot lähtötiedoille ja rajaehdoille eivät ikinä ole täysin tarkkoja johtuen mittausvirheistä. Joissakin tapauksissa mittausten tekeminen ja lähtötietojen arvioiminen voi olla hyvin hankalaa, esimerkiksi mitattaessa tuulivoimaloiden laipojen olosuhteita ja ytimen hätäjähdytysjärjestelmän olosuhteet ydinvoimaloissa onnettomuuksien sattuessa (Sanderse et al. 2011, s. 802; Zhang et al. 2018, s. 2).

Lähtötietoja ja rajaehdoja on monia ja niiden määrä riippuu tarkasteltavasta kohteesta. Yleisimpiä lähtötietoja ja rajaehdoja CFD:ssä ovat virtausnopeudet (sisäänmeno- ja ulostulovirtaus), lämpötila tai -tilat, paine ja laskentaverkoston seinämien ”no-slip condition” (Sanderse et al. 2011, s. 802–803; Andersson 2011, s. 35–37; Phillips et al. 2017, s. 53).

Laskentaverkoston seinämien ”no-slip condition” tarkoittaa, että fluidin nopeus seinämällä on nolla eli fluidin ja seinämän välillä ei tapahdu liukumista. (Andersson 2011, s. 37)

3.2.3 Virtausmallin varmennus ja tulosten vahvistus

Numeerisissa virtausmalleissa on aina tehty jonkun verran olettamuksia ja yksinkertaistuksia oikeasta fyysisestä tilanteesta, joten näiden mallien varmennus ja tulosten vahvistus ovat merkittäviä tekijöitä mallin tulosten oikeellisuudessa. Mallien varmennus tarkoittaa mallien tarkkuuden arviointia verrattuna muihin varmennettuihin malleihin tai yleisesti hyväksytyihin ratkaisuihin (Oberkampf & Trucano 2002, s. 213–215; Rebba et al. 2006, s. 1390). Mallien tulosten vahvistus tarkoittaa saatujen ratkaisujen vertaamista kokeellisiin koetuloksiin (Oberkampf & Trucano 2002, s. 213–215; Rebba et al. 2006, s. 1390). Mallien varmennus ja tulosten vahvistus eivät rajoitu vain CFD-mallien käyttöön, vaan niitä käytetään myös muissa tietokonepohjaisissa malleissa.

Mallien varmennus perustuu olettamukselle, että varmennuksessa käytettävät ratkaisut ovat oikeita ja tarkkoja (Oberkampf & Trucano 2002, s. 223). Varmennuksessa käytettävät ratkaisut tai mallit ovat aina vanhempia kuin tarkastuksessa olevat ratkaisut ja mallit, joten on kyseenalaista, kuinka luotettavina näitä vanhempia ratkaisuja ja malleja voidaan pitää. Varmennusprosessissa löytyvät virheet ovat kahta eri tyyppiä: tunnistettavia ja tunnistamattomia virheitä. Tunnistettavat virheet antavat pohjan ratkaisujen tarkkuudelle. Näitä virheitä voidaan mitata ja verrata hyväksytyihin ratkaisuihin. Esimerkkejä tunnistettavista virheistä ovat mallissa käytetyt yksinkertaistukset ja osittaisdifferentiaaliyhtälöiden muuntaminen diskreeteiksi yhtälöiksi. Tunnistamattomat virheet ovat vaikeampia kuin tunnistettavat virheet, koska niiden mittaamiseen ja arvioimiseen ei ole olemassa yksikäsitteisiä menetelmiä. Esimerkkejä tunnistamattomista virheistä ovat ohjelmointivirheet ja syöttötietojen virheellisyydet. Varmennusprosessissa etenkin ohjelmointivirheiden löytämiseksi voidaan käyttää muodollista testausta tai antaa satunnaisten ihmisten kokeilla ohjelmaa. (Oberkampf & Trucano 2002, s. 220–224)

Kun numeerinen virtausmalli on varmennettu, voidaan mallin tuloksille tehdä vahvistukset. Mallin tuloksia voidaan pitää ennusteena, jotka vahvistetaan kokeellisilla mittauksilla (Oberkampf & Trucano 2002, s. 240; Rebba et al. 2006, s. 1390). Mallin tuloksissa esiintyy epävarmuutta ja virhettä, jotka vaikuttavat tulosten vahvistamiseen (Oberkampf & Trucano 2002, s. 240–242). Epävarmuustekijät voidaan jakaa sattumanvaraisiin ja episteemisiin tekijöihin. Episteemiset tekijät tarkoittavat tekijöitä, joita tulee huolimattomu-

desta tai järjestelmän tietämyksen puutteesta. Episteemisiä tekijöitä löydetään tapauksista, joista on vähän tai ei yhtään kokeellista dataa. Sattumanvaraisia on vaikeampi ennakoita, mutta todennäköisyysjakaumilla pystytään edes vähän arvioimaan sattumanvaraisia epävarmuustekijöitä. (Oberkampf & Trucano 2002, s. 241–242)

Tulosten vahvistus edellyttää numeerisen mallin kokonaisvirheen olevan tietyn suuruisen ja tietynsuuruisuus on myös tapauskohtaista. Mallin kokonaisvirheeseen lasketaan kaikki mallissa tapahtuvat virheet yhteen. (Oberkampf & Trucano 2002, s. 242–243) Jokaisen mallin virhelähde pitää määrittää erikseen, koska kokonaisvirheen laskussa eri virhelähteet voivat kumota toisiaan. Näin malli antaa näennäisesti parempia tuloksia, vaikka todellisuudessa virheitä on paljon. Virheitä aiheuttavat monet muutkin asiat, esimerkiksi kokeellisissa mittauksissa voi esiintyä mittausvirheitä. Numeerisen mallin virhelähteitä ovat numeeriset virheet ja mallikohtaiset virheet. Esimerkkejä numeerisista virheistä ovat lähtötietovirheet ja diskreetointivirheet. Mallikohtaisia virheitä ovat esimerkiksi mallissa käytetyt yleistyksiset eli nesteen kokoonpuristumattomuus ja virtauksen luonne. (Rebba et al. 2006, s. 1392–1396)

3.3 Virtauslaskentamallien ongelmakohtia

Tässä kappaleessa keskitytään käytetyimpiin CFD malleihin ja niiden ongelmakohtiin. Ongelmakohtilla tarkoitetaan mallien epävarmuustekijöitä ja ratkaisujen vakautta.

3.3.1 Reynoldsin keskiarvotettu Navierin–Stokesin yhtälöt - malli

Tarkastellaan ensin RANS-mallien ongelmakohtia. Xiao kertoo artikkelissaan (2019) RANS-mallien pysyvän insinöörien työhevosena vielä seuraavina vuosikymmeninä. Syynä siihen on RANS-mallien kohtuulliset laskentakustannukset ja ratkaisujen vakaus, ja siksi sen ongelmia kannattaa tutkia tarkemmin.

RANS-mallien epävarmuuteen vaikuttavat tekijät voidaan jakaa kahteen luokkaan: rakenteelliseen ja parametriseen epävarmuuteen (Xiao & Cinnella 2019, s. 5). Rakenteellisen epävarmuuden suurin lähde on mallityypin epävarmuudet (Wang et al. 2015, s. 2). Mallityypin epävarmuutta aiheuttaa säilymislaeissa esiintyvä leikkausjännityksen tensori, jota ei ole pystytty kunnolla mallintamaan. Leikkausjännitystensorin mallinnuksessa käytetään yleensä lineaarisen pyörteen viskositeettimallia tai Reynoldin jännityksen siirto-

mallia. Vaikka näitä malleja on yritetty kehittää eteenpäin, niin kehittyneimmistä malleista, kuten epälineaarisen pyörteen viskositeettimalli ja EARSM (explicit algebraic Reynolds stress models), puuttuu edelleen tarvittava vakaus, mitä alkuperäisestä mallista löytyy. Kehittyneemmät mallit ovat teoreettisesti parempia, mutta niiden antamien tulosten vakaus estää niiden käyttämistä yleisessä käytössä. (Xiao & Cinnella 2019, s.4–5)

Parametriset epävarmuustekijät muodostuvat seinämämallien kertoimista, jotka ovat peräisin koetuloksista. Seinämämallit kuvaavat fluidin ja seinämän välistä käyttäytymistä. Koetuloksista saadut kertoimet voivat olla epäsopivia, koska koetulokset on saatu yksinkertaisista virtaustilanteista, eivätkä vastaa käytännön tilannetta. Myös mittausvirheet vaikuttavat koetuloksista saatuihin kertoimiin. Koetuloksista saatuja kertoimia käytetään myös ensiarvauksena sopiville kertoimille, joita lähdetään etsimään esimerkiksi yritys- ja erehdysmenetelmän avulla. (Xiao & Cinnella 2019, s.6)

Sekä rakenteellinen että parametrinen epävarmuus ovat luonteeltaan episteemisiä, joten näitä epävarmuustekijöitä voidaan pienentää, kun tutkitaan ja saadaan lisää tietoa esimerkiksi turbulentsista virtauksesta. Näiden ohella on myös kolmas epävarmuustekijä, joka on sattumanvaraisuus, jota on vaikea ennakoida. Tällaisia sattumanvaraisuuksia ovat esimerkiksi kappaleen epämuodostumat tuotantovaiheessa tai vaihtelevat ympäristöolosuhteet. (Xiao & Cinnella 2019, s.6)

3.3.2 Suurten pyörteiden simulaatio -malli

Tarkastellaan seuraavaksi suurten pyörteiden simulaatio -mallia eli LES-mallia. LES-mallia käytetään turbulentsien virtausten mallintamiseen ja sen toiminta perustuu pyörteiden jakamiseen suuriin ja pieniin pyörteisiin ja niiden eri ratkaisutapoihin. Suuret pyörteet ratkaistaan tarkasti ilman yleistyksiä. Vastaavasti pienten pyörteiden tapauksessa pyörteitä yleistetään, jotta niiden ratkaisemista saataisiin helpommaksi. LES-mallin virheet ja luotettavuuteen vaikuttavat osat ovat suurimmaksi osaksi eri asioita kuin RANS-malleissa, mutta joitakin vertailukohtiakin löytyy. (Salvetti et al. 2018, s. 15–21; Xiao & Cinnella 2019, s. 24–25).

Xiao & Cinnella (2019) listaavat artikkelissaan LES-malleille kolme ominaista epävarmuustekijää. Nämä ovat epävarmuudet SGS (subgrid-scale) -mallinnuksessa, lähtö- ja rajaehtojen epävarmuudet sekä numeerisen diskretisoinnin epävarmuustekijät. Näistä SGS-mallinnus on ainoa mallista riippuva epävarmuustekijä. Kahden muun kohdalla epävarmuustekijät riippuvat lähtötiedoista ja numeeristen menetelmien epävarmuuksista. (Xiao & Cinnella 2019, s. 24).

SGS-mallinnus tarkoittaa merkittävimpien pienten pyörteiden mallinnusta virtauksessa. SGS-malleja on monia erilaisia ja yleisimpiä niistä ovat Smagorinskyn ja Vremanin mallit (Salvetti 2018, s. 4; Xiao & Cinnella 2019, s. 24). Nämä mallit käyttävät mallikohtaisia kertoimia, jotka toimivat vain tietyillä malleilla. Esimerkki mallikohtaisesta kertoimesta on Smagorinskyn vakio. Näiden kertoimien määrittelyssä käytetään yleensä parametrisia menetelmiä, mutta ei-parametrinen menetelmä on tehnyt nousuaan viime vuosina. Esimerkki ei-parametrisesta menetelmästä on UQ (uncertainty quantification) eli epävarmuuden määrällinen määrittely, joka tarkoittaa kertoimien esittämistä tuntemattomina muuttujina. Näillä tuntemattomilla muuttujilla on omat todennäköisyysjakaumansa, joka kertoo niiden todennäköisyydet esiintyä muuttujina. (Salvetti et al. 2018, s.15–16; Xiao & Cinnella 2019, s. 25).

Gousseau et al. (2013) artikkelissa tutkittiin tuulen käyttäytymistä korkeissa kerrostoissa CFD:n avulla. Tutkimuksen yksi aihealue oli laskentaverkoston merkitys LES-virtausmallin tuloksille. Tutkimuksessa vertailtiin kahta eri tiheyksistä laskentaverkostoa ja tuloksista huomattiin, että tiheämmällä laskentaverkostolla tulosten kokonaisvirhe oli suurempi kuin karkeamman laskentaverkoston tulosten kokonaisvirhe. Gousseau et al. (2013) artikkelissa mainittiin myös muita tutkimuksia (Gousseau et al. 2013, s. 133, katso 25 ja 33), joissa oli tehty samanlainen havainto. Tämän havainnon perusteluksi esitettiin turbulenssisen hukka-asteen aliarviointi tiheämmällä verkostolla ja eri näytteenottotajuus kokeellisissa mittauksissa ja CFD-simuloinnissa (Gousseau et al. 2013, s. 130).

Lähtö- ja rajaehdoilla on suuri merkitys LES-mallin käyttäytymisessä, koska ne voivat vaikuttaa leikkausvoimiin ja virtauksen muuttumiseen turbulenttiseksi. Lähtötietojen virheellisyyttä voivat aiheuttaa esimerkiksi tiedon puute sisäänmenovirtauksesta. Tiedon puutteet voivat esimerkiksi johtua vaikeasti mitattavista tai säädettävistä tilanteista. Yksi lähtö- ja rajaehdoin liittyvä ongelma on LES-mallien herkkyyks. Herkkyyks ilmenee, kun muutetaan lähtö- tai rajaehdota ja uusi tulos vaihtelee merkittävästi edellisestä. (Salvetti 2018, s.16, Xiao 2019, s. 25). Malliherkkyyttä voisi tutkia herkkyystudkimuksilla, mutta LES-mallien simuloinnin raskauden ja suuren ajankäytön vuoksi sitä olisi vaikeaa toteuttaa (Salvetti 2018, s. 16). RANS- ja LES-malleja vertailtaessa, RANS-mallit ovat selvästi epäherkempiä lähtötietojen ja rajaehdota vaihtelulle (Xiao & Cinnella 2019, s. 25).

Viimeisenä LES-mallien epävarmuustekijöiden käsittelyssä on numeerinen diskretisointi. Numeerinen diskretisointi tarkoittaa jatkuvien yhtälöiden muuntamista epäjatkuviksi, mikä helpottaa niiden numeerista käsittelyä. Diskretisoinnin suurin ongelma on käytännössä suurten ja pienten pyörteiden välinen raja. Ongelma syntyy kahdesta eri numeerisesta menetelmästä, joiden pitäisi käyttäytyä sopivasti toistensa rajapinnassa. (Xiao & Cinnella 2019, s. 25).

4. MIKSI KÄYTTÄÄ NUMEERISTA VIRTAUSLASKENTAA

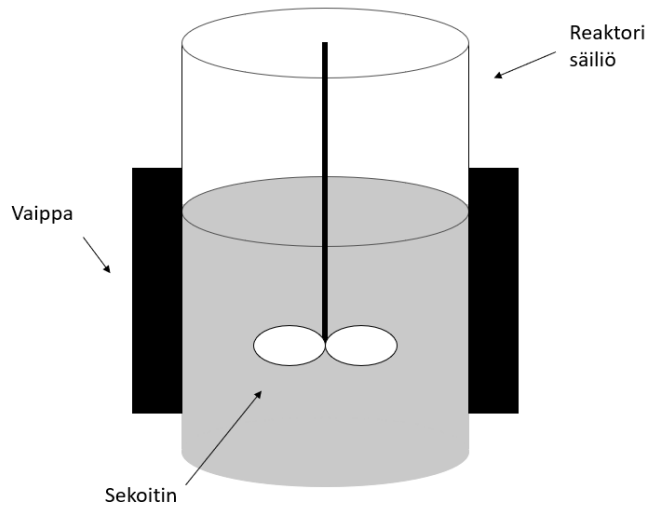
CFD:tä käytetään jo nykyään monilla eri aloilla ja sen käyttömahdollisuudet vain kehittyvät tulevaisuudessa. Tietokoneiden laskentateho jatkaa vain kasvuaan, joten sekin auttaa CFD:tä kehittämään, kuten muitakin mallinnus- tai simulointiohjelmistoja.

4.1 Käyttöesimerkkejä

Tässä kappaleessa esitellään muutama esimerkki CFD:n käyttökohteista. Esimerkkeinä esitellään sekoitusäiliöreaktorin onnettomuuksien simulointi ja painehäviöiden vertailu kahden erilaisen ohjausventtiilin välillä.

4.1.1 Sekoitussäiliöreaktorin onnettomuuksien simulointi

Sekoitussäiliöreaktorissa sekoitettavat aineet syötetään säiliöön, jonka sisällä on jonkinlainen sekoittaja. Sekoitussäiliöreaktoreita on jatkuvatoimisia ja erätoimisia. Jatkuvatoimissa sekoitussäiliöreaktoriin syötetään ja poistetaan tavaraa ilman reaktorin pysäyttämistä. Erätoimisissa puolestaan valmistetaan aina erä kerrallaan haluttua tuotetta. (Mann 2009, s. 3–5) Milewskan ja Molgan (2007) Kuvan 4 on esimerkki yksinkertaistetusta sekoitussäiliöreaktorista eikä vastaa tutkimuksessa käytettävää reaktoria. tutkimuksessa käytettiin erätoimista sekoitussäiliöreaktoria, jossa sekoittajan lavat sijaitsivat vain säiliön alaosassa. Sekoitettavat aineet olivat nesteitä ja niiden reaktio oli vahvasti eksotermista (suuri lämmöntuotto). Tutkimuksen ideana oli tutkia reaktorin lämmön karkaamista liian suureksi, kun sekoittaja hidastuu tai pysähtyy kokonaan. (Milewska & Molga 2007, s. 4920) Artikkelissa ei suoraan kerrota, miksi tutkimuksen suorittamiseksi on käytetty CFD:tä, eikä esimerkiksi oikealla reaktorilla testausta. Artikkelista voi kuitenkin päätellä, että työ olisi ollut vaikeaa ja vaarallista suorittaa oikealla reaktorilla, joten CFD:n käytön voi näin ollen ajatella olevan perusteltua tutkimuksen suorittamiseksi.



Kuva 4. Yksinkertaistettu kuva sekoitussäiliöreaktorista (Mukaillen Milewska & Molga 2007)

Reaktorin malligeometria laskentaverkoston luontiin saatiin Buxtonin terveysturvallisuuslaboratorion testimittakaavaisesta reaktorista. Reaktorin mallinnus ja laskentaverkoston luonti tehtiin Fluentin ohjelmistosta löytyvillä työkaluilla. Laskentaverkoston solujen määräksi valittiin noin 340 tuhatta kappaletta edellisten kokeiden perusteella. Virtauksen turbulenttimalliksi valittiin RANS:n standard $k-\epsilon$ malli. Sekoittajan liikkeiden mallinnuksessa käytettiin MRF (multiple reference frame) -metodia, suomeksi usean koordinaatiston metodia. MRF-metodilla sekoittajan lavoissa olevat solut jaetaan solualueisiin pyörimisnopeuden perusteella. Reaktorin simulointi toteutettiin Fluentin 6.2 ohjelmistokoodilla. Ratkaisulle hyvä suppeneminen saavutettiin 0.1 sekunnin aikajaksolla. (Milewska & Molga 2007, s. 4921).

Tutkimuksessa suoritettiin neljä erilaista simulaatiota, joista kahdessa tutkittiin vain reaktorin pohjan lämpötilan vaikutusta lämmön karkaamiseen ja sekoittajan pyörimisnopeuden pysyessä vakiona koko simuloinnin ajan. Kahdessa muussa simuloinnissa puolestaan pohjan lämpötila pidettiin vakiona, mutta sekoittajan pyörimisnopeutta vaihdettiin tietyn ajan kuluttua. Sekoittajan pyörimisnopeus vaihdettiin kolmannessa simuloinnissa 25 kierroksesta minuutissa 5 kierrokseen minuutissa ja neljännessä simuloinnissa sekoittaja pysäytettiin. Sekoittajan pyörimisnopeuden muutokset tehtiin aina 8000 sekuntia reaktorin käynnistämistä. (Milewska & Molga 2007, s. 4921–4922).

Simulointien annettiin käydä reaktorin keskilämpötilan tasaantumiseen asti tai lämpötilan karkaamista reaktorin maksimilämpötilaan 98 celsiusasteeseen. Reaktorin maksimilämpötilan ylitys laukaisee aina hälytyksen. Ensimmäisessä simuloinnissa, jossa reaktorin pohjan lämpötila oli 75 astetta, reaktorin lämpötila karkasi yli maksimilämpötilan vähän

yli 2000 sekunnin jälkeen. Toisessa simuloinnissa (pohjan lämpötila 60 astetta) keskilämpötila tasaantui 8000 sekunnissa 80 asteeseen. Kolmannessa simuloinnissa (pohjan lämpötila 60 astetta) sekoittajan nopeutta laskettiin 25 kierroksesta minuutissa viiteen kierrokseen minuutissa. Nopeuden muutoksen jälkeen huomattiin keskilämpötilan nousu ja tasaantuminen noin 95 asteeseen. Viimeisessä simuloinnissa (pohjan lämpötila 60 astetta) sekoittaja pysäytettiin ja tuloksena oli lämpötilan karkaaminen lähelle 150 astetta. Tarkemmin simulointituloksia voi tarkastella Milewskan ja Molgan artikkelista (2007, s. 4923).

Tutkimustuloksien avulla voidaan määrittää reaktorin sopiva käyttölämpötila, suunnitella hälytysjärjestelmä ja toimenpiteet sekoittajan rikkoutumisen varalle. Hälytysjärjestelmän suunnittelussa tulee kiinnittää huomiota lämpötilamittareiden sijoitteluun, koska lämpötilan karkaaminen on hyvin paikallista. Tällaisen tapahtuman ajoissa huomaaminen on elintärkeää lämpötilan karkaamisen estämiseksi. Sekoittajan rikkoutumisen varalle voidaan esimerkiksi käyttää jonkinlaista hidastinta. Hidastin olisi ainetta, jonka tarkoitus olisi hidastaa reaktorissa olevien aineiden reaktiota, mikä alentaisi reaktorin lämpötilaa. Tällaisen aineen syöttäminen reaktoriin pitäisi tutkia tarkkaan sen tarkoituksellisen toiminnan onnistumiseksi. CFD:n avulla huomattiin tilanteita, jotka voivat johtaa sekoitussäiliöreaktoreiden onnettomuuksiin. (Milewska & Molga 2007, s. 4922–4924).

4.1.2 Luisti- ja logiikkaventtiilien painehäviöiden vertailu

Lisowskin & Raidan tutkimuksessa tarkoituksena oli selvittää CFD-analyysin avulla erilaisten venttiilien vaikutusta painehäviöiden vaihteluun. Ensimmäinen venttiili oli 4/3-luistiventtiili, jota ohjataan toisella solenoidikäyttöisellä 4/3-luistiventtiilillä. Toinen eli tutkimuksen testiventtiili koostui neljästä logiikkaventtiilistä, joita ohjattaisiin myös solenoidikäyttöisellä 4/3-luistiventtiilillä. Syy painehäviöiden tarkastelulle oli saada energian kulu- tusta pienemmäksi valitsemalla vähemmän painehäviötä tuottava venttiili. CFD-analyysi valittiin tutkimuksen toteutustavaksi, koska virtausta on vaikeaa tutkia venttiilien sisällä. (Lisowski & Rajda 2012, s. 285–286)

CFD-analyysi toteutettiin vain logiikkaventtiileistä kootulle venttiilille, koska 4/3-luistiventtiilin painehäviökäyrä saatiin suoraan valmistajan tiedoista. Analyysissa käytettiin Ansys Fluent -ohjelmistoa ja virtauslaskentamallina toimi RANS:n standard $k-\epsilon$ malli. Logiikka-venttiileistä koottu venttiili 3D-mallinnettiin Solid Edge -ohjelmistolla, mikä siirrettiin sitten Ansyskseen. Laskentaverkoston luonnissa yksinkertaiset seinämäkohdat tehtiin ohjelmis- ton oletuksella ja vaikeat geometriat jalostettiin paremmaksi. Laskentaverkoston solujen

määräksi saatiin noin 630–650 tuhatta solua yhdelle linjalle. Linjoja molemmissa venttiileissä olivat PA (painelinja A puolelle), PB (painelinja B puolelle), AT (paluu A puolelta tankkiin) ja BT (B puolelta paluu tankkiin). Venttiilin läpi virtasi hydraulioöljyä, joka ajateltiin kokoonpuristumattomaksi, nopeuksilla 4, 8, 12 ja 16 m/s. Muita analyysissä käytettyjä oletuksia olivat, että seinämillä ei tapahdu luistoa, hydraulioöljyn ominaisuudet pysyvät vakioina ja öljyn viskositeetti on $41 \text{ mm}^2/\text{s}$. (Lisowski & Rajda 2012, s. 285–289)

Venttiilien painehäviöiden arvioiminen on määritelty ISO-standardin mukaisesti, joten valmistajan ja CFD-analyysin tuloksia voitiin verrata keskenään. 4/3-luistiventtiilin painehäviöt olivat valmistajan tietojen mukaan 0.4–2.6 MPa tilavuusvirroilla 100–440 l/min. BT-linjalla painehäviö oli kaikista suurin, mutta tämä erotus muista linjoista ei ollut merkittävä. CFD-analyysillä saadut tulokset logiikkaventtiilien painehäviöistä samalla tilavuusvirta alueella kuin luistiventtiilillä ovat 0.08–1.6 MPa. Myös logiikkaventtiilillä BT-linja tuotti eniten painehäviötä. CFD-analyysin validoimiseksi mittaukset tehtiin myös kokeellisesti logiikkaventtiilin prototyypillä. Kokeelliset tulokset olivat hyvin samankaltaisia CFD-analyysin tuloksien kanssa, mistä kertoo se, että näiden tulosten poikkeavuudet eivät ylittäneet viiden prosentin rajaa missään vaiheessa. CFD-analyysin tuloksia voidaan pitää luotettavina tuloksina, joten tuloksia voidaan nyt verrata luistiventtiilin tuloksiin. (Lisowski & Rajda 2012, s. 289–291)

Luisti- ja logiikkaventtiilien painehäviöissä oli selvä ero logiikkaventtiilien hyväksi. Painehäviöiden minimoimiseksi kannattaa siis tutkimuksen mukaan käyttää logiikkaventtiileitä. CFD:n avulla saatiin tutkimuksessa mallinnettua hydraulioöljyn virtausta ja sen käyttäytymistä venttiilissä, mitä olisi muuten vaikeaa tutkia. Vaikka venttiiliä pystyttiin tutki-
maan ennen fyysistä venttiiliä, fyysinen prototyyppi piti rakentaa CFD:n tulosten validoimiseksi. (Lisowski & Rajda 2012, s. 290–291)

4.2 Käytettävyys

Numeerisessa virtauslaskennassa on paljon huomioitavaa, kuten edellä on jo mainittu. Kootaan vielä taulukko edellä mainituista epäluotettavuustekijöistä ja yhdistetään niihin niiden yleisimpiä virhelähteitä.

Taulukko 1. Epäluotettavuustekijöiden yhteydet yleisimpiin virhelähteisiin.

		Virhelähteet			
		Kokeelliset mittaukset	Laskentateho	Sovelluskohteen malligeometria	Virtaava aine
Epäluotetta- vuustekijät	Virtausongelman määrittely	X		X	X
	Laskentaverkosto		X	X	
	Lähtötiedot ja rajaehdot	X		X	X
	virtausmallin varmennus ja tulosten vahvistus	X	X		
	virtausmallikohtaiset ongelmat		X		X

Taulukosta 1 huomataan, että yleisimmät virhelähteet voivat vaikuttaa useampaan kuin yhteen epäluotettavuustekijään. Esimerkiksi laskentatehon saatavuus vaikuttaa laskentaverkoston kokoon, mallin varmennukseen ja tulosten vahvistukseen käytetyn ajan määrään ja mallikohtaisiin ongelmiin laskentatehon suuren tarpeen vuoksi. CFD:n ajatellaan korvaavan kokeelliset mittaukset, sillä se on halvempaa ja nopeampaa, mutta ilman kokeellisia mittauksia ei esimerkiksi CFD-analyysin tuloksia voitaisi vahvistaa hyväksytyiksi.

Tarkastellaan miten taulukon 1 esittämät asiat heijastuvat luvussa 4.1 esitettyihin esimerkkeihin. Aloitetaan sekoitussäiliöreaktorista, 3D-malligeometria, johon oli tehty 340 tuhat soluinen laskentaverkosto. Solujen määrä oli valittu edellisten kokeiden perusteella. Edellisten kokeiden tuloksista ei kuitenkaan puhuttu mitään, että olisivatko ne olleet hyväksytyjä tuloksia vai epätarkkoja tuloksia. Mietityttämään jäi, oliko käytetty laskentaverkosto riittävän ”hyvä”. Myöskään tulosten vahvistuksesta ei puhuttu mitään, joten tuloksissa voi olla virhettä tulosten validoinnin puuttumisen takia. Sovelluksen malligeometria ja virtaavat aineet ovat hyvin tiedossa, joten niiden aiheuttamat virheet ovat vähäisiä. Virtausmallikohtainen ongelma oli MRF-menetelmä ja sen aiheuttamat laskentakustannukset.

Venttiilien painehäviöiden vertailu -esimerkissä virheiden määrä on selvästi pienempi kuin sekoitussäiliöreaktori -esimerkissä. Syitä tälle ovat tuplasti tiheämpi laskentaverkosto, tulokset on varmennettu kokeellisilla tuloksilla ja venttiileissä ei tarvinnut käyttää MRF-menetelmää. Venttiileissä virtaavalle aineelle oli tehty erilaisia yleistyksiä laskentakustannusten pienentämiseksi, mutta samalla se vaikuttaa taulukon 1 mukaisesti epävarmuustekijöihin ja siten aiheuttaa samalla virhettä. Tutkimuksessa käytettiin myös

RANS:n standard $k-\epsilon$ mallia, mutta olisiko tutkimuksessa voitu käyttää esimerkiksi LES-mallia tai jotain RANS:n kehittyneempää versiota, koska RANS:n standard $k-\epsilon$ mallin käyttöä ei perusteltu mitenkään.

Numeerisella virtauslaskennalla on monta tekijää, jotka voivat aiheuttaa epäluotettavuutta simuloinnin tuloksille. Jos nämä epäluotettavuustekijät otetaan kunnolla huomioon, on CFD:stä paljon hyötyä monelle eri alalle.

Taulukko 2. Eri lähteiden CFD:n hyötyjä ja esimerkkejä CFD:n käyttökohteista.

Vuosi	Lähde	Hyötyjä	Esimerkki Käyttökohteita tai käyttöaloja	Mahdolliset vaikeudet CFD:n käytössä
2004	Bakker	Skaalattavuus, ongelmien juurisyiden löytäminen, uusien kappaleiden nopea testaus ja "mitä jos" kysymykset	Prosessiteollisuus, polttomoottori	Kemiallisten reaktioiden mallinnus ja liikkuvat osat
2004	The engineer	Suunnittelun tarkkuus ja hyvä toistettavuus, halvempi kuin tuulitunnelitestit	Autoteollisuus, ilmastointi ja metsäpalot	Vaikeat muodot ja kemiallisten reaktioiden mallinnus
2010	de Islabao et al.	Tehokkuus, erilaisten tilanteiden testaus ja turvallisuus	Kemianteollisuus, ydinvoimalat	Kemiallisten reaktioiden mallinnus ja tiedon puute
2012	Nopens et al.	Suunnitelman analysointi ja optimointi	Ympäristötekniikka, konetekniikka ja lentotekniikka	Vaikeat muodot, hankalat olosuhteet ja väärinkäyttö
2019	Al-Baghdadi	Tuotekehitys, erilaisten tilanteiden testaus ennen fyysisten prototyyppien rakennusta, turvallisuus ja edullisuus	Biotekniikka, aerodynamiikka, hydraulikka ja urheilu	Vaikeat muodot ja sovelluksen ymmärryksen puute

Taulukkoon 2 on koottu eri lähteissä mainittuja hyötyjä CFD:n käytöstä ja useimmat niistä liittyvät suunnitteluun ja tuotekehitykseen. Suunnitteluun ja tuotekehitykseen voidaan olettaa kuuluvan suunnitelmien analysointi ja optimointi. Muita usein mainittuja hyötyjä ovat turvallisuus ja edullisuus verrattuna fyysisten laitteiden oikeaan testaukseen. Joitakin järjestelmiä voi olla riskialtista testata käytännössä, joten CFD:n avulla voidaan välttyä tapaturmilta. Edullisuus mainittiin osissa lähteissä, mutta niissäkään ei kerrottu oikeita lukuja siitä, miten paljon CFD:n käyttö olisi halvempaa kuin esimerkiksi rakentaa prototyyppin rakentaminen ja tehdä kokeita sen avulla. Taulukossa 2 mainittu tehokkuus ilmenee suunnitelmien nopeampana ja edullisempänä testauksena, kun fyysistä osaa tai järjestelmää ei tarvitse rakentaa. Taulukossa 2 esitetyt lähteet ovat 15 vuoden jakaumalta. Tästä voidaan päätellä, että CFD:n hyödyt ovat pysyneet lähes samoina ajan kuluessa.

Numeerista virtauslaskentaa voidaan soveltaa hyvin monelle alalle, kuten taulukossa 2 on esitelty. Ehkä suurimpina aloina voidaan pitää prosessiteollisuutta ja aerodynamiikkaa soveltavia aloja. Jokaisella CFD:tä käytävällä alalla on omat vaikeutensa luotettavien tai riittävien simulaatiotulosten saavuttamiseksi, mitä on myös taulukossa 2 pyritty kuvaamaan.

5. JOHTOPÄÄTÖKSET

Työn tarkoituksena oli tutustua numeeriseen virtauslaskentaan ja sen luotettavuuteen sekä siihen, miksi kannattaa käyttää numeerista virtauslaskentaa vanhojen menetelmien sijaan. Numeerisen virtauslaskennan luotettavuus nousi suureen osaan koko työtä ja antoi hyvän kuvan siitä, mitä kaikkea numeerisessa virtauslaskennassa tulee ottaa huomioon. Lopuksi työssä pohdittiin CFD:n käyttömahdollisuuksia.

Numeerisen virtauslaskennan toimintaperiaate tuli kirjallisuudesta hyvin selväksi: malligeometriaan luodaan laskentaverkosto ja hankitaan tarvittavat lähtötiedot, joilla tehdään simulaatio ja saatuja tuloksia vertaillaan kokeellisesti saatuihin tuloksiin. CFD:n teoria perustui massan, liikemäärän ja energian säilymlakeihin. Tarkemmin erilaisten virtausmallien teoriaan ei perehdytty, koska haluttiin saada käsitys olemassa olevista virtausmalleista eikä vain yhdestä tietyistä virtausmallista. Olemassa olevista CFD-malleista yleisimmin käytetty malli on RANS-malli sen riittävän tarkkuuden ja siedettävien laskentakustannusten perusteella. Laskentakustannuksilla tarkoitetaan simulointiin käytettyä aikaa ja simuloinnissa käytettyä tietokoneen laskentakoneiston eli prosessorien varaamista vain simuloinnin käyttöön. Laskentatehon jatkaessa kasvua laskentakustannukset tippuvat ja RANS-malli voidaan korvata jollain tarkemmalla mallilla.

Yleisimpiä epäluotettavuustekijöitä numeeriselle virtauslaskennalle löytyy neljä kappaletta. Näitä ovat virtausongelman määrittely, laskentaverkosto, lähtötiedot ja rajaehdot sekä mallien varmennus ja tulosten vahvistus. Virtausongelman määrittelyyn sisältyy pohdinnat virtauksen tyypistä, mikä virtausmalli kannattaa valita ja voidaanko käyttää 2D-mallia 3D-mallin sijaan. Laskentaverkoston suurin ongelma ja epäluotettavuuden lähde on verkoston solujen määrä ja verkoston rakentaminen. Ratkaisuehdotukseksi esiteltiin adaptoituvaa verkostoa, joka itsestään osaisi rakentua hyväksi laskentaverkostoksi. Tiedon puute tarkasteltavan sovelluksen olosuhteista on suurin syy lähtötiedoissa ja rajaehdoissa esiintyvälle epävarmuudelle. Joissakin tapauksissa sovellus on niin hyvin tiedetty, että lähtötietojen epävarmuus on hyvin vähäinen verrattuna muihin virhelähteisiin. Mallien varmennus ja tulosten validointi riippuu saatavilla olevasta datasta. Esimerkiksi jostain sovelluksesta voi olla saatavilla hyvin dataa, johon verrata omia tuloksia ja vastaavasti jostain sovelluksesta ei ole saatavilla validointidataa.

Numeerisen virtauslaskennan käytölle löytyi kirjallisuudesta monta sen käyttöä tukevaa etua. Näistä esimerkkeinä ovat turvallisuus, erilaisten suunnitelmien testaus ja järjestel-

mien optimointi. Aloja ja sovelluskohteita, missä CFD:tä voisi käyttää, löytyi kirjallisuudesta paljon, joten CFD-mallien ja ohjelmistojen kehittämiseksi on tilausta. Esimerkkinä näistä aloista ja sovelluskohteista ovat prosessiteollisuudessa sekoitussäiliö ja aerodynamiikkaa hyödyntävä autoteollisuus. Tietokoneiden laskentatehon jatkaessa kasvua, uskon myös CFD-ohjelmistojen kehittyvän, koska CFD:llä on suuret laskentakustannukset.

Työn aiheeseen tutustuessa sain helposti kuvan, että CFD-ohjelmistolla simulointi on helppoa, nopeaa ja tulokset ovat yhtä tarkkoja kokeellisten mittausten kanssa. Tämän takia tässä työssä keskityin CFD:n luotettavuuteen ja mitä kaikkea siinä pitää ottaa huomioon. Vaikka CFD-ohjelmistot ovat helpompia oppia ja käyttäjäystävällisiä, ohjelmistoa käyttävän pitää silti tietää mitä tekee ja ymmärtää virtauslaskennan teoriaa. CFD:tä voidaan käyttää monella alalla ja sillä on etuja verrattuna vanhempiin suunnittelumenetelmiin, mutta CFD:llä on myös omat huonot puolensa. Näihin huonoihin puoliin on tärkeää kiinnittää huomiota, jos haluaa saada hyviä simulointituloksia.

Aihekentän rajaamiseksi en tarkastellut työssäni lainkaan kemiallisten reaktioiden vaikutusta epävarmuuteen ja myös yksittäisten virtausmallien epävarmuuksien tarkastelu on vähäistä. Näitä kahta asiaa kannattaisi lähteä tutkimaan, jos haluaisi lisää tietoa CFD:n luotettavuudesta. CFD:n luotettavuus ja tarkkuus tulevat parantumaan, mutta se ei tapahdu hetkessä, joten tutkittavaa riittää paljon.

LÄHTEET

- Al-Baghdadi, M. A. R. S. (2019) 'Applications of Computational Fluid Dynamics (CFD) technology in engineering education', *International Journal of Energy and Environment*, 10(1), s. 1–14.
- Allmaras, S. R. et al. (2009) 'Algorithm issues and challenges associated with the development of robust CFD codes', in *Springer Optimization and Its Applications*. Springer International Publishing, s. 1–19. doi: 10.1007/978-0-387-95857-6_1.
- Andersson, B. et al. (2011) *Computational Fluid Dynamics for Engineers*. Cambridge: Cambridge University Press. Saatavissa: <https://ebookcentral.proquest.com/lib/tampere/detail.action?docID=824472> (Viitattu: 28.3.2021).
- Ansys Fluent | Fluid Simulation Software. Saatavissa: <https://www.ansys.com/products/fluids/ansys-fluent> (Viitattu: 30.4.2021).
- Bakker, A., Haidari, A. H. and Oshinowo, L. M. (2001) 'Realize greater benefits from CFD', *Chemical Engineering Progress*, 97(3), s. 45–53.
- Crespo, A. C. et al. (2011) 'GPUs, a New Tool of Acceleration in CFD: Efficiency and Reliability on Smoothed Particle Hydrodynamics Methods', *PLoS ONE*. Muokattu J. Langowski, 6(6), s. e20685. doi: 10.1371/journal.pone.0020685.
- de Islabão, G. I., da Silva Pinto, J. C. C. and dos Santos Vianna, A. (2010) 'Technological trends in CFD applications', *Journal of Technology Management and Innovation*, 5(2), s. 76–83. doi: 10.4067/s0718-27242010000200007.
- Gousseau, P., Blocken, B. and Van Heijst, G. J. F. (2013) 'Quality assessment of Large-Eddy Simulation of wind flow around a high-rise building: Validation and solution verification', *Computers and Fluids*, 79, s. 120–133. doi: 10.1016/j.compfluid.2013.03.006.
- Hirsch, C. (2007) *Numerical Computation of Internal and External Flows: The Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*, *Numerical Computation of Internal and External Flows: The Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*. Elsevier Ltd. doi: 10.1016/B978-0-7506-6594-0.X5037-1.
- Jamshed, S. (2015) *Using HPC for Computational Fluid Dynamics*, *Using HPC for Computational Fluid Dynamics*. doi: 10.1016/c2014-0-00508-4.
- Karpinska, A. M. and Bridgeman, J. (2016) 'CFD-aided modelling of activated sludge systems - A critical review', *Water Research*. Elsevier Ltd, s. 861–879. doi: 10.1016/j.watres.2015.11.008.
- Lisowski, E. and Rajda, J. (2013) 'CFD analysis of pressure loss during flow by hydraulic directional control valve constructed from logic valves', *Energy Conversion and Management*, 65, s. 285–291. doi: 10.1016/j.enconman.2012.08.015.
- Mann, U. (2009) *Principles of Chemical Reactor Analysis and Design: New Tools for Industrial Chemical Reactor Operations*. Hoboken, UNITED STATES: John Wiley & Sons, Incorporated. Saatavissa: <http://ebookcentral.proquest.com/lib/tampere/detail.action?docID=427787>. (Viitattu: 30.4.2021)
- Milewska, A. and Molga, E. J. (2007) 'CFD simulation of accidents in industrial batch stirred tank reactors', *Chemical Engineering Science*, 62(18–20), s. 4920–4925. doi: 10.1016/j.ces.2006.12.036.
- Nopens, I. et al. (2012) 'Computational fluid dynamics (CFD): What is good CFD-modeling practice and what can be the added value of CFD models to WWTP modeling?', in

- WEFTEC 2012 - 85th Annual Technical Exhibition and Conference. Water Environment Federation, s. 7400–7405. doi: 10.2175/193864712811704161.
- Oberkampf, W. L. and Trucano, T. G. (2002) 'Verification and validation in computational fluid dynamics', *Progress in Aerospace Sciences*. Elsevier Ltd, s. 209–272. doi: 10.1016/S0376-0421(02)00005-2.
- OpenFOAM. Saatavissa: <https://www.openfoam.com/> (Viitattu: 30.4.2021).
- Phillips, T. S. et al. (2017) 'Error transport equation boundary conditions for the Euler and Navier–Stokes equations', *Journal of Computational Physics*, 330, s. 46–64. doi: 10.1016/j.jcp.2016.11.002.
- Rebba, R., Mahadevan, S. and Huang, S. (2006) 'Validation and error estimation of computational models', *Reliability Engineering and System Safety*, 91(10–11), s. 1390–1397. doi: 10.1016/j.ress.2005.11.035.
- Runchal, A. K. (2012) 'The future of CFD and the CFD of the future', in *International Symposium on Advances in Computational Heat Transfer*. Begell House Inc., s. 1–10. doi: 10.1615/ICHMT.2012.CHT-12.10.
- Salveti, M. V. et al. (2018) 'Reliability of large-eddy simulations: Benchmarking and uncertainty quantification', *ERCOFTAC Series*, 24, s. 15–23. doi: 10.1007/978-3-319-63212-4_2.
- Sanderse, B., Pijl, S. P. and Koren, B. (2011) 'Review of computational fluid dynamics for wind turbine wake aerodynamics', *Wind Energy*, 14(7), s. 799–819. doi: 10.1002/we.458.
- SOLIDWORKS Flow Simulation | SOLIDWORKS. Saatavissa: <https://www.solidworks.com/product/solidworks-flow-simulation> (Viitattu: 30.4.2021).
- Terziev, M., Tezdogan, T. and Incecik, A. (2020) 'A posteriori error and uncertainty estimation in computational ship hydrodynamics', *Ocean Engineering*, 208, p. 107434. doi: 10.1016/j.oceaneng.2020.107434.
- Tu, J., Yeoh, G.-H. and Liu, C. (2018) *Computational Fluid Dynamics - A Practical Approach* (3rd Edition) - Knovel.
- Wang, J.-X., Wu, J.-L. and Xiao, H. (2015) 'Incorporating Prior Knowledge for Quantifying and Reducing Model-Form Uncertainty in RANS Simulations', *International Journal for Uncertainty Quantification*, 6(2), s. 109–126. doi: 10.1615/Int.J.UncertaintyQuantification.2016015984.
- Xiao, H. and Cinnella, P. (2019) 'Quantification of model uncertainty in RANS simulations: A review', *Progress in Aerospace Sciences*. Elsevier Ltd, s. 1–31. doi: 10.1016/j.paerosci.2018.10.001.
- Zhang, X. et al. (2018) 'Investigation on the subcooled boiling in vertical pipe with uncertainties from boundary conditions by using FLUENT', *Frontiers in Energy Research*, 6(APR). doi: 10.3389/fenrg.2018.00023.