

OpenFOAM na VŠCHT: CFD a modelování separačních kolon



Martin Isoz

VŠCHT Praha, Ústav matematiky



2. seminář VŠCHT k OpenFOAM,
Praha 13. prosince 2016

Drobná organizační poznámka

Informace k semináři je možné nalézt na stránkách ústavu matematiky



Ústav matematiky VŠCHT - Mozilla Firefox

ústav.vsch.cz/math

 **Ústav matematiky**
Fakulta chemicko-technologická

VYSOKÁ ŠKOLA
CHEMICKO-TECHNOLOGICKÁ
V PRAZE

English 

Úvod
Výuka
Teaching in English
Doktorandské studium
Výzkum
Seminar
Kontakty
Seznam pracovníků
Užitečné odkazy

Úvodní stránka

Ústav zajišťuje výuku základních předmětů: **Seminář z matematiky**, **Základy matematiky**, **Matematika I.**, **Matematika II** pro všechny studijní obory školy a **Matematika A**, **Matematika B** pro studijní obor **Chemie**. Dále ústav zajišťuje výuku navazujících předmětů: **Aplikovaná statistika**, **Numerické metody**, **Matematika pro kvantovou chemii**, **Finanční matematika**, **Soustavy obyčejných diferenciálních rovnic**, **Parciální diferenciální rovnice**, **Matematika III**, **Fourierova transformace**, **Základy matematické optimizace**, **Matematika pro chemické inženýry**, **Úlohy matematika**, **Metody aplikované matematiky**, **Diskrétní matematika**, **Metody analýzy nelineárních dynamických modelů**, **Optimalizace inženýrských procesů**, **Matematické základy optimálního řízení a teorie her** a **Počítačové algebraické systémy - Maple**.

Ústav matematiky vyučuje každý rok [bakalářské a diplomové práce](#).

Na ústavu matematiky je akreditován doktorandský program **Aplikovaná matematika**, vysílané [dissertační práce](#).

Ústav matematiky pořádá 24. 6. - 26. 6. 2014
4th [Scientific Colloquium](#)

Aktuálně:
[Uzávěrání zápočtu](#) ZS 2016/17

Vědecko-výzkumná činnost

2. Seminář VŠCHT k OpenFOAM
OpenFOAM na VŠCHT
Úterý 13. 12. 2016, 17:00, učebna BII
Přijďte se podívat na možnosti aplikací matematiky v chemickém inženýrství

Time: 0.375 | $|\vec{U}|$ [m s⁻¹]
0.30
0.25
0.20
0.15
0.10
0.05
0.00
 p [Pa]
0.0
0.5
1.0

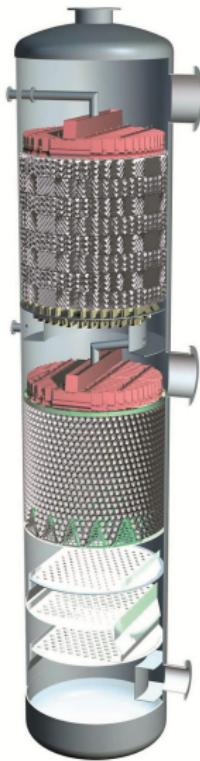


Úvod



Základní motivace výzkumu roztékání kapaliny

Různé aplikace, nás zajímá hydrodynamika kapalné fáze v plněných kolonách



Význam

- BASF: 2009, chemický průmysl se na celkové energetické spotřebě EU podílel 5%
- BASF: 50% z toho přímo souvisejelo s destilačními kolonami

Výzvy

- Vícefázové proudění → neustálený děj
- Komplexní geometrie
- Přestup hmoty a tepla

[Sulzer ChemTech]



Bilance hybnosti a hmoty, N fází

$$\rho_i \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{U}_i) + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{U}_i \otimes \mathbf{U}_i) = \nabla \cdot \tau + F_i, \quad i = 1, \dots, N$$

$$\rho_i = \rho(c_i, T_i), \quad \nabla \cdot (\mathbf{U}_i) = S_i^\rho = \sum_{j=1}^M \hat{R}_{i,j}^c$$

Přestup hmoty, M složek

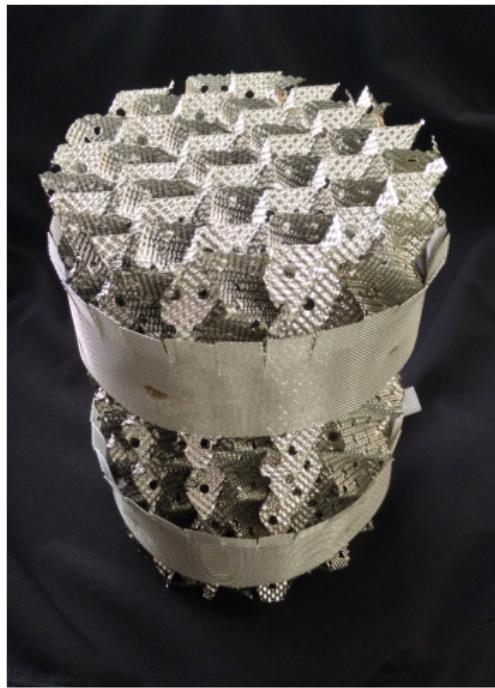
$$\frac{\partial}{\partial t} c_{i,j} + \nabla \cdot (\mathbf{U}_i c_{i,j}) = \nabla \cdot (\Gamma_{i,j}^c \nabla c_{i,j}) + S_{i,j}^c, \quad j = 1, \dots, M$$

Přestup tepla, N fází

$$\frac{\partial}{\partial t} T_i + \nabla \cdot (\mathbf{U}_i T_i) = \nabla \cdot (\Gamma_i^T \nabla T_i) + S_i^T, \quad i = 1, \dots, N$$

Strukturovaná výplň

Prohýbaný, perforovaný plech s texturou

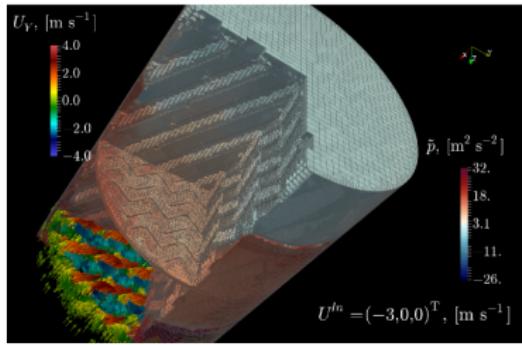


Možná zjednodušení

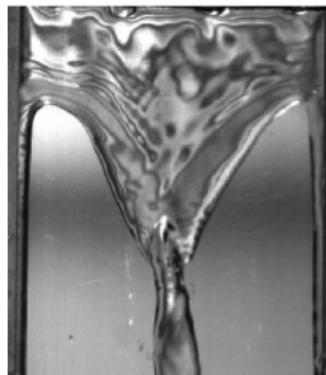
Zaměříme se vždy pouze na jeden aspekt (a to ještě pouze v hydrodynamice)



zachovej geometrii,
zjednoduš proudění

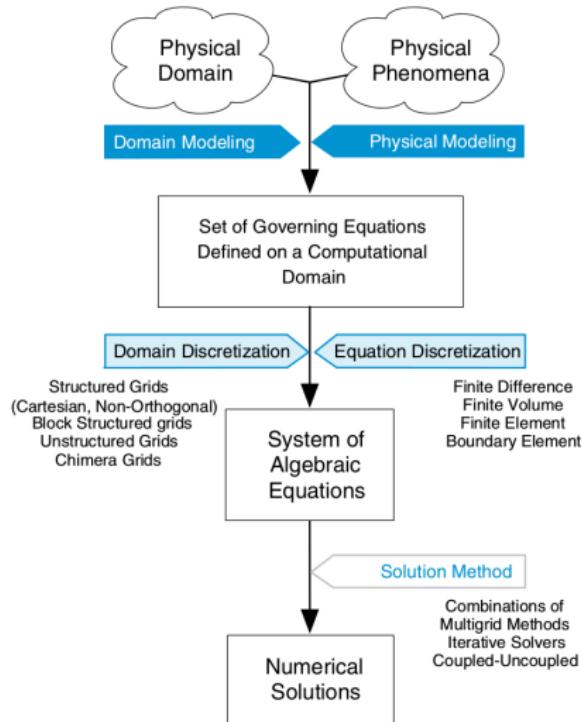


zjednoduš geometrii,
zachovej proudění



Přístup k modelování

Používáme komplexní sadu pokročilých matematických metod



[F. Moukalled et al., *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics, Fluid Mechanics and Its Applications* 113, Springer 2016]



Jednofázové proudění

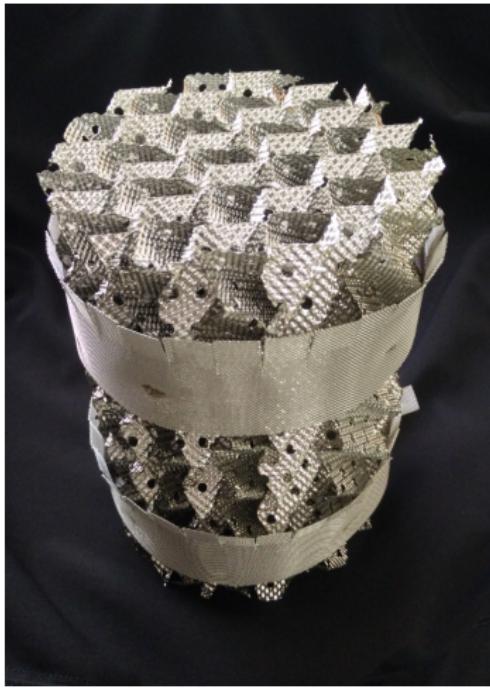


Geometrie problému

Mellapak 250.X & Mellapak 250.Y, 1 nebo 2 elementy výplně

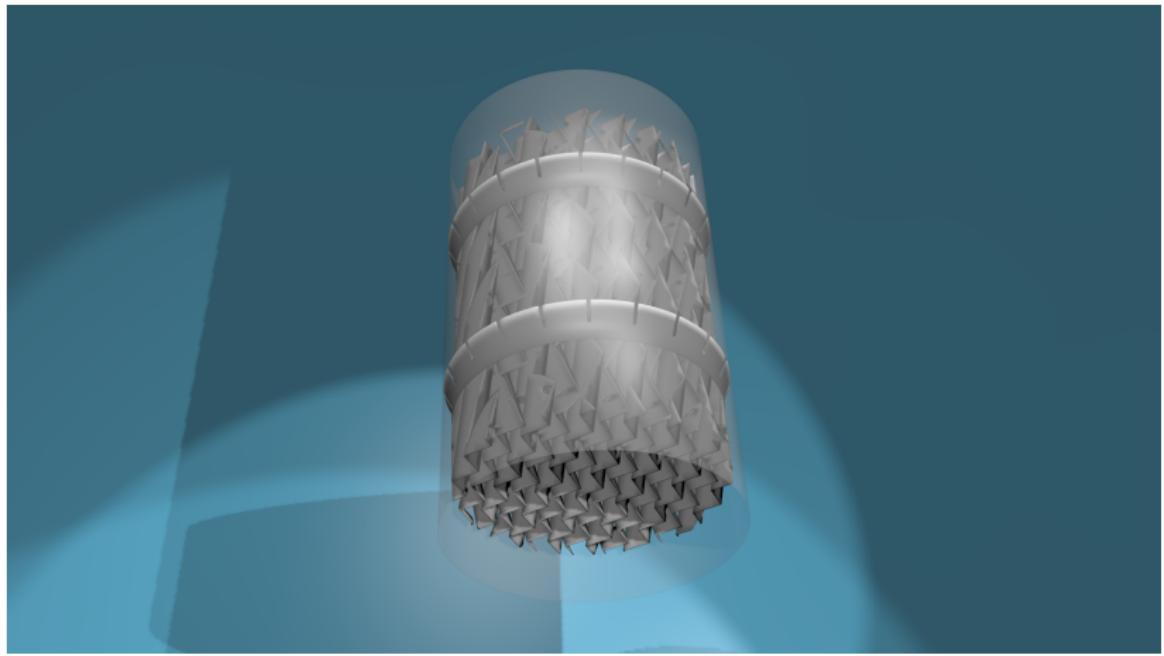


Princip: Zachovej geometrii, zjednoduš proudění



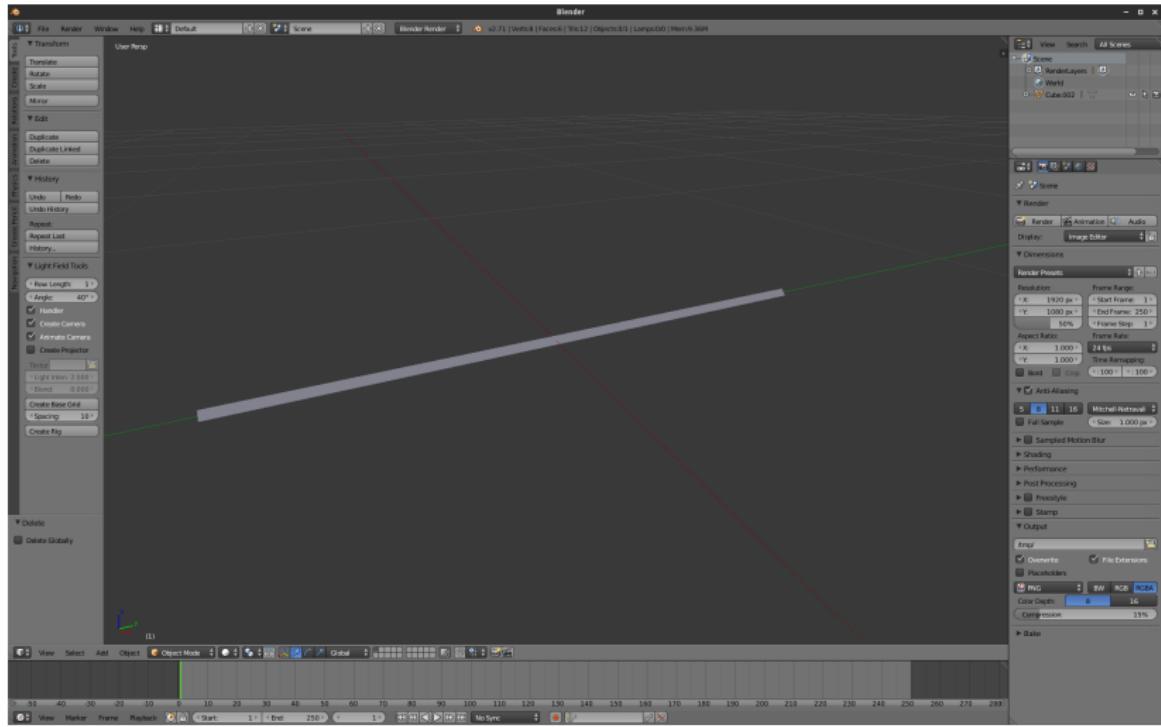


Geometrie: Mellapak 250.X, automaticky generovaná





Krok 1: Vytvoř první destičku

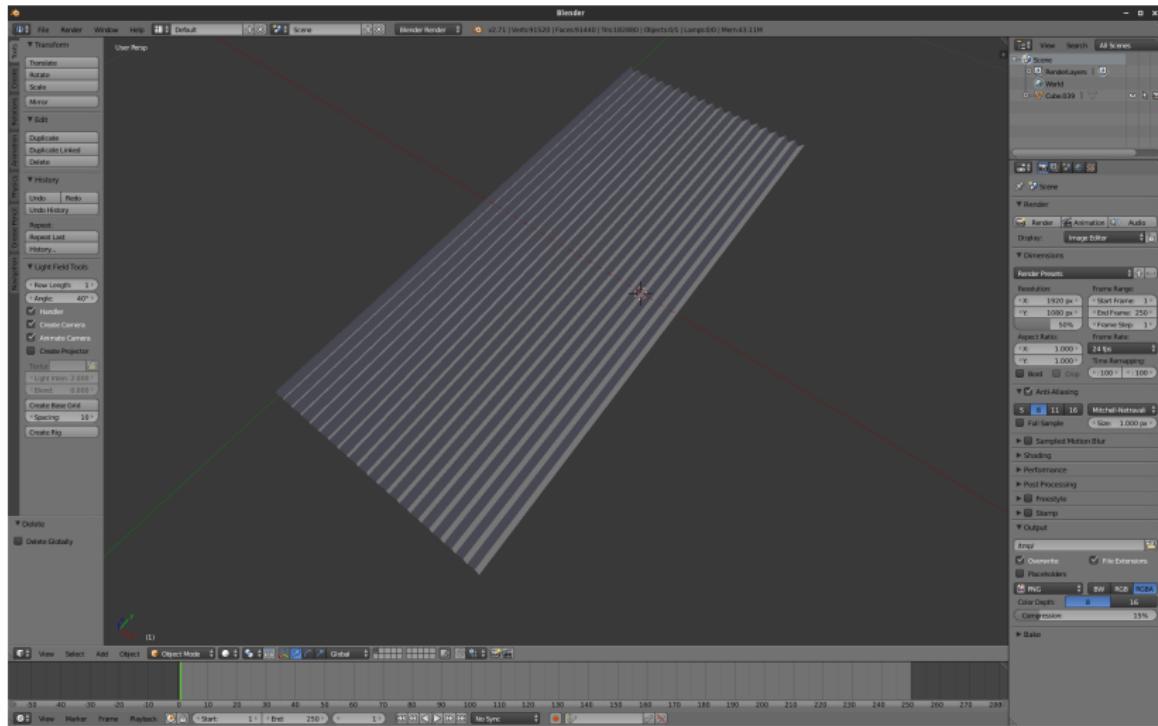


Generace geometrie

Jednoduché python-blender čarování

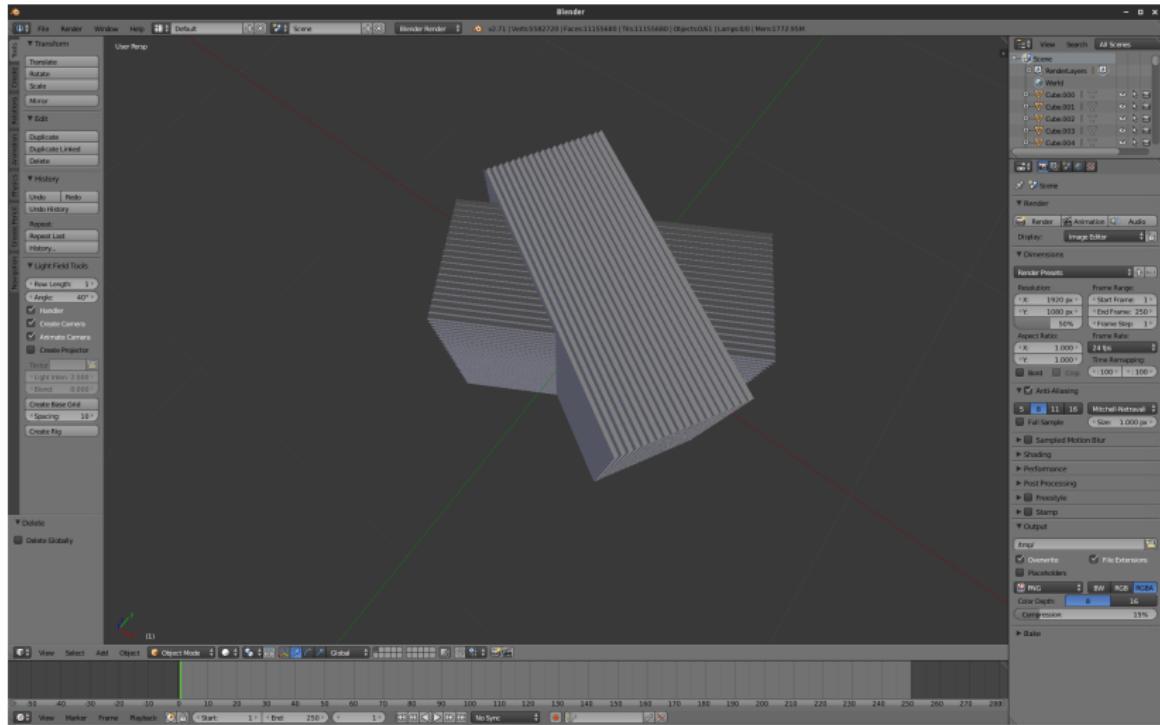


Krok 2: Poskládej 1 ohýbanou desku



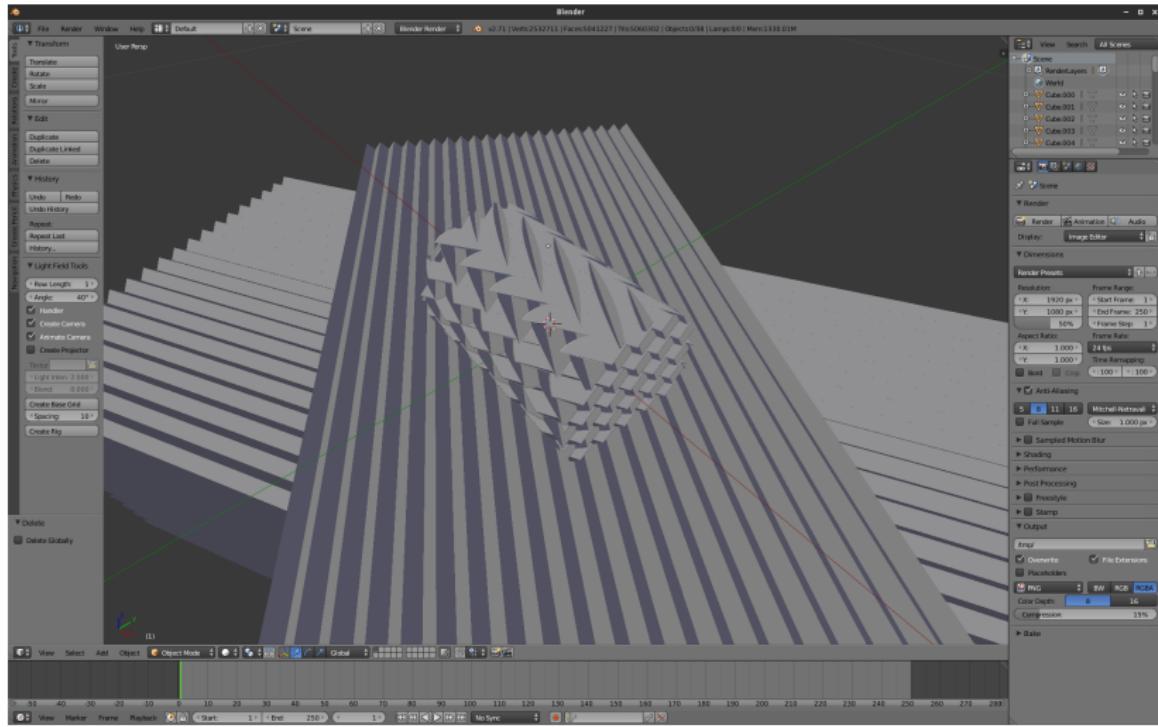


Krok 3: Poskládej celkovou strukturu výplně



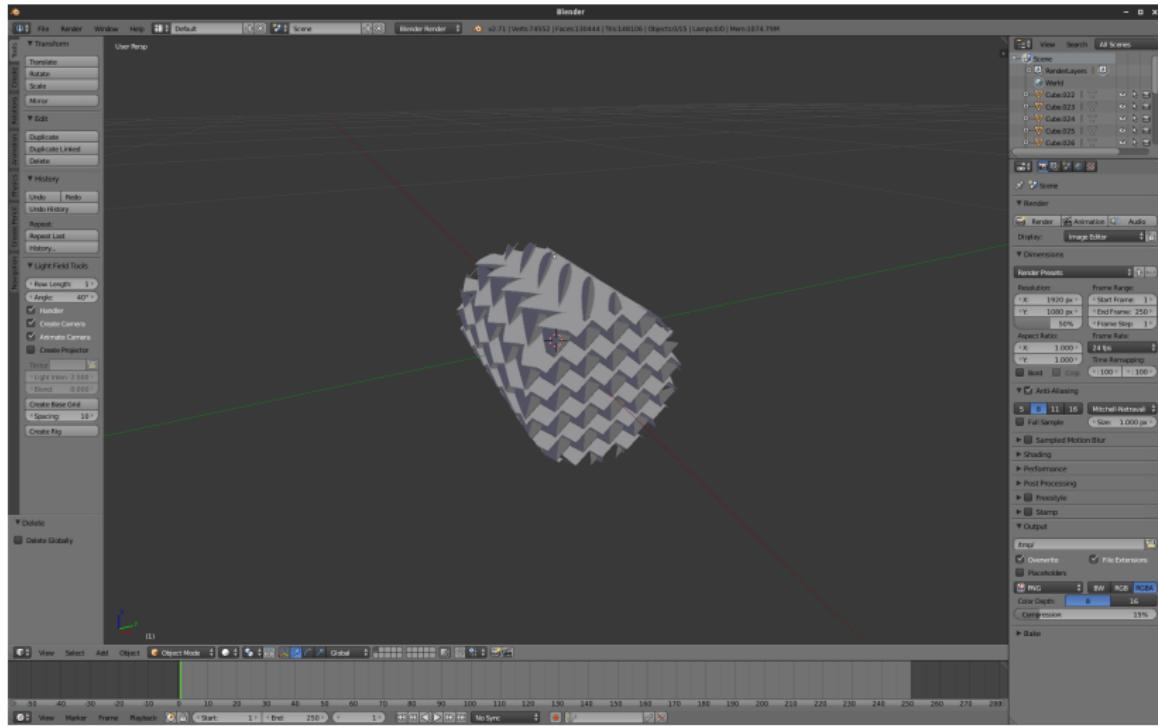


Krok 4: Vyřízní výplň



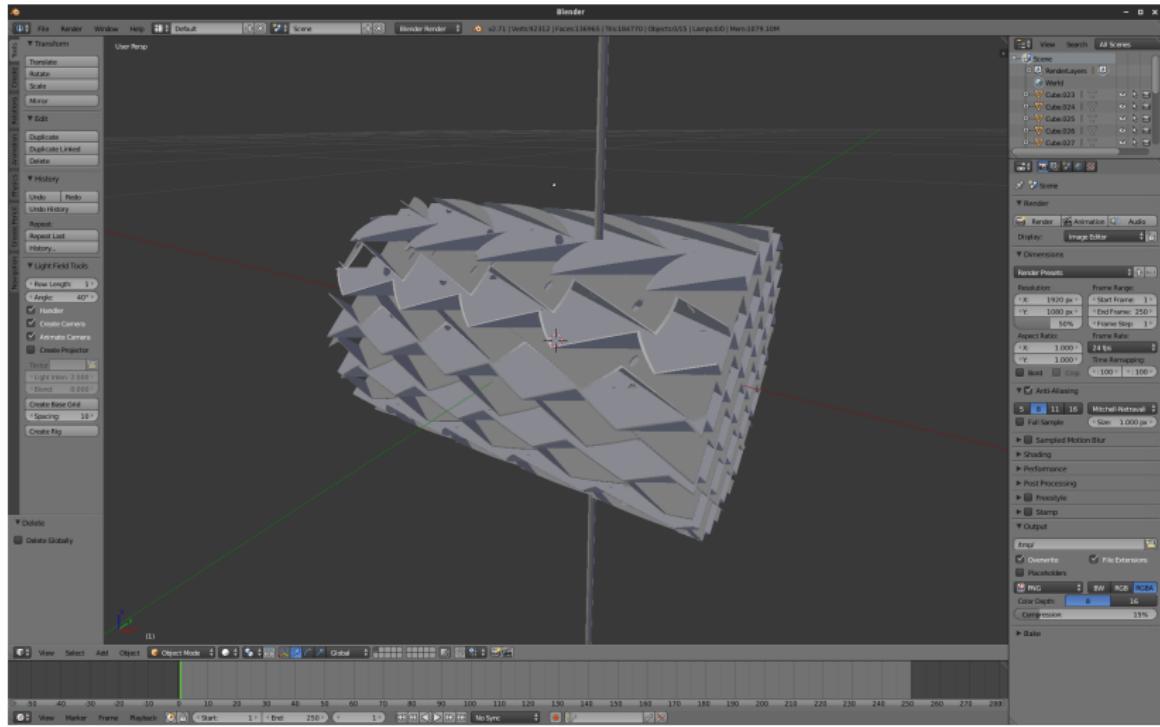


Krok 4: Vyřízní výplň





Krok 5: Perforuj výplň





Krok 6: Dokompletuj výplň a exportuj využitelný .stl soubor





Navier-Stokesovy rovnice

$$\begin{aligned}\textcolor{red}{\mathbf{U}_t} + \nabla \cdot (\mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) - \textcolor{blue}{\nabla \cdot \mathbb{T}} &= -\nabla \tilde{p} + \tilde{f} \\ \nabla \cdot \mathbf{U} &= 0\end{aligned}$$

SST $k - \omega$ model

$$\textcolor{red}{k_t} + \mathbf{U} \cdot \nabla k = \tilde{P}_k + \nabla \cdot [(\nu + \nu_t \sigma_k) \nabla k] - \beta^* k \omega$$

$$\textcolor{red}{\omega_t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \omega = \tilde{P}_\omega + \nabla \cdot [(\nu + \nu_t \sigma_{\omega,1}) \nabla \omega] \dots$$

$$\dots + \alpha S^2 - \beta \textcolor{blue}{\omega^2} + 2(1 - F_1) \sigma_{\omega,2} \frac{1}{\omega} \nabla k \cdot \nabla \omega$$

!! spousta konstant !!

BC

$$\begin{aligned}\mathbf{U} &= G(\mathbf{U}) \\ \tilde{p} &= H(p) \\ k &= K(k) \\ \omega &= L(\omega) \\ \text{na } &\partial\Omega^h\end{aligned}$$

IG

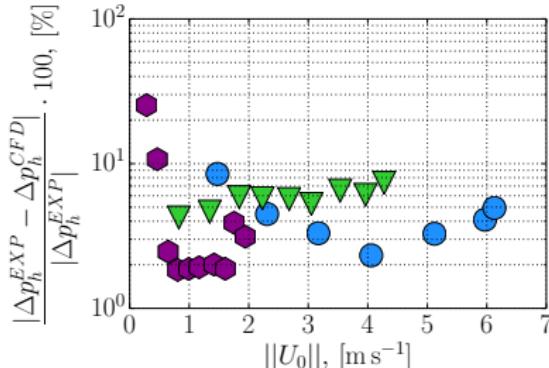
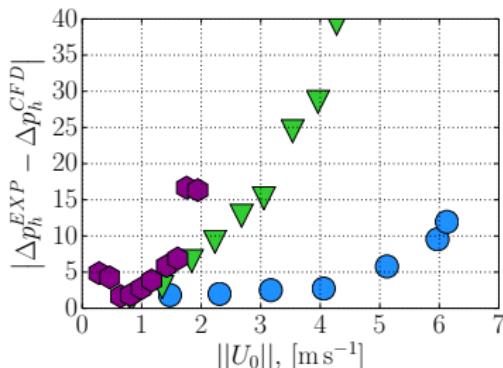
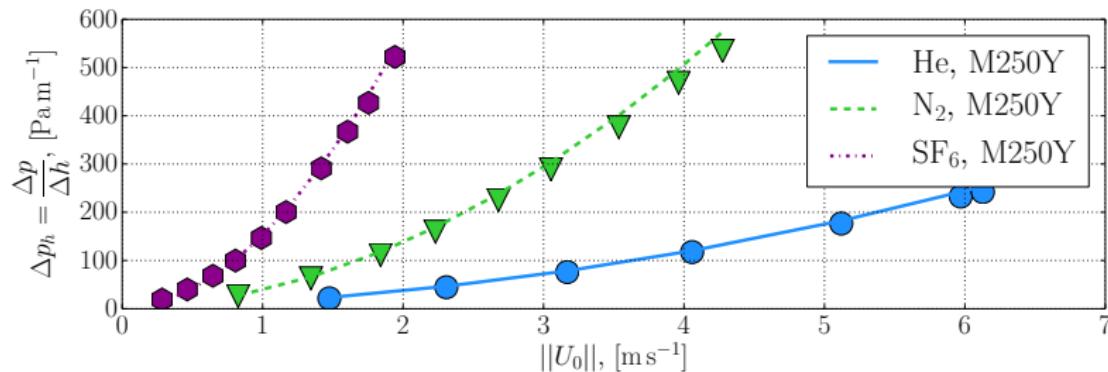
$$\begin{aligned}\mathbf{U}_0, \tilde{p}_0, k_0, \omega_0, \nu_0 \\ \mathbf{v} \Omega^h\end{aligned}$$

Výsledky modelu

Možnost studovat proudění plynu uvnitř plněných kolon

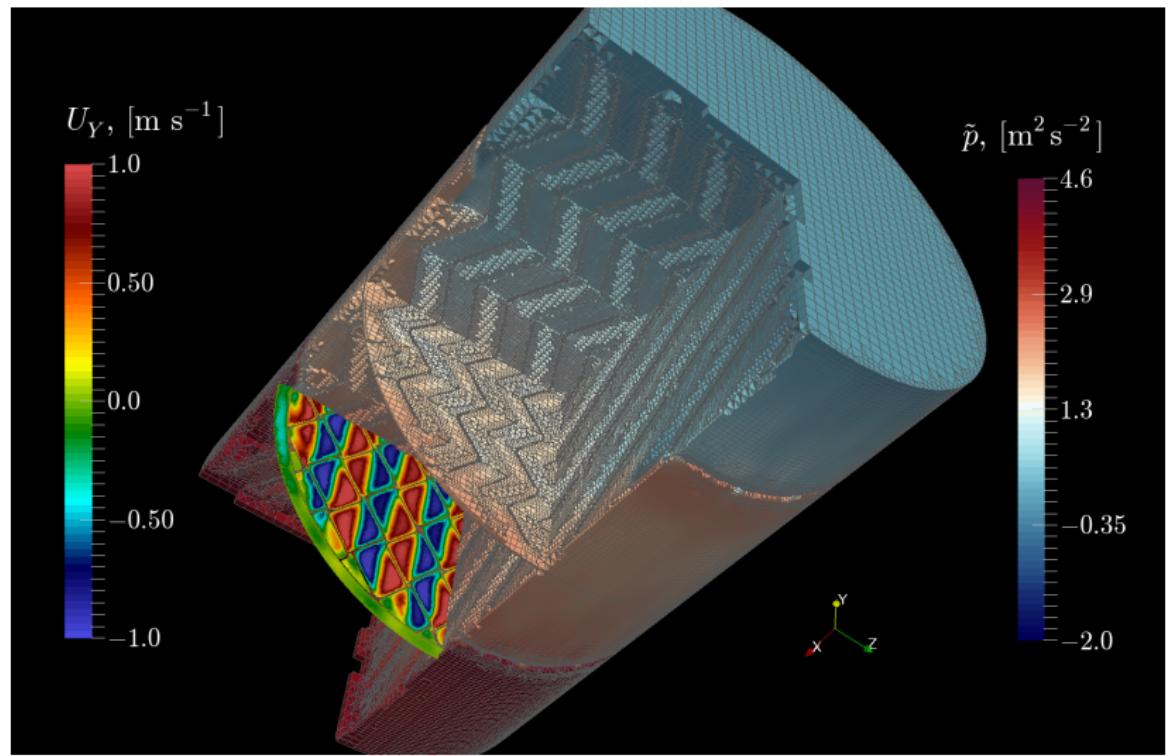


Validace modelu: Porovnání s experimentem [Haidl, J. UCT Prague]





Výsledky simulace: Tlakové a rychlostní pole

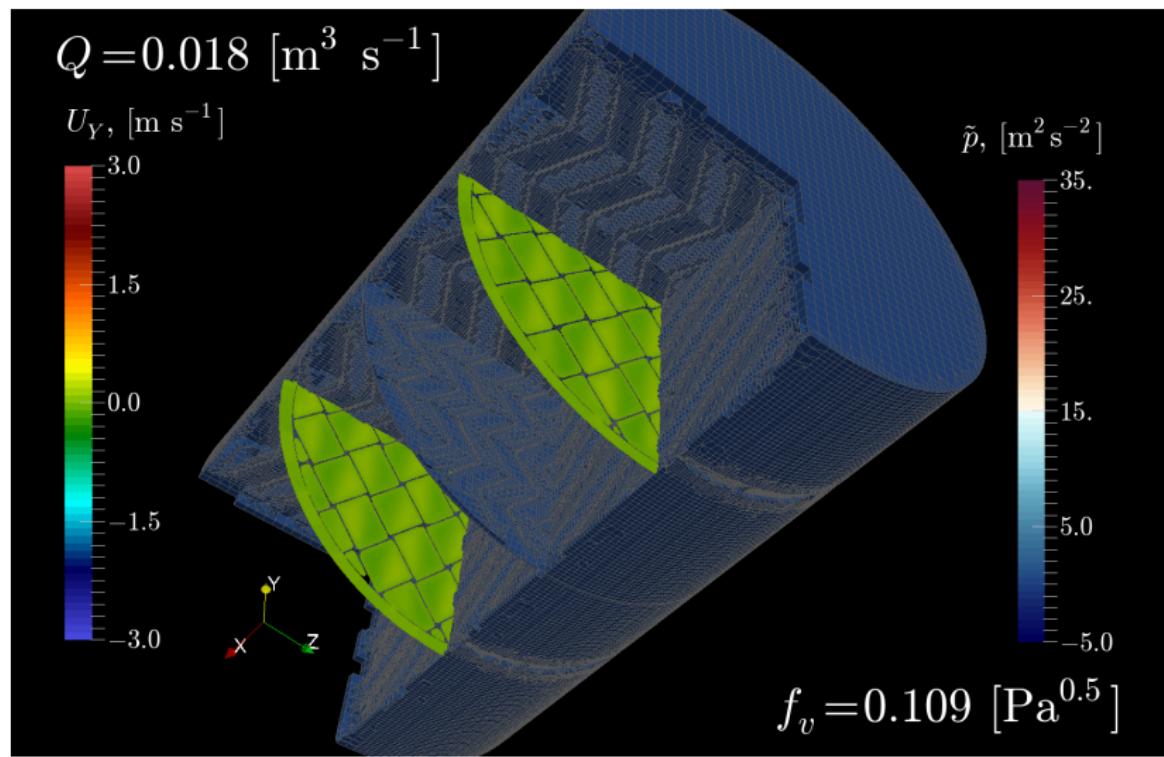


Výsledky modelu

Možnost studovat proudění plynu uvnitř plněných kolon



Výsledky simulace: Vývoj proudění v závislosti na f -faktoru

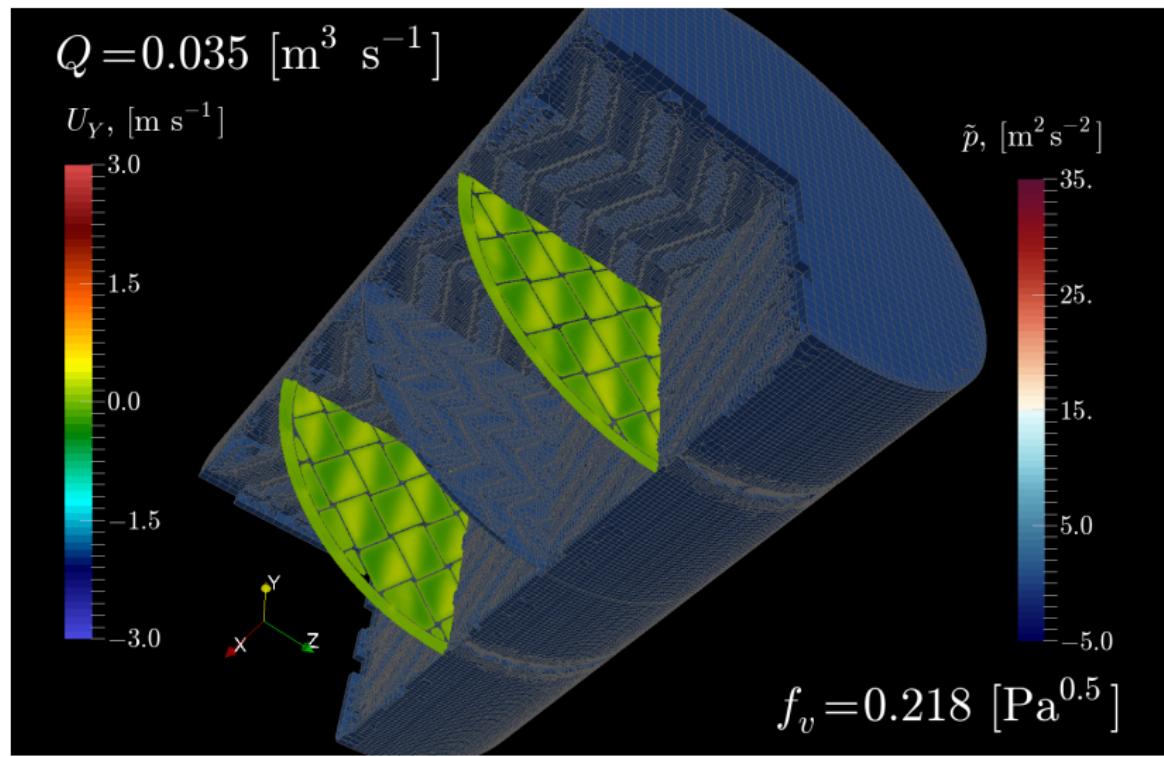


Výsledky modelu

Možnost studovat proudění plynu uvnitř plněných kolon



Výsledky simulace: Vývoj proudění v závislosti na f -faktoru

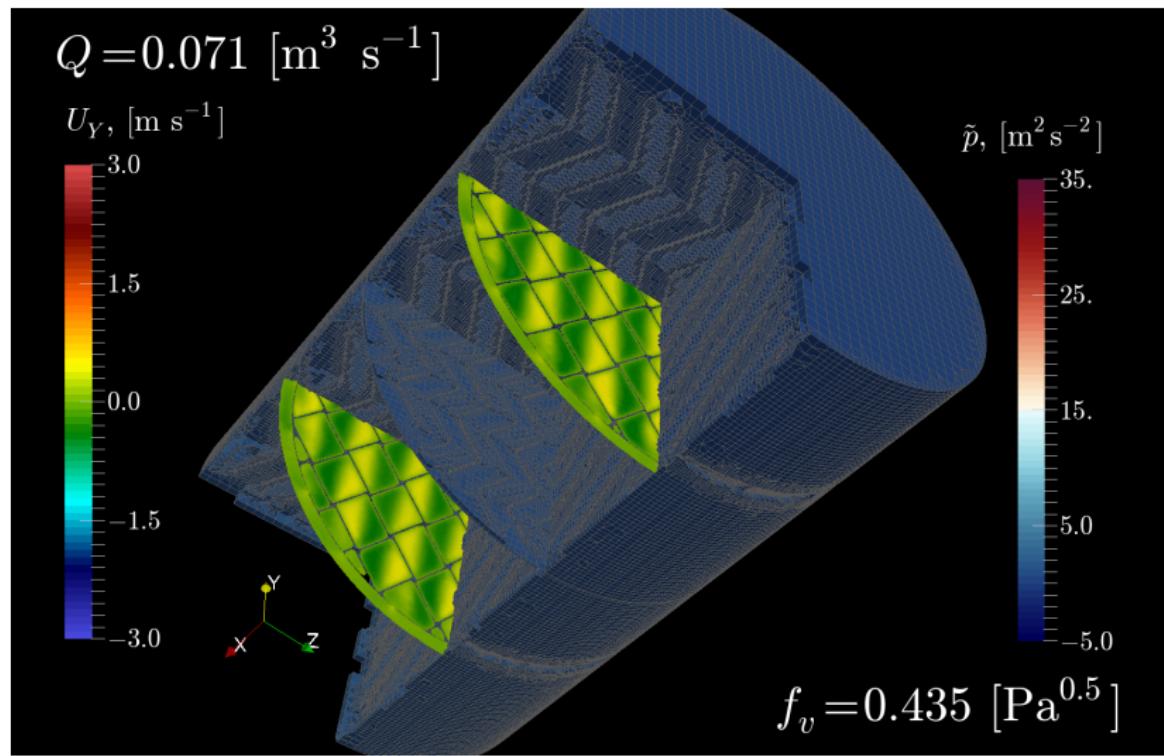


Výsledky modelu

Možnost studovat proudění plynu uvnitř plněných kolon



Výsledky simulace: Vývoj proudění v závislosti na f -faktoru

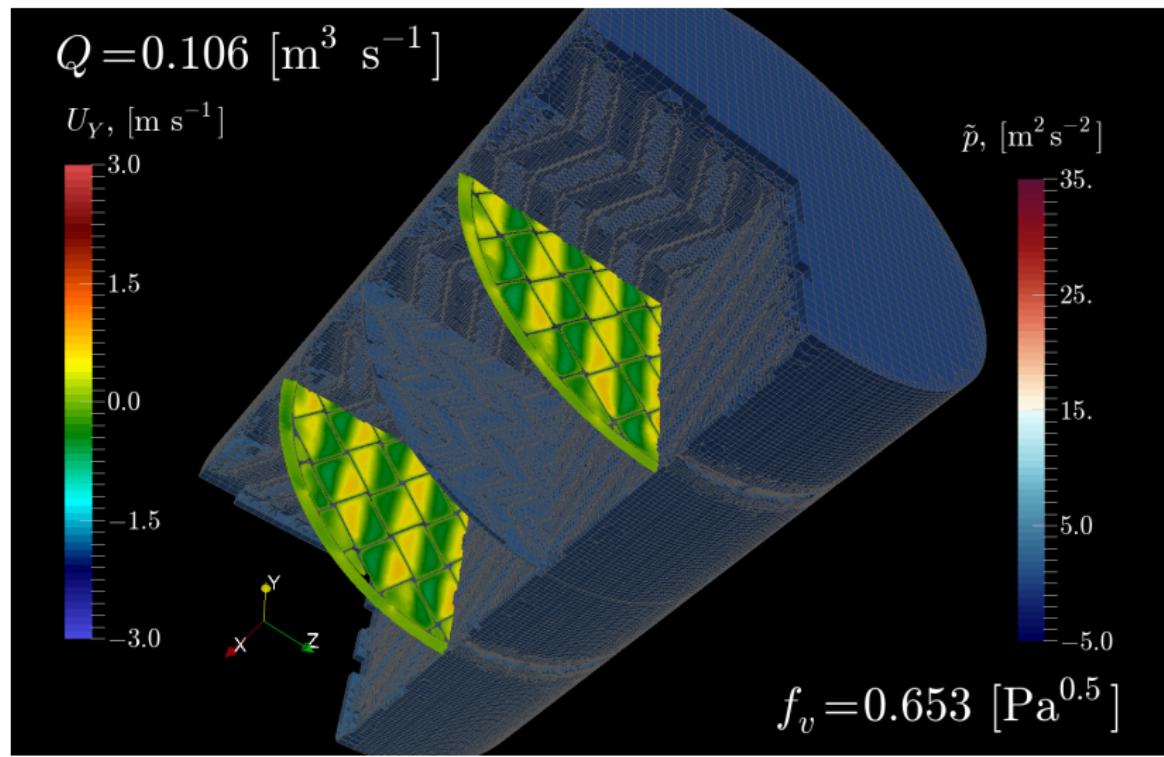


Výsledky modelu

Možnost studovat proudění plynu uvnitř plněných kolon



Výsledky simulace: Vývoj proudění v závislosti na f -faktoru

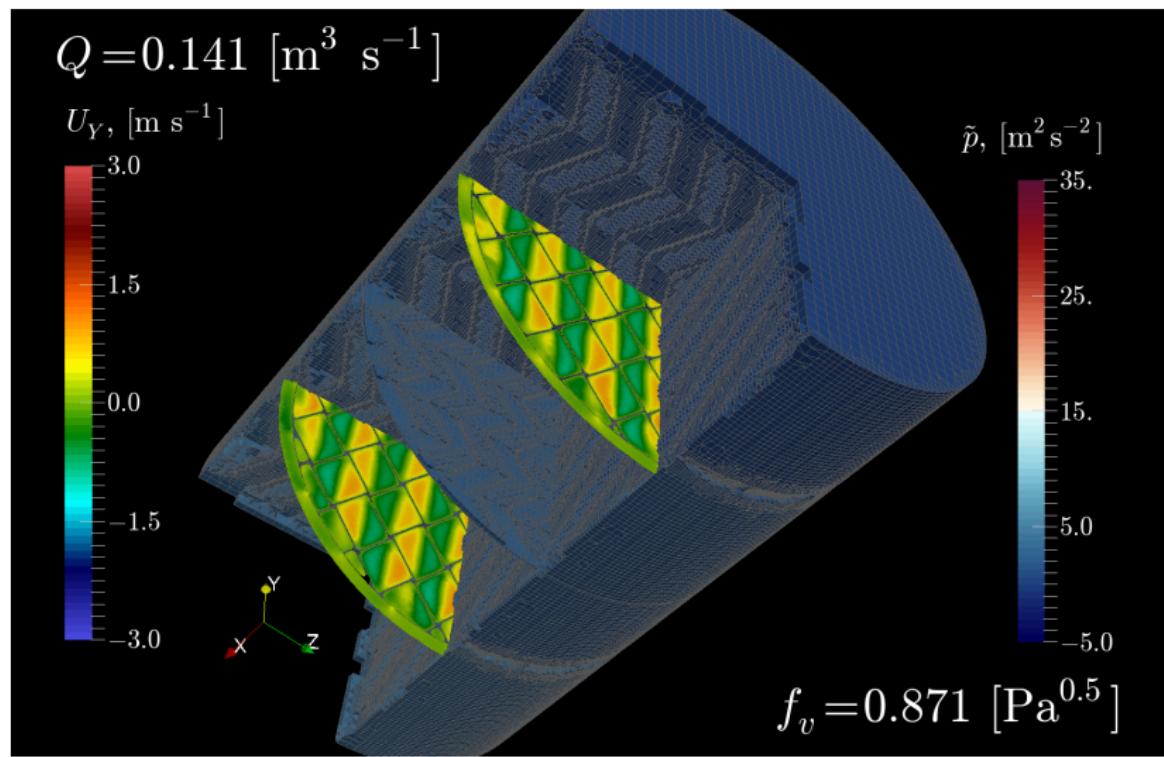


Výsledky modelu

Možnost studovat proudění plynu uvnitř plněných kolon



Výsledky simulace: Vývoj proudění v závislosti na f -faktoru

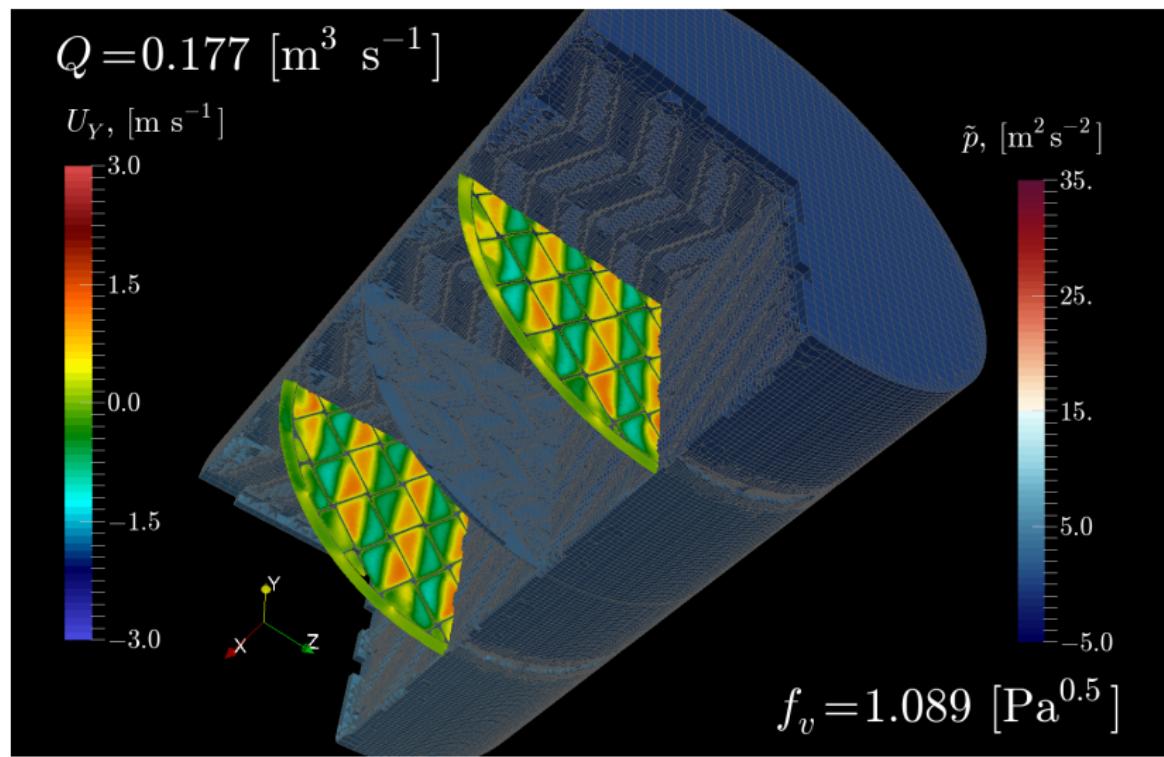


Výsledky modelu

Možnost studovat proudění plynu uvnitř plněných kolon



Výsledky simulace: Vývoj proudění v závislosti na f -faktoru

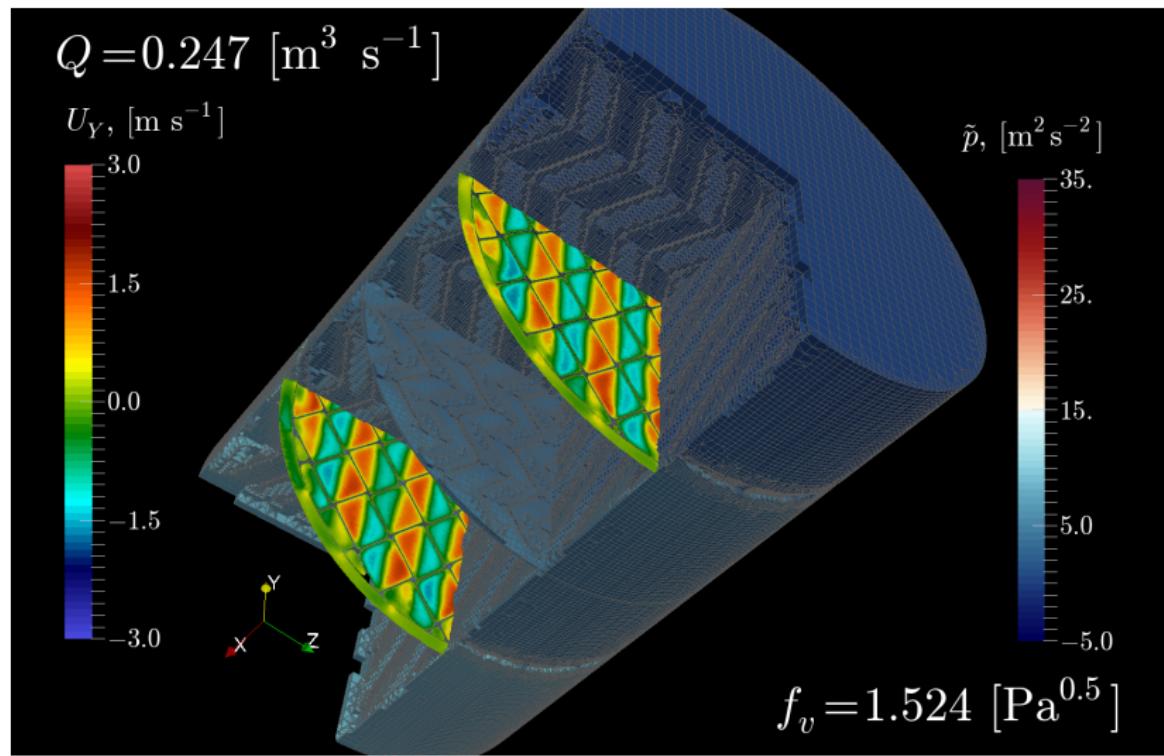


Výsledky modelu

Možnost studovat proudění plynu uvnitř plněných kolon



Výsledky simulace: Vývoj proudění v závislosti na f -faktoru

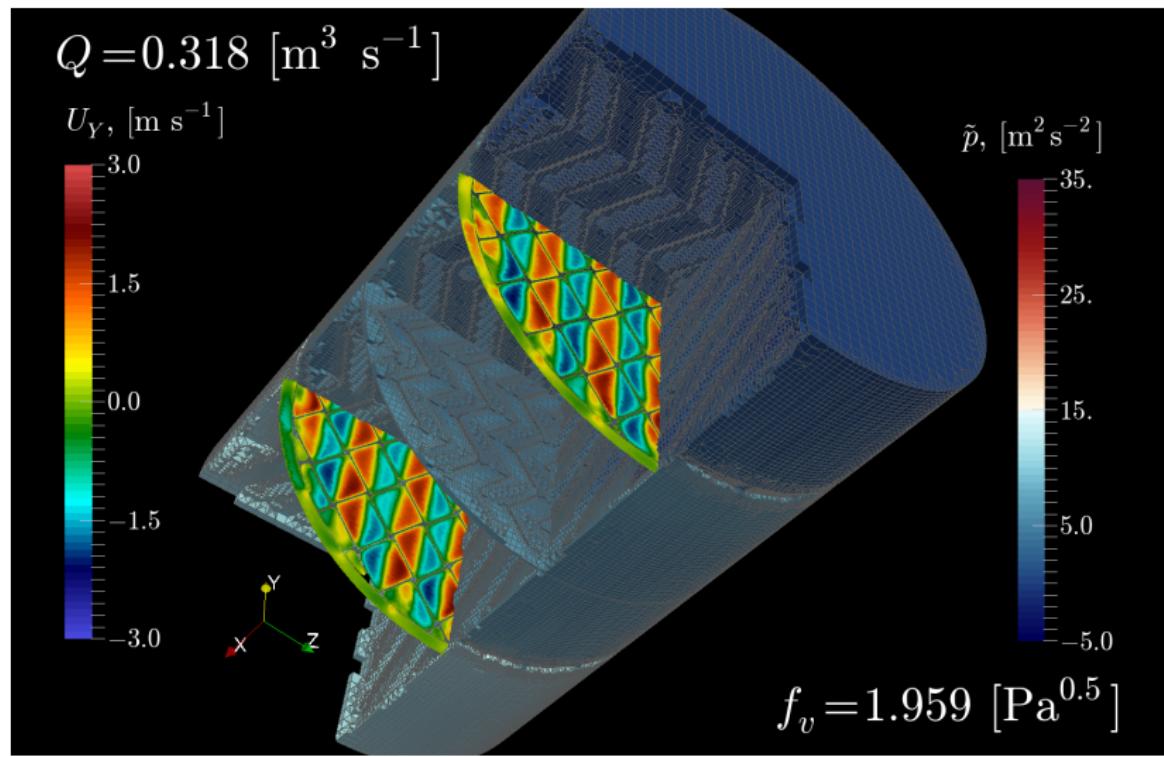


Výsledky modelu

Možnost studovat proudění plynu uvnitř plněných kolon



Výsledky simulace: Vývoj proudění v závislosti na f -faktoru

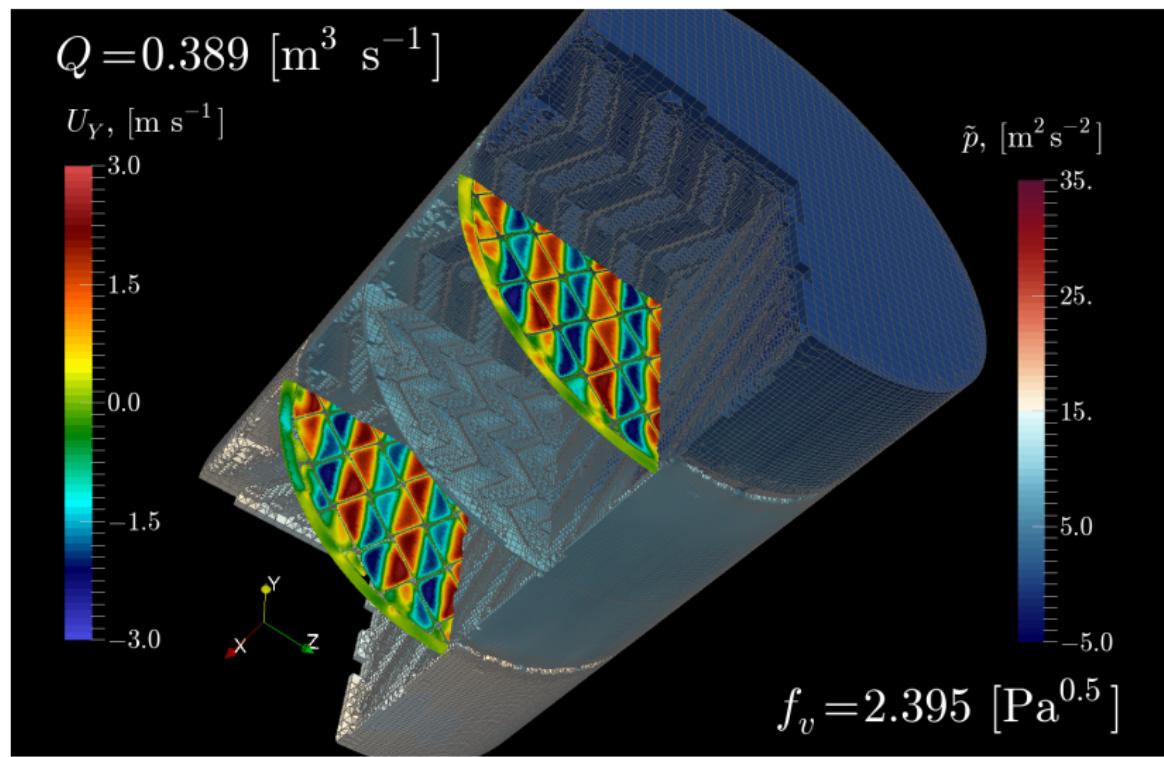


Výsledky modelu

Možnost studovat proudění plynu uvnitř plněných kolon



Výsledky simulace: Vývoj proudění v závislosti na f -faktoru

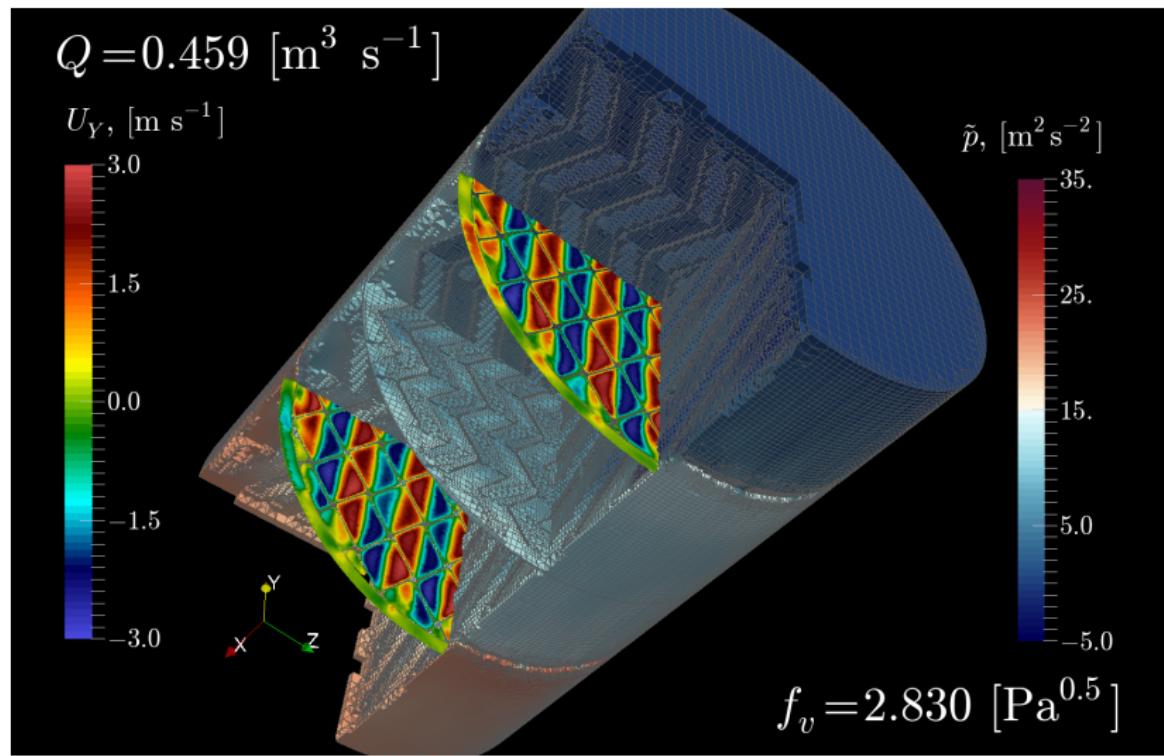


Výsledky modelu

Možnost studovat proudění plynu uvnitř plněných kolon



Výsledky simulace: Vývoj proudění v závislosti na f -faktoru

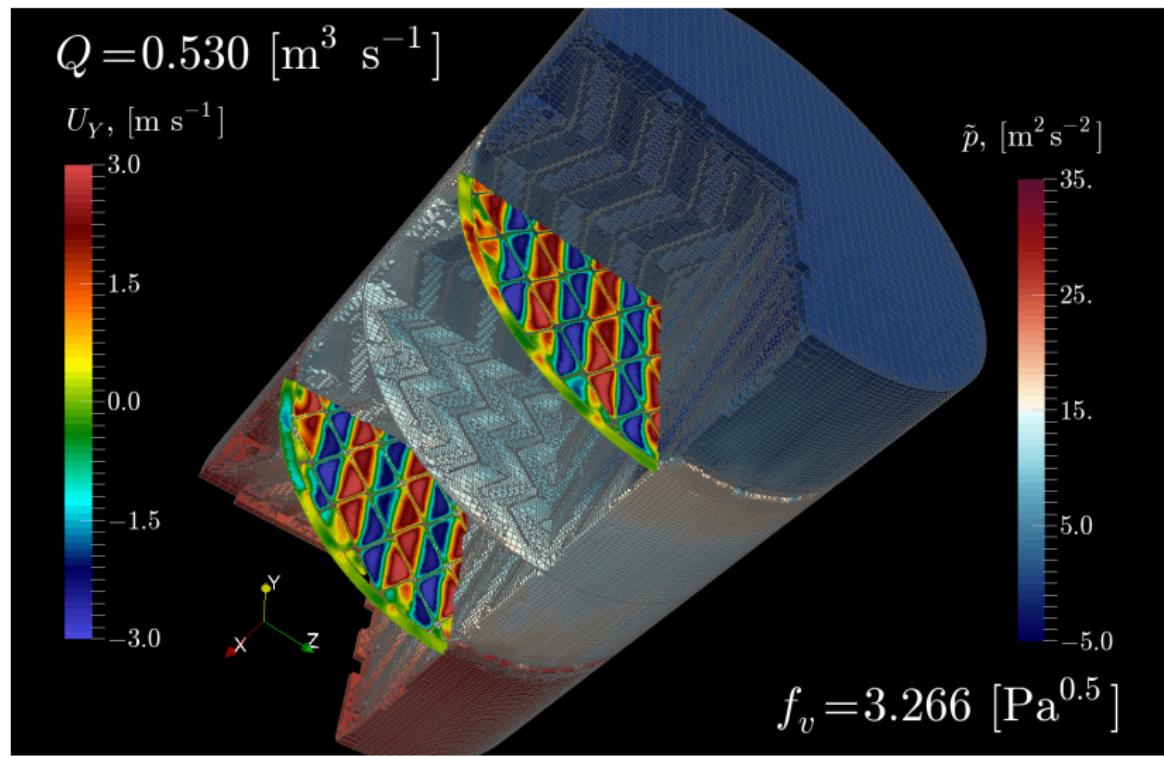


Výsledky modelu

Možnost studovat proudění plynu uvnitř plněných kolon



Výsledky simulace: Vývoj proudění v závislosti na f -faktoru

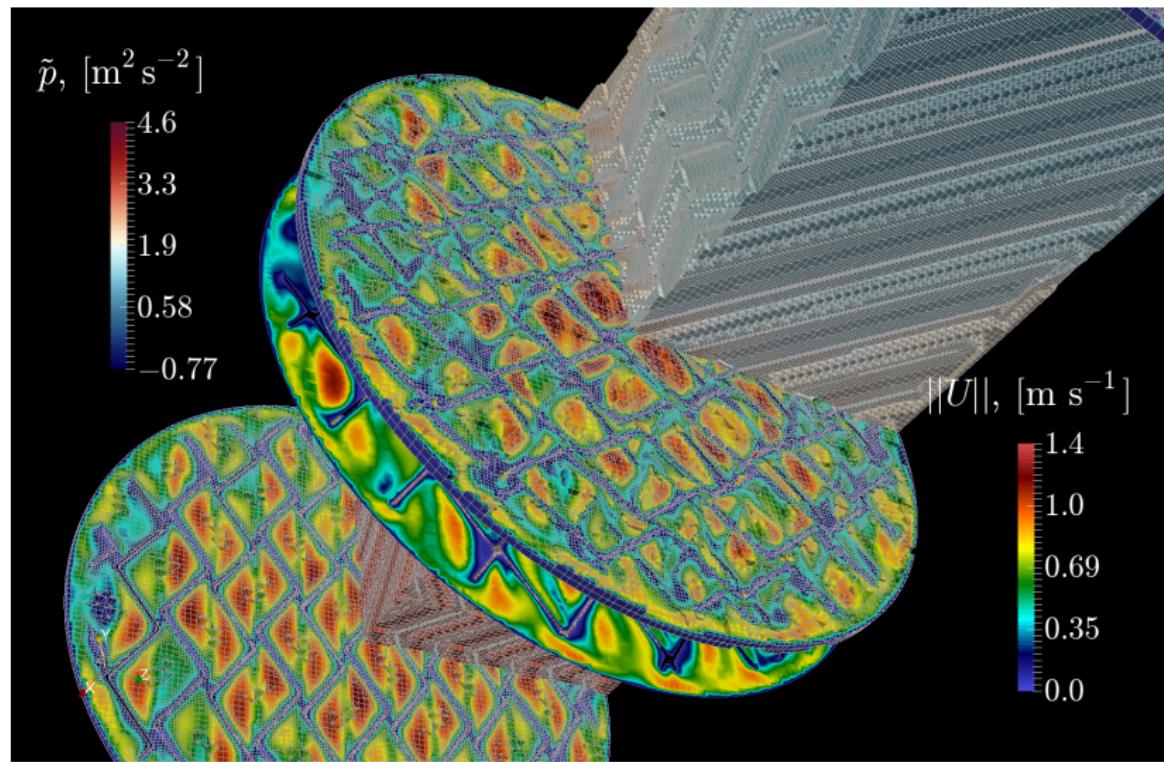


Výsledky modelu

Možnost studovat proudění plynu uvnitř plněných kolon



Výsledky simulace: Proudění na dvou elementech výplně

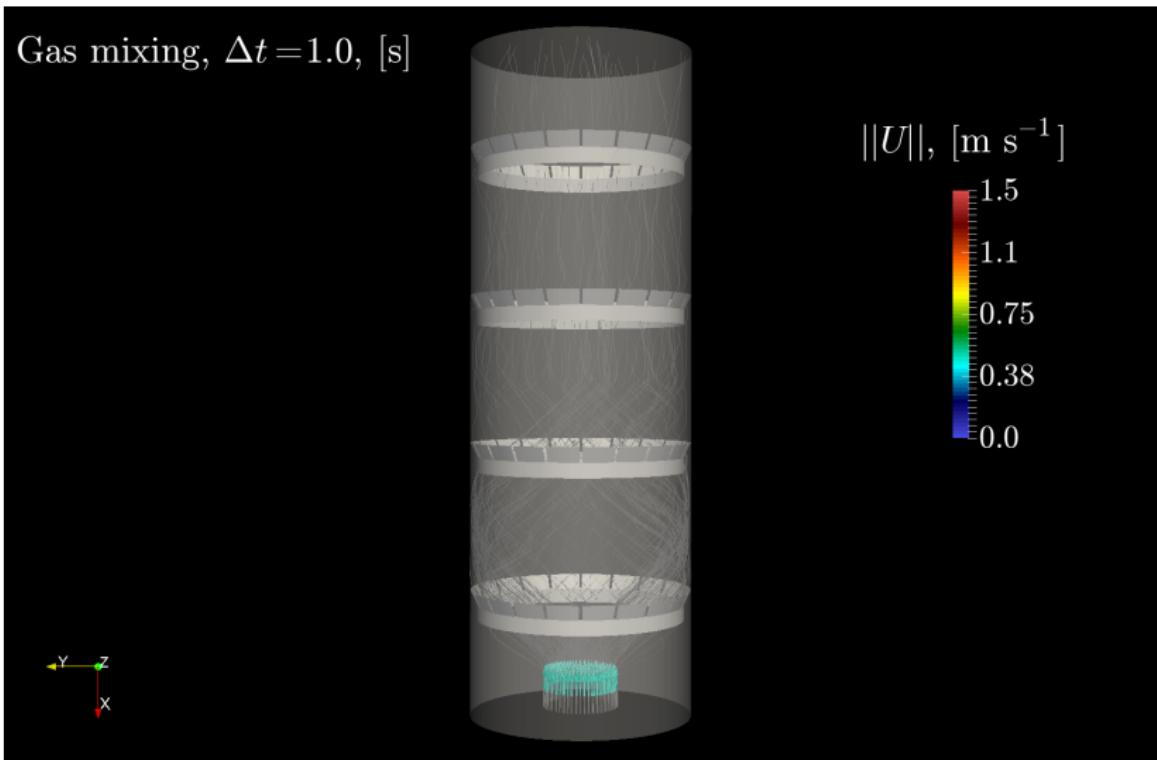


Výsledky modelu

Možnost studovat proudění plynu uvnitř plněných kolon



Výsledky simulace: Promíchávání plynu na dvou elementech výplně

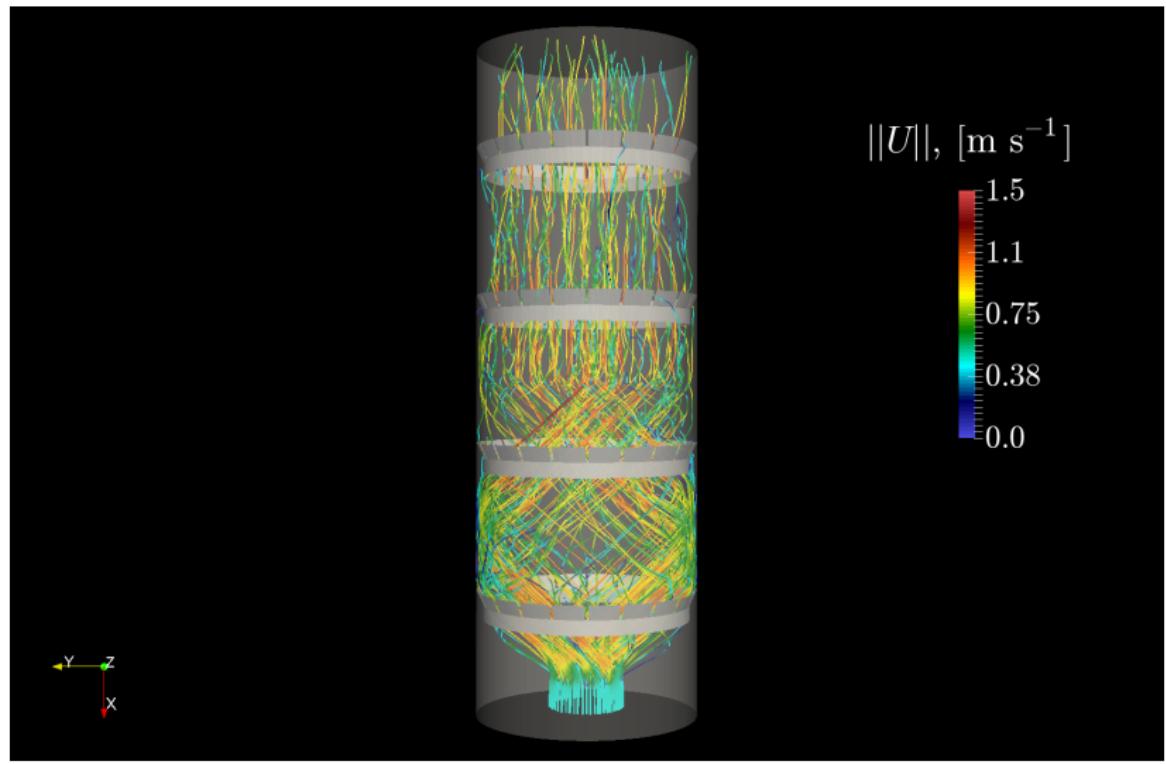


Výsledky modelu

Možnost studovat proudění plynu uvnitř plněných kolon



Výsledky simulace: Promíchávání plynu na dvou elementech výplně

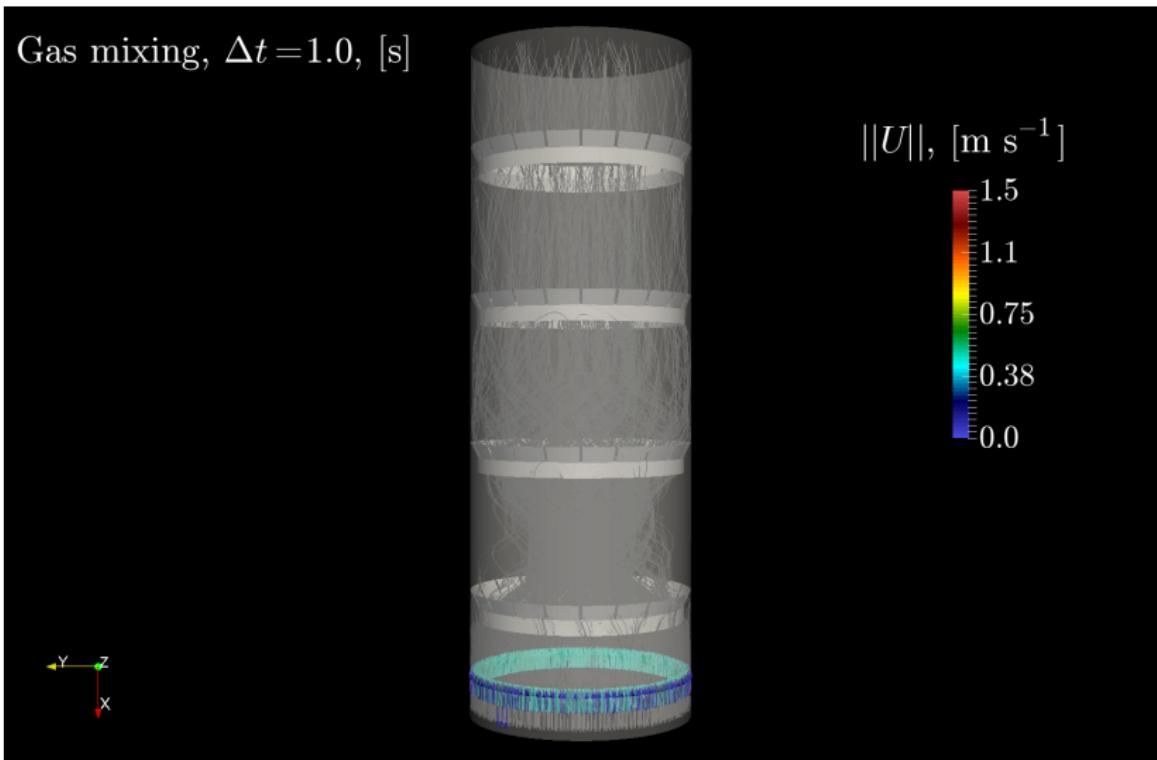


Výsledky modelu

Možnost studovat proudění plynu uvnitř plněných kolon



Výsledky simulace: Promíchávání plynu na dvou elementech výplně

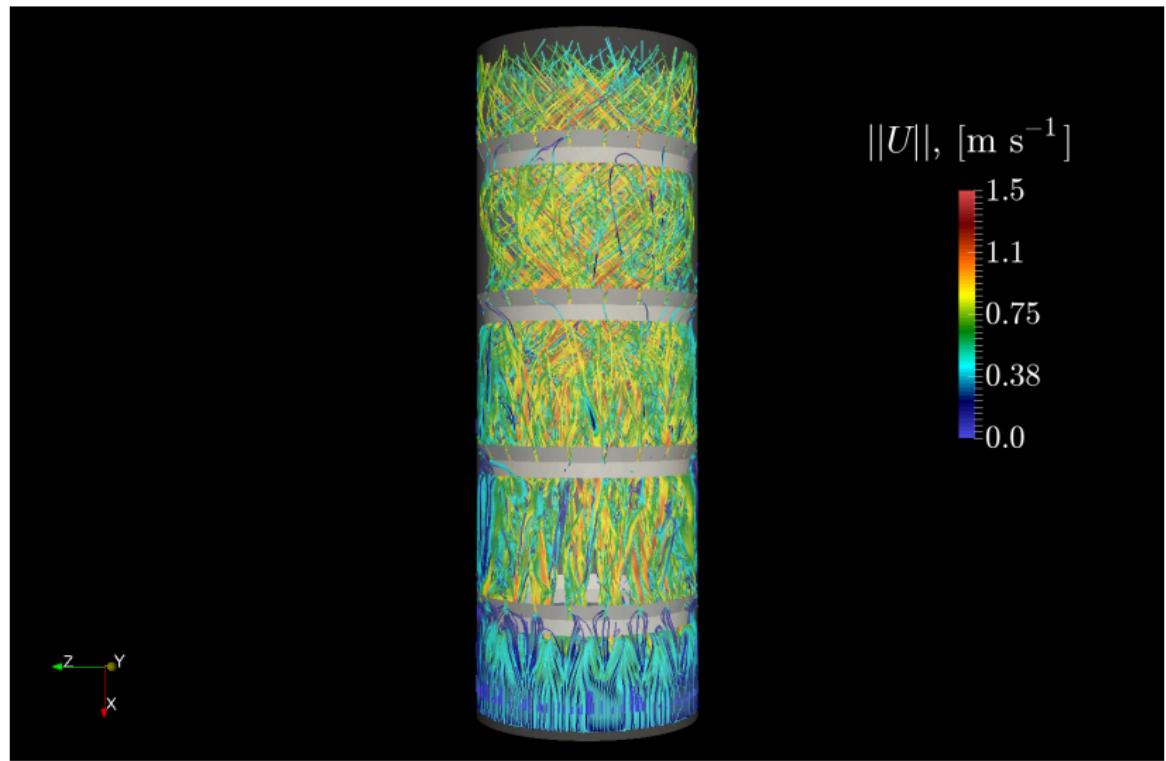


Výsledky modelu

Možnost studovat proudění plynu uvnitř plněných kolon

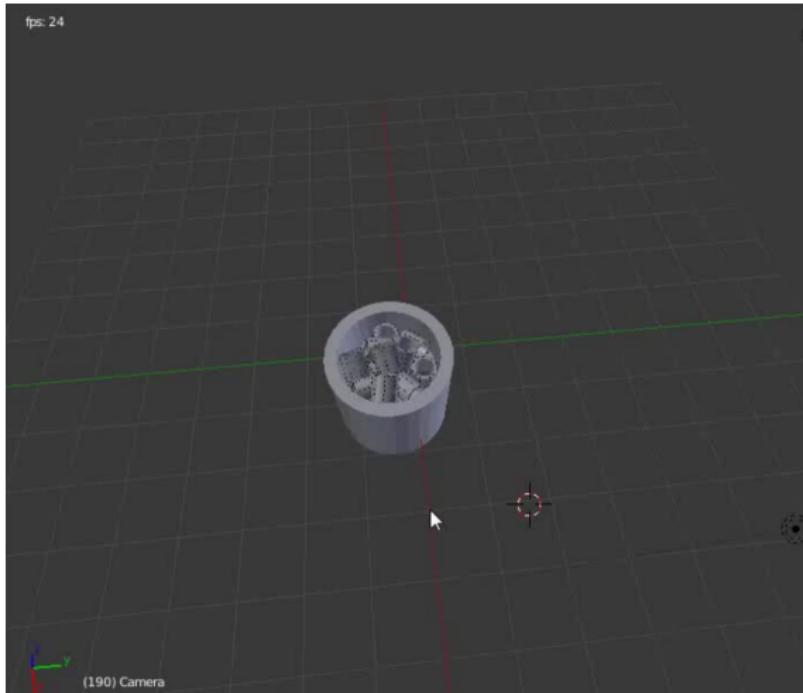


Výsledky simulace: Promíchávání plynu na dvou elementech výplně





Výroba geometrie: blender + python magie

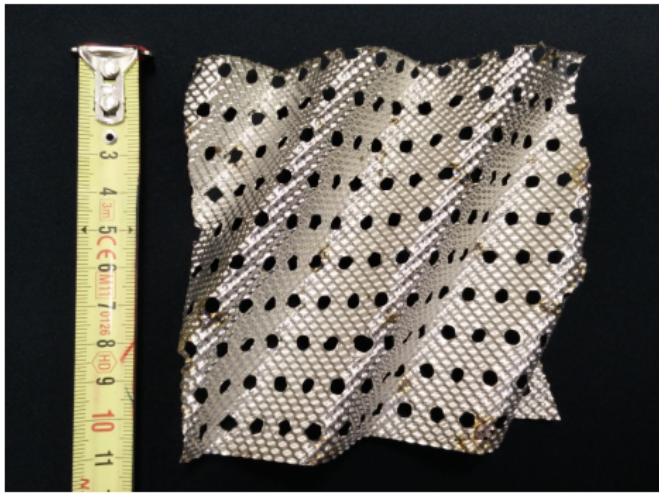




Vícefázové proudění



Princip: Zjednoduš geometrii, **zachovej proudění**

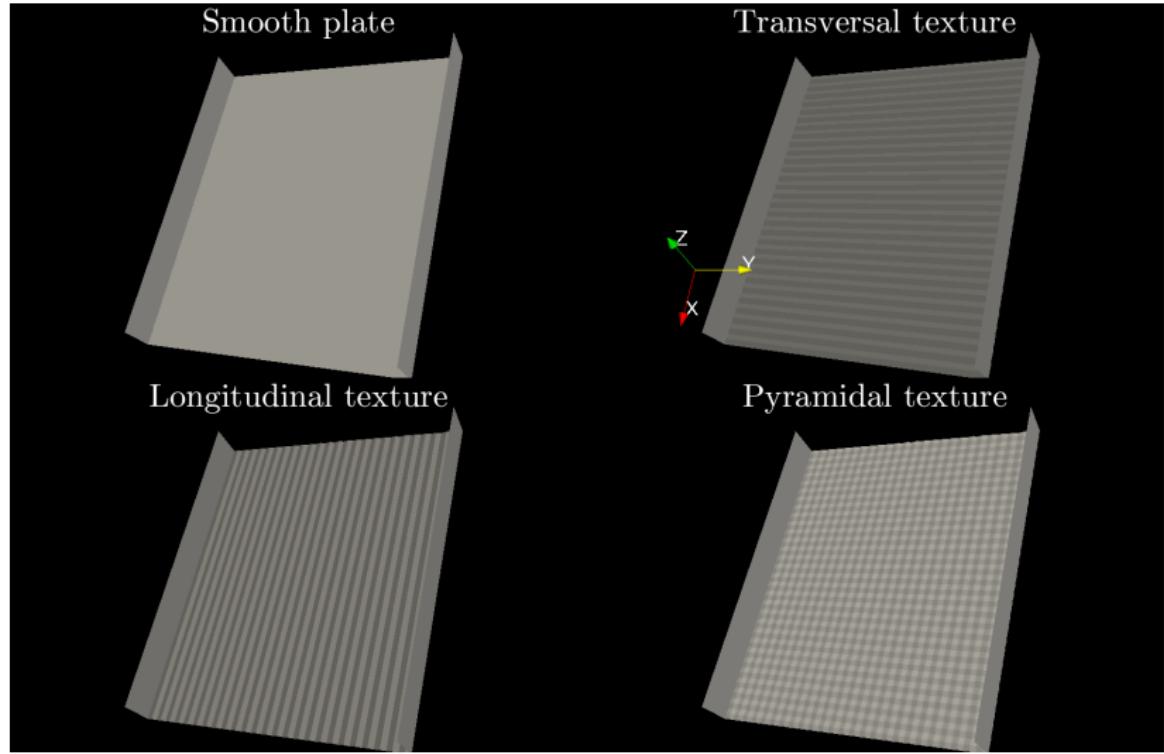


Geometrie problému

Zajímá nás pouze "mikroměřítka"

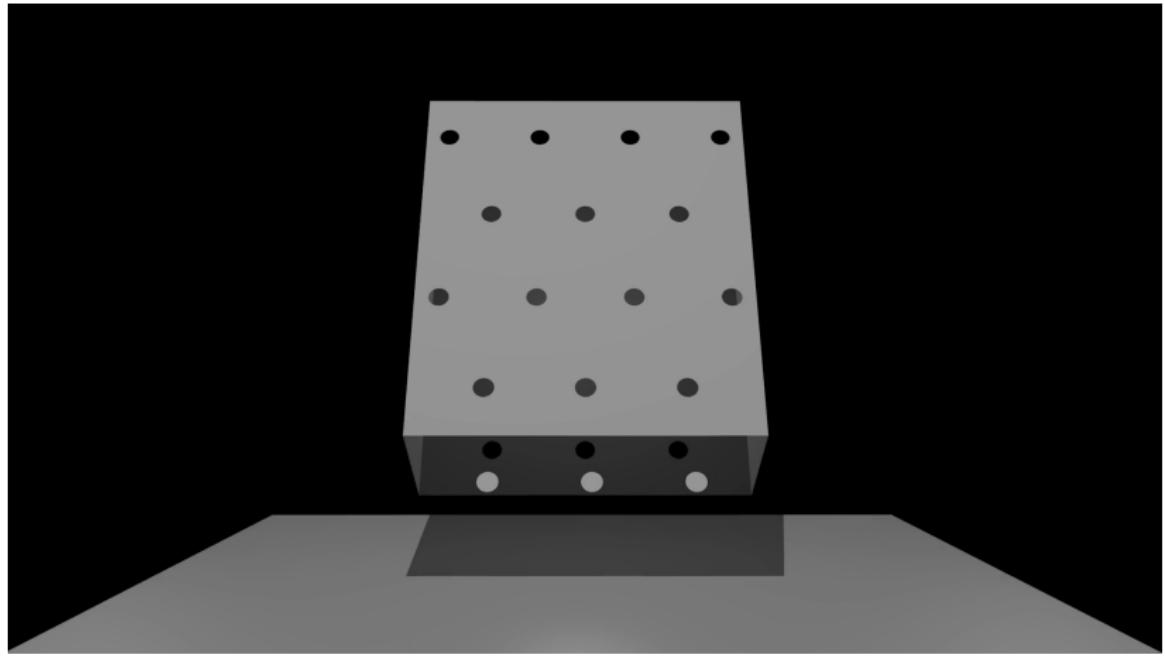


Geometrie: Destička 6×5 cm, různé textury





Geometrie: Kvádr $6 \times 5 \times 2$ cm, perforovaný

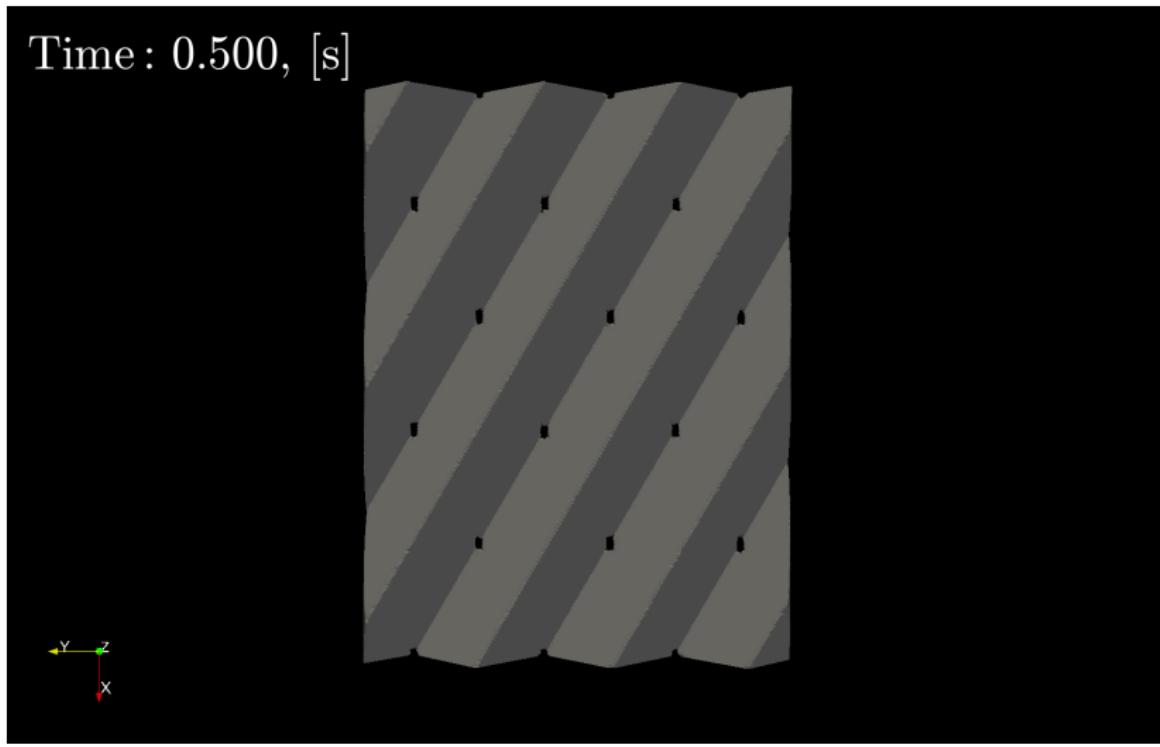


Geometrie problému

Zajímá nás pouze "mikroměřítko"



Geometrie: Výřez původní geometrie

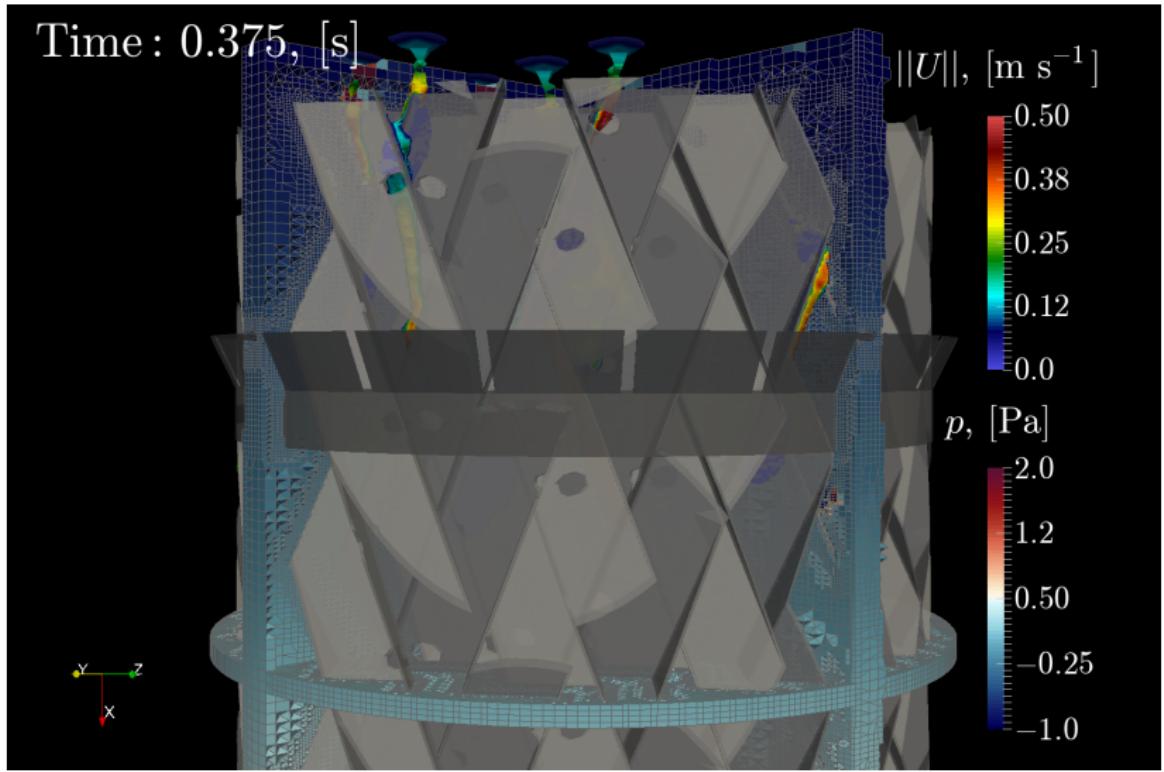


Geometrie problému

Zajímá nás pouze "mikroměřítko"



Geometrie: Původní geometrie (Mellapak 250.X)





Zákony zachování hybnosti a hmoty

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_t + \nabla \cdot (\mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) - \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{U}) - (\nabla \mathbf{U}) \cdot \nabla \alpha &= \\ = - \nabla p_d - g \cdot x \otimes \nabla \rho + \gamma \kappa \nabla \alpha & \\ \nabla \cdot \mathbf{U} &= 0 \end{aligned}$$

Advekční rovnice pro identifikační funkci

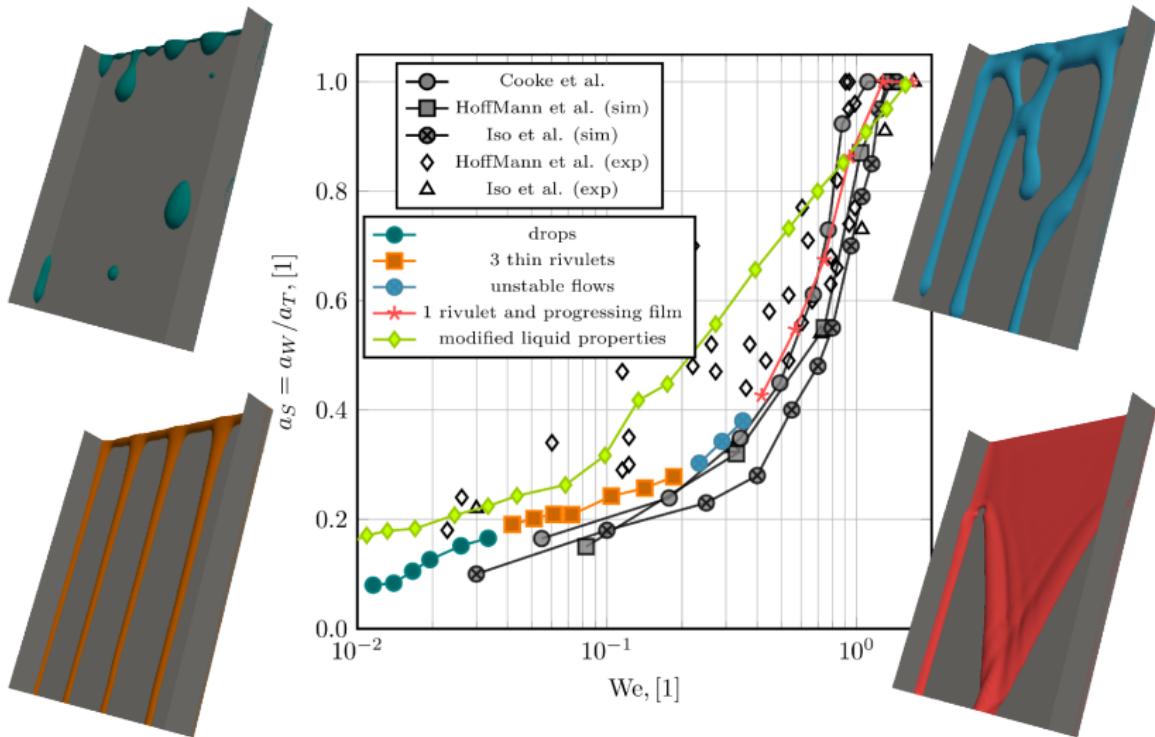
$$\alpha_t + \nabla \cdot (\mathbf{U} \alpha) + \nabla \cdot [\mathbf{U}_r \alpha (1 - \alpha)] = 0$$

Značení

$\mathbf{U} [\text{m s}^{-1}]$ rychlostní pole	$\gamma [\text{N m}^{-1}]$ povrchové napětí
$\mathbf{U}_r [\text{m s}^{-1}]$ kompresní rychlosť	$g [\text{m s}^{-2}]$ gravitační zrychlení
$\mu [\text{Pa s}]$ dynamická viskozita	$x [\text{m}]$ průvodíč
$\rho [\text{kg m}^{-3}]$ hustota	$\alpha [-]$ identifikační funkce

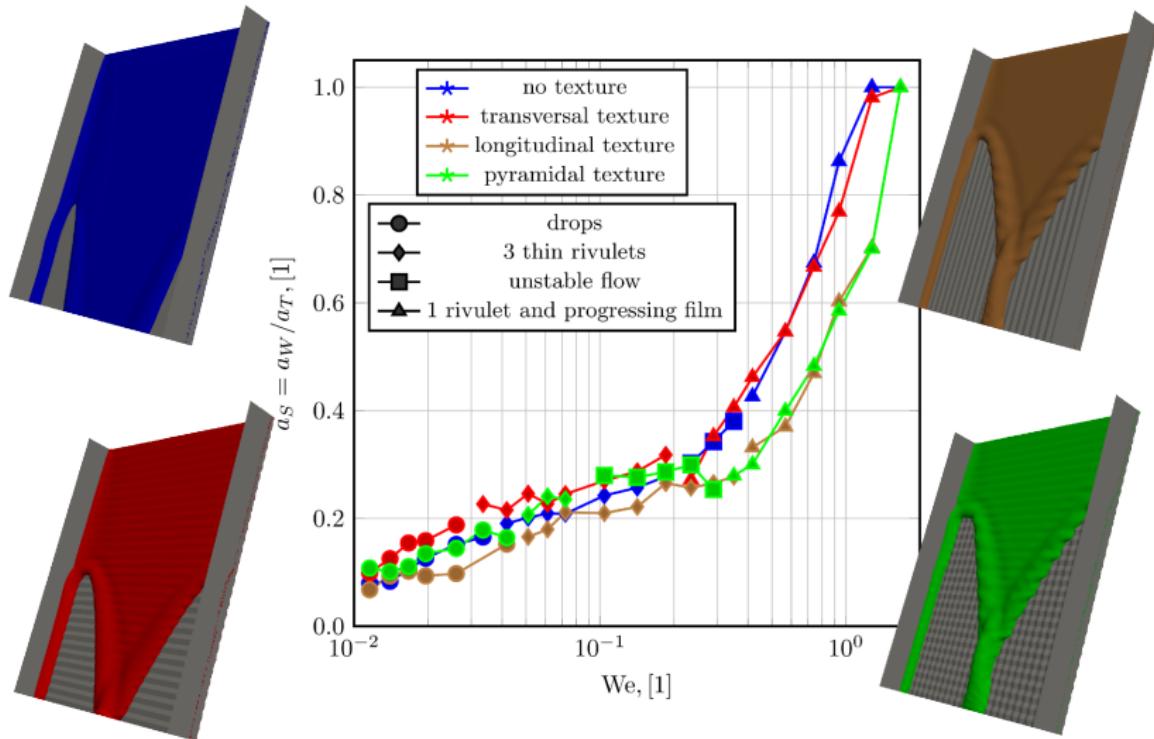


Validace modelu: Porovnání s dostupnými daty





Výsledky simulace: Vliv textury, obrázky pro We = 0.94



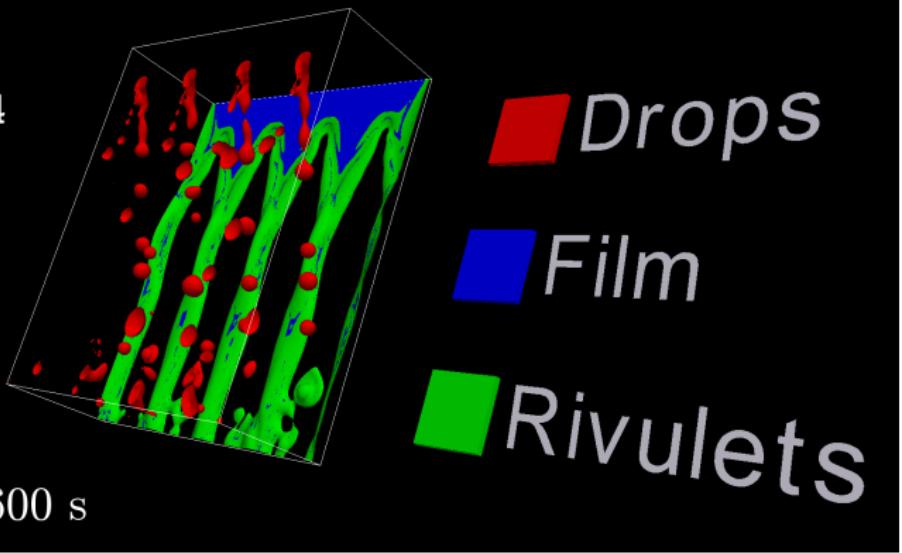


Výsledky simulace: Typ proudění

Flow between 2 perforated plates

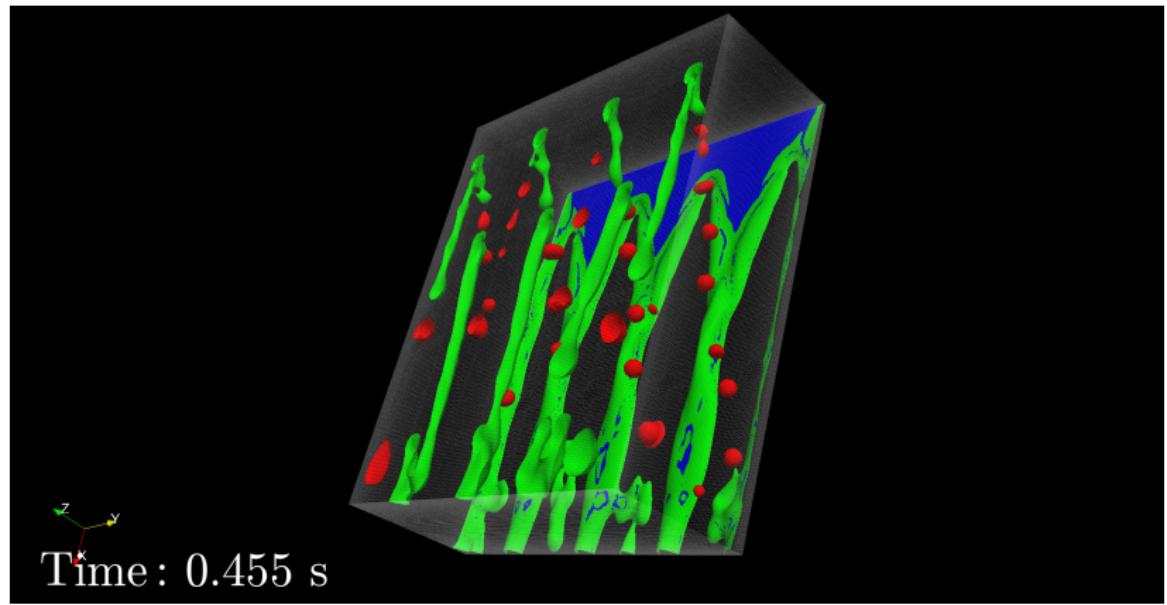
$Re = 240$

$We = 4.04$



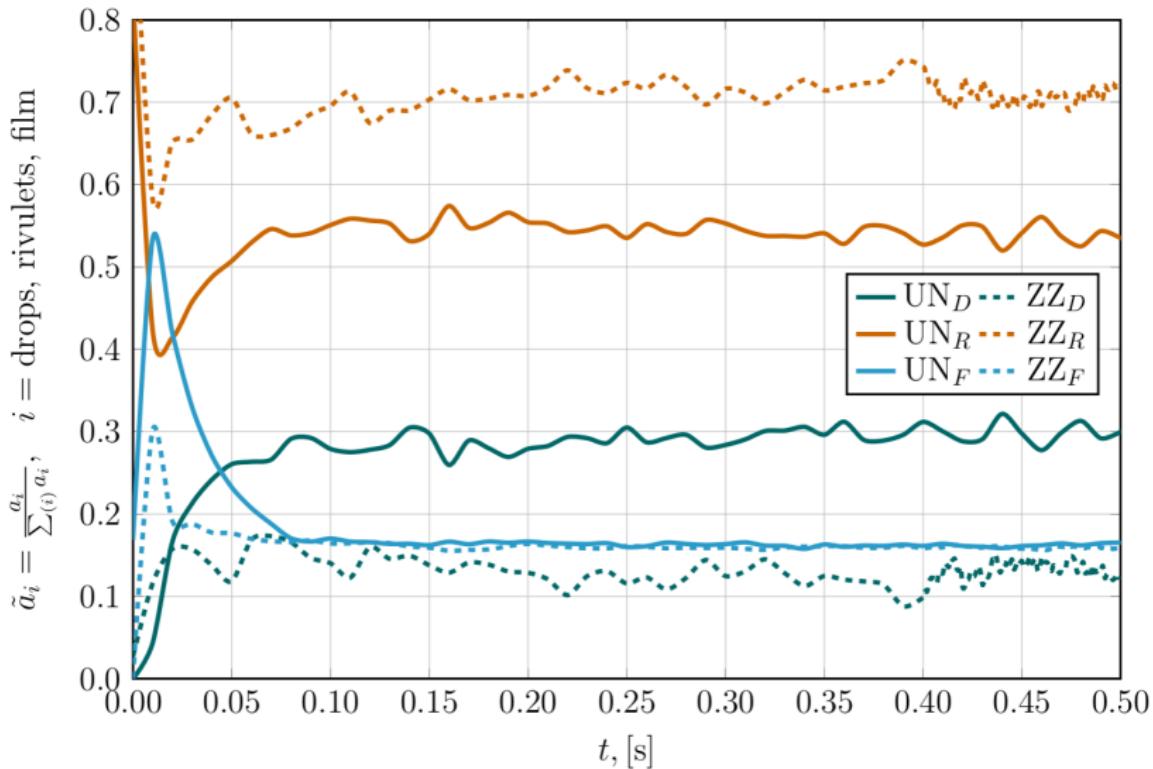


Výsledky simulace: Typ proudění





Výsledky simulace: Určení kvality mezifázového rozhraní

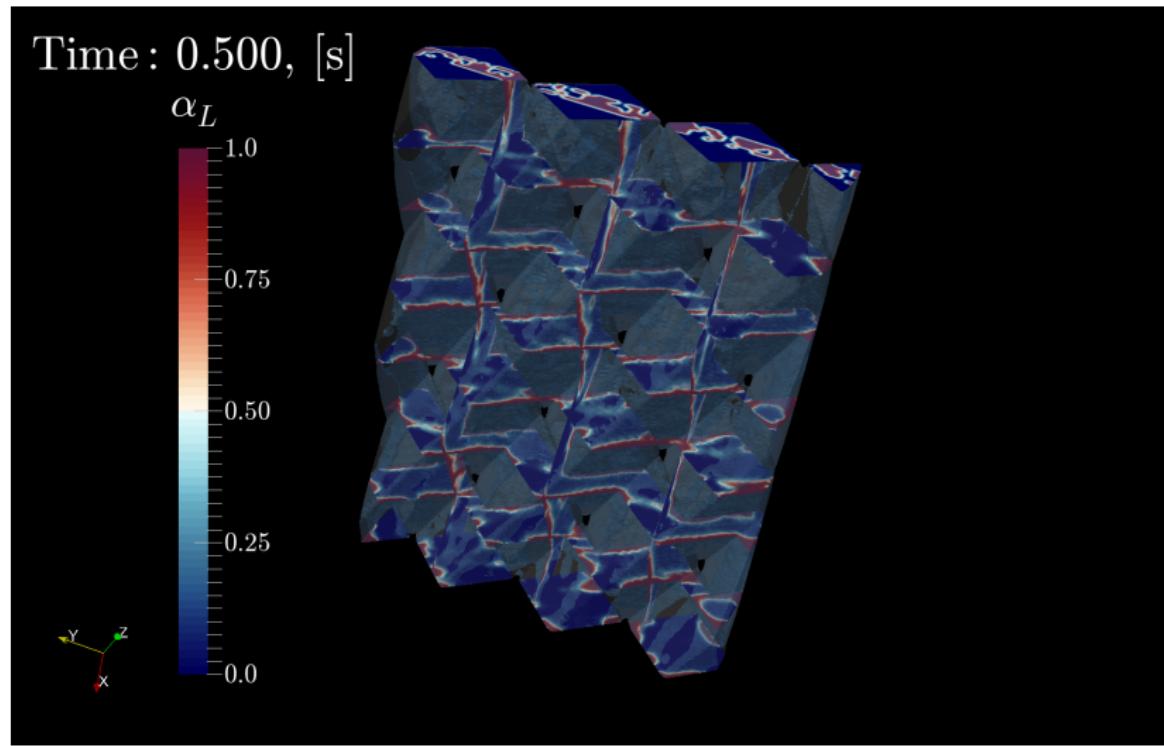


Výsledky modelu

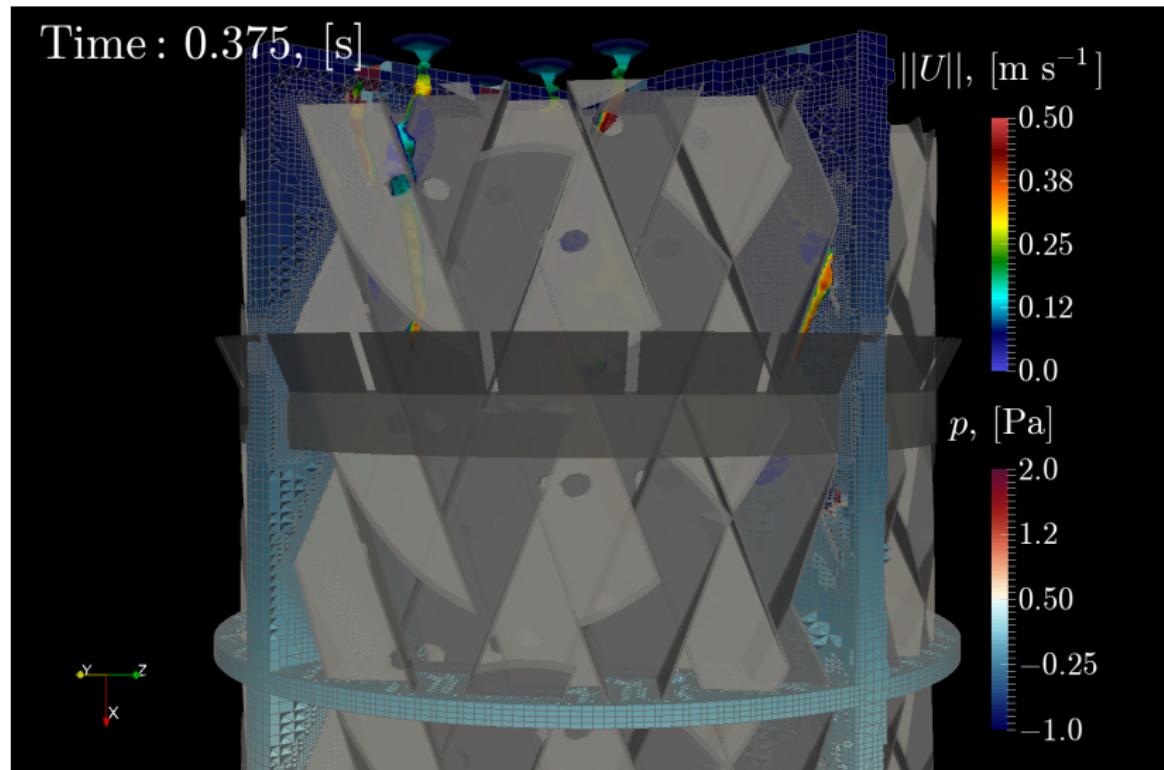
Možnost studovat vlastnosti proudění



Výsledky simulace: Kvalitativní chování kapaliny na výplni



Výsledky simulace: Chování kapaliny v koloně jako celku





Závěr





Co umíme

- Vícefázové proudění – VOF metoda
- Nízkorychlostní proudění plynu, $\text{Re} \leq 30000$
- Komplikované geometrie – automatická generace geometrie + snappyHexMesh síťování
- Alespoň povrchní znalost využitých matematických metod (někde hlubší)

V čem bychom potřebovali pomoc

- Kontakt s realitou
- Konkrétní inženýrské aplikace
- Přestup tepla a hmoty



Děkuji za pozornost

