

Samenvatting

Numerieke stromingsmechanica (CFD) wordt alsmaar belangrijker in de ontwerpfase van hedendaagse systemen waar reagerende stromingen deel van uitmaken. Numerieke simulaties worden dan ook veelvuldig gebruikt bij het ontwerp en optimalisatie van bijvoorbeeld industriële branders. Een goede voorspelling van de ingewikkelde processen die zich voordoen in dergelijke systemen is enkel mogelijk indien men beschikt over nauwkeurige modellen en geavanceerde numerieke methoden. Voorbeelden van dergelijke krachtige en betrouwbare CFD-technieken omvatten *directe numerieke simulaties* (DNS) en *large-eddy simulaties* (LES). Helaas zijn deze technieken enkel in staat kwantitatieve voorspellingen te maken als de onderliggende algoritmen geschikt zijn voor tijdsnauwkeurige simulaties van reagerende stromingen.

De algoritmen die veelal gebruikt worden in de onderzoekswereld, blijken aanleiding te geven tot onstabiele oplossingen als deze toegepast worden op stromingen met sterk variabele dichtheid. Nochtans bleken deze algoritmen goed te functioneren in stromingen met constante dichtheid. De desbetreffende algoritmen maken deel uit van een klasse die we hier aanduiden onder de noemer *massabehoud gebonden drukcorrectiealgoritmen*. Andere gangbare algoritmen blijken wel stabiel, maar voorspellen oplossingen die fysisch niet mogelijk zijn. De voorspelde toestanden voldoen immers niet aan de toestandsvergelijking. Deze algoritmen vallen onder de klasse *analytische-compatibiliteit gebonden drukcorrectiealgoritmen*. Omwille van deze tekortkomingen, ontwikkel ik hier een nieuw algoritme met volgende eigenschappen: (i) het is stabiel en robuust, (ii) het behoudt massa en andere scalaire grootheden, zoals energie en atomaire brandstofmassa, (iii) het voorspelt toestanden die exact voldoen aan de toestandsvergelijking, (iv) het kan doeltreffend worden geïmplementeerd en (v) het maakt tijdsnauwkeurige simulaties mogelijk. Het gebruik van dergelijk algoritme kan bijgevolg aanleiding geven tot een consistent simulatieprogramma, dat op zijn beurt kwantitatieve voorspellingen kan maken. Zodoende kan een basis gelegd worden voor verdere modellering op gebied van LES van reagerende stromingen, zonder te vrezen voor onverwacht onstabiel gedrag. Het toepassingsgebied van dit algoritme bevat stromingen van willekeurige fluida bij lage Machgetallen. Een willekeurig fluidum wordt beschreven door een onbegrensd aantal scalaire grootheden, transportvergelijkingen voor die grootheden en een willekeurige toestandsvergelijking die deze grootheden koppelt. Het algoritme heeft voornamelijk een toegevoegde waarde wanneer de toestandsvergelijking niet-lineair is, zoals in het geval van turbulente niet-voorgemengde vlammen.

Het ontwikkelde algoritme bevindt zich in de klasse van de drukcorrectiealgoritmen. In deze gesegegreerde oplossingsmethode worden de vergelijkingen sequentieel opgelost. Op het einde van elke tijdstap volgt een globale correctiestap, die de druk in rekening brengt. De druk wordt berekend uit een elliptische vergelijking, die afgeleid wordt uit een vergelijking die een beperking oplegt op het snelheidsveld. In het nieuwe algoritme wordt deze beperkende vergelijking opgebouwd uit een combinatie van de discrete massabehoudswet en de discrete transportvergelijking voor de scalaire grootheden, op een dusdanige manier dat de nieuw voorspelde toestand voldoet aan de toestandsvergelijking. Het aldus gevormde algoritme heet *discrete-compatibiliteit gebonden drukcorrectiealgoritme*. Het verschilt van de standaard drukcorrectiealgoritmen, waar de beperkende vergelijking enkel gebaseerd is op massabehoud (massabehoud gebonden drukcorrectiealgoritme) of op een analytische combinatie van de materiële afgeleide van de toestandsvergelijking enerzijds en de massabehoudswet en de transportvergelijkingen van de scalaire grootheden anderzijds (analytische-compatibiliteit gebonden drukcorrectiealgoritme). In het bijzonder wanneer de toestandsvergelijking een niet-linear verband beschrijft tussen de toestandsgrootheden, is het gebruik van het discrete-compatibiliteit gebonden drukcorrectiealgoritme behept met voortreffelijke kwaliteiten. Het extreme geval van reagerende stromingen waar de scheikundige reacties oneindig snel verlopen (het scheikundig model van Burke en Schumann) legt een sterk niet-lineair en niet-differentieerbaar verband op tussen dichtheid en atomaire brandstofmassa. In tegenstelling tot het nieuw ontwikkelde algoritme, slaagt een standaardalgoritme niet in een correcte voorspelling van dit geval.

Deze bevinding wordt duidelijk aangetoond in enkele ééndimensionale testgevallen, waarbij een initieel scherpe gradiënt in een scalaire grootheid wordt geconvecteerd of gediffundeerd. Hierbij worden drie types fluïda onderzocht: de stroming van een ideaal gas, dat zich op verschillende temperatuur bevindt; de stroming van twee fluïda die mengen doch niet reageren; en een stroming van twee reagerende fluïda. Het massabehoud gebonden drukcorrectiealgoritme geeft aanleiding tot onstabiel gedrag in bijna alle onderzochte gevallen en is bijgevolg niet toepasbaar in stromingen met scherpe gradiënten in het dichtheidsveld. Het analytische-compatibiliteit gebonden drukcorrectiealgoritme leidt wel tot stabiele oplossingen, doch voorspelt toestandsgrootheden die sterk afwijken van de fysische toestandsvergelijking indien deze laatste niet-linear is in de toestandsvariabelen, zoals het geval is in reagerende stromingen. Het discrete-compatibiliteit gebonden drukcorrectiealgoritme daarentegen levert wel stabiele oplossingen die bovendien in alle gevallen voldoen aan de toestandsvergelijking.

Ook in meerdere dimensies levert het algoritme betrouwbare resultaten, op voorwaarde dat een oplossing geboden wordt aan het probleem van de ontkoppeling tussen de even en oneven knooppunten. Indien de simulatie immers uitgevoerd wordt op een rekenrooster waar alle variabelen op dezelfde plaats gestockeerd worden, verschijnt er een niet-fysische drukgolf in de oplossing. Om deze niet-fysische golf te onderdrukken, ontwerp ik een bijzondere snelheidsinterpolatie, specifiek voor stromingen met variabele dichtheid. Ook wanneer de stroming zich in een ingesloten ruimte bevindt, garandeert het gebruik van deze interpolatie nog steeds de oplosbaarheid van de elliptische drukcorrectievergelijk-

ing. De combinatie van de snelheidsinterpolatie met het discrete-compatibiliteit gebonden drukcorrectiealgoritme, levert een algoritme dat gemakkelijk kan aangewend worden in meerdimensionale stromingen.

Een eerste validatie van het algoritme in twee dimensies betreft een thermisch gedreven caviteit die onderworpen wordt aan grote horizontale temperatuursverschillen. Voor een grote waaier aan Rayleigh getallen worden goede oplossingen bekomen, zelfs indien de simulatie uitgevoerd wordt op relatief grove rekenroosters. Bovendien wordt de niet-fysische drukgolf onderdrukt.

De stabiliteit en de convergentie van het algoritme worden onderzocht met behulp van een tweede testgeval. Het betreft hier een tweedimensionale menglaag, die de menging beschrijft van twee inerte of reagerende fluïda. Uit de verkregen resultaten besluit ik dat het massabehoud gebonden drukcorrectiealgoritme, in het bijzonder bij toepassing op reagerende stromingen, geen stabiele resultaten kan leveren, tenzij maatregelen getroffen worden die de tijdsnauwkeurigheid van het algoritme schaden. Het analytische-compatibiliteit gebonden drukcorrectiealgoritme is wel stabiel, maar voorspelt een oplossing die merkbaar verschilt van de juiste oplossing. Deze foute voorspelling vindt zijn oorsprong in de onbeheersbare afwijking van de niet-lineaire toestandsvergelijking. Het discrete-compatibiliteit gebonden drukcorrectiealgoritme daarentegen levert een stabiele oplossing, wier toestandsgrootheden exact voldoen aan de toestandsvergelijking. Deze grotere robuustheid en nauwkeurigheid kunnen verkregen worden tegen een kleine meerkost in termen van reketijd. Het uiteindelijke algoritme is dus niet enkel stabiel en nauwkeurig, maar tevens efficiënt.

Samenvattend kunnen we stellen dat dit werk het bewijs levert dat, omwille van de niet-lineaire toestandsvergelijking in, onder meer, het verbrandingsproces, standaardalgoritmes niet leiden tot het gewenste resultaat. Bijgevolg dienen nieuwe algoritmes aangewend te worden, gebaseerd op de grondbeginselen van het hier ontwikkelde discrete-compatibiliteit gebonden drukcorrectiealgoritme. Op die manier kunnen stabiele en nauwkeurige oplossingen bekomen worden in tijdsnauwkeurige simulaties.