



Nyílt forráskódú CFD-kód használatának megkezdése 2. év, 2. ütem

Kiss Attila, Kiss Béla, Zsíros Gábor, Dr. Tóth Sándor

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Nukleáris Technikai Intézet

Tel.: +36-1/463-1997, kissa@reak.bme.hu

Országos Atomenergia Hivatal, TSO Szeminárium, NBI nap

OAH földszinti előadóterem

2017. május 31.



A nyílt forráskódú CFD kódokról 1/2

Napjainkra a nyílt forráskódú CFD (Computational Fluid Dynamics) kódokat egyre szélesebb körben használják, amit jól jeleznek az alábbi körülmények:

- ❖ Az egyes kódokat magas költségű, népszerű többnapos képzéseken oktatják,
- ❖ A kódok köré kutatói közösségek szerveződtek (pl. a CFD-Online fórumon),
- ❖ A kutatói közösségek egy-két évente nemzetközi konferenciákon vitatják meg a frissen elért eredményeiket,
- ❖ A konferenciákon kívül is egyre több publikáció jelenik meg.

A nyílt forráskódú programok előnye, hogy forráskódjuk általában megismerhető, ha pedig a probléma jellege indokolja, az adott feladat fizikai sajátosságainak megfelelő mértékben módosíthatók, és **a programok** maguk **ingyenesek** (?),



A nyílt forráskódú CFD kódokról 2/2

- ❖ Ugyanakkor a program használatához szükséges tudást **a legtöbb potenciális felhasználó** csak túlzottan sok utána járás révén tudná megszerezni, így **rá van utalva a drága kurzusokon való részvételre**,
- ❖ A mi esetünkben több mint 10 évnyi CFD-s tapasztalat sem volt elegendő a választott nyílt forráskódú program gyors, mélyreható megismerésére,
- ❖ Mindemellett kérdéses, hogy a nyílt forráskódú programokkal nyert eredmények mennyire megbízhatóak, és a nukleáris iparban gyakran előforduló bonyolult geometriák esetén alkalmazhatóak-e?

OpenFOAM®
OpenFoam Essential Training



A projekt célja 1/2

- ❖ A nyílt forráskódú CFD kódokhoz szükséges tapasztalattal a projekt előtt nem rendelkezünk, jóllehet a harmadik (pl. folyamatban lévő paksi kapacitás fenntartásnál) és különösen a negyedik generációs reaktoroknál felmerülhet alkalmazásuk szükségessége.
- ❖ **A projekt célja**: Egy választott (lásd alább) nyílt forráskódú program megismerése annak céljából, hogy felmérjük az alkalmazhatóságukat a nukleáris területen,
- ❖ Melyik nyílt forráskódú programot válasszuk?

SU2
The Open-Source CFD Code

OpenFOAM
CFD
Soft

CODE
SATURNE



OpenFOAM

- ❖ Európai cégek fejlesztik,
- ❖ tréningek Európában is,
- ❖ elterjedt (nukl. területen is),
- ❖ folyamatosan fejlesztik,
- ❖ rendszeres új verzió,
- ❖ kiforrott.

POINTWISE

A projekt célja 2/2

- ❖ Nem a BME NTI által jelenleg használt ANSYS CFX kereskedelmi CFD kód leváltása a célunk, hanem a CFX által képviselt igényes CFD elemző képesség kiegészítése egy nagyobb háttértudást igénylő, kódfejlesztést lehetővé tevő nyílt forráskódú CFD kód használatával:

- ❖ ANSYS CFX (interaktív):



- ❖ igényes CFD elemzőkód, amely jól használható az oktatásban és kutatásban,
- ❖ széles körben validált,
- ❖ éves licenz-díjas, de a támogatás („support”) benne van az árban,
- ❖ korlátozottan módosítható (a fejlesztők a nagy felhasználók igényei szerint fejlesztik a programot tovább),

- ❖ OpenFOAM (parancssoros + interaktív):



- ❖ Igényes, **nem csak CFD** elemzőkód, amely autentikusan használható az oktatásban és kutatásban,
- ❖ változó, hogy az egyes megoldói és alkalmazásai mennyire validáltak,
- ❖ ingyenes, de a felhasználását nehéz elsajátítani önállóan (drágák a kurzusai),
- ❖ szabadon módosítható (az egyes felhasználók igényeik szerint fejleszthetik tovább, de a felhasználók felkészültsége, tudása korlátokat jelenthet).



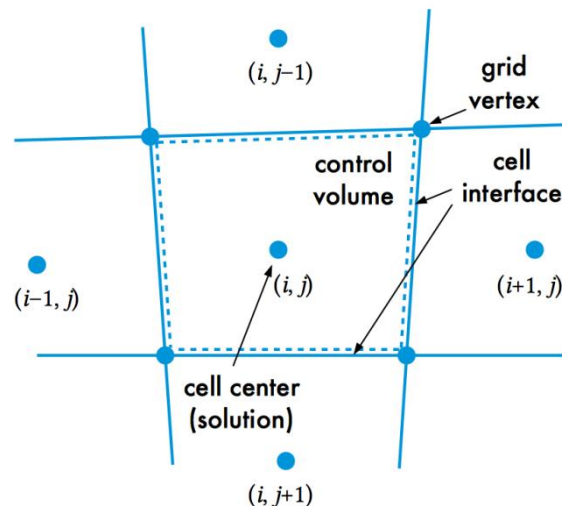
A projekt fő jellemzői



- ❖ Támogató: Országos Atomenergia Hivatal, Nukleáris Biztonsági Igazgatóság,
- ❖ „Az atomenergia biztonságos alkalmazásának hatósági felügyeletét szolgáló műszaki megalapozó tevékenység (ABA MMT)” programhoz tartozik,
- ❖ Eddig négy ütem:
 - ❖ 1. ütem: szerződésszáma [OAH-ABA-65/13-M](#), teljesítés határideje [2014. április](#), 2 részfeladat,
 - ❖ 2. ütem: szerződésszáma [OAH-ABA-44/14-M](#), teljesítés határideje [2015. április 3.](#), 4 részfeladat,
 - ❖ 3. ütem: szerződésszáma [OAH-ABA-53/15-M](#), teljesítés határideje [2016. május 15.](#), 3 részfeladat,
 - ❖ 4. ütem: szerződésszáma [OAH-ABA-37/16-M](#), teljesítés határideje [2017. május 15.](#), 4 részfeladat.
- ❖ Kutatási jelentések:
 - ❖ 1. ütem: Matulik Gábor, Nyílt forráskódú CFD-kód használatának megkezdése ([46 oldal](#))
 - ❖ 2. ütem: Zsíros Gábor - Kiss Attila, Nyílt forráskódú CFD-kód használatának megkezdése – 2. ütem ([123 oldal](#))
 - ❖ 3. ütem: Kiss Attila - Kiss Béla - Zsíros Gábor - Dr. Tóth Sándor, Nyílt forráskódú CFD kód használatának megkezdése, 2. év ([147 oldal](#))
 - ❖ 4. ütem: Kiss Attila - Kiss Béla - Zsíros Gábor - Dr. Tóth Sándor, Nyílt forráskódú CFD kód használatának megkezdése, 2. év, 2. ütem ([174 oldal](#))

Az OpenFOAM programcsomag 1/2

- ❖ Az OpenFOAM egy olyan C++ nyelven íródott könyvtár, amely minden fajta numerikus problémát (nem csak CFD-t) képes megoldani, **C++**
- ❖ Jelenleg többségében CFD analízisek elvégzésére használják,
- ❖ Az alapkönyvtár tartalmán kívül magába foglal számos **megoldót** („solver-t”) és **alkalmazást** („utility-eket”, pl. pre- és post-processzálót, rácsgeneráló programokat, értékadó programokat, stb.),
- ❖ A **véges térfogatok módszerével** (FVM) diszkrétizálja a számítási tartományt, minden rácsot tetszőleges strukturálatlan rácsként kezel,



Ábra: Véges térfogatok módszere, alapfogalmak

Az OpenFOAM programcsomag 2/2

❖ OpenFOAM terminológia:

- ❖ **eset („case”) könyvtár**: egy olyan könyvtár egy adott számítógépen, amely tartalmazza az adott modell minden részletét,
- ❖ **könyvtár („dictionary”)**: bármely fájl az esetkönyvtárban, amelyet az OpenFOAM beolvas paraméterek definiálása céljából,
- ❖ **időlépés („time step”)**: bármely könyvtár az esetkönyvtárban, amelynek numerikus neve van, pl. „0” (kezdeti feltételek), „0,5”, „15”, „139,74”, „27563”, stb.

❖ OpenFOAM használat:

- ❖ A parancsokat a program terminál ablakában, mindig az adott eset könyvtárában adhatjuk ki,
- ❖ Példa a párhuzamos futtatás parancsára:
 - ❖ **System/decomposeParDict** szükséges, majd esetkönyvtárból terminálablakban: **>decomposePar + ENTER**
 - ❖ Utána az esetkönyvtárban indíthatjuk terminál ablakban a számítást: **> mpirun -np <N> <SOLVER> -parallel + ENTER**
- ❖ Munkamenet: kevert – parancssoros + interaktív ablakok felváltott/párhuzamos használatával,

Ábra: Az OpenFOAM esetkönyvtár általános tartalma

```
<case>/
|
| 0/ ..... Boundary conditions
|  U ..... Velocity boundary condition
|  p ..... Pressure boundary condition
|
| constant/ ..... Mesh, physical properties
|  polyMesh/ ..... Mesh
|
| system/ ..... Solution controlling
|  fvSchemes ..... Discretisation schemes
|  fvSolution ..... Solver settings
|  controlDict ..... Run control parameters
|  (0.*|[1-9]*)/ ..... Timestep folders
```


Eredmény A: Az OpenFOAM megismerése és használatba vétele

❖ A részfeladat célja: a program megismerése, használatba vétele.

❖ 1. ütem:

- ❖ irodalomkutatás (OpenFOAM asználatáról),
- ❖ telepítés egy PC-re, számítások az L-STAR mérőberendezés függőleges teszszakaszának periodikus modelljére (SC számítások).

❖ 2. ütem:

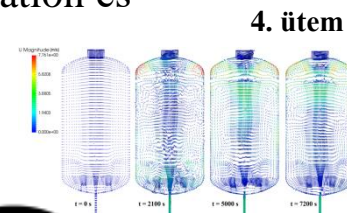
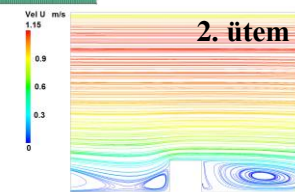
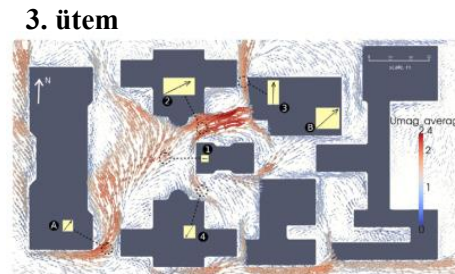
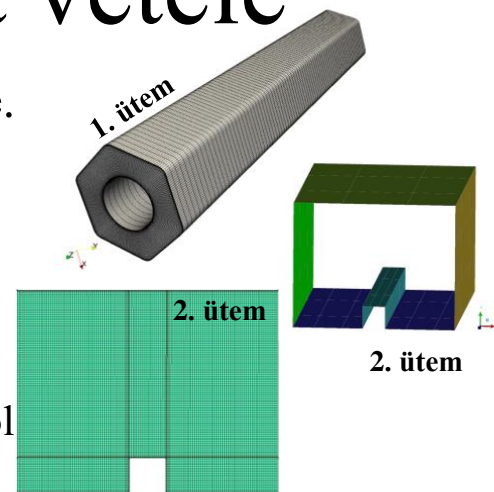
- ❖ irodalomkutatás az OpenFOAM programcsomag CFD-s alkalmazásáról
- ❖ bordázott csatornában kialakuló áramlás 2D és 3D modellezése.

❖ 3. ütem:

- ❖ irodalomkutatás a megoldók módosíthatóságáról,
- ❖ „free” geo. építő és rácsgeneráló programok keresése,
- ❖ a számítások párhuzamosításának elsajátítása.

❖ 4. ütem:

- ❖ programtelepítés további három PC-re,
- ❖ két választott „free” geo. és rácsgeneráló program megismerése és kipróbálása,
- ❖ két fő részvétele az ESI Group-hoz tartozó Open CFD Ltd. kurzusain (Foundation és Advanced Course) – 2017. április 24-25. és 26-27.,
- ❖ OpenFOAM próbaszámítások a PANDA benchmarkra három különböző megoldóval.



Eredmény B: Ingyenes geometriaépítő és rácsgeneráló program kiválasztása 1/2

- ❖ A részfeladat célja: „free” geometriaépítő és rácsgeneráló programok összegyűjtése, a két legígéretesebb kiválasztása, megismerése,
- ❖ Viszonyítási alap: ANSYS ICEM CFD program – a képességeihez pontos rendszerben hasonlítottuk a megvizsgált programok tudását,



Sz.:	A program neve:	Fejlesztő személy(ek)/cégek	Honlapjának címe:
	<i>blockMesh</i>		
1.	blockMesh	OpenFOAM Foundation	https://openfoamwiki.net/index.php/BlockMesh
	CalculiX GraphiX		
2.	CalculiX GraphiX	Guido Dhondt és Klaus Wittig	http://www.calculix.de/
	<i>cfMesh</i>		
3.	cfMesh	Creative Fields, Ltd.	http://cfmesh.com/
	Discretizer CFD as in Computational Fluid Dynamics		
4.	Discretizer	Björn Bergqvist	http://www.discretizer.org/wordpress/
	<i>enGrid</i>		
5.	enGrid	enGits Inc.	http://engits.eu/en/engrid
	<i>gmsH</i>		
6.	gmsH	C. Geuzaine és J.-F. Remacle	http://gmsH.info/
	Gridgen Reliable CFD Meshing		
7.	Gridgen	Pointwise Inc.	http://www.pointwise.com/gridgen/
	GridPro Superior Engineering Solutions		
8.	GridPro	Program Development Company (PDC)	http://www.gridpro.com/
	MegaCads MultiBlock-Cad/Cad-Grid-Generation-And-Computer-Aided-Design-System		
9.	MegaCads	Megacads Development Team (több szervezet)	http://www.megacads.dlr.de/
	POINTWISE		
10.	NetGen	Joachim Schöberl	https://sourceforge.net/projects/netgen-mesher/
	SALOME		
11.	PointWise	Pointwise, Inc.	http://www.pointwise.com/
12.	Salome	OPEN CASCADE, EDF, CEA	http://www.salome-platform.org/
	snappyHexMesh		
13.	snappyHexMesh	OpenFOAM Foundation	http://cfd.direct/openfoam/user-guide/snappyhexmesh/
14.	TetGen	Hang Si (WIAS)	http://wias-berlin.de/software/tetgen/

Táblázat: A vizsgált 14 „free” program listája



Eredmény B: Ingyenes geometriaépítő és rácsgeneráló program kiválasztása 2/2

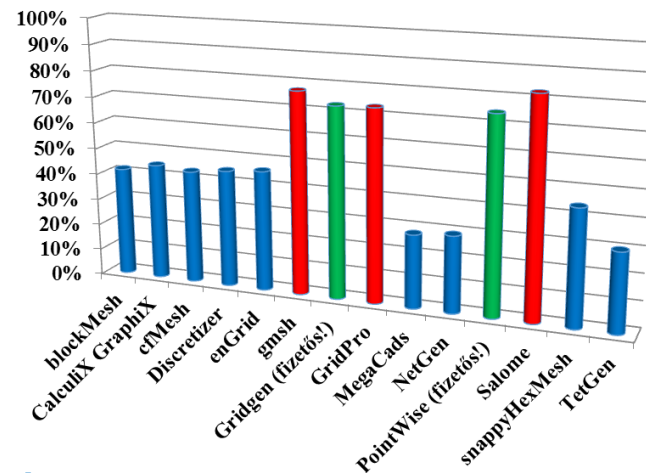
❖ Az összehasonlítást három fő szempontcsoport szerint végeztük el:

- ❖ A., Általános jellemzők,
- ❖ B., Geometria építési – CAD képesség,
- ❖ C., Hálógenerálási képesség.

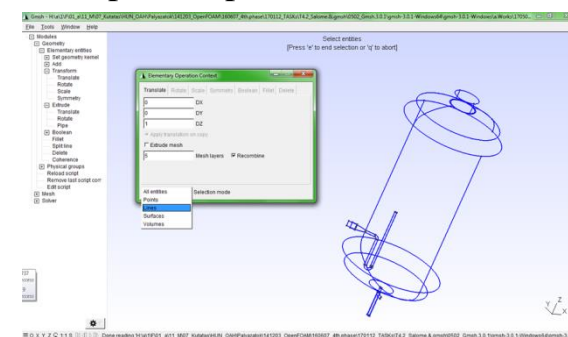
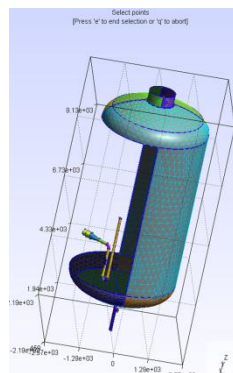
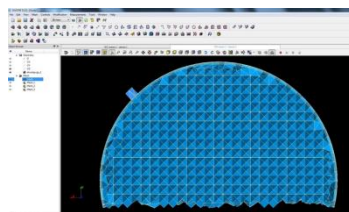
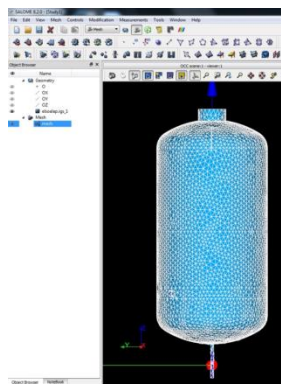
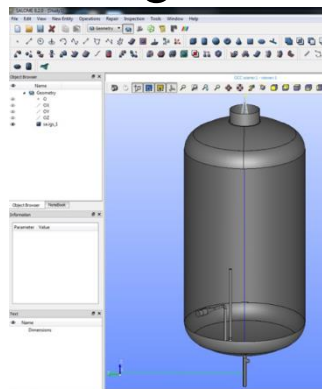
❖ A 3. ütemben kiválasztott programok:

- ❖ Salome, 
- ❖ Gmsh, 

❖ A 4. ütemben használatba vettük a két kiválasztott programot: a PANDA benchmark geometriájának megépítése és hálózása,



Ábra: A 14 program által elért pontszámok százalékos értéke mindhárom (A+B+C) szempontcsoportban



Eredmény C: ANSYS CFX

számítások a PANDA benchmarkra 1/2

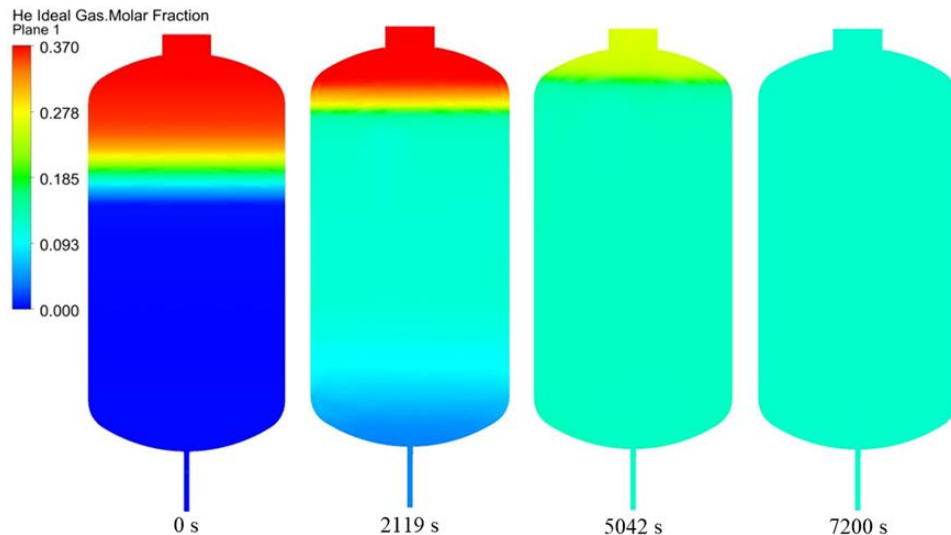
- ❖ **A részfeladat célja:** követő számítások a OECD/NEA PANDA benchmark problémára az ANSYS CFX kereskedelmi CFD kóddal,
- ❖ A számításokhoz az egyszerűsített PANDA tartálygeometriát használtuk (lásd lent),
- ❖ Geometria leírására: „Háló 2” jelű blokkstrukturált háló (a hálóérzékenység-vizsgálat alapján), hexaéder elemekből áll, 1,18 millió nódus és 1,16 millió elem, a jellemző cella élhossz 74 mm,
- ❖ Kezdeti- és peremfeltételek: a benchmark kiírás alapján,
- ❖ A tranziens elején a tartályban berétegződött levegő-hélium és kis mennyiségű vízpára keveréke volt,
- ❖ A kísérlet során levegő-hélium elegyet juttattak a tartályba (mólarányok: $x_{\text{levegő}}=0,862$, $x_{\text{He}}=0,134$, $x_{\text{vízgőz}}=0,004$) a betápláló csövön keresztül úgy, hogy az egyes komponensek tömegárama állandó volt.



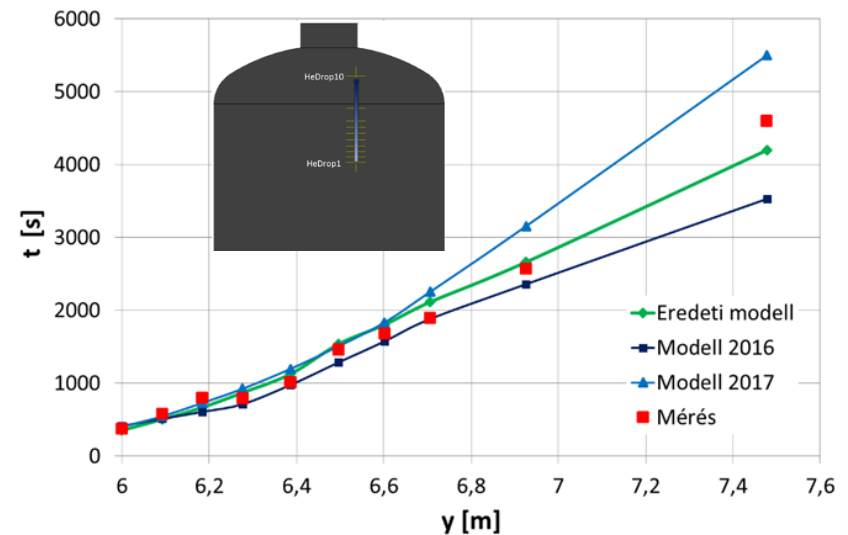
Eredmény C: ANSYS CFX

számítások a PANDA benchmarkra 2/2

- ❖ A számításokat SAS SST turbulenciamodellel végeztük el,
- ❖ A szimulációk során a levegő-hélium-vízgőz elegyét ideális keverékként definiáltuk,
- ❖ A 7200 s, azaz 2 h hosszú tranziens adaptív időlépés használatával vizsgáltuk,
- ❖ Modellek:
 - ❖ Eredeti modell – ennek eredményeit küldtük be 2014-ben a benchmark feladat megoldásaként,
 - ❖ Modell 2016 – követő számítások, előírtuk a tartályfal hőmérsékletét a mérési eredmények alapján,
 - ❖ Modell 2017 – követő számítások, további fejlesztések a koncentrációváltozás jobb modellezése érdekében.



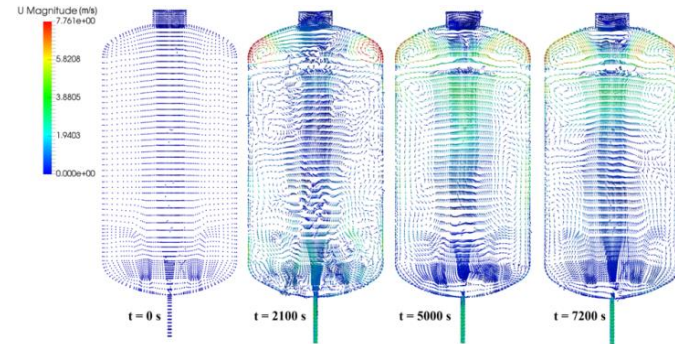
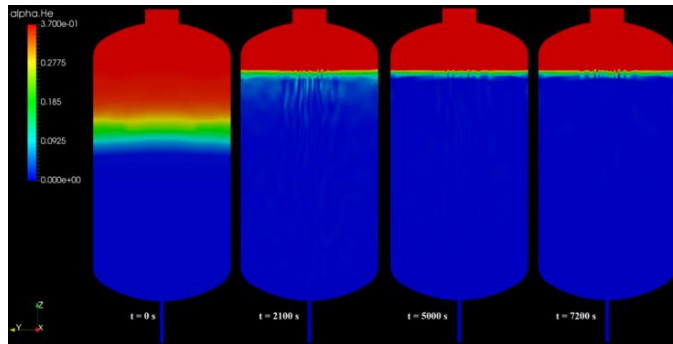
Bal ábra: A hélium koncentráció-eloszlása a középsíkon néhány időpillanatban



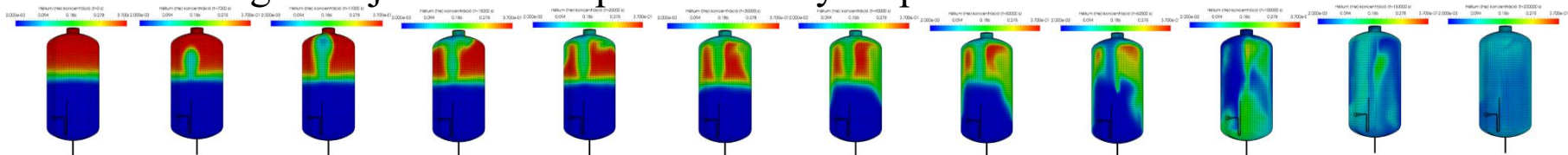
Jobb ábra: 0,2-es hélium koncentráció elérésének ideje különböző magasságokban

Eredmény D: OpenFOAM számítások a PANDA benchmarkra

- ❖ A részfeladat célja: próbaszámítások elvégzése az OpenFOAM-ban a PANDA benchmark feladatra,
- ❖ Három különböző bonyolultságú megoldóval fejlesztettünk modelleket, amelyek a következők:
 - ❖ **interFoam**: amely a legegyszerűbb multiphase (többfázisú) megoldó a programcsomagban, amely a Volum of Fluid (VOF) módszert alkalmazza, k- ϵ és SST turbulenciamodellel végeztünk vele számításokat a 7200 s hosszú tranzienstre,
 - ❖ **rhoReactingBuoyantFoam**: amely a reactingFoam megoldó módosított változata gázkeverékek égésére, de mi a kémiai reakciókat (pl. égés kikapcsoltuk benne), sajnos nem konvergált,
 - ❖ **reactingFoam**: viszonylag bonyolult, multiphase típusú, egy időben lejátszódó fázisok (komponensek) közötti reakciókat és keveredést modellezni képes megoldó, a megoldóhoz fejlesztett modelljeinkben a turbulenciát a k- ω SST turbulenciamodellel felhasználásával modelleztük.



Fenti két ábra: A hélium koncentráció eloszlása balra (fázisaránya – alpha.He) és a sebességmező jobbra a középsíkon néhány időpillanatban az **interFoam** modellre



Ábrásor: A hélium koncentráció-eloszlása a középsíkon 14 időpillanatban a **reactingFoam** megoldó modellje esetén jóval hosszabb számítás során

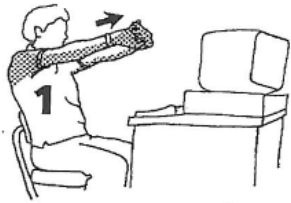
Összefoglalás



- ❖ A projekt célja, egy választott nyílt forráskódú CFD program megismerése és használatba vételének megkezdése teljesült,
- ❖ A 4. ütemben megvalósult két kurzus részvétellel az OpenFOAM használat haladó tudást is elsajátítottuk – ennek konkrét feladatokon történő begyakorlása a feladatunk most,
- ❖ Az előzetesen összegyűjtött ingyenes geometriaépítő és rácsgeneráló programok közül a két legígéretesebbet megismertük, használatba vettük,
- ❖ Követő számításokat végeztünk az ANSYS CFX kóddal a PANDA benchmark feladatra – sikerült pontosabb modelleket fejleszteni nagy geometriában kialakuló hélium (hidrogén) rétegződés és keveredés számításra,
- ❖ Próbaszámításokat végeztünk OpenFOAM-mal a PANDA benchmark feladatra: három különböző modellt készítettünk, a kapott eredmények alapján elmondhatjuk, hogy a kezdeti modellel továbbfejlesztésére van szükség, amit a közeljövőben kívánunk elvégezni a kutatás következő ütemében.



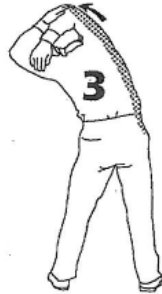
Interpreting CFD Body Language



This should be easy.



My computer budget is this big.



Let me pat myself on the back for taking on this job.



Hmmm. Now I need a budget this big.



Please converge, please converge, please converge...

Köszönöm a figyelmet!



Can I get some help?



I'll pretend I can't see him asking for help.



Damn, this code is a real pain in the...



Gulp. The presentation is in 5 minutes.