

# De (on)berekenbaarheid van turbulentie

Martin Streng, Jan Broeze, Hans Kuerten en Bernard Geurts

**Eén van de onopgeloste problemen in de klassieke natuurkunde is het begrijpen en beschrijven van de eigenschappen van turbulente stromingen. Traditioneel werd dit vraagstuk voornamelijk experimenteel onderzocht. Met de komst van de nieuwe generatie supercomputers is hiervoor een nieuw hulpmiddel ontstaan, de numerieke simulatie. Op dit moment kunnen hiermee relatief eenvoudige stromingen reeds goed worden bestudeerd. Door toepassing van nieuwe berekeningsmethoden en gebruik van de nieuwe generatie supercomputers komt op termijn ook de bestudering van voor de praktijk relevante stromingen binnen bereik.**

De stroming van een vloeistof of gas in een bepaalde geometrie voldoet aan de wetten van behoud van massa, impuls en energie. Deze wetten worden voor Newtonse stoffen uitgedrukt door de Navier-Stokesvergelijkingen, die (in drie ruimtelijke dimensies) een stelsel van vijf gekoppelde, niet-lineaire partiële differentiaalvergelijkingen vormen. De eigenschappen van het medium, zoals bijvoorbeeld de viscositeit, komen in deze vergelijkingen als (plaats- en tijdsafhanke-lijke) grootheden voor. De informatie betreffende de geometrie is bevat in de begin- en randvoorwaarden behorende bij dit stelsel. Wanneer de Navier-Stokesvergelijkingen met hun randvoorwaarden exact zouden kunnen worden opgelost met behulp van methoden uit de analyse, dan zou elk detail van de betreffende stroming bekend zijn. Dit is voor praktisch relevante turbulente stromingen echter in geen enkel geval mogelijk. Daarom moet men zijn toevlucht nemen tot andere technieken om turbulente stromingen te onderzoeken. Behalve de experimentele aanpak kan daarvoor de numerieke oplossing van de vergelijkingen gebruikt worden.

In een numerieke methode wordt een benaderende oplossing voor het stromingsprobleem berekend in een verzameling discrete punten, het rekenrooster. In principe zou elk detail van de stroming zichtbaar gemaakt kunnen worden door de maaswijdte van het rekenrooster kleiner te kiezen dan de grootte van de kleinste relevante ruimtelijke structu-

ren die in de stroming voorkomen, en nauwkeurige rekentechnieken te gebruiken. In de praktijk is dit echter meestal onmogelijk omdat de verhouding tussen de grootste en de kleinste ruimtelijke structuren, en dus het aantal benodigde roosterpunten, zeer groot is. Dit is op grond van fysische beschouwingen nader te beschrijven.

## Convectieve en viskeuze effecten

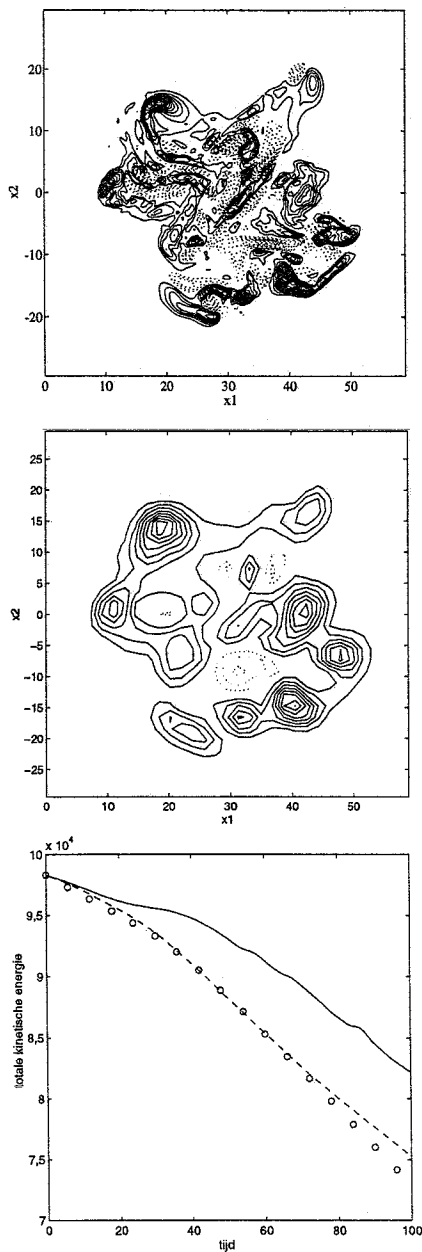
In een stromend medium spelen twee processen een rol, transport (ook convectie genoemd), en dissipatie. De convectieve processen hebben de neiging de kinetische energie van een structuur met een bepaalde lengteschaal over te dragen op structuren met een kleinere lengteschaal. Via deze energiecascade geven de convectieve processen aanleiding tot het ontstaan van steeds kleinere wervels. Dit proces stopt door toedoen van de viscositeit, die voor dissipatie van kinetische energie zorgt. Omdat deze dissipatie evenredig is met de deformatie van het medium, speelt dit vooral bij structuren met een kleine schaal een grote rol. Deze energiecascade wordt in detail besproken in het boek van Tennekes en Lumley [1].

In elke stroming is er dus sprake van een competitie tussen de convectieve en de viskeuze processen. De verhouding tussen de typische grootte-orde die met deze twee processen kunnen worden geassocieerd wordt gegeven door het kengetal van Reynolds,  $Re$ : hoe hoger dit getal is, hoe kleiner de viskeuze effecten zijn ten

opzichte van de convectieve. Stromingen met een hoog Reynoldsgetal gedragen zich veelal turbulenter dan stromingen in dezelfde geometrie met een lager Reynoldsgetal.

Er is echter bij ieder Reynoldsgetal een lengteschaal waarbij de convectieve en dissipatieve processen met elkaar in evenwicht zijn. Deze heet de Kolmogorovlengte  $L_K$ , en is evenredig met  $L_0 Re^{-3/4}$ , waarbij  $L_0$  de lengteschaal van de hoofdstroming is, die in de regel bepaald wordt door de geometrie. Schalen kleiner dan deze Kolmogorovlengte spelen geen wezenlijke rol, omdat de dissipatie daarvoor te groot is. Om alle details van een stroming te kunnen beschrijven, moet de maaswijdte van het rekenrooster dus van de grootte-orde van  $L_K$  zijn. Dit betekent dat we voor elke ruimtelijke dimensie een aantal roosterpunten nodig hebben dat evenredig is met  $L_0/L_K = Re^{3/4}$ , zodat het totale aantal roosterpunten ( $N$ ) evenredig is met  $Re^{9/4}$ . Omdat met een dergelijke methode de volledige Navier-Stokesvergelijkingen kunnen worden gesimuleerd, worden zulke berekeningen wel aangeduid met de term Directe Numerieke Simulatie (DNS).

Voor veel praktisch relevante stromingen volgt hieruit dat  $N$  van de orde  $10^{13}$  is. Vanwege dit grote aantal benodigde roosterpunten is DNS derhalve alleen uitvoerbaar voor eenvoudige stromingen. Zelfs op een moderne supercomputer kost de simulatie van 1 seconde van een stroming over een vlakke plaat op deze manier weken rekentijd. Toch komt door toepassing van nieuwe rekentechnieken de bestudering van steeds meer stromingen binnen bereik. Ruwweg richt het moderne onderzoek zich op drie aspecten. Ten eerste wordt geprobeerd modellen te vinden waarmee de effecten van de kleinste schalen beschreven kunnen worden zonder deze expliciet te berekenen.



**Fig. 1.** Isolijnen van de  $x_3$ -component van de vorticeit in een driedimensionale menglaag; in de bovenste figuur is het DNS-resultaat getoond, in de middelste is het effect van de ruimtelijke middeling duidelijk. In de onderste figuur is een voorspelling van de totale kinetische energie met een goed LES-model (gestippelde lijn) vergeleken met de gefilterde DNS-resultaten (aangegeven door de cirkels) en met een DNS op een grof rooster, dus zonder model (aangegeven met de doorgetrokken lijn).

Ten tweede worden de numerieke methoden steeds efficiënter. En ten derde wordt verwacht dat de ontwikkeling van parallelle supercomputers een essentiële vergroting van de rekencapaciteit met zich mee zal brengen. Hieronder zullen we kort ingaan op elk van deze aspecten.

### Reynoldsmiddeling

Veronderstel dat we, gegeven de beschikbare hoeveelheid rekentijd en geheugen, een bepaalde stroming kunnen doorrekenen op een rekenrooster met maaswijdte  $\Delta$ . Als  $\Delta \gg L_K$ , dan kunnen we de kleinste schalen in deze stroming niet berekenen. In zogenaamde *Large Eddy Simulatie* (LES) wordt daarom het effect van de schalen kleiner dan  $\Delta$  met een model verdisconteerd en berekent men alleen de schalen groter dan  $\Delta$  expliciet. De Navier-Stokesvergelijkingen worden hiertoe gemiddeld over een volume met afmetingen van de orde  $\Delta$ . Omdat de Navier-Stokesvergelijkingen niet lineair zijn, ontstaan hierdoor zogenaamde subgridtermen die niet uitgedrukt kunnen worden in de gemiddelde stromingsgrootheden en derhalve gemodelleerd moeten worden. Zo'n model wordt een subgridmodel genoemd. Voor het bepalen van een goed subgridmodel is fysisch inzicht in de eigenschappen van de kleine structuren (die geacht worden 'universeel' te zijn) van belang. De validatie van een dergelijk model gebeurt in de regel door resultaten verkregen met dit model te vergelijken met 'gefilterde' resultaten verkregen uit een Directe Numerieke Simulatie. Uiteraard kan dit alleen voor eenvoudige stromingen. Een voorbeeld van zo'n vergelijking uitgevoerd voor de stroming in een menglaag is te zien in figuur 1. Zodra inzicht is verkregen in de bruikbaarheid van de subgridmodellen, kan Large Eddy Simulatie worden ingezet voor berekeningen aan complexere stromingen waarbij veel minder roosterpunten nodig zijn dan bij toepassing van DNS.

Veel voor de praktijk relevante turbulente stromingen zijn statistisch stationair, hetgeen betekent dat het gemiddelde van de stromingsgrootheden over een voldoende lange periode tijdonafhankelijk is. Wanneer men alleen geïnteresseerd is in deze statistisch stationaire oplossing, kan, in plaats van een ruimtelijke middeling zoals in LES, een ensemblegemiddelde worden bepaald. Hiertoe worden de Navier-Stokesvergelijkingen in de tijd gemiddeld om de snelle fluctuaties rond het gemiddelde veld te elimineren. Dit noemen we Rey-

noldsmiddeling. De effecten van de fluctuaties moeten dan worden gemodelleerd door een zogenaamd turbulentiemodel. Hierdoor ontstaan nieuwe vergelijkingen, de Reynolds-gemiddelde Navier-Stokesvergelijkingen (RaNS). De moeilijkheid bij het vinden van een goed turbulentiemodel is dat nu ook de fluctuaties van de grote structuren moeten worden gemodelleerd. Omdat deze sterk afhangen van de geometrie van het stromingsprobleem, zijn de resulterende turbulentiemodellen veel minder universeel dan de subgridmodellen in LES. Het voordeel van deze methode is echter dat RaNS-berekeningen op een grover rooster uitgevoerd kunnen worden, en dat de oplossing stationair is, zodat veel minder rekentijd en geheugen nodig is dan bij gebruik van LES of DNS. Hierdoor kunnen met deze methode veel complexere stromingen worden doorgerekend dan met LES of DNS. Analoot aan de toetsing van de subgridmodellen bij LES, kunnen de turbulentiemodellen bij Reynolds-middeling worden getoetst aan resultaten verkregen met LES of DNS voor een eenvoudige stroming. In figuur 2 is de relatie tussen DNS, LES en RaNS geschetst. Bovendien is de begrenzing in toepasbaarheid ten gevolge van de beschikbare computerkracht aangegeven.

Zowel voor LES als voor RaNS wordt veel onderzoek verricht naar bruikbare modellen voor de effecten van de niet-opgeloste schalen op de dynamica van de opgeloste schalen. Omdat met de kleine schalen het belangrijkste deel van de dissipatie uit de vergelijkingen verdwenen is in deze twee benaderingen, speelt met name de zogenaamde eddyviscositeit, die het transport van kinetische energie naar de kleine schalen modelleert, een belangrijke rol [2]. Op dit moment is er echter nog geen model beschikbaar dat voor complexere stromingen (bijvoorbeeld rond een vliegtuig) een voldoende goed resultaat geeft. In de vliegtuigindustrie is immers een hoge nauwkeurigheid vereist. Zo wordt geschat dat een verlaging van 1 % van de weerstand van een vleugel een besparing van 150.000 dollar aan brandstof per vliegtuig per jaar oplevert.

## Numerieke methoden

In een numerieke berekeningsmethode, wordt de stroming gerepresenteerd door de waarden van de stromingsgrootheden op de punten van een rekenrooster. Laten we, voor zo'n punt  $\underline{x}$ , al deze gegevens samenvatten in een vector  $w(\underline{x})$ . Door uit te gaan van de Navier-Stokesvergelijkingen (of de LES- of RaNS-vergelijkingen) kunnen we voor elk roosterpunt  $\underline{x}$  de tijdsevolutie van  $w(\underline{x})$  beschrijven door een groot stelsel gekoppelde niet-lineaire gewone (in plaats van partiële) differentiaalvergelijkingen. Dit proces noemen we de ruimtelijke discretisatie van de vergelijkingen. Gegeven de waarde van  $w(\underline{x})$  in elk roosterpunt  $\underline{x}$  op een zeker tijdstip  $t$  aan te geven met  $w(\underline{x}, t)$  dan kunnen we nu  $w(\underline{x}, t + \Delta t)$  uitrekenen, waarbij  $\Delta t$  de tijdstap is. Hiervoor is, voor een roosterpunt  $\underline{x}$ , niet alleen  $w$  in het roosterpunt  $\underline{x}$  zelf nodig, maar ook op enkele nabij gelegen roosterpunten. Hoe minder dit er zijn, des te minder rekenwerk is er nodig om  $w(\underline{x}, t + \Delta t)$  te berekenen, maar ook des te onnauwkeuriger de berekening is. Deze onnauwkeurigheid kan dan weer worden gecompenseerd door een fijner rooster te gebruiken. Aan de andere kant wordt de laatste tijd een intensieve studie gemaakt van discretisaties die nauwkeuriger zijn, maar toch efficiënt. Een van de problemen hierbij is dat de stromingsvergelijkingen behoudswetten representeren. Het is belangrijk dat dit ook in de vorm van de ruimtelijke discretisatie uitgedrukt wordt. Verder speelt een rol welke van de nabij gelegen roosterpunten gebruikt worden in het discretisatieschema. Als de stroming betrekkelijk glad is, is het het meest efficiënt om deze gelijkmatig rond  $\underline{x}$  verspreid te nemen. Als dit niet zo is, bijvoorbeeld vanwege de aanwezigheid van een schokgolf in de buurt van  $\underline{x}$ , dan is het beter om ze meer stroomopwaarts van deze schokgolf te kiezen. Een probleem hierbij is dat van te voren niet vaststaat of en zo ja waar een schokgolf zal optreden. Dankzij recente ontwikkelingen kan dit nu echter goed automatisch worden gedetecteerd.

Na de ruimtelijke discretisatie dient het aldus ontstane stelsel gewone differentiaalvergelijkingen geïnte-

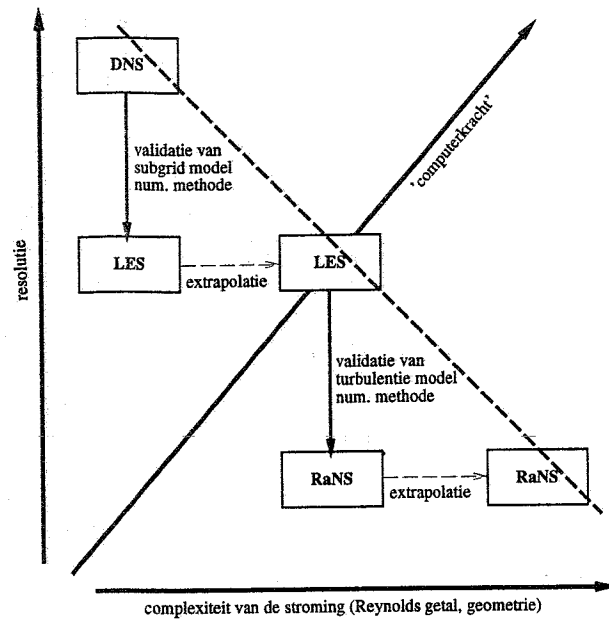


Fig. 2. Overzicht van de toepassing van DNS-LES-RaNS in stromingssimulaties.

greerd te worden in de tijd. Hiervoor zijn expliciete en impliciete methoden beschikbaar. Bij een expliciete methode kan  $w(\underline{x}, t + \Delta t)$  direct worden berekend; bij een impliciete methode moet hiervoor een stelsel niet-lineaire vergelijkingen worden opgelost. Het voordeel van expliciete methoden is dat een tijdstap weinig rekenwerk vereist. Daar staat tegenover dat voor stabiliteit van deze methoden de maximaal toelaatbare tijdstap  $\Delta t$  meestal veel kleiner is dan de kleinste tijdschaal waarop de fysische processen zich afspelen. Dit heeft tot gevolg dat enorm veel tijdstappen nodig zijn om een stroming te simuleren. Impliciete methoden zijn over het algemeen stabiel voor een veel grotere waarde van de tijdstap, maar het berekenen van één enkele tijdstap is veel ingewikkelder, en kost aanzienlijk meer rekentijd. Bovendien is het niet zo gemakkelijk een impliciete methode efficiënt te implementeren op de huidige supercomputers. Veel recent onderzoek spitst zich daarom ook toe op de ontwikkeling van impliciete methoden die wel een grote tijdstap toelaten, maar toch niet al te veel extra rekenwerk met zich meebrengen [3].

We hebben nu gezien dat zowel vanuit fysisch oogpunt, als vanuit numeriek wiskundig oogpunt benaderingen worden gemaakt van de Navier-Stokesvergelijkingen, om ook

stromingen die van praktisch belang zijn te kunnen simuleren. Echter, zonder de toepassing van de nieuwe generatie supercomputers zou dit nog steeds onmogelijk zijn. Gelukkig blijkt het zo te zijn dat sommige numerieke methoden voor stromingsproblemen zich goed lenen voor implementatie op parallelle computers.

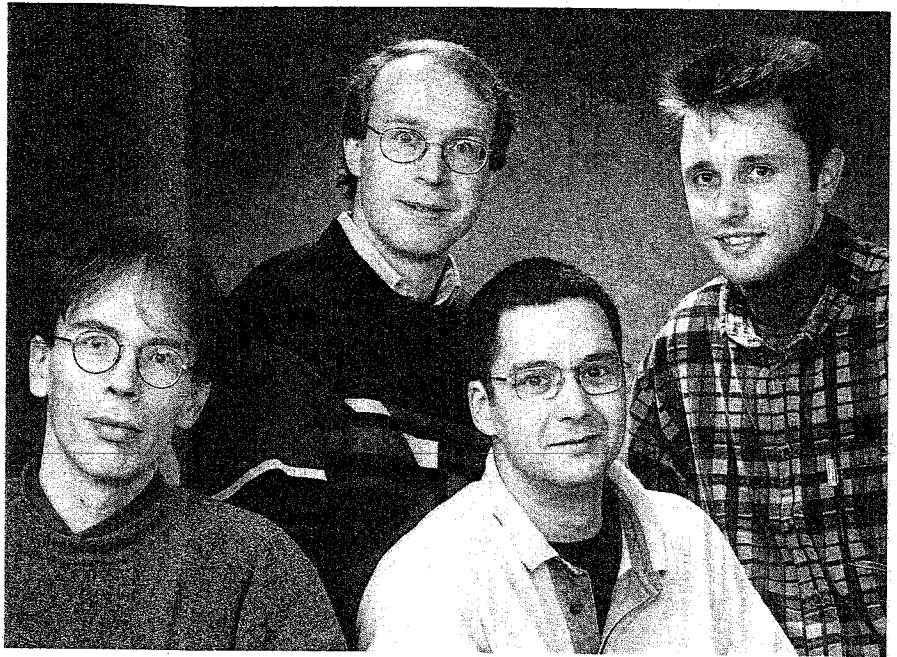
### High Performance Computing

De traditionele supercomputer heeft als belangrijkste rekeneenheid een vectorprocessor. Dit type processor is zeer goed in het uitvoeren van operaties op vectoren. Bovendien is het bij supercomputers van dit type meestal zo dat de gegevens zeer snel vanuit het geheugen naar de processor kunnen worden getransporteerd. Deze eigenschappen, gekoppeld aan het feit dat zeer veel numerieke algoritmen kunnen worden geformuleerd in termen van operaties op vectoren, maakt dat vectorcomputers zeer geschikt zijn om te worden ingezet bij het oplossen van stromingsproblemen. De afgelopen twintig jaar zijn de vectorcomputers steeds krachtiger geworden, maar de groeicurve is nu duidelijk aan het afvlakken, en het is niet te verwachten dat binnen afzienbare tijd nog een vectorprocessor kan worden ontwikkeld die bijvoorbeeld tien keer zo krachtig is als de krachtigste op dit moment. Bovendien is de

ontwikkeling van dit soort processoren zeer kostbaar.

Daarom zijn de laatste jaren computers ontwikkeld waarin een (groot) aantal processoren gelijktijdig kunnen werken aan de oplossing van een probleem. Als je er maar in slaagt een voldoende groot aantal processoren effectief hiervoor in te zetten, krijg je een in principe onbeperkte rekenkracht. Voor de constructie van een dergelijke parallelle computer kunnen de vectorprocessors uit de traditionele supercomputers worden gebruikt, maar dat resulteert in een zeer kostbaar apparaat. Daarom worden veelal processoren gebruikt van het type dat al vaak in werkstations wordt toegepast. Deze processoren zijn veel goedkoper, en in de verwerkingssnelheid zit op dit moment nog een behoorlijke groei. (Bij gerenommeerde computerfabrikanten lopen zelfs weddenschappen welk type processor over vijf jaar het snelst is.) Een typische parallelle supercomputer bestaat momenteel uit enkele tientallen tot enkele duizenden van dit soort processoren.

Een voorwaarde voor efficiënt gebruik van parallelle computers is dat de numerieke methode hiervoor geschikt moet zijn. Een van de mogelijkheden om bestaande methoden toe te passen bij parallelle stromingsberekeningen is het fysische domein te verdelen in deelgebieden, waarbij elke processor de berekeningen in een deelgebied verricht [4]. Na iedere tijdstap moeten echter de resultaten van de berekeningen in de buurt van de rand van elk deelgebied worden overgestuurd naar de processoren belast met de berekeningen in aangrenzende deelgebieden. Op dit moment is dat vaak een snelheidsbeperkend aspect. Een belangrijk punt van onderzoek is dan ook de ontwikkeling van numerieke methoden die hier zo min mogelijk last van hebben. Deze 'communicatiebottleneck' is de reden dat een probleem niet twee keer zo snel wordt opgelost als je twee keer zoveel processoren inzet. Voor stromingsproblemen geldt echter wel vaak de eigenschap dat bij gebruik van twee keer zoveel processoren een twee keer zo groot probleem in dezelfde tijd kan worden doorgerekend. En dat is eigenlijk precies de



Van links naar rechts: Bernard Geurts, Hans Kuerten, Martin Streng, Jan Broeze.

eigenschap die van belang is. De eerste twee aspecten van het hedendaagse onderzoek in de numerieke stromingsleer (fysische en numerieke modellering) waren er immers op gericht ons in staat te stellen het aantal punten in ons rekenrooster kleiner te nemen, en zo het probleem hanterbaar te maken. Nu komt de ontwikkeling in parallelle computers ons in die zin tegemoet dat we steeds grotere rekenproblemen aankunnen. Nog zijn we niet zover dat een realistisch stromingsprobleem tot in elk detail kan worden opgelost. Het wachten is op het moment dat de ontwikkeling in fysische en wiskundige technieken de hand schudt van de ontwikkeling in computerkracht.

#### Referenties

1. H. Tennekes, J.L. Lumley, *A first course in turbulence* (MIT-Press, 1994).
2. A.W. Vreman, *Direct and Large-Eddy Simulation of the compressible turbulent mixing layer*, proefschrift Universiteit Twente, 1995 (De resultaten uit figuur 1 zijn ontleend aan dit proefschrift).
3. J. Broeze, B. Geurts, H. Kuerten, M. Streng, *Multigrid acceleration of time-accurate DNS of compressible turbulent flow*, in: Proc Seventh Conference on Multigrid Methods, 1995, Copper Mountain.
4. M. Streng, H. Kuerten, J. Broeze, B. Geurts, *Parallel algorithms for DNS of compressible flow*, in: Proc 77-th Fluid Dynamics Panel meeting on 'Progress and challenges in CFD methods and algorithms', AGARD, 1995.

Bernard Geurts (1961) studeerde technische natuurkunde en toegepaste wiskunde aan de Universiteit Twente. Hij promoveerde in 1989 aan dezelfde universiteit op het gebied van macromoleculaire systemen. Na twee jaar werkzaam te zijn geweest bij het Natuurkundig Laboratorium van Philips is hij sinds 1991 in dienst van de Universiteit Twente bij de faculteit der Toegepaste Wiskunde als universitair docent.

Hans Kuerten (1961) studeerde theoretische natuurkunde aan de Rijksuniversiteit Utrecht. Hij promoveerde in 1987 aan de Technische Universiteit Eindhoven op thermodynamische en hydrodynamische eigenschappen van superfluïde heliummengsels. Sindsdien is hij als universitair docent werkzaam bij de faculteit der Toegepaste Wiskunde van de Universiteit Twente.

Martin Streng (1964) studeerde technische natuurkunde en toegepaste wiskunde aan de Universiteit Twente. Hij promoveerde in 1993 aan dezelfde universiteit op een onderwerp uit de optimalisatietheorie. Hij is nu als postdoc verbonden aan de faculteit der Toegepaste Wiskunde.

Jan Broeze (1966) studeerde toegepaste wiskunde aan de Universiteit Twente. Hij promoveerde in 1993 op een onderzoek uitgevoerd bij het Waterloorkundig Laboratorium op het gebied van numerieke modellering van niet-lineaire watergolven. Hij is nu als postdoc verbonden aan de faculteit der Toegepaste Wiskunde.