

Разработка моделей в OpenFOAM: этапы и рекомендации

М.В. Крапошин

**НАЦИОНАЛЬНЫЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»**

1

РАЗРАБОТКА МОДЕЛЕЙ В OPENFOAM

- Постараюсь избежать излишнего резонёрства
- Возможно, для специалистов, имеющих внушительный багаж численного моделирования данный доклад будет лишь повторением их собственного опыта
- Надеюсь, что это предостережёт начинающих и сэкономит их время
- **Очень важно:**
научиться учиться и
критически мыслить

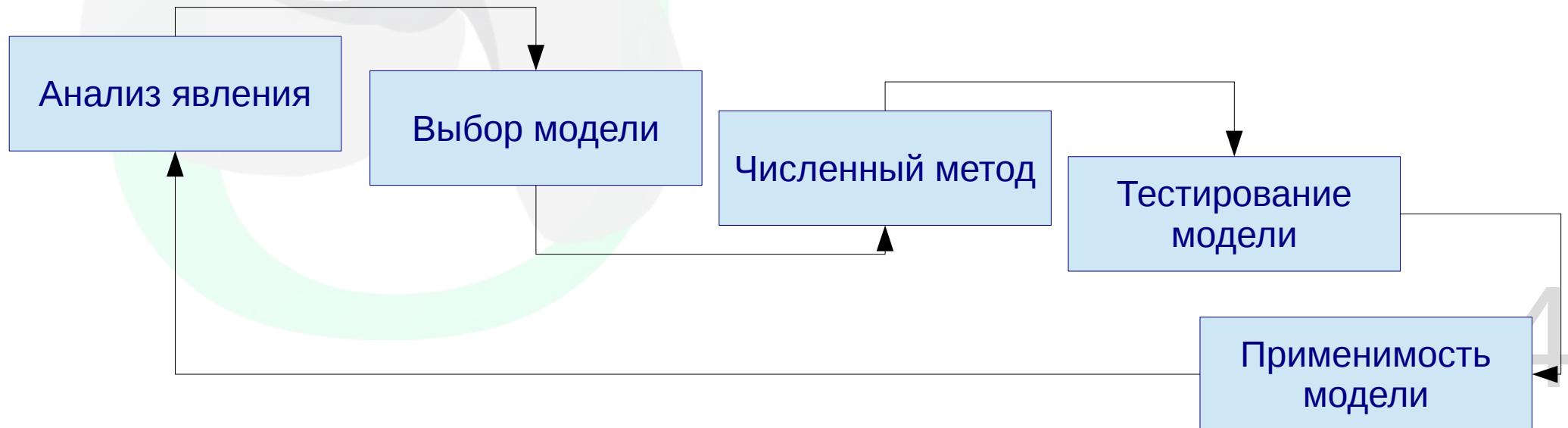
ИТАК, ВЫ РЕШИЛИ СОЗДАТЬ МОДЕЛЬ

- Предположим, это обоснованное и взвешенное решение
- Далее будет показано, насколько не только решение создать собственное приложение в OpenFOAM, но и сам выбор этой платформы, да и метода конечных объёмов может быть опрометчивым:
 - Какие подводные камни содержит в себе выбор OpenFOAM (и МКО) для решения задач механики сплошных сред
 - Как и где искать документацию

ЭТАПЫ РАЗРАБОТКИ

- 1) Анализ причин и возможных последствий физического явления
- 2) Выбор физической модели исследуемого явления (интегральная, макроскопическая, микроскопическая, молекулярная и т. д.)
- 3) Выбор численного метода решения, который включает в себя
- 4) Качественное и количественное тестирование модели
- 5) Анализ применения разработанной модели к сформулированной на первом этапе прикладной проблеме

Изменения и несоответствия на каждом этапе могут привести к полному пересмотру всех остальных этапов, в том числе и первого.



УРОВНИ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ МАТЕРИИ

- Атомарный уровень
- Молекулярный уровень
- Микроскопический уровень
- Макроскопический уровень
- Системный уровень

CFD — макроскопический уровень, механика сплошных сред



На каждом из уровней возможно взаимодействие с другими **с помощью эмпирических соотношений**

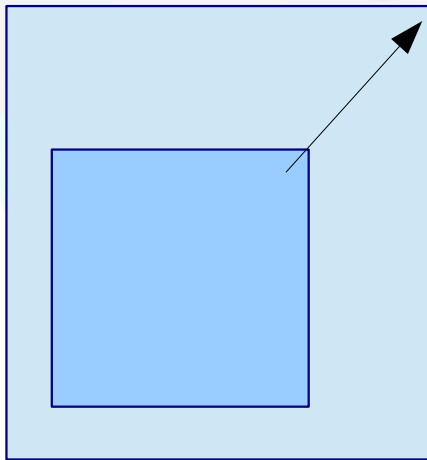
МЕХАНИКА СПЛОШНЫХ СРЕД

- Среда представляется сплошной и неразрывной
- Основные законы классической механики и термодинамики:
 - Закон сохранения массы
Масса замкнутой системы постоянна
 - Закон сохранения импульса
Изменение импульса системы равно сумме действующих на неё сил
 - Закон сохранения энергии
Изменение внутренней энергии равно сумме работы внешних сил над системой и подведённого тепла
- Таким образом, вводится понятие системы (контрольной массы), для которой и формулируются основные законы и соответствующие физические величины. Нам же требуется исследовать изменение физических величин в пространстве, указав их пространственную и временную связь.

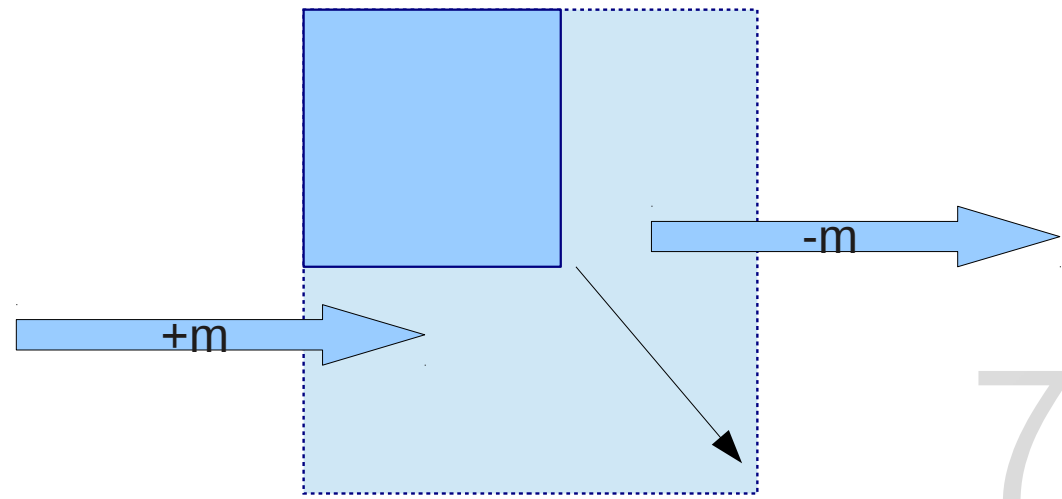
6

КОНТРОЛЬНАЯ МАССА, КОНТРОЛЬНЫЙ ОБЪЁМ

- **Контрольная масса** (физически малый объём, элементарный физический объём, материальный объём) — некоторое постоянное количество вещества, заключённое в «непроницаемую оболочку» и движущееся со скоростью среды



- **Контрольный объём** — объём пространства, величина которого, форма и положение может меняться и включать в себя контрольную (или несколько контрольных) массу.



7

ВЫБОР ЧИСЛЕННОГО МЕТОДА

- **Метод конечных разностей**

Сформулированные в пространстве дифференциальные соотношения заменяются разностными аналогами в узлах контрольного объёма

- **Метод конечных элементов**

Искомая функция (поле) заменяется комбинацией базисных или весовых функций в пределах контрольного объёма (элемента) и затем минимизируется ошибка исходного уравнения

- **Метод конечного объёма**

Искомое поле представляется в виде дискретного набора средних значений, каждое из которых постоянно в пределах своего контрольного объёма. Далее составляется и решается система линейных алгебраических уравнений, описывающих баланс среднего значения в контрольном объёме.

2

8

ТЕОРЕМА ПЕРЕНОСА РЕЙНОЛЬДСА

- Теорема переноса Рейнольдса — связь контрольной массы и контрольного объёма
- Позволяет получить интегральные соотношения искомой величины для контрольного объёма используя законы сохранения для контрольной массы
- В качестве теоремы о дифференцировании интеграла функции по переменному объёму

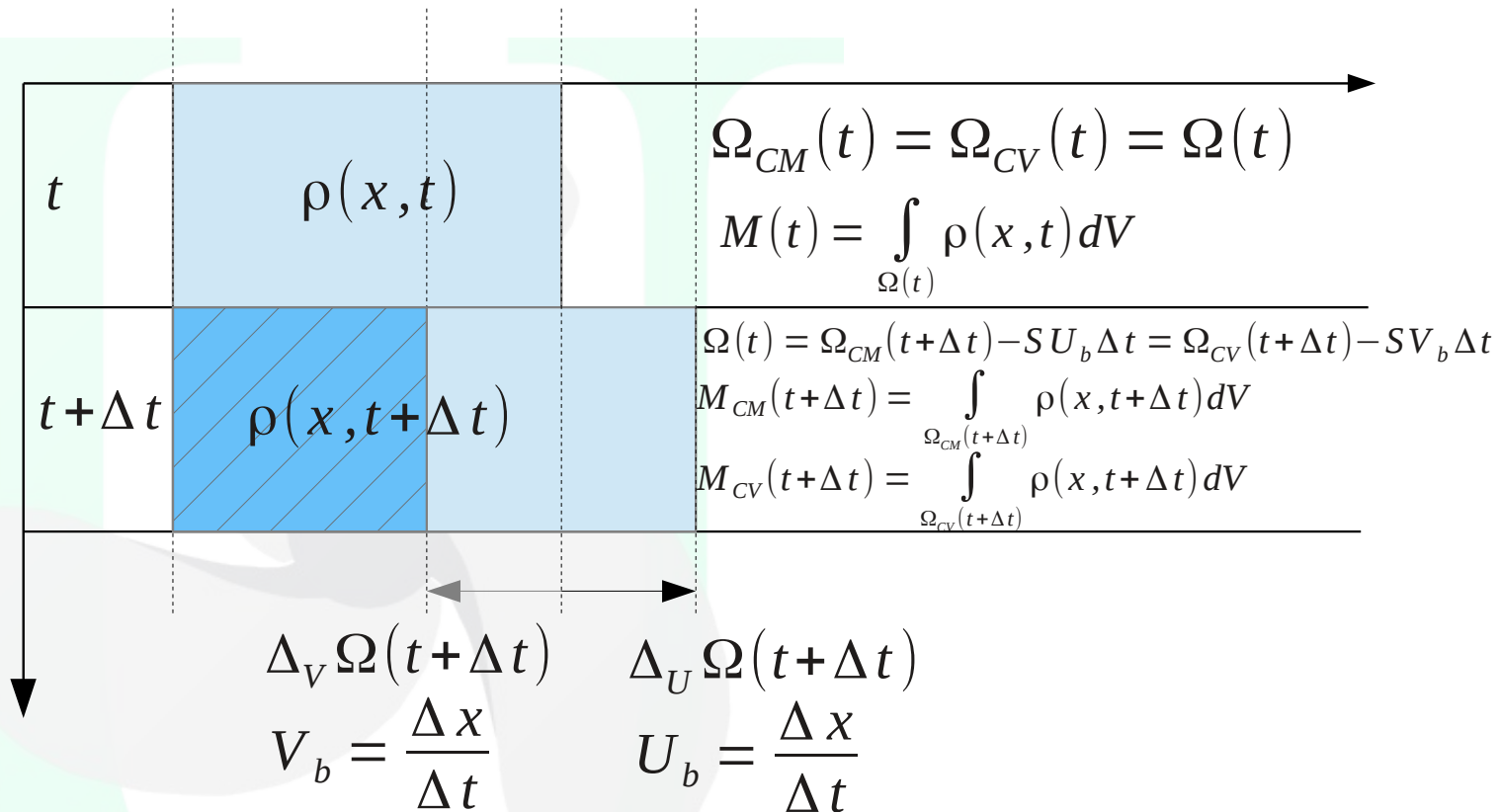
$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \psi dV = \int_{V(t)} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{U} \psi \right) dV$$

- В качестве связи между изменением экстенсивного свойства произвольной контрольной массы и охватывающего её произвольного контрольного объёма

$$\frac{d}{dt} \Psi = \frac{d}{dt} \int_{V_m(t)} \psi dV = \frac{d}{dt} \int_{V_m(t)} \psi dV + \int_{V_m(t)} \nabla \cdot \vec{U}_r \psi dV$$

ОДНОМЕРНАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ТПР

- Теорема переноса Рейнольдса в 1D:



изменение экстенсивного свойства вещества в материальном объёме может производиться за счёт:

- 1) Изменения внутри границ пространственного (контрольного объёма)
- 2) Потока через границы контрольного объёма, охватывающего материальный объём.

10

ВИДЫ УРАВНЕНИЙ

- Значит, записывая уравнения в дифференциальной форме, мы должны помнить, что они будут решаться в интегральной форме

- Говорим

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U} \psi) = 0 \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \nabla \cdot (\Gamma_\psi \nabla \psi) = 0 \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} - \nabla \cdot (\Gamma_\psi \nabla \psi) = 0$$

- Подразумеваем

$$\int_V \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U} \psi) \right) dV = 0 \quad \int_V \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \nabla \cdot (\Gamma_\psi \nabla \psi) \right) dV = 0 \quad \int_V \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} - \nabla \cdot (\Gamma_\psi \nabla \psi) \right) dV = 0$$

- Для первой производной по времени чаще всего подразумевается что объём может быть переменным по времени. В случае постоянства к.о.:

$$\frac{d}{dt} \int_{cv} \psi dV = \int_{cv} \frac{\partial \psi}{\partial t} dV$$

3

Круг задач сужается до тех, которые определяются балансом величин в контрольном объёме

11

ТЕОРЕМА О СРЕДНЕМ

- Для вычисления интеграла по объёму используется теорема о среднем

- Существует такая точка, что

$$\langle \Psi \rangle = \frac{1}{V} \int_V \Psi dV = \Psi(\vec{\xi})$$

- Предположение 1. Эта точка — геометрический центр масс

4

$$\vec{\xi} = \vec{c}: \xi_x = \frac{1}{V} \int_V x dV, \xi_y = \frac{1}{V} \int_V y dV, \xi_z = \frac{1}{V} \int_V z dV$$

- Предположение 2. Вычисление среднего от произведения как произведение средних

5

$$\langle \Psi \Phi \rangle = \frac{1}{V} \int_V \Psi \Phi dV = \langle \Psi \rangle \langle \Phi \rangle + \langle \Psi' \Phi' \rangle \approx \langle \Psi \rangle \langle \Phi \rangle$$

12

АППРОКСИМАЦИЯ

- Для вычисления потоков (дивергентных слагаемых) через границы объёмов используется теорема Остроградского-Гаусса:

$$\int_V \nabla \cdot \psi dV = \int_{\partial V} \psi \cdot \vec{n} dS$$

- Для вычисления значений на гранях (интеграла по поверхности) используются значения в соседних ячейках (аппроксимация по пространству) + теорема о среднем
- Для вычисления производной по времени используется несколько значений с предыдущих временных шагов (аппроксимация по времени)
- Говоря об ошибке (порядке точности), подразумевается (6) и (7), но вот про (4) и (5), например, забывают

6

7

13

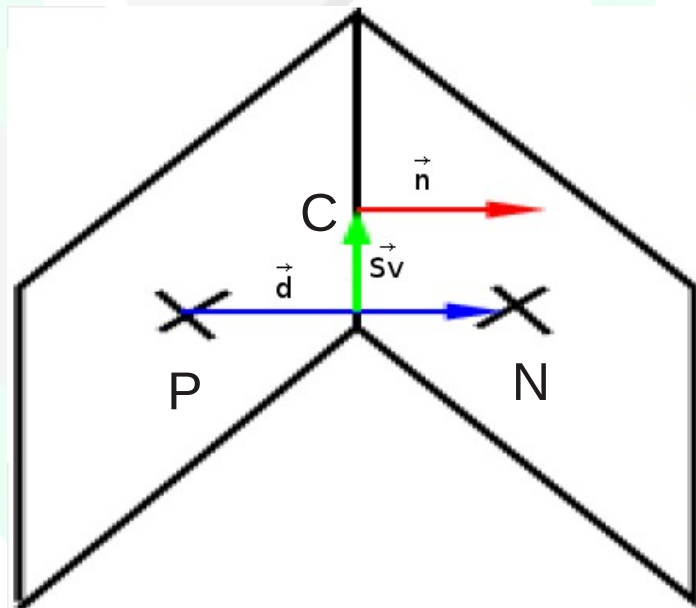
ГЕОМЕТРИЯ ЯЧЕЕК И МЕТОД К.О. (1)

- Адвективные слагаемые

$$\int_S \psi \vec{U} \cdot \vec{n} dS \quad \psi_c \vec{U}_c \cdot \vec{n}_c S_c = \varphi_c \psi_c$$

Методом центральных разностей:

$$\psi_c = \frac{(\vec{CP} \cdot \vec{n}) \psi_P + (\vec{NC} \cdot \vec{n}) \psi_N}{(\vec{CP} \cdot \vec{n}) + (\vec{NC} \cdot \vec{n})}$$



8

При этом, если использовать для вычисления знаменателя расстояние PN, то сумма весов будет отличаться от единицы

14

ГЕОМЕТРИЯ ЯЧЕЕК И МЕТОД К.О. (2)

- Диффузионные слагаемые

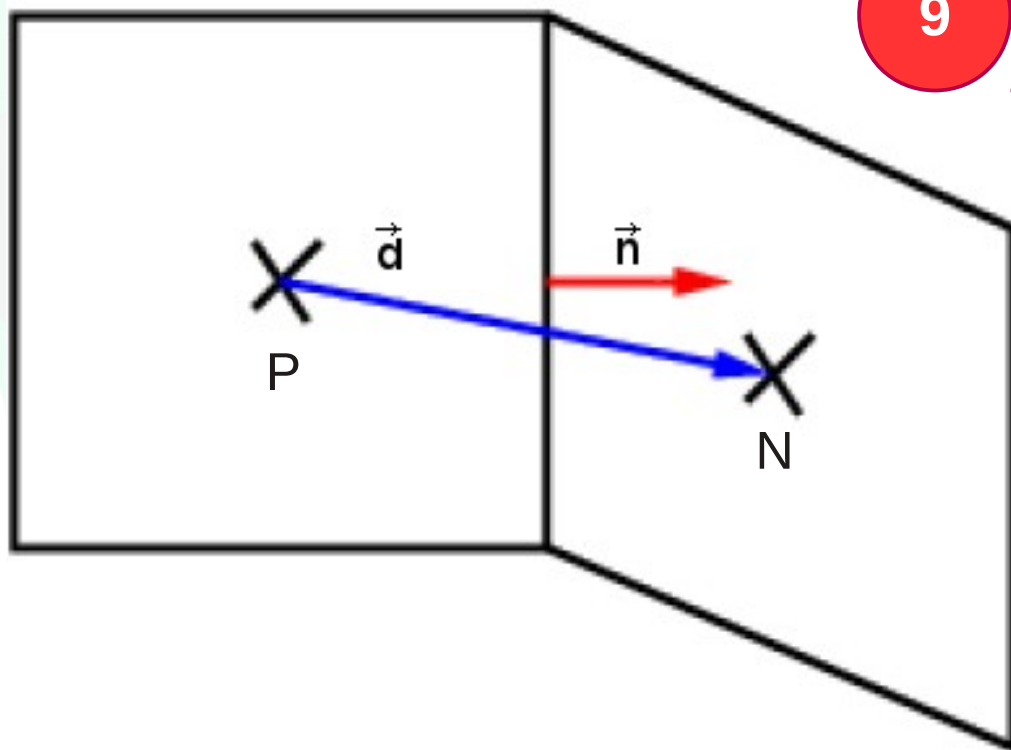
$$\int_S (\Gamma_\psi \nabla \psi) \cdot \vec{n} dS \quad \nabla \psi \cdot \vec{n} = \frac{\partial \psi}{\partial \vec{n}}$$

В случае ортогональной сетки:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \vec{n}} = \frac{\partial \psi}{\partial \vec{d}}$$

Для неортогональных сеток это неверно

9



15

КАКИЕ СЛУЧАИ УДОБНО РЕШАТЬ МКО?

- Геометрия — ортогональная
- Уравнения — чистый перенос
- Что делать с такими слагаемыми:

$$\psi Q, \frac{d\psi}{dt}, \frac{1}{\psi} \frac{d\psi}{dt}$$

- В первую очередь необходимо руководствоваться «физичностью» численной схемы, искать такой метод, который будет «физически» подобен

16

ПРИМЕР - ТРАНСПОРТ ФАЗЫ

$$\frac{\partial \alpha \rho_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{U} \alpha \rho_\alpha) = 0$$

Как учесть консервативность?

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{U} \alpha) = -\frac{\alpha}{\rho_\alpha} \frac{d\rho_\alpha}{dt}$$

Как учесть правую часть?

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{U} f_\alpha) = -\frac{f_\alpha}{\rho_m} \frac{d\rho_m}{dt}$$

Как учесть правую часть?

$$\rho_m = \alpha \rho_\alpha + \beta \rho_\beta \quad \frac{1}{\rho_m} = \frac{f_\alpha}{\rho_\alpha} + \frac{f_\beta}{\rho_\beta}$$

В интегральном виде

$$(\alpha \rho_\alpha)^n - (\alpha \rho_\alpha)^o + \frac{\Delta t}{V} \sum_j (\alpha \rho_\alpha)_j =$$

$$(\alpha \rho_\alpha)^n - (\alpha \rho_\alpha)^o + \frac{\Delta t}{V} \sum_j (\alpha \rho_\alpha)_j - (\alpha \rho_\alpha)^n \nabla \cdot (\vec{U}) \Delta t + (\alpha \rho_\alpha)^n \nabla \cdot (\vec{U}) \Delta t = 0$$

17

ВОЗМОЖНОЕ РЕШЕНИЕ

Какие есть способы? Представим интеграл в дискретном виде

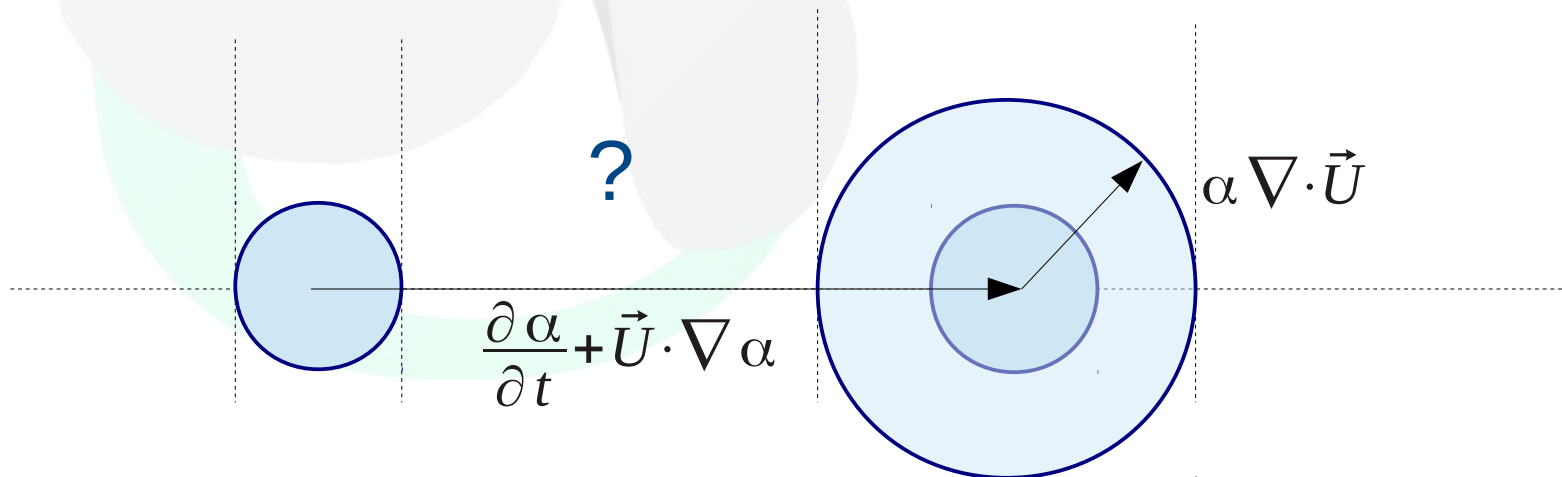
$$(\alpha \rho_\alpha)^n = (\alpha \rho_\alpha)^o - \left(\frac{\Delta t}{V} \sum_j (\vec{U} \cdot \vec{dS} \alpha \rho_\alpha)_j - (\alpha \rho_\alpha)^n \nabla \cdot (\vec{U}) \Delta t \right) - (\alpha \rho_\alpha)^n \nabla \cdot (\vec{U}) \Delta t$$

Обозначим первое слагаемое правой части

$$(\alpha \rho_\alpha)^p = (\alpha \rho_\alpha)^o - \left(\frac{\Delta t}{V} \sum_j (\vec{U} \cdot \vec{dS} \alpha \rho_\alpha)_j - (\alpha \rho_\alpha)^p \nabla \cdot (\vec{U}) \Delta t \right)$$

Приблизённо можно считать, что новая масса: перенос + расширение

$$(\alpha \rho_\alpha)^n \approx (\alpha \rho_\alpha)^p - (\alpha \rho_\alpha)^n \nabla \cdot (\vec{U}) \Delta t$$

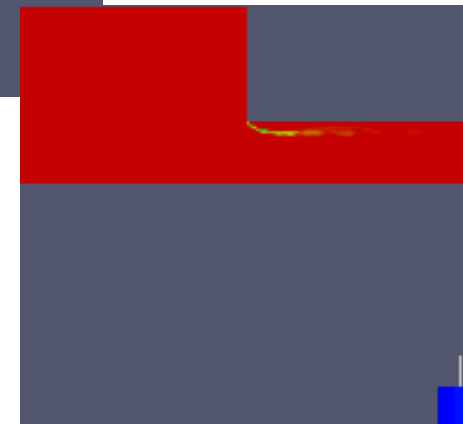
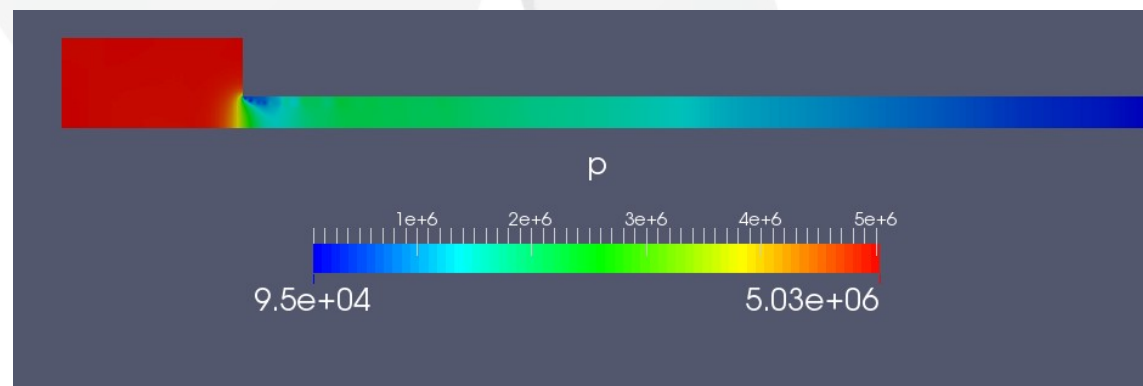
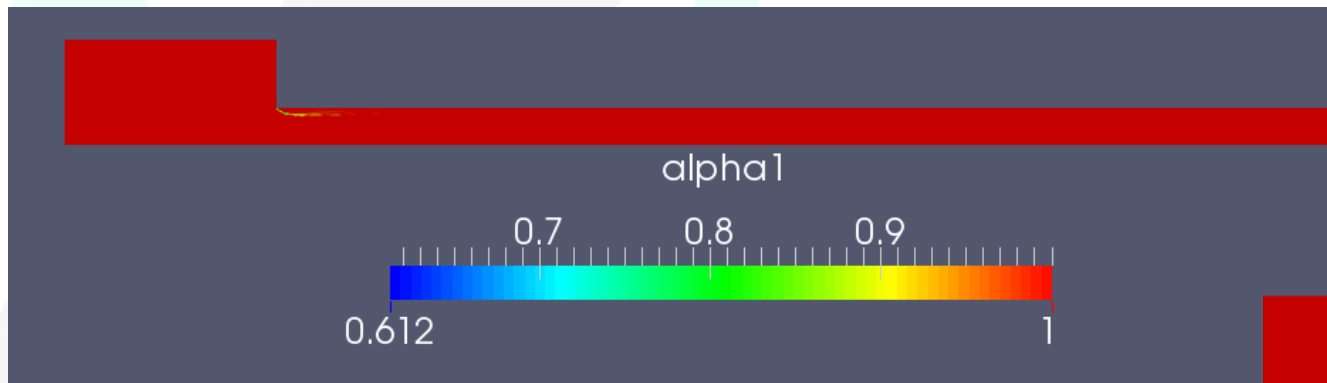


18

КАК НЕ НАДО ДЕЛАТЬ

- compressibleInterFoam

$$\int_V \frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{U} \alpha) dV = \int_V \frac{-\alpha}{\rho_\alpha} \frac{d\rho_\alpha}{dt} dV$$



19

СОЗДАНИЕ МОДЕЛИ В OPENFOAM

- 1) Необходимо быть полностью уверенным, что ничего подходящего уже в пакете нет
- 2) Также, следует произвести поиски возможных решений, которые могут храниться в открытом доступе, но не включены в официальную версию
- 3) Следует удостовериться, что МСС — удовлетворительное приближение, а МКО — подходит для решения поставленной задачи
- 4) Кроме того, перед реализацией новой модели необходимо продумать процедуру тестирования
- 5) И всё же — проверьте, возможно, для Вашей задачи нужен другой метод

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{U} \psi) = 0$$

20

ТИПЫ ПРИЛОЖЕНИЙ OPENFOAM

- Источники — возможно, достаточно добавить источник в уравнение или источник
- Решатели — или придётся реализовывать модель «с нуля»
- Граничные условия — или достаточно реализации нового граничного условия
- Библиотеки — г.у., источники и прочее возможно реализовать с использованием динамических библиотек
- `functionObjects` — пользовательские подпрограммы в объектно-ориентированной формулировке

21

OPENFOAM И МЕТОД К.О.

Дискретизация слагаемых:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \psi dV \quad \text{fvm::ddt} \quad \text{fvc::ddt}$$

$$\int_V \nabla \cdot (\rho \vec{U} \psi) dV \quad \text{fvm::div} \quad \text{fvc::div}$$

$$\int_V \nabla \cdot (\Gamma_\psi \nabla \psi) dV \quad \text{fvm::laplacian} \quad \text{fvc::laplacian}$$

$$\int_V \nabla \psi dV \quad \text{fvc::grad}$$

$$\int_V S \psi dV \quad \text{fvm::Sp} \quad \text{fvc::Sp}$$

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \psi dV + \int_V \nabla \cdot (\rho \vec{U} \psi) dV - \int_V \nabla \cdot (\Gamma_\psi \nabla \psi) dV = S_1 \psi + S_2$$

$$\text{fvm::ddt}(\rho, \psi) + \text{fvm::div}(\phi, \psi) - \text{fvm::laplacian}(D\psi, \psi) \\ = \text{fvm::Sp}(S1, \psi) + S2$$

$$\text{fvc::ddt}(\rho, \psi) + \text{fvc::div}(\phi, \psi) - \text{fvc::laplacian}(D\psi, \psi) \\ = \text{fvc::Sp}(S1, \psi) + S2$$

22

ИСХОДНЫЙ КОД OPENFOAM

• Уровни исходного кода OpenFOAM

Платформа OpenFOAM включает в себя следующие уровни (могут находиться в различных библиотеках):

I. Библиотека, системный уровень	<ol style="list-style-type: none">1) Системный: файлы, потоки, системные команды, динамические библиотеки2) Примитивы программирования: массивы, списки, программные указатели, хэш-списки, контейнеры
II. Библиотека, Уровень разработчика	<ol style="list-style-type: none">3) Математические примитивы: тензоры, вектора, скаляры, поля тензоров, размерности физических величин4) Физическое время5) Пространство (сетка)6) Средства дискретизации уравнений, матрица СЛАУ7) Методы решения систем линейных алгебраических уравнений
III. Приложения, Уровень пользователя	<ol style="list-style-type: none">8) Алгоритмы интегрирования ДУ в ЧП9) Решатели и утилиты (приложения)

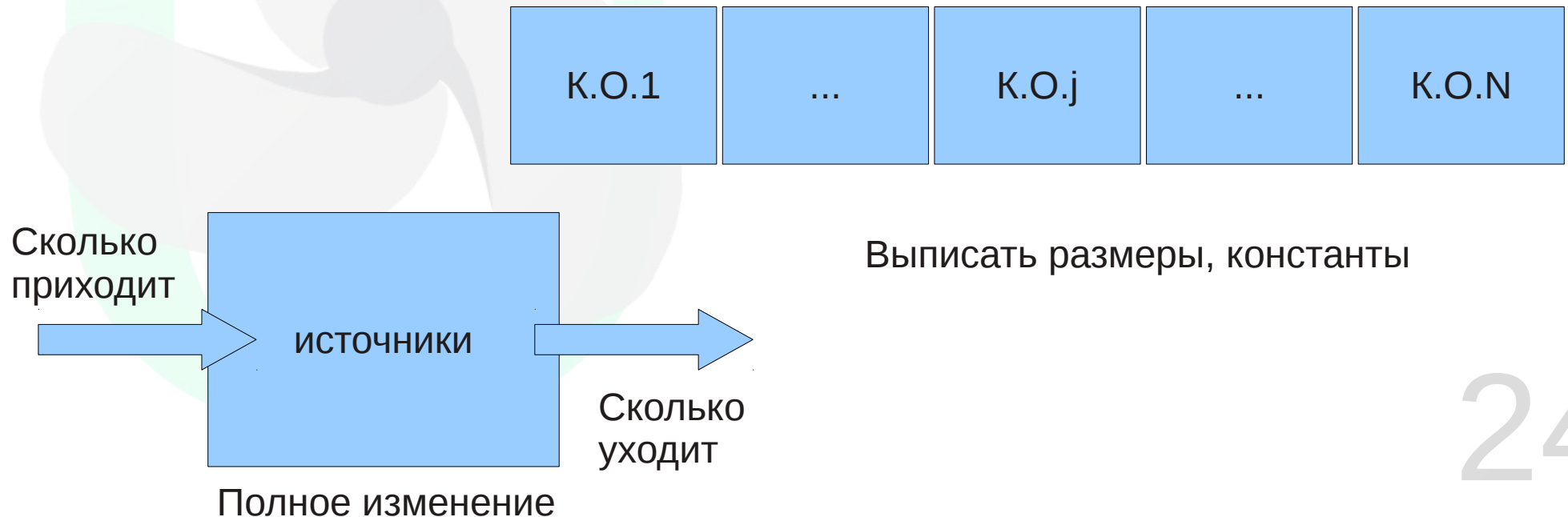
Сложность ↑

23/31

23

ТЕСТИРОВАНИЕ МОДЕЛИ

- Подготовьте простые тесты, желательно — одномерные
- Распишите численную схему, решите уравнения на бумаге, запишите числа на графике
- Перейдите к двумерной задаче
- Чаще обращайтесь к источникам, описывающим физику явления



24

ПОИСК УЧЕБНЫХ МАТЕРИАЛОВ

- Если говорите на английском —
www.cfd-online.com,
http://openfoamwiki.net/index.php/Main_Page
- Но есть и на русском: www.unihub.ru
 - Форум
 - Вики
 - Учебные курсы
 - Материалы сайта
 - Лекции

ФОРУМ

Форум платформы UniHUB: OpenFOAM - программирование - Mozilla Firefox

File Edit View History Bookmarks Tools Help

186 · Входящие — Яндекс... unihub - Tools: BL2x220 Cl... unihub - Tools: ParaView v... Форум платформы UniHUB... NEWSru.com :: Самые бы...

fudforum.cloud.unihub.ru/index.php?t=thread&frm_id=17&

Личная почта Участники Поиск F.A.Q. Настройки Выход [matvey.kraposhin] Начало Управление

Админ: [Очередь модератора \(2\)](#) | [Менеджер групп](#)

[Начало](#) » [Web-лаборатория UniCFD](#) » [Решение задач МСС - OpenFOAM](#) » **OpenFOAM - программирование**

Показать: [Сегодняшние сообщения](#) :: [Непрочитанные сообщения](#) :: [Сообщения без ответа](#) :: [Показать голосования](#) :: [Навигатор по сообщениям](#) НОВАЯ ТЕМА

[Отписаться от форума](#) [Объединить темы](#)

Тема	Ответы	Просмотров	Последнее
Работа с матрицами на примере matricoFoam От: e.avdeev - Вск, 10 Ноябрь 2013 Действия модератора: Перенести Удалить Закреть тему	3	172	Пнд, 11 Ноябрь 2013 21:28 От: matvey.kraposhin
Использование нестандартной модели турбулентности Можно ли использовать модели турбулентности не из стандартного пакета openFoam От: a.zagoskin - Чтв, 07 Ноябрь 2013 Действия модератора: Перенести Удалить Закреть тему	4	210	Вск, 10 Ноябрь 2013 15:58 От: matvey.kraposhin

Удалить выбранные | Перенести выбранные | Объединить выбранные | Блок/Разблок выбранные

Переход к форуму:
OpenFOAM - программирование

[отметить все сообщения форума как прочитанные] [Сформировать XML] [RSS]

Легенда:
 Новые сообщения Нет новых сообщений Тема закрыта (есть непрочитанные сообщения) Тема закрыта Тема перенесена в другой форум

Текущее время: Срд Дек 04 18:57:07 MSK 2013

- <http://fudforum.cloud.unihub.ru/>

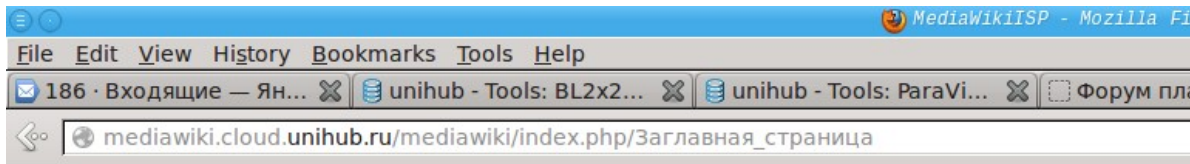
26

Использование свободного программного обеспечения

Здесь будем складывать информацию о решении задач МСС

Оглавление

1. Расчётный случай OpenFOAM
2. Решатели OpenFOAM
3. Работа с геометрией в пакете SALOME
4. Работа с сетками в пакете SALOME
5. Утилита создания сеток snappyHexMesh
6. Визуализация и обработка результатов - ParaView
7. Создание анимации
8. Загрузка примеров
9. Пример создания сеток в OpenFOAM - нагруженная ба



Set \$wgLogo to the URL path to your own logo image.

Навигация

- Заглавная страница
- Портал сообщества
- Текущие события
- Свежие правки
- Случайная статья
- Справка

Статья [Обсуждение](#)

Заглавная страница

Вики-движок

Информация

Некоторые ссылки

- Список в
- Часто за
- Рассылка
- Перевод

Утилита создания сеток snappyHexMesh

6.4 Раздел autoLayersControls.
6.5 Раздел meshQualityControls.
7 Работа на нескольких процессорах.

Введение.

Утилита snappyHexMesh поставляемая вместе с пакетом openFOAM предоставляет возможность построения гексаэдральных элементов.

Алгоритм построения сетки в snappyHexMesh

- Создается фоновая сетка

- Проводится разбиение ребер поверхностей в соответствии с заданными параметрами улучшения сетки

<http://mediawiki.cloud.unihub.ru/mediawiki/index.php>

БАЗОВЫЙ УЧЕБНЫЙ КУРС

День I

1. Введение, обзор курса
 - 2.1 Технологическая платформа UniHUB
 - 2.2 Системное окружение
 - 2.3 Подготовка геометрии и сетки - SALOME
 - 2.4 Решение задач - OpenFOAM
 - 2.5 Анализ результатов - ParaView
3. Лабораторные работы — разбор примеров SALOME, OpenFOAM

День II

Лабораторные работы — разбор примеров типичных задач:

- а) обтекание бруса
 - б) обтекание цилиндра
 - в) обтекание сферы
 - г) течение в канале с поворотом
- Завершение

УЧЕБНЫЙ КУРС ПО СЕТКАМ

- День 1
 - Создание блочно-структурированных сеток — blockMesh
 - Структурный Анализ. МКЭ - CalculiX GraphiX, CalculiX CrunchiX
 - Ручная параметризация
 - Построение неструктурированных сеток с помощью snappyHexMesh
 - Демонстрация и самостоятельная работа
- День 2
 - SALOME, построение геометрии
 - Параметризация геометрии в salome
 - Построение сеток в SALOME
 - Демонстрация и самостоятельная работа



УЧЕБНЫЙ КУРС ПО ПРОГРАММИРОВАНИЮ

ДЕНЬ ПЕРВЫЙ

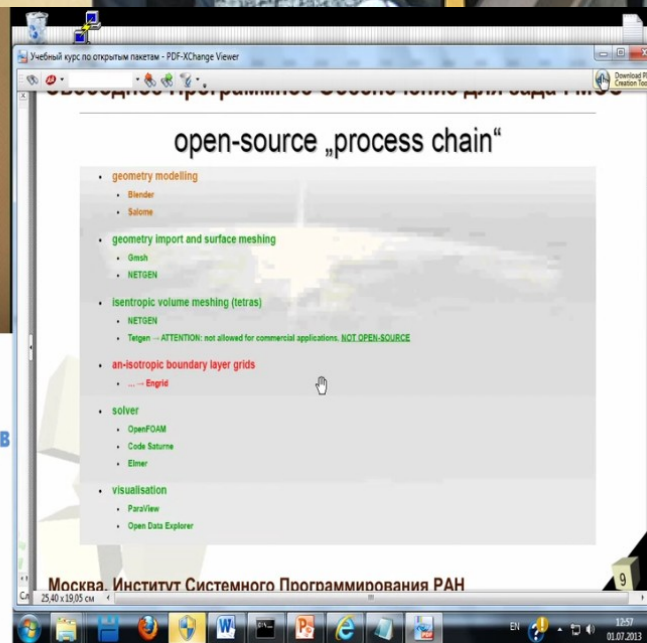
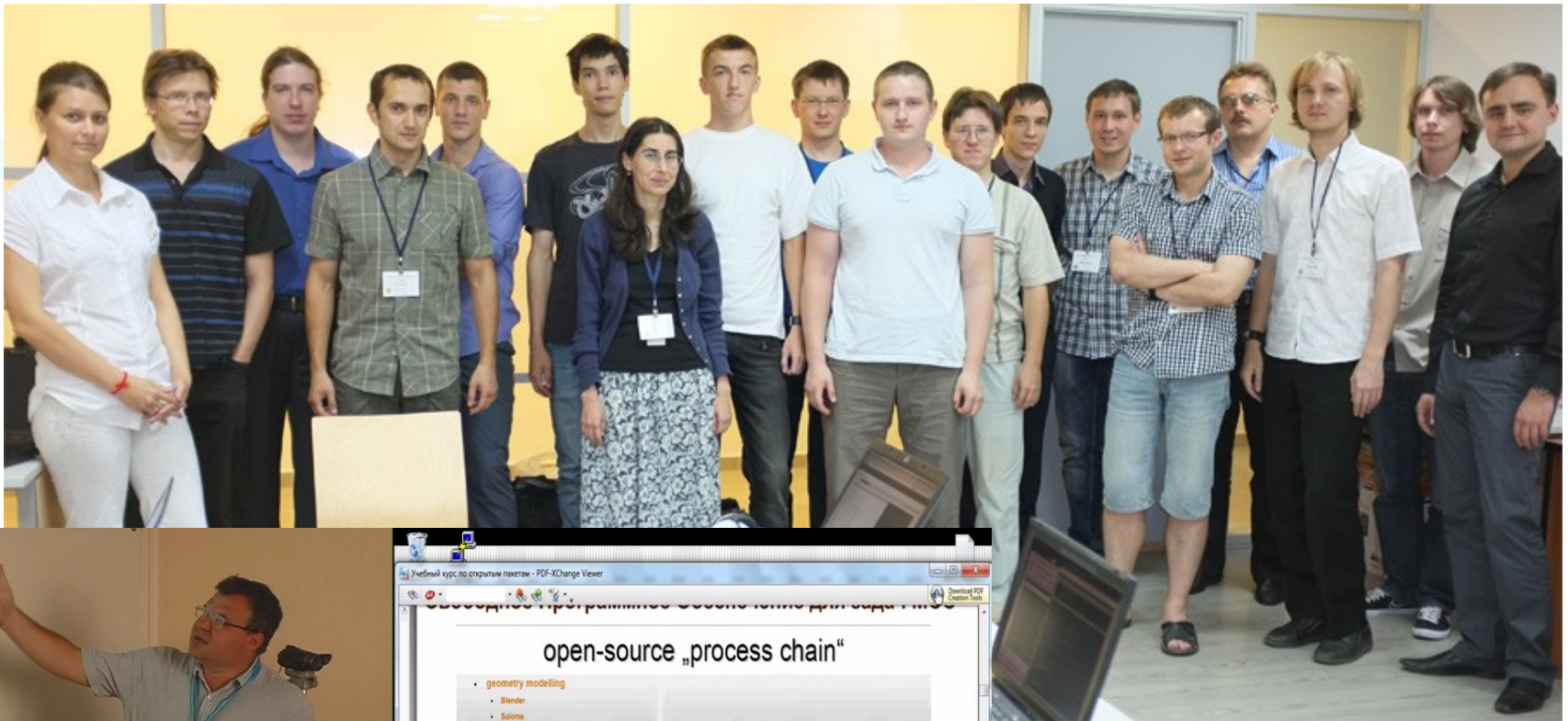
1. ВВЕДЕНИЕ
2. ОСНОВЫ ОБЪЕКТНО-ОРИЕНТИРОВАННОГО ЯЗЫКА C++
3. РАЗРАБОТКА ПРИЛОЖЕНИЙ НА ЯЗЫКЕ C++ В СРЕДЕ UNINUB
4. ПРИЛОЖЕНИЯ ORENFOAM
5. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

ДЕНЬ ВТОРОЙ

6. ДЕТАЛЬНЫЙ ОБЗОР СТРУКТУРЫ ИСХОДНОГО КОДА ORENFOAM
7. ПОШАГОВЫЙ РАЗБОР ИСХОДНОГО КОДА РЕШАТЕЛЯ
8. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

30

НЕДЕЛЬНЫЙ ТРЕК В МГУ



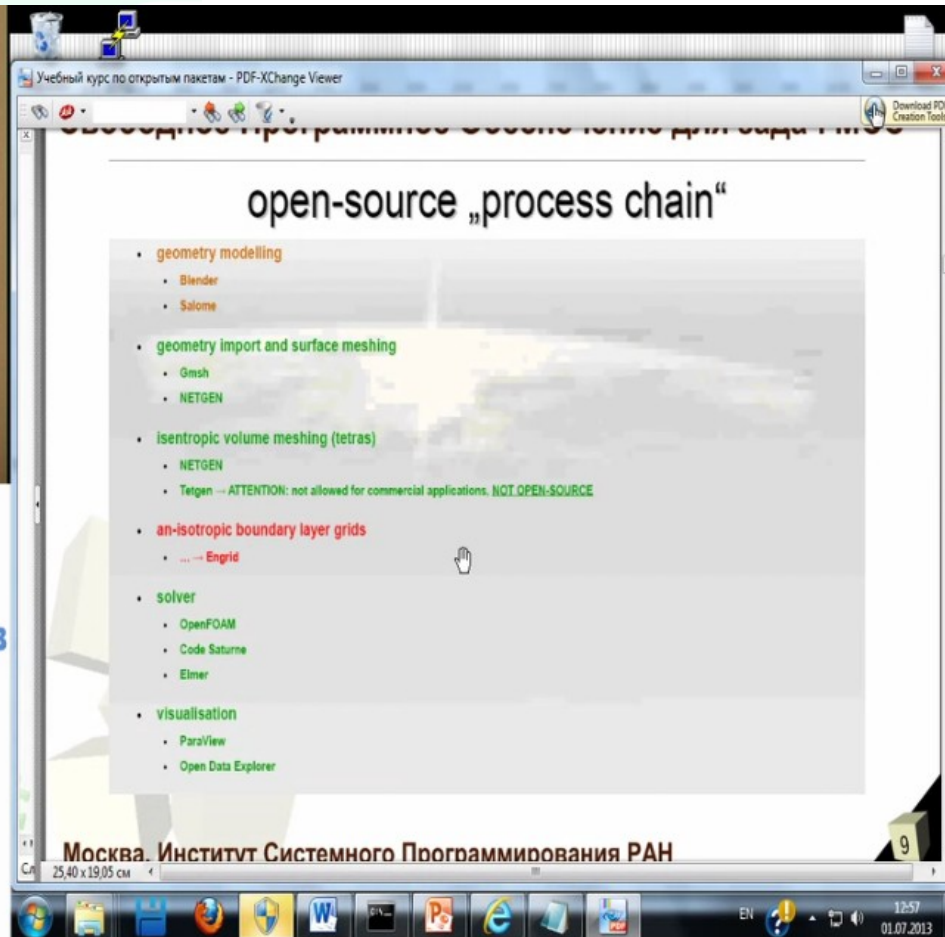
УЧЕБНЫЙ ТРЕК
«Возможности открытых пакетов
(Salome/OpenFOAM/Paraview)
для решения задач МСС»
(МГУ, 01 - 05 июля 2013)

31

- Видеолекции



УЧЕБНЫЙ ТРЕК
«Возможности открытых пакетов
(Salome/OpenFOAM/Paraview)
для решения задач МСС»
(МГУ, 01 - 05 июля 2013)



КУРСЕРА



+33

Более 500 учебных бесплатных онлайн курса (семестр, год)

Биология, бизнес, компьютерные, экономика, образование, электроника, гуманитарные и социальные науки, математика, медицина, естествознание, статистика, анализ данных

111 479 (2011) - 5 266 200 (2013) студентов

США (38%), Бразилия, Китай, Индия, Россия, Германия, Испания, Великобритания, Канада, Австралия, Колумбия, Украина, Таиланд...

США (38%), Бразилия, Китай, Индия, Россия, Германия, Испания, Великобритания, Канада, Австралия, Колумбия, Украина, Таиланд...

Видео лекции с субтитрами, конспекты лекций, домашние задания, тесты, итоговые экзамены. Сертификат об окончании.

Группы в социальных сетях. Более 1360 городов, в которых проходят встречи студентов. (Москва, Санкт-Петербург, Киев...)

Princeton. «Computer Architecture»
by David Wentzlaff



33

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

- Выбор реализуемой модели должен диктоваться в первую очередь решаемой практической задачей
- Хорошим критерием может быть «физичность» получаемых результатов в тестовых задачах
- Используемый численный метод должен соответствовать «физической» постановке задачи
- Необходимо «хорошее» понимание соотношения порядков искомых величин и соотношения погрешностей, вносимых допущениями и численным методом
- При реализации модели следует придерживаться принципа модульности — менять лишь только то, что необходимо менять
- Быть готовым полностью сменить парадигму в случае несоответствия получаемых результатов и референсных (или ожидаемых) данных

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ

- Вопросы?

