Aalto yliopisto Insinööritieteiden korkeakoulu
Virtausmekaniikka / Sovelletun mekaniikan laitos

MUISTIO No CFD/MECHA-19-2011 pvm 28. heinäkuuta 2011

OTSIKKO

Diskretointimenetelmät OpenFOAMissa

LAATIJA(T)

Tuomas Turunen

TIIVISTELMÄ

Tarkoituksena on koota OpenFOAMissa käytettävät diskretointimenetelmät ja niiden vaatimukset käyttäjän näkökulmasta. Lisäksi esitellään, miten eri menetelmien valitseminen vaikuttaa laskennan aikana ratkaistaviin yhtälöryhmiin.

PÄÄKOHDAT

SIVUJA

10

AVAINSANAT

diskretointi, OpenFOAM

TARKASTANUT

Timo Siikonen 28. heinäkuuta 2011

Sisältö

1 Diskretointimenetelmät OpenFOAMissa

OpenFOAMissa perusajatuksena on antaa käyttäjälle mahdollisuus valita mahdollisimman vapaasti laskennassa käytettävät numeeriset menetelmät. Käyttäjän on kunkin operaattorin $(\nabla, \nabla\cdot, \Delta)$ kohdalla ensin valittava menetelmä, jolla operaattori diskretoidaan eli määritellä, miten päästään muotoon, jossa derivaatta lausutaan suureen itsensä arvojen avulla. Jos saadussa lausekkeessa esiintyy muita kuin suureiden arvoja koppien keskipisteissä, on suureille vielä erikseen määritettävä interpolointimenetelmät. Useimmiten tulee tarve interpoloida suuren arvoja koppien keskipisteistä seinille.

Kerrataan vielä *konvektiodiffuusioyhtälössä* esiintyvät termit ja niiden aiheuttamat vaatimukset diskretoinnin kannalta. Konvektiotermiä varten täytyy määrittää suureiden ϕ_j ρ_j ja $\overline{u}_j$ arvot koppien *seinillä*. Koska kyseiset suureet lasketaan aina koppien keskipisteissä, tarvitaan menetelmät, joilla niiden arvot interpoloidaan koppien keskipisteistä koppien seinille.

Diffuusiotermiä varten tarvitaan diffuusiokertoimen Γ_ϕ ja nopeusgradientin seinää vastaan kohtisuoran komponentin $(\nabla\phi)_n$ arvot niinikään koppien seinillä. Näin ollen termin $(\nabla\phi)_n$ diskretoimiseksi tarvitaan oma menetelmä ja Γ_ϕ:lle interpolointimenetelmä.

Interpolointimenetelmät voivat vielä synnyttää tarpeen laskea eri suureiden gradientteja. (ks. kaavat (4.9) ja (4.10)), joten myös jokaisen suureen gradientille tarvitaan oma diskretointimenetelmä. Seuraavaksi käsitellään edellä mainittujen termien muodostamista erikseen.

1.1 Interpolointimenetelmät

OpenFOAMissa jokaisen kopin seinälle laskettavan suureen interpolointimenetelmä
määritellään erikseen. On olemassa yleisiä interpolointimenetelmiä, ja lisäksi menetelmiä, jotka on tarkoitettu käytettäväksi konvektiotermin yhteydessä. Kaikkia menetelmiä voidaan kuitenkin käyttää ristiin missä yhteydessä tahansa, mutta konvektiotermiin liittyvien menetelmien käyttöön esimerkiksi painetta interpoloitaessa ei vain yleensä ole perusteita. Tavallisimmat menetelmät on listattu taulukoissa 1 ja 2. Konvektiotermin kanssa käytettävät menetelmät jaetaan kolmeen ryhmään: perus konvektio-, TVD- (Total Variation Diminishing) ja NV- (Normalized Variable) menetelmiin. [1]

Taulukko. 1: Perus interpolointimenetelmät

linear	keskeisdifferenssi
cubicCorrection	
midPoint	symmetrisesti painotettu keskeisdifferenssi

Taulukossa 2 mainittujen TVD- ja NV-menetelmien kanssa voidaan käyttää

Taulukko. 2: Pääasiassa konvektiotermin yhteydessä käytettävät interpolointimenetelmät

perus konvektiomenetelmät	
upwind	ylävirtapainotettu menetelmä
linearUpwind	
skewLinear	keskeisdifferenssi, jossa epäortogonaalisuuskorjaus
QUICK	2. kertaluvun ylävirtapainotettu menetelmä
TVD	
limitedLinear	rajoitettu keskeisdifferenssi
vanLeer	van Leer rajoitin
MUSCL	MUSCL rajoitin
limitedCubic	
NV	
SFCD	Self-filtered central differencing
Gamma	

vuon rajoittimia, ja toisin kuin Fluentissa, OpenFOAM:ssa käyttäjä voi vaikuttaa rajoittimeen. Rajoittamiseen on olemassa erilaisia tapoja.

Määrittämällä kerroin voidaan sekoittaa kahta menetelmää, joista toinen ei aiheuta arvojen epäfysikaalista heilahtelua mutta on kenties epätarkempi ja toinen on tarkempi mutta voi aiheuttaa oskillointia. Riippuen menetelmästä kerroin voidaan antaa käsin tai se voidaan määrittää koodin sisällä, jolloin voidaan huomioida virtaustilanne.

Toinen tapa on määrätä tarkasteltavan suureen arvolle ylä- ja alaraja ja sillä tavoin estää arvon liiallinen heilahtelu. Vektorisuureiden konvektiotermejä varten on olemassa vielä omia versioita aiemmin mainituista interpolointimenetelmistä, jotka ilmeisesti huomioivat vektorikentän suunnan vuon rajoittamisessa.[1]

1.2 Gradientin seinää vastaan kohtisuora komponentti, $(\nabla\phi)_n$

Gradientin komponentille seinän normaalin suunnassa määritetään arvot aina koppien seinillä. Yksinkertaisimmillaan tämä voidaan tehdä erottamalla toisistaan suureen arvot molemmin puolin seinää ja huomioimalla koppien etäisyys. Kuvan 4.1 merkinnöin tämä on [1]

$$(\nabla\phi)_n = \frac{\phi_{c1} - \phi_{c0}}{|\mathbf{d}|} \quad , \tag{1}$$

missä $\mathbf{d}$ on pisteestä $c0$ pisteeseen $c1$ kulkeva vektori. Näin voidaan kuitenkin tehdä vain, jos koppien keskipisteet yhdistävä jana on seinää vastaan kohtisuorassa suunnassa.

Jos jana ja seinän normaali ovat eri suuntaiset, täytyy lisäksi käyttää koppien keskipisteissä määritettyjä gradientin arvoja ja interpoloida ne seinälle. Gradientin määrittämiseen naapurikoppien keskipisteissä puolestaan joudutaan käyttämään suureen ϕ arvoja naapurikoppien naapurikopeissa, mikä johtaa huomattavasti suurempaan laskentamolekyyliin kuin kaava 1 ja siten myös suurempaan virheeseen. Jotta virhettä saataisiin pienennettyä, määritetään epäortogonaalisen hilan tapauksessa seinän normaalin suuntainen (ortogonaalinen) osa gradientista kaavan 1 mukaisesti ja epäortogonaalinen osa koppien keskipisteissä määritettyjen gradienttien perusteella. Korjaustermi muodostetaan aina eksplisiittisesti eli käyttäen jo tunnettuja ϕ:n arvoja. [2]

OpenFOAMissa käyttäjä voi valita normaalin suuntaiselle gradientille diskretointimenetelmän, jossa korjaustermi on mukana, ei ole mukana tai joustavan vaihtoehdon näiden väliltä. Lisäksi on mahdollista valita neljännen asteen tarkka menetelmä tai menetelmä, jossa gradientin arvoa rajoitetaan. Viimeisin on käytössä vain positiivisille skalaarisuureille. [1]

1.3 Gradientti-operaattorin diskretointi, ∇

$$\int_V \nabla\phi dV = \int_A \phi dA \approx \sum_{N_{faces}} \phi_f \tag{2}$$

Gradientti voidaan diskretoida yhtälön (4.10) tapaan Gaussin lauseen avulla mutta myös pienimmän neliösumman menetelmään perustuen.

Pienimmän neliösumman menetelmään perustuvien diskretointien tarkkuus voi olla toista tai neljättä kertalukua. [1] Niissä määritetään ensin ϕ:n arvolle naapurikopissa lauseke gradientin $\nabla\phi$ avulla (3) ja määritetään lausekkeen virhe vertaamalla sitä tunnettuun ϕ:n arvoon (4).

$$\phi_{c1}(\nabla\phi) = \phi_{c0} + \nabla\phi \cdot \mathbf{d} \tag{3}$$

$$e = \phi_{known} - \phi_{c1}(\nabla\phi) \tag{4}$$

Minimoimalla virheen e neliön summa kaikkien naapurikoppien yli saadaan approksimaatio $\nabla\phi$:lle [2].

Jos gradientti diskretoidaan Gaussin lauseen avulla, täytyy määrittää menetelmä, jolla suure ϕ interpoloidaan koppien keskipisteistä koppien seinille. Käytettävissä ovat kaikki kohdassa 1.1 kuvaillut interpolointimenetelmät. [1]

Jokaisesta diskretointimenetelmästä on versio, jossa vuota rajoitetaan [1]. Gradientti muodostetaan ekplisiittisesti eli tunnettuja arvoja käyttäen [2].

1.4 Laplace-operaattorin diskretointi, Δ

$$\int_V \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla\phi)\ dV = \int_A (\Gamma_\phi)_j \nabla\phi\ dA \approx \sum_{N_{faces}} \Gamma_\phi(\nabla\phi)_j \tag{5}$$

Laplace-operaattori esiintyy diffuusiotermissä, jolloin sen yhteydessä on kaksi muuttujaa: diffuusiokerroin Γ_ϕ ja suureen gradientin seinää vastaan kohtisuora komponentti $(\nabla\phi)_n$. Laplace-operaattori diskretoidaan aina Gaussin lauseen avulla ja operaation suorittamiseen riittää valita Γ_ϕ:lle jokin kohdassa 1.1 kuvatuista interpolointimenetelmistä ja ϕ:lle jokin kohdassa 1.2 kuvatuista menetelmistä.

1.5 Divergenssi-operaattorin diskretointi, ∇·

$$\int_V \nabla \cdot (\rho U \phi)\ dV = \int_A \rho U \phi\ \cdot dA \approx \sum_{N_{faces}} \rho_j U_j \phi_j \cdot S_j \tag{6}$$

Divergenssioperaattori voi esiintyä sellaisenaan tai konvektiotermissä, jossa skalaarivuo kuljettaa jotakin muuttujaa (yhtälössä (4.8) massavuo $\rho_j \overline{u}_j A_j$ kuljettaa muuttujaa ϕ).

Konvektiotermin tapauksessa OpenFOAMissa divergenssioperaattori määritetään vuo-suure-parille. Koska vuotermi on valmiiksi määritelty koppien seinillä, operaation suorittamiseksi riittää valita suureelle ϕ jokin kohdassa 1.1

kuvailluista interpolointimenetelmistä. Tässä yhteydessä käytettäväksi on kehitetty lukuisia menetelmiä, joissa pyrkimyksenä on ottaa huomioon tiedon tulosuunta. Yksinkertaisimmillaan tämä toteutuu `upwind`-menetelmällä, jossa suureen arvoksi seinällä otetaan kopin keskipisteen arvo siltä puolelta seinää, mistä vuo tulee. `upwind`-menetelmän heikkoutena on ensimmäisen kertaluvun tarkkuus. Implisiittinen osa divergenssistä muodostetaan `upwind`-menetelmällä, ja jos laskentaan valitaan jokin muu diskretointimenetelmä, menetelmien erotus muodostetaan eksplisiittisesti käyttäen tunnettuja arvoja.

Mikäli kyseessä on pelkkä divergenssi ilman kovektiivistä roolia, ei tarvita muuta kuin kaikkien termiin sisältyvien suureiden arvot kopin seinillä. Näin ollen jokaiselle koppien keskipisteessä määriteltävälle suureelle määritetään interpolointimenetelmä. Esimerkkinä tällaisista operaatioista ovat jatkuvuusyhtälöt puristuvassa ja puristumattomassa tapauksessa, $\nabla \cdot (\rho U)$ ja $\nabla \cdot U$. Seinillä määriteltävistä suureista divergenssi voidaan ottaa ilman mitään määrittelyjä. Divergenssi muodostetaan aina eksplisiittisesti.

1.6 Aikadiskretointi, $\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial^2}{\partial t^2}$

OpenFOAMissa on kolme menetelmää ensimmäisen aikaderivaatan määrittämiseen. Menetelmät on listattu taulukossa 3

Taulukko. 3: Ensimmäisen aikaderivaatan diskretointimenetelmät

Euler	1. kertaluku, rajoitettu, implisiittinen
CrankNicholson	2. kertaluku, rajoitettu, implisiittinen
backward	2. kertaluku, implisiittinen

Aikaderivaatta diskretoidaan yhtälön (4.32) mukaisesti `Euler`in menetelmässä ja `backward`-menetelmässä yhtälön (4.33) mukaisesti. Erot ovat siinä, millä aikatasolla muut yhtälössä esiintyvät termit määritellään. Gradientit ja divergenssit(huom! ei konvektio) lasketaan OpenFOAMissa aina eksplisiittisesti. Lisäksi diffuusio- ja kovektiotermeissä on osia, jotka lasketaan eksplisiittisesti. Kuitenkin siinä, määritetäänkö tietyt osat implisiittisesti vai ei, on eroja menetelmien välillä.

Toisen aikaderivaatan diskretointi `Euler`in menetelmällä voidaan kirjoittaa [2]:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = \frac{\phi^{t+\Delta t} - 2\phi^t + \phi^{t-\Delta t}}{\Delta t^2} \tag{7}$$

Viitteet

[1] http://www.openfoam.com/docs/user/, May 2011

[2] foam.sourceforge.net/doc/Guides-a4/ProgrammersGuide.pdf, May 2011