

PRIMER INFORME DE SESIONES DEMOSTRATIVAS

CFD for begginers; uso de los solvers <icofoam> y <simplefoam>

Estiven Torres^{1,2} y Marco Mendoza ^{1,2}

I. INTRODUCCIÓN

La mecánica de fluidos analiza la estática y dinámica que influye en estos, en general, aplica principios que puedan explicar y hasta predecir el comportamiento de un fluido dentro de un sistema y estos resultados son los que permiten a un usuario tomar decisiones (sea en el diseño o implementación) en un sistema de su interés. Para complementar estas decisiones se necesita de algún elemento de verificación -de manera clásica- se hace uso de rangos de valores (para resultados unidimensionales), también, de diagramas bidimensionales los cuales son desarrollados e interpretados tras una etapa de capacitación, y es en este proceso donde empieza a resaltar la alternativa de implementar plataformas de procesamiento (*software* [denominados *Computational Fluid Dynamics* (CFD)]), estas plataformas pueden ser implementadas de tal manera que se muestre esta data de la misma manera (bidimensionales) con la posibilidad de implementar más dimensiones (i,j,k y t; de manera común).

Un software que puede ser usado con este objetivo es **openFoam** (que tiene como ventaja principal en contra de otros *softwares* el ser *opensource*), el cual es implementado en lenguaje *C++*; este software puede ser usado para desarrollar simulaciones desde cero, sin embargo, como parte del curso se se hace uso de parte de las bibliotecas que incluye el software.

El procedimiento que permite ejecutar una simulación se puede describir en tres pasos: pre procesamiento, *solving* y post procesamiento; cada uno de estos pasos incluyen subprocesos en los cuales se puede hacer uso de las herramientas asociadas a **openFoam** u otras plataformas que puedan implementar dichos subprocesos.

- *Pre-procesamiento*

En esta etapa se desarrollan los recursos bases bajo el cual se implementará el modelo a usar (con modelo nos referimos a las operaciones y sistemas en el cual se analizará el fluido). Los subprocesos implicados son la definición de las propiedades del fluido y elementos intrínsecos de la simulación, estos son agrupados bajo el nombre de utilidades y pueden implementar: cálculo de errores, unidades de medida, modo de trabajo (relacionada al uso de recursos computacionales), elementos de los otros pasos (principalmente post procesamiento), otros; y la generación de la geometría del sistema en el cual se realizará la simulación: diagramación de la geometría, y generación de la malla (ambos se desarrollan en plataformas externas a openFoam).

Como observación, en este paso, en un nivel inicial, se hace uso de las bibliotecas de **openFoam** las cuales almacenan los archivos que se generen en este paso.

- *Solving*

En esta etapa se hace uso de elementos llamados *solvers*, los cuales realizan los cálculos que permiten obtener resultados de la aplicación del modelo que se esté aplicando, esto al ejecutar los *escripts* necesarios. Estos solvers se pueden clasificar acorde a las características del sistema que que pueden resolver: CFD básico (laplacianFoam, potentialFoam, scalarTransportFoam), fluidos incomprensibles, fluidos comprensibles, y flujo de calor y flotabilidad; de manera representativa se hace uso de dos *solvers*, icoFoam (permite la resolución de sistemas con fluidos incomprensibles, de comportamiento newtoniano y con flujo laminar) y simpleFoam (sistemas con fluidos incomprensibles pero bajo flujo turbulento).

Los *solvers* mencionados presentan la limitación de resolver sistemas con fluidos, únicamente incomprensibles; de manera particular icoFoam se limita a resolver sistemas con flujos laminares mientras simpleFoam a resolver sistemas con flujos turbulentos. *Post procesamiento*

En esta etapa se realiza la recuperación de resultados de la manera que al usuario le convenga, en general se trata de recuperar elementos que permitan una interpretación del flujo del sistema, presiones en el sistema, velocidades u otros (esto puede incluir desde informe de resultados, gráficos en dos o tres dimensiones, y

*This work was not supported by any organization

¹Faculty of Engineering and Science - Biomedical engineering unity - Pontifical University Catholic of Peru

²Faculty of Science and Philosophy - Biomedical Engineering Unity-Cayetano Heredia Peruvian University

hasta animaciones, todos estos mostrando los parámetros de preferencia y pudiendo ser personalizados en estilos, marcadores y colores).

Por otra parte, el mallado que se da en la etapa de pre procesamiento, influye directamente en el comportamiento que pueda tener la simulación, por tanto se han desarrollado diferentes métodos que puedan virtualizar la disposición geométrica de un sistema (mallado), uno de estos métodos es la discretización, de estas geometrías, por volúmenes finitos (MVF), el cual presenta ciertas ventajas a comparación de otros métodos, la más importante es la capacidad, tras la aplicación del método, de resolver sistemas con flujos turbulentos complejos o sistema con flujos multifásicos, otras ventajas que presenta el método pueden ser mencionados: la capacidad de ser implementado por recursividad (mejora el uso de recursos de memoria), la conservación de propiedades del sistema que se esté analizando (mejora la precisión de los resultados) y la simplicidad algebraica a la que puede ser reducida (mejora la implementación a nivel de programación, y a su vez mejora el uso de recursos).

II. OBJETIVO

El objetivo principal de documento es mostrar y analizar los resultados de ejecutar simulaciones de OpenFoam en diferentes modelos que evidencien los campos de velocidades y campos de presiones. Dicho análisis basado en los conceptos y alcances teóricos de la mecánica y transporte de fluidos.

III. TEORÍA Y CONCEPTOS BÁSICOS

A. Preliminares

1) *Campos de velocidades*: Es un campo vectorial que representa un conjunto de velocidades, estas a su vez, se presentan en un volumen ΔV (fluido) cuando este está en movimiento, describiendo así el comportamiento de la velocidad en el sistema [1]. En un sistema incompresible se puede caracterizar bajo la ecuación 1.

$$\vec{V} = u\hat{i} + v\hat{j} + w\hat{k} \quad (1)$$

2) *Campos de presiones*: Al igual que el campo de velocidades, este es un campo vectorial, el cual describe el comportamiento de la presión en todo el espacio definido para el estudio [1]. Asumiendo un flujo y sin esfuerzos de corte, el campo de presiones se puede modelar bajo la ecuación 2.

$$-\nabla p - \gamma \hat{k} = \rho \vec{a} \quad (2)$$

3) *Líneas de corriente*: Son líneas de curvas que son tangentes al vector velocidad de local instantánea. No se pueden conocer experimentalmente a menos que se presente el caso de un flujo estacionario [2].

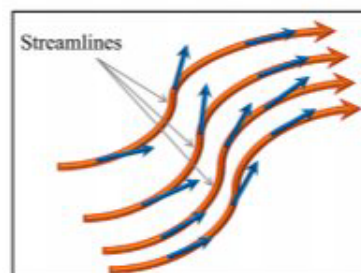


Fig. 1: Diagramación de líneas de corriente

4) *Condiciones iniciales*: Estado o situación en el que se halla inicialmente el fluido, se puede incluir data de campos de velocidad o presión, valores de gradientes (velocidad, temperatura) y otros [3].

5) *Condiciones de borde*: Son condiciones que imponen valores específicos a la solución de una ecuación diferencial, estos valores son tomados de la frontera del dominio y de la derivada normal a la frontera. También establecen valores de reajuste en el sistema, así como valores iniciales de ciertas variables [3].

6) *Estabilidad numérica*: Define cuán buen resultado podemos obtener usando métodos aproximados para calcular cierto problema matemático, específicamente hace referencia a la propagación de errores que un algoritmo pueda generar tras su uso [3].

7) *Convergencia*: Lugar o punto en que se unen o tienden a unirse dos o más cosas en un mismo punto, a nivel de la simulaciones también puede identificarse como las áreas de perfusión [4], a nivel matemático se hace referencia a un punto en el cual una sucesión finita tiende a ir.

8) *Discretización numérica*: Es aquel proceso en donde las ecuaciones que gobiernan el proceso de interés son convertidas a un sistema discreto de ecuaciones algebraicas, es decir, se modela de un sistema continuo (infinitos elementos) bajo un arreglo numérico de elementos finitos [3].

9) *Malla computacional*: Una malla computacional hace referencia a métodos numéricos que permiten representar una geometría a través de elementos pequeños que son denominados celdas, según el método que implemente estas celdas representaran diferentes elementos, en openFoam se suele usar discretización por volúmenes finitos, por tanto estas celdas representaran pequeños volúmenes de la geometría original.

B. Tipos de flujo; definición y caracterización

1) *Flujo laminar*: Se dice que un flujo es laminar cuando el movimiento del fluido es ordenado, moviéndose en láminas paralelas sin entremezclarse, estas condiciones permiten que la velocidad de flujo permanezca constante [1].

2) *Flujo turbulento*: Presenta movimientos viscosos de fluidos con fluctuaciones por la velocidad (movimiento caótico), si se toma como referencia un flujo laminar, el flujo turbulento presenta una aleatoriedad en el desplazamiento de sus partículas [1].

*la característica de un flujo puede ser determinada de manera teórica con el calculo del numero de Reynolds el cual establece que para un valor menor a 2100 se tendrá un flujo laminar mientras que para un valor mayor a 4200 se tendrá un flujo turbulento [2].

3) *Flujo incompresible*: Un flujo es incompresible cuando la densidad se mantiene a lo largo de todo el flujo, manteniendo así un volumen constante en toda las secciones del fluido; se resalta que un flujo compresible cumple las asunciones del principio de conservación de masa desarrollado (caudal) [1].

4) *Flujo transitorio*: Las propiedades hidráulicas del fluido dependen del tiempo y el espacio, a manera de ejemplo si se toman puntos en partes del sistema la velocidad de estos puntos podrían variar [1].

5) *Flujo estacionario*: Las propiedades hidráulicas del fluido no dependen del tiempo [2], tomando el mismo ejemplo de la velocidad, este se mantendrá constante en todo el sistema.

C. Ecuaciones fundamentales de la mecánica de fluidos

1) *Ecuación de energía*: En un volumen de control, la energía acumulada es igual a la energía transferida más el trabajo realizado en el volumen de control más la energía producida dentro del volumen de control; la relación descrita puede expresarse bajo la ecuación 3

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla T \right) = k \nabla^2 T + \dot{Q}_p + \dot{W} \quad (3)$$

2) *Ecuación general de transporte*: La ecuación general de transporte hace referencia a la ecuación que establece el número de Reynolds 4, el cual establece la relación de fuerzas inerciales y las fuerzas viscosas en el flujo de un sistema [2].

$$Re = \frac{\rho v d}{\mu} \quad (4)$$

3) *Ecuación de la conservación de la masa*: En un volumen de control, donde existe la presencia de un flujo de masa que entra y un flujo de masa que sale, se debe de cumplir que el flujo de masa que se queda al interior es igual a la diferencia entre el flujo de masa que entra y el flujo de masa que sale; esta relación esta gobernada por la ecuación 5. Esta ecuación reducida tras la asunción de ciertos parámetros, una forma reducida relevante es la ecuación de caudal (ver ecuación 9).

$$\frac{\partial \rho}{\partial r} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 \quad (5)$$

4) *Ecuación de la cantidad de movimiento*: En un volumen de control se establece que el impulso no puede ser cambiado, a meno que intervengan fuerzas externas al volumen de control. La cantidad de movimiento, también denominado *momentum*, es matemáticamente parecido a la conservación de masa y puede ser expresada bajo la ecuación 6.

$$\rho \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \rho \mathbf{V} \cdot \nabla \mathbf{V} = -\nabla P + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} \quad (6)$$

D. Teoría de la capa límite

La teoría de la capa límite establece que para un fluido en movimiento existe una capa en la que convergen la fase líquida con una fase sólida, en dicha capa se generan (de manera ideal) todas las pérdidas por fricción en el sistema; además, se establece que la velocidad relativa entre dos capas adyacente (en cualquier parte del sistema) es cero. Para lograr un estudio de la capa límite la mayoría de parámetros que se establecen se sirven de dos principios, la ecuación general de transporte o número de Reynolds, y la ecuación de Navier-Stokes. Es así que iniciando de la ecuación de Navier-Stokes, y suponiendo a posibilidad de derivar el potencial y una subdimensión de la velocidad, se puede establecer la ecuación 7.

$$\frac{D\vec{u}}{Dt} = -\nabla P' + \frac{1}{Re} \Delta \vec{u} \quad (7)$$

E. Teoría y explicación por término de la ecuación de Navier-Stokes

La ecuación de Navier-Stokes describe el movimiento de un fluido, para ser formulada esta ecuación se sirve de los principios de conservación mecánica y la termodinámica todo esto bajo lo que se llama una formulación integral. Sin embargo, la complejidad de la ecuación resultante, obliga a establecer diferentes formas diferenciales, las cuales son obtenidas a partir de diferentes asunciones, y es razón de ello que se genera un grupo de ecuaciones que también reciben el mismo nombre que la ecuación original (ver el apéndice I). Bajo la asunción de que el fluido es incompresible y la viscosidad es uniforme y constante se puede reducir la ecuación como se muestra en la ecuación 8.

$$\rho \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \rho \mathbf{V} \cdot \nabla \mathbf{V} = -\nabla P + \mu \nabla^2 \mathbf{V} + \rho \mathbf{g} \quad (8)$$

Donde ρ es la densidad, t es el tiempo, \mathbf{V} es la velocidad del fluido, P es la presión normal en superficies del sistema, μ es viscosidad y \mathbf{g} es gravedad[1], [2].

IV. RECURSOS

V. DESARROLLO

A. Modelo Cavity

```
$ cd cavity/
$ cd cavity/
$ blockMesh
$ icoFoam
$ icoFoam > info
$ paraFoam
```

B. Modelo Elbow

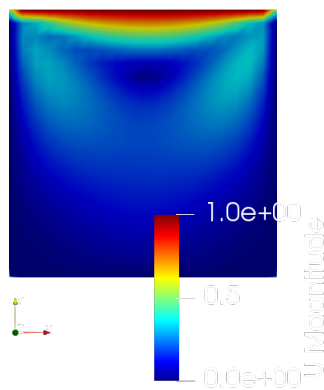
```
$ cd..
$ cd elbow/
$ blockMesh
$ icoFoam
$ icoFoam > info
$ paraFoam
```

C. Modelo Airfoil2d

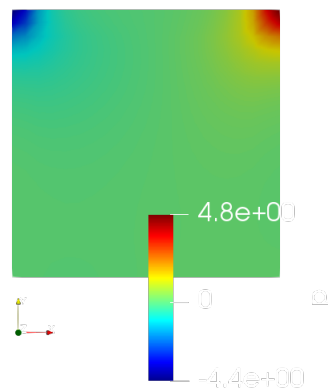
```
$ cd..  
$ cd airFoil2D/  
$ blockMesh  
$ simpleFoam  
$ simpleFoam > info  
$ paraFoam
```

VI. RESULTADOS Y DISCUSIONES

- Los resultados obtenidos son resultados desarrollados a partir de las clases magistrales. Sin embargo, se logró esta simulación a último momento, esto debido a que uno de los integrantes no tiene una laptop con la capacidad suficiente para instalar el virtualbox y el otro sí pudo instalar el Openfoam, pero al momento de usarlo la pantalla se puso negra y no volvió a responder (ver Figura 5) - En gráfico de velocidades se observa que el *indeed* del que tiene menor área es mayor que el *indeed* de la velocidad del área mayor, observando ese comportamiento. - En el gráfico de presiones podemos ver que en la zona crítica de la presión es donde ocurre mayor velocidad. Si la velocidad es muy grande puede ocurrir por una presión negativa, generando el fenómeno de cavitación, que hace que se deforme justo en dicha zona. Pero en caso la simulación, es una pared rígida, pero en otro caso sí podría deformarse la pared



(a) Gráfico de velocidades (estado final)



(b) Gráfico de presiones (estado final)

Fig. 2: Simulación cavity (*solver icoFoam*)

VII. CONCLUSIONES

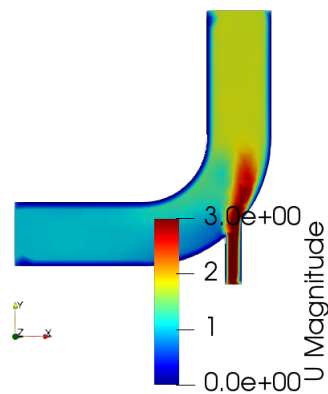
- El área menor del gráfico de velocidades es el que genera mayor *indeed*. - En la zona crítica de la presión es donde ocurre mayor velocidad. - No ocurre el fenómeno de cavitación en el gráfico de presiones, esto se debe a que las paredes son rígidas

VIII. CUESTIONARIO

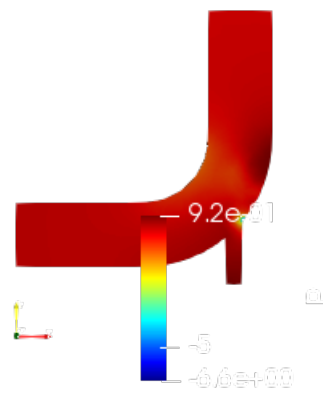
- a. Desde la óptica biomédica ¿En qué casos prácticos ejecutaría usted la simulación de fluidos con IcoFoam? Desarrolle un ejemplo

Con el fundamento de icoFoam que establece su diseñado para flujos no estacionarios [3]–[5], podemos encontrar aplicaciones prácticas en el intercambio gaseoso a nivel pulmonar y el bombeo sanguíneo (generación de flujo pulsátil).

El flujo pulsátil indica la característica de un flujo en el cual la gradiente de presión es dependiente del tiempo, a nivel orgánico este tipo de flujo es aprovechado por el organismo para generar una correcta

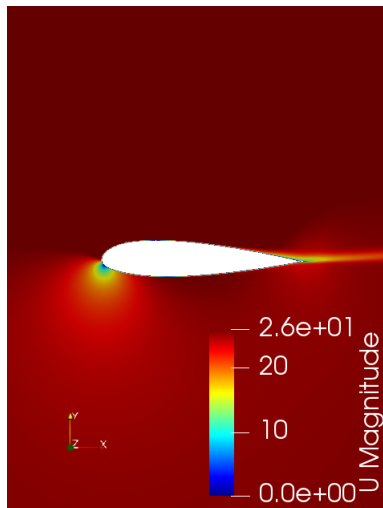


(a) Gráfico de velocidades (estado final)

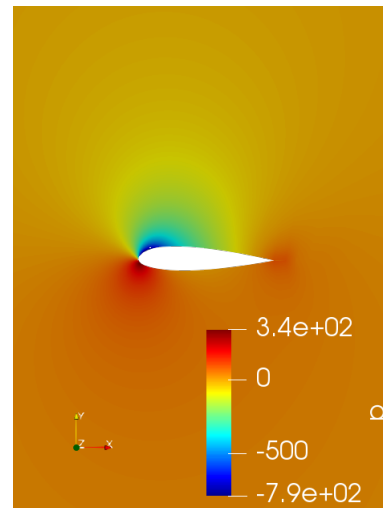


(b) Gráfico de presiones (estado final)

Fig. 3: Simulación elbow (*solver* icoFoam)



(a) Gráfico de velocidades (estado final)



(b) Gráfico de presiones (estado final)

Fig. 4: Simulación airFoil2d (*solver* simpleFoam)

perfusión; a nivel de equipamiento biomédico se podría analizar los efectos que tengan un dispositivo de circulación extracorpórea que genere este flujo de manera artificial, específicamente se podría hacer uso de las simulaciones, con el *solver* icoFoam, para analizar las velocidades máximas de flujo que podrían generarse dentro de un sistema (vasos sanguíneos), esto con el fin de establecer parámetros de seguridad del dispositivo [6].

b. **¿Cuál es la relación entre la pérdida de velocidad y el diámetro de la sección?**

La relación que existe entre la pérdida de velocidad y el diámetro de la sección es una que tiene un comportamiento directamente proporcional: a mayor diámetro mayor pérdida de velocidad. Esta relación puede ser deducida a partir del principio de conservación de masa, de manera explicativa, si se toma el caudal (recordar asunciones: fluido incompresible, gradiente de velocidad igual a 0 y flujo laminar) se establece que, al ser Q constante la velocidad y el área (el cual depende del diámetro de la sección donde se tome el volumen de control) están en una relación inversamente proporcional [1], [2].

$$Q = v.A \quad Q\text{- caudal (constante)} \quad (9)$$

c. **¿Cuáles son los puntos críticos donde conviene estudiar estas geometrías? ¿Por qué estudiar las zonas críticas?**

se asume referencia a la aplicación de un mallado sobre una geometría, donde los puntos críticos representen celdas pequeñas con velocidades altas

La geometrías donde conviene analizar estos puntos son en las paredes (contornos y superficies de contacto), la áreas de difusión (donde se mezclen fluidos) y en la curvaturas que se tengan (en especial en aquellas con un ángulos extremos: ángulos muy cerrados/abiertos); como adicional este análisis se hace por la constante de Courant (ver ecuación 10), el cual de manera ideal se trata de mantener constante y por debajo de 1.

$$Co = \frac{u\delta t}{\delta x} \quad (10)$$

Donde : u – velocidad δx – intervalo de espacio δt – intervalo de tiempo

Se hace conveniente analizar estas zonas por un factor de estabilidad y confiabilidad de la simulación, esto debido a que los puntos críticos disminuyen las aproximación que tiene una simulación a un fluido real: aumenta la probabilidad de errores esta al generar una difusión negativa; además, si no basamos en la implementación de openFoam, ante la presencia de un numero de Courant mayor a 1 o fuera del rango establecido, trata de ajustar de manera automática el tamaño de las celdas del mallado, este reajuste aumenta el consumo de recursos, por tanto si logramos analizar y establecer de manera preliminar un tamaño de celda se lograría optimizar el uso de recursos [4], [5].

d. **¿Qué es la cavitación y cuando ocurre?**

La cavitación es un fenómeno en el que un fluido en fase gaseosa se acumula de tal manera que forma cavidades (o "burbujas") en un fluido en fase líquida, la fase gaseosa, por lo general, se encuentra diluida en la fase líquida o se genera del mismo fluido por una vaporización, aunque bajo ciertas condiciones esta se adhiere de elementos externos al sistema.

El fenómeno de cavitación ocurre cuando la diferencia de presión entre la fase líquida menos la fase gaseosa (vapor) se hace negativa, lo cual permite la acumulación de esta fase gaseosa, como observaciones, esta acumulación se puede revertir tras el restablecimiento de la diferencia de presiones, además que este fenómeno solo puede ocurrir en fluidos compresibles [2].

REFERENCES

- [1] O. Ali, *Biofluid mechanics*. 2016.
- [2] D. A. Rubenstein, W. Yin, and M. D. Frame, *Biofluid mechanics*, 2nd ed. 2015.
- [3] R. L. S. Joel H. Ferziger Milovan Perić, *Computational Methods for Fluid Dynamics*, 4th ed. 2020. Springer International Publishing, 2020, ISBN: 9783319996912.
- [4] I. Hernández Alayeto, "Aplicación del código de openfoam al control activo de la capa límite," PhD thesis, Universidad Politécnica de Madrid, 2016.
- [5] P. D.-I. O. K. (auth.), *Computational Methods in Environmental Fluid Mechanics*, 1st ed. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2002, ISBN: 9783662047613.
- [6] K. P. H. Rüdiger Kramme Heike Kramme, *Handbook of Medical Technology*, 1st ed., ser. Springer Handbooks. Springer, 2011, ISBN: 9783540746577.

APPENDIX I

ECUACIÓN COMPLETA DE NAVIER-STOKES

$$\begin{aligned} \rho \frac{Du}{Dt} &= \left(\rho g_x + \frac{\partial \left(-p - \frac{2}{3}\mu \nabla \cdot \vec{v} + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right)}{\partial y} + \frac{\partial \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right)}{\partial z} \right) \\ &= \rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \left[\mu \left(2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} \right) \right]}{\partial x} + \frac{\partial \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right)}{\partial y} + \frac{\partial \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right)}{\partial z} \end{aligned} \quad (11)$$

componente en u

$$\begin{aligned}
\rho \frac{Dv}{Dt} &= \left(\rho g_y + \frac{\partial \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(-p - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \vec{v} + 2 \mu \frac{\partial v}{\partial y} \right)}{\partial y} + \frac{\partial \left(\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right)}{\partial z} \right) \\
&= \rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \left[\mu \left(2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} \right) \right]}{\partial y} + \frac{\partial \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right)}{\partial z}
\end{aligned} \tag{12}$$

componente en v

$$\begin{aligned}
\rho \frac{Dw}{Dt} &= \left(\rho g_z + \frac{\partial \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right)}{\partial y} + \frac{\partial \left(-p - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \vec{v} + 2 \mu \frac{\partial w}{\partial z} \right)}{\partial z} \right) \\
&= \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \left[\mu \left(2 \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} \right) \right]}{\partial z} + \frac{\partial \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right)}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial x}
\end{aligned} \tag{13}$$

componente en w

APPENDIX II ADICIONALES

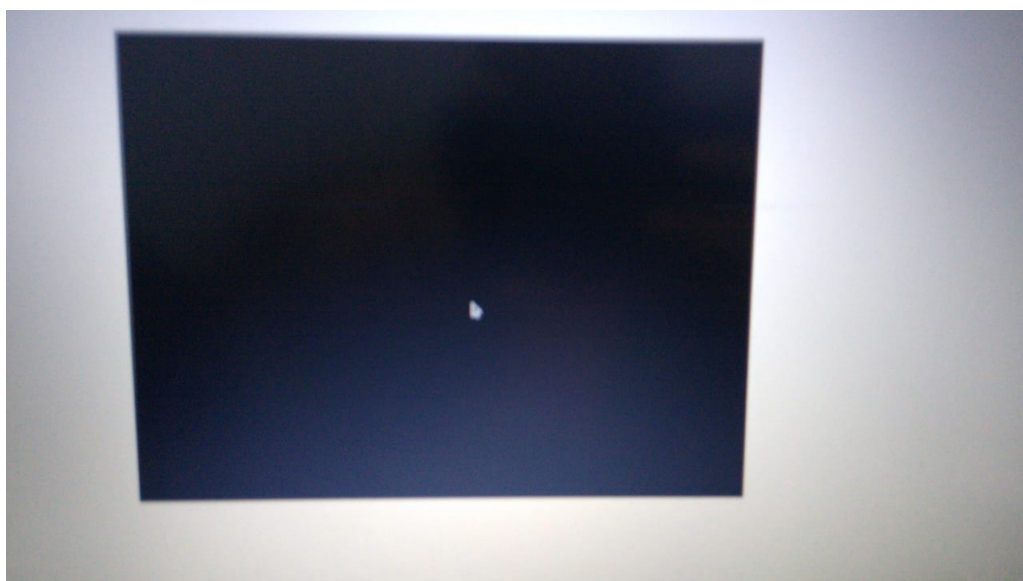


Fig. 5: Pantallazo de error en ejecución de openFoam