Применение СПО для решения задач аэро- и газовой динамики

Семинар 5. Численные методы. Разностные схемы.

Преподаватель: Романова Дарья Игоревна

Институт системного программирования им. В.П. Иванникова РАН, Москва

2023

Уравнение переноса в OpenFOAM

scalarTransportFoam

Уравнение переноса реализованное в решателе scalarTransportFoam

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\boldsymbol{U} T) - \boldsymbol{\nabla}^2(\mathcal{D}_T T) = 0,$$

где T — скаляр, $\boldsymbol{U}$ — скорость среды, $\mathcal{D}_T$ — коэффициент диффузии (константа), отнесенный к плотности среды (константа).

В одномерном случае

При $\boldsymbol{U} = (U, 0, 0)$, $U = \text{const}$:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + U \frac{\partial T}{\partial x} - \mathcal{D}_T \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0.$$

Оценка устойчивости разностной схемы методом гармоник

Рассмотрим частное решение вида гармоники (первый член разложения в ряд по пространственным гармоникам):

$$T_i^n = \rho^n e^{\iota i \varphi},$$

где ι — мнимая единица.

При использовании схемы неявный левый уголок, когда $U > 0$, $\mathcal{D}_T = 0$ получаем разностную схему вида:

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{dt} + U \frac{T_i^{n_1} - T_{i-1}^{n_1}}{dx} = 0.$$

Подставим выражение для гармоники в разностную схему:

$$\frac{\rho^{n+1} e^{\iota i \varphi} - \rho^n e^{\iota i \varphi}}{dt} + U \frac{\rho^{n+1} e^{\iota i \varphi} - \rho^{n+1} e^{\iota (i-1) \varphi}}{dx} = 0.$$

Оценка устойчивости разностной схемы методом гармоник

Сократим на $\rho^n e^{\iota i \varphi}$ и обозначим $r = \frac{Udt}{dx}$:

$$\rho - 1 + CFL(\rho - \rho e^{-\iota\varphi}) = 0.$$

$$\rho = \frac{1}{1 + r(1 - e^{-\iota\varphi})}.$$

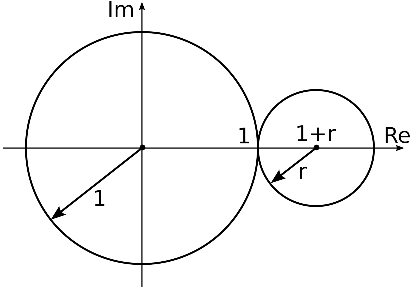
Условие устойчивости по методу гармоник

Разностная схема считается устойчивой, если $|\rho| \leq 1$.

$$\left| \frac{1}{1 + r(1 - e^{-\iota\varphi})} \right| \leq 1$$

$$|1 + r - re^{-\iota\varphi}| \geq 1$$

Условие $|\rho| \leq 1$ выполнено при любом r. То есть схема абсолютно устойчива.



Кейс для решения одномерного уравнения переноса

Кейс `transport1D` лежит на GitHub

`https://github.com/RomanovaDI/freeSoftwareTrainingCourse`

Настройки разностной схемы. Файл system/fvSchemes

```
ddtSchemes
{
    default          Euler;
}
gradSchemes
{
    default          Gauss linear;
}
divSchemes
{
    default          none;
    div(phi,T)       Gauss linearUpwind grad(T);
}
laplacianSchemes
{
    default          none;
    laplacian(DT,T) Gauss linear corrected;
}
```

```
interpolationSchemes
{
    default          linear;
}
snGradSchemes
{
    default          corrected;
}
```

fvSchemes

Файл fvSchemes содержит в себе подсловари для указания типа аппроксимации различных терминов.

Ключевое слово	Категория математических терминов
`interpolationSchemes`	Межточечная интерполяция значений
`snGradSchemes`	Компонент градиента по нормали к грани ячейки
`gradSchemes`	Градиент ∇
`divSchemes`	Дивергенция $\nabla\cdot$
`laplacianSchemes`	Оператор Лапласа Δ
`ddtSchemes`	Первая производная по времени $\partial/\partial t$
`d2dt2Schemes`	Вторая производная по времени $\partial^2/\partial t^2$

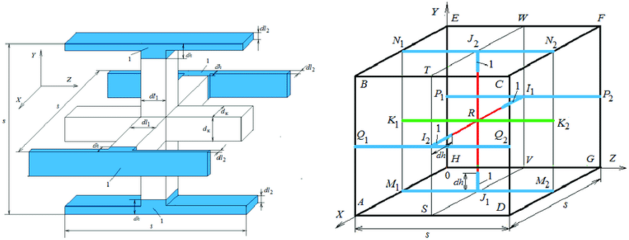
fvSchemes

В примере мы видели, что файл `fvSchemes` содержит в себе подсловари для каждой категории математических терминов, в которых перечислены конкретные термины, а так же тип схемы по умолчанию (`default`).

Если задано значение по умолчанию, то можно не перечислять явно все термины, к отсутствующим терминам будет применена разностная схема указанная в `default`.

Можно указать `default none;`, в этом случае необходимо прописать разностную схему для всех терминов уравнения. В этом случае при отсутствии какого-либо термина будет ошибка.

Разностные схемы общего вида

Ключевое слово	Описание
`linear`	Linear interpolation (central differencing) which takes into account the distances between points
`cubicCorrection`	Cubic scheme $\varphi_{i+1,j,k} - \varphi_{i-1,j,k} = 1/4((\varphi_{i+1,j+1,k+1} - \varphi_{i-1,j+1,k+1}) + (\varphi_{i+1,j+1,k-1} - \varphi_{i-1,j+1,k-1}) + (\varphi_{i+1,j-1,k-1} - \varphi_{i-1,j-1,k-1}) + (\varphi_{i+1,j-1,k+1} - \varphi_{i-1,j-1,k+1}))$ 
`midPoint`	Linear interpolation with symmetric weighting

Разностные схемы для конвективных членов

Upwinded convection schemes

Ключевое слово	Описание	Схема (нумерация по потоку)
`upwind`	Upwind differencing	$\varphi_i - \varphi_{i-1}$
`linearUpwind`	Linear upwind differencing	$\varphi_i - \varphi_{i-1} + 0.5((\varphi_i - \varphi_{i-1}) + (\varphi_{i-1} - \varphi_{i-2}))$
`skewLinear`	Linear with skewness correction	
`filteredLinear2`	Linear with filtering for high-frequency	

Разностные схемы для конвективных членов

Total variation diminishing (TVD) schemes (Схемы, ограничивающие общую вариацию)

Ключевое слово	Описание
`limitedLinear`	limited linear differencing
`vanLeer`	van Leer limiter
`SuperBee`	SuperBee limiter
`MUSCL`	MUSCL limiter
`limitedCubic`	Cubic limiter

Разностные схемы для конвективных членов

Normalised variable diminishing (NVD) schemes (Схемы ограничивающие нормализованную вариацию)

Ключевое слово	Описание
`SFCD`	Self-filtered central differencing
`Gamma` ψ	Gamma differencing

fvSchemes. interpolationSchemes

Подсловарь `interpolationSchemes` содержит термины, представляющие собой межточечные интерполяции значений, как правило, интерполяция в центрах граней по значениям в центрах ячеек.

Схемы для конвективных членов могут быть также быть использованы, но в силу того, что они вычисляют интерполяцию на основе потока скорости потока, необходимо указывать для этих схем имя поля потока, на котором будет основываться интерполяция. В большинстве солверов OpenFOAM это phi, имя, которое обычно используется для обозначения поля потока скорости φ.

```
default upwind phi;
```

Для некоторых схем TVD/NVD требуется коэффициент ψ ограничивающий поток, $0 \leq \psi \leq 1$ (где $\psi = 1$ обычно обеспечивает наилучшую сходимость, а $\psi = 0$ — наилучшую точность. Обычно рекомендуется работать с $\psi = 1$ — дефолтное значение. Такие схемы ограничивают поток, который необходимо указывать.

```
default limitedLinear phi 1.0;
```

fvSchemes. interpolationSchemes

Существуют расширенные версии некоторых ограничевающих схем для тех скаляров, которые должны быть строго ограничены. Для задания ограничения на скаляр имя схемы должно начинаться со слова `limited`, а за названием схемы следует нижний и верхний пределы для скаляра. Например, чтобы ограничить скаляр при схеме `vanLeer` строго между значениями -2 и 3, пользователь должен указать:

```
default limitedVanLeer -2.0 3.0;
```

Существуют специализированные версии этих схем для скалярных полей, которые ограничены от 0 до 1. Они выбираются путем добавления 01 к имени схемы. Например, чтобы связать схему `vanLeer` строго между 0 и 1, пользователь должен указать:

```
default vanLeer01;
```

Строго ограниченные версии доступны для следующих схем: `limitedLinear`, `vanLeer`, `Gamma`, `limitedCubic`, `MUSCL` и `SuperBee`.

fvSchemes. snGradSchemes

Подсловарь `snGradSchemes` содержит описание разностных схем для аппроксимации градиента вдоль нормали к поверхности. Градиента вдоль нормали к поверхности оценивается на поверхности ячейки, например, для аппроксимации оператора Лапласа с использованием интегрирования методом Гаусса. Список доступных схем:

Ключевое слово	Описание
`corrected`	Explicit non-orthogonal correction
`uncorrected`	No non-orthogonal correction
`limited` ψ	Limited non-orthogonal correction
`bounded`	Bounded correction for positive scalars
`fourth`	Fourth order

Схема `limited` требует задания коэффициента ψ, который:

$$\psi = \begin{cases} 0 & \text{corresponds to uncorrected,} \\ 0.333 & \text{non-orthogonal correction } \le 0.5 \times \text{orthogonal part,} \\ 0.5 & \text{non-orthogonal correction } \le \text{orthogonal part,} \\ 1 & \text{corresponds to uncorrected.} \end{cases}$$

fvSchemes. gradSchemes

Подсловарь `gradSchemes` содержит описание разностных схем для аппроксимации градиента. Список доступных схем:

Ключевое слово	Описание
`Gauss <interpolationScheme>`	Second order, Gaussian integration
`leastSquares`	Second order, least squares
`fourth` ψ	Fourth order, least squares
`cellLimited <gradScheme>`	Cell limited version of one of the above schemes
`faceLimited <gradScheme>`	Face limited version of one of the above schemes

Примеры:

```
grad(p) leastSquares;
grad(p) Gauss linear;
grad(p) cellLimited Gauss linear 1;
```

fvSchemes. laplacianSchemes

Подсловарь `laplacianSchemes` содержит описание разностных схем для аппроксимации оператора Лапласа.

Список доступных схем:

Ключевое слово	Описание
`Gauss <interpolationScheme> <snGradScheme>`	Gaussian integration

Пример:

```
laplacian(nu,U) Gauss linear corrected;
```

Синтакс записи аппроксимируемого члена обуславливается классическим видом оператора Лапласа в гидродинамике $\nabla \cdot (\nu \nabla \boldsymbol{U})$, который записывается как `laplacian(nu, U)`.

fvSchemes. divSchemes

Подсловарь divSchemes содержит описание разностных схем для аппроксимации дивергенции. Список доступных схем:

Ключевое слово	Описание
Gauss <interpolationScheme>	Gaussian integration

Пример:

```
div(phi ,U) Gauss upwind;
```

Синтакс записи аппроксимируемого члена обуславливается классическим видом конвективного члена в гидродинамике $\nabla \cdot (\rho \boldsymbol{U}\boldsymbol{U})$, который записывается как div(phi, U), где $\phi = \rho \boldsymbol{U}$. Синтаксис для указания схем аппроксимации для конвективных членов здесь не включает указание потока, поскольку он уже известен исходя из записи самого члена, т. е. для div(phi, U) мы знаем, что поток равен phi, поэтому указание его в схеме интерполяции только вызовет вопросы.

fvSchemes. ddtSchemes

Подсловарь `ddtSchemes` содержит описание разностных схем для аппроксимации производной по времени. Список доступных схем:

Ключевое слово	Описание
`Euler`	First order, bounded, implicit
`localEuler`	Local-time step, first order, bounded, implicit
`CrankNicholson` ψ	Second order, bounded, implicit
`backward`	Second order, implicit
`steadyState`	Does not solve for time derivatives

Для схемы Кранка-Николсона задаётся коэффициент смешения ψ со схемой Эйлера. Значение коэффициента $\psi = 1$ соответствует чистому Кранк-Николсону, а $\psi = 0$ соответствует чистому Эйлеру. Коэффициент смешивания может помочь улучшить стабильность в случаях, когда чистый Крэнк-Николсон нестабилен.

Примеры:

```
default          Euler;
```

fvSchemes. d2dt2Schemes

Подсловарь `d2dt2Schemes` содержит описание разностных схем для аппроксимации второй производной по времени. Список доступных схем:

Ключевое слово	Описание
`Euler`	First order, bounded, implicit

Примеры:

```
default             Euler;
```

Задачи

1. Исследовать устойчивость разностной схемы неявный правый уголок для уравнения переноса.
2. Произвести расчёт задачи `transport1D` с использованием следующих схем аппроксимации для конвективного члена: SuperBee, linearUpwind, upwind. Нарисовать график вдоль оси Ox для оценки разницы.

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!

Список литературы