

icoFoam解析

李东岳

1. 引言

计算流体力学 (CFD) 采用计算机模拟流体的流动行为。流体动力学包含各种类型，如可压缩流动、不可压缩流动、多相流动以及化学反应、组分输运等。所有的这些流动性为都可以用偏微分方程来描述。例如，不可压缩牛顿流体的控制方程可以表示为 (Ferziger and Peric, 2012)：

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}\mathbf{U}) = -\nabla \frac{p}{\rho} + \nabla \cdot (\nu \nabla \mathbf{U}), \quad (2)$$

其中 ρ 为密度， \mathbf{U} 为速度， p 为压力， ν 为粘度。该方程具有以下特点：（1）方程(2)中左边第二项是关于 \mathbf{U} 乘积的偏导数，这种未知量和未知量乘积的问题构成非线性问题，CFD对非线性问题需要特殊处理。另一方面，非线性的双曲问题的解可能会存在间断（如激波）。激波通常存在于高超声速的欧拉问题求解中。同时，非线性项也是湍流在数学方程中的体现；

（2）方程(2)的数学特征为抛物线。不同数学特征的问题需要调用不同的时间离散格式，隐性时间格式更有利于求解抛物线问题。若方程(2)中省略若干项则会改变方程的数学特征，例如若将方程右侧置为0，则变为双曲特征的欧拉方程。欧拉方程得益于其双曲特性，可采用迎风类显性算法推进，各种基于有限体积法的高分辨率格式因此而生（交错网格中心格式、中心-迎风格式等）；（3）方程(1)和(2)中存在未知量压力 p ，同时压力和速度是耦合在一起的（二者相互影响），但并没有单独的压力方程。这导致压力的求解需要特殊的策略。这也是CFD中压力基SIMPLE/PISO算法、密度基、耦合/解耦算法要处理的问题。另一方面，方程(2)右侧存在压力梯度项，所有类似的梯度项都需要特殊的数值处理否则会引起数值震荡；（4）方程(1)和(2)为宏观方程，调用了宏观假定，其起源为玻尔兹曼方程（又名动理学方程）。在更底层的介尺度研究领域，方程(1)和(2)也即从介尺度模型演化的宏观二阶矩模型。在无压力无粘性的条件下具备弱双曲特征。由于失去了高阶矩的统计学特征，因此方程(1)和(2)在某些情况下是不适用的；在考虑适当的简化情况下，方程(1)和(2)可被称之为Navier-Stokes (N-S) 方程。除了上述数学特征，求解N-S方程可分为不同的方法如有限体积法、有限差分法以及谱方法等。有限体积法得益于其天然守恒的数学特征，被大量的植入于CFD软件（如ANSYS Fluent、OpenFOAM等）中用于流体动力学计算模拟。

icoFoam为OpenFOAM中一个基于有限体积法的，用于求解不可压缩牛顿流体N-S方程的求解器。它可用于模拟层流流动或流场剪切力引致的湍流准直接模拟 (quasi-DNS)，也被称之为准DNS。在这里需要注意的是，得益于谱方法以及有限差分法高阶精度的易用性，DNS计算通常采用谱方法或有限差分法。有限体积法由于本身在计算通量时引入的中点插值法则，大大限制了有限体积法的精度。然而Komen等通过研究圆管内的湍流流动，认为在网格分辨率足够

的情况下，使用有限体积法同样可以获得高质量的平均速度以及脉动速度流场 (Komen et al., 2014)。Komen等进一步的使用有限体积法进行准DNS计算，并与有限体积法大涡模拟进行标定，认为大涡模拟方法会引致一定的数值耗散 (Komen et al., 2017)。Axtmann与Rist也使用OpenFOAM进行了准DNS直接模拟，并研究了编译器与并行计算的特性 (Axtmann and Rist, 2016)。liu等通过icoFoam对开口顶盖驱动流进行了准直接模拟 (Liu et al., 2016)，进一步验证了使用OpenFOAM进行准直接模拟的可行性。

在icoFoam中，压力和速度的耦合通过瞬态PISO算法进行计算 (Issa, 1986)，且没有考虑其他体积力（如重力等）。除去三个基本求解器 laplacianFoam, potentialFoam, scalarTransportFoam, icoFoam为一个最基本的求解器范例，可用于理解 OpenFOAM中压力速度耦合的框架策略。需要注意的是对于流场内温度变化较大，但可忽略浮力以及重力的可压缩求解器，可选用 rhoPimpleFoam。附加重力的可压缩浮力驱动流求解器可选用 buoyantPimpleFoam。本文从最基本的N-S方程在笛卡尔网格下的有限体积离散开始推导，介绍icoFoam求解器中的算法并和OpenFOAM植入的代码相对应，可用于理解N-S方程在有限体积法中的离散以及瞬态PISO算法在OpenFOAM中的实现。需要注意的是，由于为不可压缩流体求解器，下文中 p 的单位为压力除以密度的单位，即 $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$ 。在下文中， p 也对应方程(2)中的 p/ρ 。

2. 控制方程与算法

2.1 有限体积法离散

首先对方程(2)中的时间项进行对速度 \mathbf{U} 关于时间 t 的欧拉全隐离散有 (Jasak, 1996)：

$$\int \int \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} dV dt = (\mathbf{U}_P^* - \mathbf{U}_P^t) V_P, \quad (3)$$

对流项隐性离散：

$$\int \int \nabla \cdot (\mathbf{U}\mathbf{U}) dV dt = \int \int \mathbf{U}\mathbf{U} \cdot d\mathbf{S} dt = \sum (\mathbf{U}^* \mathbf{U}^t)_f \cdot \mathbf{S}_f \Delta t = \Delta t \sum F_f^t \mathbf{U}_f^*, \quad (4)$$

拉普拉斯项隐性离散：

$$\int \int \nabla \cdot (\nu \nabla \mathbf{U}) dV dt = \int \int \nu \nabla \mathbf{U} \cdot d\mathbf{S} dt = \sum (\nu \nabla \mathbf{U}^*)_f \cdot \mathbf{S}_f \Delta t = \Delta t \sum \nu (\nabla \mathbf{U}^*)_f \cdot$$

压力项显性离散：

$$\int \int \nabla p dV dt = \int \int p d\mathbf{S} dt = \Delta t \sum (p_f^t \mathbf{S}_f), \quad (6)$$

其中上标 t 表示为当前的时间步（已知），上标 $*$ 表示预测步（待求），下标 f 表示网格单元面上的值， V_P 表示网格单元体积， \mathbf{S}_f 表示网格单元的各个面的面矢量， Δt 表示时间步长， F_f^t 为通量， ν 为动力粘度。方程(5)中 $(\nabla \mathbf{U}^*)_f \cdot \mathbf{S}_f$ 需要进一步处理，其中 $\nabla \mathbf{U}^*$ 为定义在体心的量，即网格体心的速度梯度。 $(\nabla \mathbf{U}^*)_f$ 为定义在面心的量，即网格面心的速度梯度。为使用紧致基架点防止数值震荡， $(\nabla \mathbf{U}^*)_f \cdot \mathbf{S}_f$ 通常表示为面法向梯度与面矢量的模的乘积：

$$(\nabla \mathbf{U}^*)_f \cdot \mathbf{S}_f = \left((\nabla \mathbf{U}^*)_f \cdot \frac{\mathbf{S}_f}{|\mathbf{S}_f|} \right) \cdot |\mathbf{S}_f| \quad (7)$$

其中 $(\nabla \mathbf{U}^*)_f \cdot \frac{\mathbf{S}_f}{|\mathbf{S}_f|}$ 表示面法向梯度，有

$$(\nabla \mathbf{U}^*)_f \cdot \frac{\mathbf{S}_f}{|\mathbf{S}_f|} = \frac{\mathbf{U}_N^* - \mathbf{U}_P^*}{|\mathbf{d}|}, \quad (8)$$

其中 \mathbf{d} 表示网格单元体心之间矢量差（距离矢量），下标 N 表示相邻网格单元的速度，下标 P 表示当前网格单元的速度。速度的面法向梯度在三维情况下为一个矢量（变量的面法向梯度与变量的阶数相同）。在这里需要注意的是，方程(8)只对矩形网格精准，网格非正交性增加，需要特定的数值处理提高其计算精准性。将方程(3)-(7)代入到方程(2)有：

$$\frac{\mathbf{U}_P^* - \mathbf{U}_P^t}{\Delta t} V_P + \sum F_f^t \mathbf{U}_f^* = \sum \nu \nabla_f \mathbf{U}^* |\mathbf{S}_f| - \sum p_f^t \mathbf{S}_f. \quad (9)$$

需要注意的是，方程(2)中的左边第二项（对流项）是非线性的。在求解的过程中，要么选择非线性求解器，要么将对流项线性化。由于非线性求解器非常复杂，因此在OpenFOAM均采用线性化处理。具体的，在对方程(9)中的左边第二项对流项离散中，其中的通量 F_f^t 采用当前已知时间步的速度 \mathbf{U}^t 来计算，同时保留 \mathbf{U}_P^* 为未知量。这种将高阶非线性项降为一阶线性项的过程即为线性化操作。线性化的一个问题即为通量速度的信息有所滞后 (Jasak, 1996)。

2.2. 动量预测

方程(9)中 \mathbf{U}_f^* 被定义为面上的预测速度。为方便与OpenFOAM代码对应，在时间步内第一次通过求解动量方程获得的速度叫预测速度。面速度需要从体心速度进行插值来获得，在此步可以引入各种插值格式。假设在均一网格上使用中心线性格式：

$$\mathbf{U}_f^* = \frac{\mathbf{U}_P^* + \mathbf{U}_N^*}{2}. \quad (10)$$

$$p_f^t = \frac{p_P^t + p_N^t}{2}. \quad (11)$$

将方程(7), (10), (11)代入到方程(9)有

$$\frac{\mathbf{U}_P^* - \mathbf{U}_P^t}{\Delta t} V_P + \sum F_f^t \frac{\mathbf{U}_P^* + \mathbf{U}_N^*}{2} = \sum \nu |\mathbf{S}_f| \frac{\mathbf{U}_N^* - \mathbf{U}_P^*}{|\mathbf{d}|} - \sum \frac{p_P^t + p_N^t}{2} \mathbf{S}_f, \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{1}{V_P} \sum \frac{F_f^t}{2} + \frac{1}{V_P} \sum \nu \frac{|\mathbf{S}_f|}{|\mathbf{d}|} \right) \mathbf{U}_P^* = \\ - \sum \frac{1}{V_P} \left(\frac{F_f^t}{2} - \nu \frac{|\mathbf{S}_f|}{|\mathbf{d}|} \right) \mathbf{U}_N^* + \frac{1}{\Delta t} \mathbf{U}_P^t - \frac{1}{V_P} \end{aligned}$$

将上式简写为

$$\mathbf{U}_P^* = \frac{1}{1 + \frac{1}{V_P} \sum \left(\frac{F_f^t}{2} - \nu \frac{|\mathbf{S}_f|}{|\mathbf{d}|} \right)} \left(\frac{1}{\Delta t} \mathbf{U}_P^t - \frac{1}{V_P} \sum \left(\frac{F_f^t}{2} - \nu \frac{|\mathbf{S}_f|}{|\mathbf{d}|} \right) \mathbf{U}_N^* \right)$$

$$A_P \mathbf{U}_P^* + \sum A_N \mathbf{U}_N^* = S_P^t - \frac{1}{V_P} \sum \frac{\mathbf{F}_f \cdot \mathbf{d}_f}{2} \mathbf{S}_f, \quad (14)$$

其中

$$A_P = \frac{1}{\Delta t} + \frac{1}{V_P} \sum \frac{F_f^t}{2} + \frac{1}{V_P} \sum \nu \frac{|\mathbf{S}_f|}{|\mathbf{d}|}, \quad (15)$$

$$A_N = \frac{1}{V_P} \left(\frac{F_f^t}{2} - \nu \frac{|\mathbf{S}_f|}{|\mathbf{d}|} \right), \quad (16)$$

$$S_P^t = \frac{1}{\Delta t} \mathbf{U}_P^t. \quad (17)$$

可以看出在某个时间步内 A_P 、 A_N 、和 S_P^t 保持不变（注意 A_N 、 $\sum A_N \mathbf{U}_N$ 、 $-\sum A_N \mathbf{U}_N + S_P$ 的区别）。求解方程(14)即可获得预测速度 \mathbf{U}_P^* 。方程(14)即为OpenFOAM中的动量预测方程。需要注意的是，动量预测步骤并不是必须的，这主要和速度压力耦合求解策略有关。如果不调用动量预测步骤，则 $\mathbf{U}_P^* = \mathbf{U}_P^t$ 。

2.3. 压力泊松方程

N-S方程求解的关键问题之一在于并没有压力的方程出现。仔细分析得知上文中求解动量方程获得了速度，但连续性方程并不是关于压力的方程。压力泊松方程的构建正式基于连续性方程而来，其通过对动量方程继续做散度并相加获得。考虑最终收敛的情况下，对连续性方程 $\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$ 进行离散后的形式为

$$\sum (\mathbf{U}_{P,f}^{t+\Delta t} \cdot \mathbf{S}_f) = 0. \quad (18)$$

如果能用压力表示方程(18)中的 $\mathbf{U}_{P,f}^{t+\Delta t}$ ，是不是就可以得出压力泊松方程了呢？答案是肯定的。首先，方程(14)可以写为：

$$A_P \mathbf{U}_P^* + \sum A_N \mathbf{U}_N^* = S_P^t - \frac{1}{V_P} \sum p_f^t \mathbf{S}_f, \quad (19)$$

收敛情况下为：

$$A_P \mathbf{U}_P^{t+\Delta t} + \sum A_N \mathbf{U}_N^{t+\Delta t} = S_P^t - \frac{1}{V_P} \sum p_f^{t+\Delta t} \mathbf{S}_f, \quad (20)$$

若将方程(20)减去(19)有：

$$A_P \mathbf{U}_P' + \sum A_N \mathbf{U}_N' = -\frac{1}{V_P} \sum p_f' \mathbf{S}_f, \quad (21)$$

其中 $\mathbf{U}_P' = \mathbf{U}_P^{n+1} - \mathbf{U}_P^*$ （其他同理）。在这里未调用任何略去临点的假定，方程(20)是严格成立的（精准的）。对方程(20)移项有

$$\mathbf{U}_P^{t+\Delta t} = \mathbf{HbyA}_P^{t+\Delta t} - \frac{1}{A_P} \frac{1}{V_P} \sum p_f^{t+\Delta t} \mathbf{S}_f. \quad (22)$$

其中有 \mathbf{HbyA}

$$\mathbf{HbyA}_P^{t+\Delta t} = \frac{1}{A_P} \left(- \sum A_N \mathbf{U}_N^{t+\Delta t} + S_P^n \right). \quad (23)$$

类似的，面上的速度可以通过下面的公式获得：

$$\mathbf{U}_{P,f}^{t+\Delta t} = \mathbf{HbyA}_f^{t+\Delta t} - \frac{1}{A_{P,f}} \left(\frac{1}{V_P} \sum p_f^{t+\Delta t} \mathbf{S}_f \right)_f. \quad (24)$$

将方程(24)代入到方程(18)有：

$$\sum \left(\mathbf{HbyA}_f^{t+\Delta t} - \frac{1}{A_{P,f}} \left(\frac{1}{V_P} \sum p_f^{t+\Delta t} \mathbf{S}_f \right)_f \right) \cdot \mathbf{S}_f = 0, \quad (25)$$

$$\sum \mathbf{HbyA}_f^{t+\Delta t} \cdot \mathbf{S}_f = \sum \frac{1}{A_{P,f}} \left(\frac{1}{V_P} \sum p_f^{t+\Delta t} \mathbf{S}_f \right)_f \cdot \mathbf{S}_f, \quad (26)$$

方程(26)即下述方程的离散形式：

$$\nabla \cdot \mathbf{HbyA}^{t+\Delta t} = \nabla \cdot \left(\frac{1}{A} \nabla p^{t+\Delta t} \right). \quad (27)$$

方程(27)即为压力泊松方程。若有 $\mathbf{HbyA}^{t+\Delta t}$ ，则可求得收敛的压力。需要注意的是， $\nabla \cdot \left(\frac{1}{A} \nabla p^{t+\Delta t} \right)$ 可以通过先求梯度再求散度进行，也可以直接通过拉普拉斯积分进行。方程(26)右端即先求梯度再求散度的方法，这种方法会引起数值震荡。若通过拉普拉斯并进行高斯积分进行离散，则会调用紧致格式防止数值震荡 (Li, 2019)。

2.4. 迭代算法

可以看出，最后求解的速度 $\mathbf{U}_P^{t+\Delta t}$ 和压力 $p^{t+\Delta t}$ 应该符合方程(14)和(27)，分别对应动量方程和连续性方程。然而目前，我们只有通过2.2节动量预测步骤求出来的 \mathbf{U}_P^* 。 $\mathbf{HbyA}_P^{t+\Delta t}$ 和 $p^{t+\Delta t}$ 均为未知的。压力泊松方程不能求解。1986年Issa提出了PISO算法可以解决这个问题 (Issa, 1986)。PISO算法在提出时主要针对不可压缩非稳态计算，其作为一种在时间步内非迭代的算法，在随后也被拓展用于稳态问题以及可压问题中。PISO算法通过对当前时间步内的多次修正来获得最终的 $\mathbf{U}_P^{t+\Delta t}$ 和 $p^{t+\Delta t}$ 。依据PISO算法，在方程(21)的基础上引入略去临点影响的假定有：

$$A_P \mathbf{U}_P' = - \frac{1}{V_P} \sum p_f' \mathbf{S}_f, \quad (28)$$

将方程(28)和(19)相加有

$$A_P \mathbf{U}_P^{**} + \sum A_N \mathbf{U}_N^* = S_P^n - \frac{1}{V_P} \sum p_f^* \mathbf{S}_f, \quad (29)$$

其中 $\mathbf{U}_P^{**} = \mathbf{U}_P^* + \mathbf{U}_P'$ ， $p_f^* = p_f^t + p_f'$ 。相比方程(20)，方程(29)由于忽略了临点的影响并不是精准的。对方程(29)进行移项有

$$\mathbf{U}_P^{**} = \mathbf{HbyA}_P^* - \frac{1}{A_P} \frac{1}{V_P} \sum p_f^* \mathbf{S}_f. \quad (30)$$

$$\mathbf{HbyA}_P^* = \frac{1}{A_P} \left(- \sum A_N \mathbf{U}_N^* + S_P^n \right). \quad (31)$$

$$\mathbf{U}_{P,f}^{**} = \mathbf{HbyA}_f^* - \frac{1}{A_{P,f}} \left(\frac{1}{V_P} \sum p_f^* \mathbf{S}_f \right). \quad (32)$$

方程(32)中可参考方程(25)-(27)的步骤组建压力泊松方程，即

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{A} \nabla p^* \right) = \nabla \cdot \mathbf{HbyA}^* \quad (33)$$

对方程(33)求解后有 p^* 。将 p^* 回代到方程(32)的时候，有 \mathbf{U}_P^{**} 。但需要注意的是，方程(32)并不是精准的。因此 p^* 和 \mathbf{U}_P^{**} 并不是最终时间步 $t + \Delta t$ 的结果。通过多次更新速度，并求解压力泊松方程，这种滞后性逐渐消除并可最终忽略。总而言之，PISO算法中的迭代过程可以表示为下面几个步骤：

1. 依据初始条件求解预测速度 \mathbf{U}^* ；
2. 通过速度组建 \mathbf{HbyA}^* ；
3. 求解方程(33)求解压力 p^* ；
4. 通过方程(32)依据压力 p^* 以及 \mathbf{HbyA}^* 更新速度有 \mathbf{U}^{**} ；
5. 回到第二步迭代求解几次即可；

3. 验证算例

3.1. Quasi-DNS直接模拟

icoFoam自带若干算例。在OpenFOAM-6中，自带的算例主要为以下几个：

- cavity：顶盖驱动流问题；
- elbow：非结构网格弯头流动问题；

上述算例在《OpenFOAM用户指南》已经进行了非常详细的阐述。在此不做过多介绍。除上述算例外，icoFoam也可以进行直接模拟。icoFoam不附加任何湍流模型直接求解N-S方程，并采用二阶有限体积法进行离散求解。因此可作为一个直接模拟求解器进行直接模拟。一些文章中更严谨的将其称为准直接模拟:quasi-DNS。另外，在这里强调OpenFOAM中的icoFoam、pisoFoam以及pimpleFoam在不使用湍流模型的情况下是相同的。本算例对标相关文献的研究工作 (Komen et al., 2017)。



算例网格为采用blockMesh生成的3D纯六面体结构网格。左侧为周期速度进口，右侧为周期速度出口，上下为用于附加剪切的壁面。需要注意的是，对于DNS以及LES，流场本身的湍流结构以及进口边界条件非常敏感。在不合理的初始条件下，二阶精度的有限体积法可能并不会捕获精细的涡结构。因此初始场应该尽可能的精准。本算例初始场通过boxTurb给定湍流涡结构之后，运行了200个周期，作为稳定的初始场。 $Re_\tau \approx 180$ 。

- 初始场 p ：内部即均一分布 $uniform\ 0$ ；
- 初始场速度 U ：内部速度为0.1335，即均一分布 $uniform\ (0.1335\ 0\ 0)$ ；
- 边界场 p ：边界全部为 $cyclic$ ，壁面为 $zeroGradient$ 零法向梯度；
- 边界场 U ：边界全部为 $cyclic$ ，壁面为 $noSlip$ 无滑移边界；

constant文件夹的物性主要设置如下：

- 粘度模型选择层流，即 $laminar$ ；
- 流体的动力粘度为 $2e-5$ ；
- fvOptions文件用于指定压力梯度，其中meanVelocityForce用于指定fvOptions的类型。 $UBar$ 平均速度指定 $(0.1335\ 0\ 0)$ ；

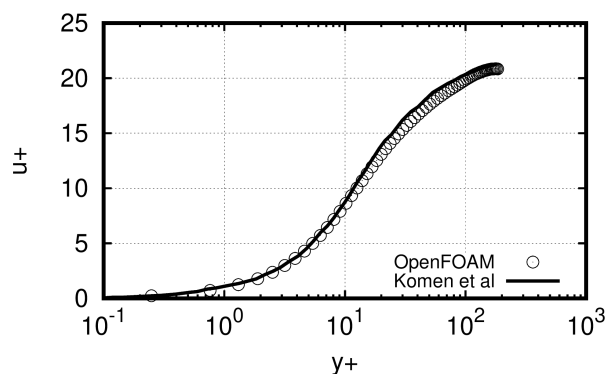
相关算例运行首先需要执行网格转换命令：

```
blockMesh
```

网格生成完毕，后直接运行直接模拟求解器运行即可：

```
pisoFoam
```

在这里提醒，pisoFoam是icoFoam的进阶版本。由于icoFoam中不支持fvOptions，因此本算例采用pisoFoam进行计算。本算例比较耗费计算机资源，采用12核并行计算大约需要10个小时。在运行之后，针对平均速度 U_{Mean} 即可以求出 u^+ 以及 y^+ （如下图）。



点击下载DNS算例。因为初始场信息已经经过计算200个周期，因此文件较大，约65m。

3.2. 圆柱绕流

下面，采用icoFoam对圆柱绕流进行计算模拟。相关算例由CFD中文网用户波流力提供。算例采用 blockMesh 生成的非正交四面体网格。左侧为进口，右侧为出口，计算域内存在一个圆柱。上下边界为对称面。0文件夹下的相关设置如下：

- 初始场 p：内部即均一分布 uniform 0；
- 初始场速度 U：内部速度为1，即均一分布 uniform (1 0 0)；
- 边界场 p：出口为 fixedValue 固定值边界条件，进口为 zeroGradient 零法向梯度；上下采用 symmetryPlane 对称边界条件；
- 边界场 U：进口为 fixedValue 固定值边界条件，出口为 zeroGradient 零法向梯度；上下采用 symmetryPlane 对称边界条件；

constant文件夹的物性主要设置如下：

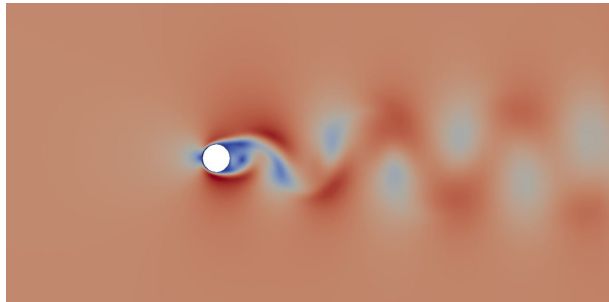
- 粘度模型选择层流，即 laminar；
- 流体的动力粘度为0.01，一个非常粘的流体，雷诺数为200；

相关算例运行首先需要执行网格转换命令：

```
blockMesh
```

网格生成完毕，后直接运行直接模拟求解器运行即可：

```
icoFoam
```



[点击下载圆柱绕流算例](#)

更新历史

2020.07.19warner bestucan | 2020.07.07周佳其 | 2020.03.04周佳其 | 2019.10.12Yongbo | 2019.6.12chaoscf | 2018.12.08丁长友 | 2018.11.07ghoully | 2018.08.22于鸿翔 | 2018.07.05尹胜强 | 2018.05.21JimShi | 2018.05.08张某人

东岳流体 2014 - 2020

勘误、讨论、补充内容请前往CFD中文网