

Capítulo: Método de Volúmenes Finitos

Ingeniería en Informática

Norberto Nigro^{1,2}

¹Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas
Universidad Nacional del Litoral

²Centro de Investigación en Métodos Computacionales (CIMEC)
UNL/CONICET, Predio Conicet Litoral Centro, Santa Fe, Argentina

Contenidos

1 Breve introducción teórica al método de los volúmenes finitos (FVM)

- Planteamiento del problema de conservación
- Forma discreta del problema de conservación
- Caso escalar térmico
 - Conducción térmica estacionaria con fuente
 - Conducción térmica transiente con fuente
 - Convección y Conducción térmica transiente con fuente
 - Condiciones de contorno

2 Implementación en 1D

- Difusión con fuente estacionaria
- Términos advectivos
- Discretización temporal en 1D

3 OpenFOAM®

- Qué es OpenFOAM®?
- Organización de la librería
- Solvers y utilidades
- Organización de las simulaciones
- Ejemplos en OpenFOAM®
- Trabajos Prácticos

Contenidos

1 Breve introducción teórica al método de los volúmenes finitos (FVM)

- Planteamiento del problema de conservación
- Forma discreta del problema de conservación
- Caso escalar térmico
 - Conducción térmica estacionaria con fuente
 - Conducción térmica transiente con fuente
 - Convección y Conducción térmica transiente con fuente
 - Condiciones de contorno

2 Implementación en 1D

- Difusión con fuente estacionaria
- Términos advectivos
- Discretización temporal en 1D

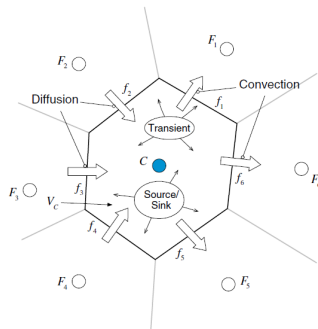
3 OpenFOAM®

- Qué es OpenFOAM®?
- Organización de la librería
- Solvers y utilidades
- Organización de las simulaciones
- Ejemplos en OpenFOAM®
- Trabajos Prácticos

Método de Volúmenes Finitos

- Partimos del Método de los Residuos Ponderados (MRP)
- aplicado a una ecuación de conservación general que consta de 3 términos
 - ▶ término de acumulación (derivada temporal)
 - ▶ término que tiene en cuenta los flujos de las cantidades a conservar
 - ★ flujos convectivos: promovidos por la velocidad
 - ★ flujos difusivos o conductivos: promovidos por la difusión tanto molecular como por turbulencia
 - ▶ términos fuentes

$$\underbrace{\int_{\Omega} \mathbf{W} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} d\Omega}_{ACUMULACION} + \underbrace{\int_{\Omega} \mathbf{W} \nabla \cdot \mathbf{F} d\Omega}_{FLUJOS} = \underbrace{\int_{\Omega} \mathbf{W} \mathbf{Q}}_{FUENTES} \quad (1)$$



Método de Volúmenes Finitos

- Selección de la función de peso \mathbf{W}
- Colocación por subdominios
- los subdominios coinciden con las celdas o volúmenes de control

$$\begin{aligned} W_j(\mathbf{x}) &= 0 & \mathbf{x} &\notin \Omega_j \\ W_j(\mathbf{x}) &= 1 & \mathbf{x} &\in \Omega_j \end{aligned} \quad (2)$$

$$\int_{\Omega_j} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega_j} \nabla \cdot \mathbf{F} d\Omega = \int_{\Omega_j} \mathbf{Q} d\Omega \quad (3)$$

- via el teorema de Gauss-Green o de la divergencia es posible transformar integrales de volumen en integrales de superficie

$$\int_{\Omega_j} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} d\Omega + \oint_{\Gamma_j} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S} = \int_{\Omega_j} \mathbf{Q} d\Omega \quad (4)$$

Método de Volúmenes Finitos

- La variable \mathbf{U} puede ser:
 - ▶ un escalar: temperatura T
 - ▶ un vector:
 - ★ desplazamiento $\mathbf{d} = [d_x, d_y]$ Elasticidad o mecánica de sólidos
 - ★ velocidad $\mathbf{v} = [v_x, v_y]$ Mecánica de fluidos
- los flujos vistos \mathbf{F} pueden ser:
 - ▶ caso escalar: $\mathbf{F} = \mathbf{q} = -\kappa \nabla T$ flujo de calor por conducción
 - ▶ caso vectorial: $\mathbf{F} = \boldsymbol{\sigma}$ = el tensor de tensiones
- Además se agregarán los flujos por transporte convectivo
 - ▶ caso escalar térmico: $\mathbf{F} = \rho C_p \mathbf{v} T$
 - ▶ caso vectorial de la mecánica de los fluidos: $\mathbf{F} = \rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}$ = un tensor de convección

Contenidos

1 Breve introducción teórica al método de los volúmenes finitos (FVM)

- Planteamiento del problema de conservación
- **Forma discreta del problema de conservación**
- Caso escalar térmico
 - Conducción térmica estacionaria con fuente
 - Conducción térmica transiente con fuente
 - Convección y Conducción térmica transiente con fuente
 - Condiciones de contorno

2 Implementación en 1D

- Difusión con fuente estacionaria
- Términos advectivos
- Discretización temporal en 1D

3 OpenFOAM®

- Qué es OpenFOAM®?
- Organización de la librería
- Solvers y utilidades
- Organización de las simulaciones
- Ejemplos en OpenFOAM®
- Trabajos Prácticos

Método de Volúmenes Finitos

$$\int_{\Omega_j} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} d\Omega + \oint_{\Gamma_j} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S} = \int_{\Omega_j} \mathbf{Q} d\Omega \quad (5)$$

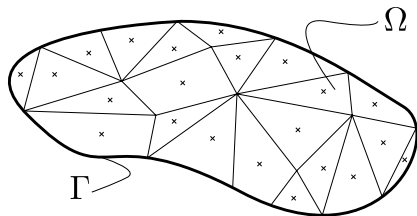


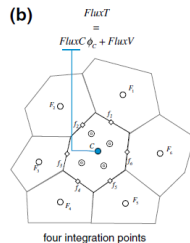
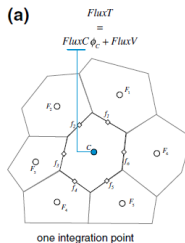
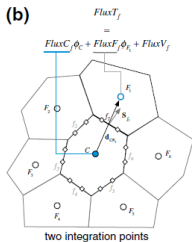
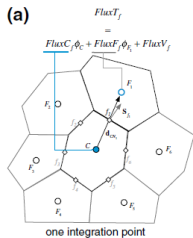
Figure : Dominio discretizado.

- versión semidiscreta, discretizamos solo la dependencia espacial
- integración espacial mediante cuadratura de Gauss

$$\underbrace{\sum_{PG} \frac{\partial \mathbf{U}_j}{\partial t} \Big|_{PG} \omega_{PG} \Omega_j}_{\text{Volumen}} + \underbrace{\sum_{f \in \Gamma_j} \sum_{PG} (\mathbf{F}_f \Big|_{PG} \cdot \mathbf{S}_f) \omega_{PG}}_{\text{Superficie}} = \underbrace{\sum_{PG} \mathbf{Q}_j \Big|_{PG} \omega_{PG} \Omega_j}_{\text{Volumen}} \quad (6)$$

Integración sobre la superficie

Integración sobre el volumen



- en el caso de asumir variaciones lineales de los integrandos con 1 solo punto de Gauss basta, entonces:

$$\frac{\partial \mathbf{U}_j}{\partial t} \Omega_j + \sum_{f \in \Gamma_j} (\mathbf{F}_f \cdot \mathbf{S}_f) = \mathbf{Q}_j \Omega_j \quad (7)$$

Contenidos

1 Breve introducción teórica al método de los volúmenes finitos (FVM)

- Planteamiento del problema de conservación
- Forma discreta del problema de conservación
- **Caso escalar térmico**
 - Conducción térmica estacionaria con fuente
 - Conducción térmica transiente con fuente
 - Convección y Conducción térmica transiente con fuente
 - Condiciones de contorno

2 Implementación en 1D

- Difusión con fuente estacionaria
- Términos advectivos
- Discretización temporal en 1D

3 OpenFOAM®

- Qué es OpenFOAM®?
- Organización de la librería
- Solvers y utilidades
- Organización de las simulaciones
- Ejemplos en OpenFOAM®
- Trabajos Prácticos

Caso escalar térmico

Sea $\phi(x, y, z)$ una magnitud escalar, Ω un dominio en \mathbb{R}^3 y Γ su frontera, podemos escribir una ecuación de conservación de esta cantidad en forma integral como

$$\underbrace{\int_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega}_{\text{temporal}} + \underbrace{\int_{\Omega} \nabla \cdot \vec{f}^{adv} d\Omega}_{\text{convectivo}} + \underbrace{\int_{\Omega} c\phi d\Omega}_{\text{reactivo}} = \underbrace{\int_{\Omega} \nabla \cdot \vec{f}^{dif} d\Omega}_{\text{difusivo}} + \underbrace{\int_{\Omega} q d\Omega}_{\text{fuente}} \quad (8)$$

- ecuación en general lineal
- no estacionaria
- término convectivo dependiente del movimiento del medio material
- término reactivo, proveniente de la ley de Arrhenius, $k = Ae^{-\frac{E_a}{RT}}$
- término difusivo, mecanismo de transporte a escala molecular
- término fuente

Caso escalar térmico

$$\int_{\Omega} W \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \phi) - \nabla \cdot (\Gamma^{\phi} \nabla \phi) - Q^{\phi} \right) d\Omega = 0 \quad (9)$$

$Q^{\phi} = q - c\phi$ fuente generalizada

- colocación por subdominios $W = \chi|_{\Omega_j}$

$$\int_{\Omega_j} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \phi) - \nabla \cdot (\Gamma^{\phi} \nabla \phi) - Q^{\phi} \right) d\Omega = 0 \quad (10)$$

$$\int_{\Omega_j} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} - Q^{\phi} \right) d\Omega + \int_{\Gamma_j} \left((\rho \mathbf{v} \phi) - (\Gamma^{\phi} \nabla \phi) \right) \cdot d\Gamma_j = 0 \quad (11)$$

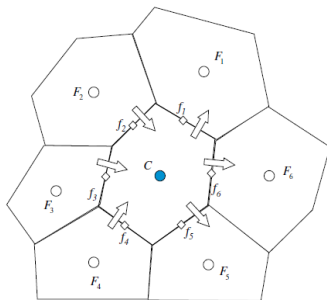
Conducción térmica estacionaria con fuente

$$\int_{\Omega_j} Q^\phi d\Omega + \int_{\Gamma_j} \Gamma^\phi \nabla \phi \cdot d\Gamma_j = 0 \quad (12)$$

integrando usando un punto de Gauss (asumiendo variación lineal)

$$\underbrace{Q_C^\phi |\Omega_C|}_{\text{volumen}} + \sum_{f \in \Gamma_C} \underbrace{(\Gamma_f^\phi (\nabla \phi)_f \cdot \mathbf{S}_f)}_{\mathbf{J}_f^\phi} = 0 \quad (13)$$

Aporte de los flujos



Linealización del flujo

para cada cara del poliedro centrado en C tenemos:

$$\mathbf{J}_f^\phi \cdot \mathbf{s}_f = \mathcal{F}_f^T = \mathcal{F}_f^C \phi_C + \mathcal{F}_f^F \phi_F + \mathcal{V}_f \quad (14)$$

sumando sobre todas las caras

$$\sum_{f \in \Gamma_C} \mathbf{J}_f^\phi \cdot \mathbf{s}_f = \sum_{f \in \Gamma_C} \mathcal{F}_f^T = \sum_{f \in \Gamma_C} \left(\mathcal{F}_f^C \phi_C + \mathcal{F}_f^F \phi_F + \mathcal{V}_f \right) \quad (15)$$

El aporte del término fuente (volumen) es:

$$\mathcal{F}_{\Omega_C}^C \phi_C + \mathcal{V}_{\Omega_C}$$

$$\mathcal{F}_{\Omega_C}^C = 0 \quad \text{no hay dependencia con la variable propia de la celda}$$

$$\mathcal{V}_{\Omega_C} = Q_C^\phi |\Omega_C| \quad (16)$$

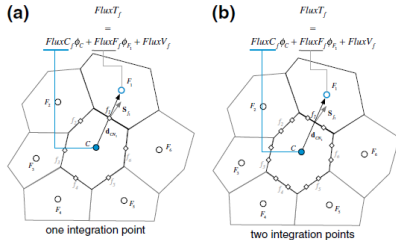
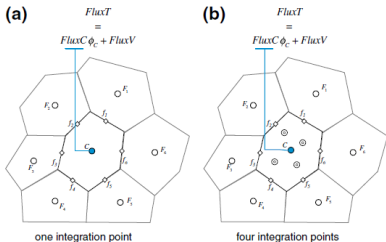
Ecuación de la celda C

En resumen

$$\underbrace{Q_C^\phi |\Omega_C|}_{\mathcal{F}_{\Omega_C}^C \phi_C + \mathcal{V}_{\Omega_C}} + \sum_{f \in \Gamma_C} \left(\underbrace{\mathbf{J}_f^\phi \cdot \mathbf{S}_f}_{\mathcal{F}_f^T = \mathcal{F}_f^C \phi_C + \mathcal{F}_f^F \phi_F + \mathcal{V}_f} \right) = 0 \quad (17)$$

Integración sobre el volumen

Integración sobre la superficie



Ecuación de la celda C

La ecuación de la celda C surge de:

$$\underbrace{Q_C^\phi |\Omega_C|}_{\mathcal{F}_{\Omega_C}^C \phi_C + \mathcal{V}_{\Omega_C}} + \sum_{f \in \Gamma_C} \left(\underbrace{\mathbf{J}_f^\phi \cdot \mathbf{S}_f}_{\mathcal{F}_f^T = \mathcal{F}_f^C \phi_C + \mathcal{F}_f^F \phi_F + \mathcal{V}_f} \right) = 0 \quad (18)$$

que montada en la matriz global del sistema queda como:

$$\begin{aligned} a_C \phi_C + \sum_{F \in \text{NB}_C} a_F \phi_F &= b_C \\ a_C &= \sum_{f \in \Gamma_C} \mathcal{F}_f^C + \mathcal{F}_{\Omega_C}^C \\ a_F &= \sum_{f \in \Gamma_C} \mathcal{F}_f^F \\ b_C &= \sum_{f \in \Gamma_C} \mathcal{V}_f + \mathcal{V}_{\Omega_C} \end{aligned} \quad (19)$$

Tratamiento del término no estacionario

$$\begin{aligned}
 & \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{\Omega_j} \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Gamma_j} \rho \phi \mathbf{v} \cdot d\Gamma_j + \int_{\Omega_j} c \phi d\Omega - \right. \\
 & \quad \left. \int_{\Gamma_j} \Gamma^\phi \nabla \phi \cdot d\Gamma_j - \int_{\Omega_j} Q^\phi d\Omega \right] dt \\
 & \int_t^{t+\Delta t} \underbrace{\left[\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} |\Omega_C| + c \phi_C |\Omega_C| - Q_C^\phi |\Omega_C| \right]}_{\text{Volumen}} dt \\
 & \underbrace{\sum_f \left[((\rho \mathbf{v} \phi)_f - (\Gamma^\phi \nabla \phi)_f) \cdot \mathbf{S}_f \right]}_{\text{Superficie}} dt
 \end{aligned} \tag{20}$$

Tratamiento del término no estacionario

$$\begin{aligned}
 \text{Temporal: } & \int_t^{t+\Delta t} \left[\rho \frac{\partial \phi_C}{\partial t} |\Omega_C| \right] dt \approx \rho |\Omega_C| \left[\frac{\partial \phi_C}{\partial t} \right]^{n+\theta} \Delta t \\
 \text{Reactivo: } & \int_t^{t+\Delta t} \left[c \phi_C |\Omega_C| \right] dt \approx c |\Omega_C| \left[\phi_C \right]^{n+\theta} \Delta t \\
 \text{Fuente: } & \int_t^{t+\Delta t} \left[Q_C^\phi |\Omega_C| \right] dt \approx \left[Q_C^\phi \right]^{n+\theta} \Delta t \\
 \text{Flujos: } & \int_t^{t+\Delta t} \left[\sum_f ((\rho \mathbf{v} \phi)_f - (\Gamma^\phi \nabla \phi)_f) \cdot \mathbf{S}_f \right] dt \approx \\
 & \approx \left[\sum_f ((\rho \mathbf{v} \phi)_f - (\Gamma^\phi \nabla \phi)_f) \cdot \mathbf{S}_f \right]^{n+\theta} \Delta t
 \end{aligned} \tag{21}$$

Tratamiento del término no estacionario

- Método explícito Forward Euler ($\theta = 0$)

Temporal:
$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\rho \frac{\partial \phi_C}{\partial t} |\Omega_C| \right] dt \approx \rho |\Omega_C| \left[\frac{\partial \phi_C}{\partial t} \right]^{n+\theta} \Delta t =$$

$$= \rho |\Omega_C| \left[\frac{\phi_C^{n+1} - \phi_C^n}{\Delta t} \right] \Delta t$$

Reactivo:
$$\int_t^{t+\Delta t} \left[c \phi_C |\Omega_C| \right] dt \approx c |\Omega_C| \left[\phi_C \right]^{n+\theta} \Delta t =$$

$$= c |\Omega_C| \left[\phi_C^n \right] \Delta t$$
 (22)

Fuente:
$$\int_t^{t+\Delta t} \left[Q_C^\phi |\Omega_C| \right] dt \approx |\Omega_C| \left[Q_C^\phi \right]^{n+\theta} \Delta t =$$

$$= |\Omega_C| \left[Q_C^{\phi,n} \right] \Delta t$$

Tratamiento del término no estacionario

Flujos:

$$\begin{aligned}
 \int_t^{t+\Delta t} \left[\sum_f ((\rho \mathbf{v} \phi)_f - (\Gamma^\phi \nabla \phi)_f) \cdot \mathbf{S}_f \right] dt &\approx \\
 &\approx \left[\sum_f ((\rho \mathbf{v} \phi)_f - (\Gamma^\phi \nabla \phi)_f) \cdot \mathbf{S}_f \right]^{n+\theta} \Delta t \\
 &= \sum_f (\rho \mathbf{v} \phi_f^n - \Gamma^\phi \nabla \phi_f^n) \cdot \mathbf{S}_f \Delta t
 \end{aligned} \tag{23}$$

$$\phi_f^n = f(\phi_C^n, \phi_F^n)$$

Tratamiento del término no estacionario

- Método implícito Backward Euler ($\theta = 1$)

$$\begin{aligned}
 \text{Temporal: } \int_t^{t+\Delta t} \left[\rho \frac{\partial \phi_C}{\partial t} |\Omega_C| \right] dt &\approx \rho |\Omega_C| \left[\frac{\partial \phi_C}{\partial t} \right]^{n+\theta} \Delta t = \\
 &= \rho |\Omega_C| \left[\frac{\phi_C^{n+1} - \phi_C^n}{\Delta t} \right] \Delta t \\
 \text{Reactivo: } \int_t^{t+\Delta t} \left[c \phi_C |\Omega_C| \right] dt &\approx c |\Omega_C| \left[\phi_C \right]^{n+\theta} \Delta t = \\
 &= c |\Omega_C| \left[\phi_C^{n+1} \right] \Delta t \\
 \text{Fuente: } \int_t^{t+\Delta t} \left[Q_C^\phi |\Omega_C| \right] dt &\approx |\Omega_C| \left[Q_C^\phi \right]^{n+\theta} \Delta t = \\
 &= |\Omega_C| \left[Q_C^{\phi, n+1} \right] \Delta t
 \end{aligned} \tag{24}$$

Tratamiento del término no estacionario

Flujos:

$$\begin{aligned}
 \int_t^{t+\Delta t} \left[\sum_f ((\rho \mathbf{v} \phi)_f - (\Gamma^\phi \nabla \phi)_f) \cdot \mathbf{S}_f \right] dt &\approx \\
 &\approx \left[\sum_f ((\rho \mathbf{v} \phi)_f - (\Gamma^\phi \nabla \phi)_f) \cdot \mathbf{S}_f \right]^{n+\theta} \Delta t \\
 &= \sum_f (\rho \mathbf{v} \phi_f^{n+1} - \Gamma^\phi \nabla \phi_f^{n+1}) \cdot \mathbf{S}_f \Delta t
 \end{aligned} \tag{25}$$

$$\phi_f^{n+1} = f(\phi_C^{n+1}, \phi_F^{n+1})$$

Tratamiento del término no estacionario

- Método semi-implícito Crank-Nicholson ($\theta = 1/2$)

$$\begin{aligned}
 \text{Temporal: } \int_t^{t+\Delta t} \left[\rho \frac{\partial \phi_C}{\partial t} |\Omega_C| \right] dt &\approx \rho |\Omega_C| \left[\frac{\partial \phi_C}{\partial t} \right]^{n+\theta} \Delta t = \\
 &= \rho |\Omega_C| \left[\frac{\phi_C^{n+1} - \phi_C^n}{\Delta t} \right] \Delta t \\
 \text{Reactivo: } \int_t^{t+\Delta t} \left[c \phi_C |\Omega_C| \right] dt &\approx c |\Omega_C| \left[\phi_C \right]^{n+\theta} \Delta t = \\
 &= c |\Omega_C| \left[\phi_C^{n+1/2} \right] \Delta t \\
 \text{Fuente: } \int_t^{t+\Delta t} \left[Q_C^\phi |\Omega_C| \right] dt &\approx |\Omega_C| \left[Q_C^\phi \right]^{n+\theta} \Delta t = \\
 &= |\Omega_C| \left[Q_C^{\phi, n+1/2} \right] \Delta t
 \end{aligned} \tag{26}$$

Tratamiento del término no estacionario

Flujos:
$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\sum_f ((\rho \mathbf{v} \phi)_f - (\Gamma \phi \nabla \phi)_f) \cdot \mathbf{S}_f \right] dt \approx$$

$$\approx \left[\sum_f ((\rho \mathbf{v} \phi)_f - (\Gamma \phi \nabla \phi)_f) \cdot \mathbf{S}_f \right]^{n+\theta} \Delta t$$

$$= \sum_f (\rho \mathbf{v} \phi_f^{n+1/2} - \Gamma \phi \nabla \phi_f^{n+1/2}) \cdot \mathbf{S}_f \Delta t \quad (27)$$

$$\phi_f^{n+1/2} = f(\phi_C^{n+1/2}, \phi_F^{n+1/2})$$

$$\phi_C^{n+1/2} = 1/2 \phi_C^n + 1/2 \phi_C^{n+1}$$

• LIMITES DE ESTABILIDAD TEMPORAL

Courant number : $Co = \frac{\Delta t |\mathbf{v}|}{h}$ (28)

Fourier number : $Fo = \frac{\Delta t \alpha}{h^2}$

Tratamiento del término convectivo

$$\sum_f (\rho \mathbf{v} \phi)_f \cdot \mathbf{S}_f = \sum_f \underbrace{(\rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{S}_f)}_{\text{Flujo másico [kg/seg]}} \phi_f \quad (29)$$

$$\phi_f = f(\phi_C, \phi_F)$$

• LIMITES DE ESTABILIDAD ESPACIAL PECLET

Peclet number: $Pe^h = \frac{h|\mathbf{v}|}{\alpha}$ (30)

Difusión cinemática [m^2/sec]: $\alpha = \Gamma \phi$

Condiciones de contorno

- Las condiciones de contorno no general una ecuación adicional al sistema de ecuaciones
- sirven para calcular los flujos sobre aquellas caras pertenecientes al contorno
- las caras en general se dividen en 2 grupos:
 - ▶ caras internas, poseen 2 celdas que la contienen (owner & neighbour)
 - ▶ caras de contorno, poseen solo 1 celda (owner)
- las condiciones de contorno hay de distintos tipos: podríamos separarlas en matemáticas y físicas
- las físicas se derivan de las matemáticas pero actuando en forma combinada sobre todos los campos, ej: entradas/salidas, paredes deslizantes y no deslizantes, simetría , etc
- las matemáticas son:
 - ▶ Dirichlet
 - ▶ Neumann
 - ▶ mixtas o Robin

Condición de contorno Dirichlet

$$\phi_b = \phi_{b,specified}$$

caso convectivo

$$\mathbf{J}_b^{C,\phi} \cdot \mathbf{S}_b = (\rho \mathbf{v} \phi)_b \cdot \mathbf{S}_b =$$

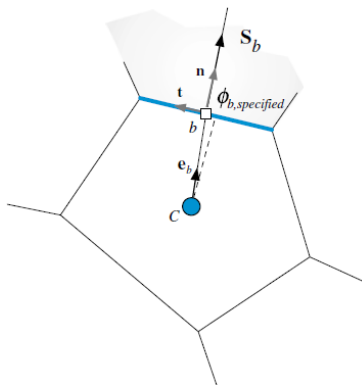
$$= \dot{m}_f \phi_{b,specified}$$

(31)

caso difusivo

$$\mathbf{J}_b^{D,\phi} \cdot \mathbf{S}_b = (\Gamma^\phi \nabla \phi)_b \cdot \mathbf{S}_b \approx$$

$$\approx \Gamma_b^\phi \frac{(\phi_{b,specified} - \phi_C)}{|\mathbf{d}_{Cb} \cdot \mathbf{S}_b|} |\mathbf{S}_b|^2$$



Condición de contorno Dirichlet

$$\phi_b = \phi_{b,specified}$$

$\mathcal{F}_{f=b}^F = 0$ (no hay vecino por una cara de borde a la celda C).

caso convectivo

$$\mathcal{F}_{f=b}^C = 0$$

$$\mathcal{V}_{f=b} = \dot{m}_f \phi_{b,specified}$$

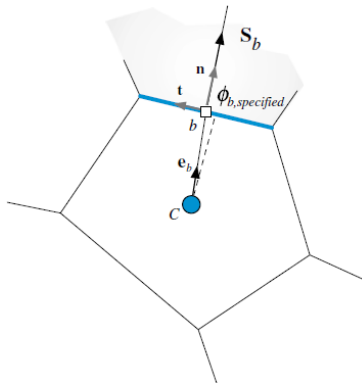
caso difusivo

$$\psi = \Gamma_b \frac{1}{|\mathbf{d}_{Cb} \cdot \mathbf{S}_b|} |\mathbf{S}_b|^2$$

$$\mathcal{F}_{f=b}^C = -\psi$$

$$\mathcal{V}_{f=b} = \psi \phi_{b,specified}$$

(32)



Condición de contorno Neumann

$$(\Gamma \nabla \phi)_b \cdot \frac{\mathbf{S}_b}{|\mathbf{S}_b|} = q_{b,specified}$$

caso difusivo

$$\mathbf{J}_b^{D,\phi} \cdot \mathbf{S}_b = \mathbf{J}_b^{D,\phi} \cdot \frac{\mathbf{S}_b}{|\mathbf{S}_b|} |\mathbf{S}_b| = q_{b,specified} |\mathbf{S}_b|$$

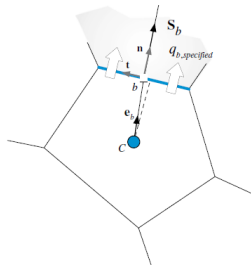
caso convectivo

a partir de una expansión en Taylor

$$\phi_C = \phi_b + (\nabla \phi)_b \cdot (\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_C) + O(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_C)^2$$

$$\phi_b = \phi_C - (\nabla \phi)_b \cdot (\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_C) \approx \phi_C - (\nabla \phi)_b \cdot \mathbf{d}_n$$

$$\mathbf{J}_b^{C,\phi} \cdot \mathbf{S}_b = (\rho \mathbf{v} \phi)_b \cdot \mathbf{S}_b \approx \dot{m}_f (\phi_C - (\nabla \phi)_b \cdot \mathbf{d}_n) = \dot{m}_f \left(\phi_C - \frac{q_{b,specified}}{\Gamma_b} |\mathbf{d}_n| \right) \quad (33)$$



Condición de contorno Neumann

$$(\Gamma \nabla \phi)_b \cdot \frac{\mathbf{S}_b}{|\mathbf{S}_b|} = q_{b,specified}$$

$\mathcal{F}_{f=b}^F = 0$ (no hay vecino por una cara de borde a la celda C).

caso difusivo

$$\mathcal{F}_{f=b}^C = 0$$

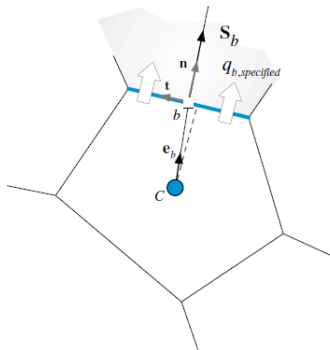
$$\mathcal{V}_{f=b} = q_{b,specified} |\mathbf{S}_b|$$

caso convectivo

$$\mathcal{F}_{f=b}^C = \dot{m}_f$$

$$\mathcal{V}_{f=b} = -\dot{m}_f \frac{q_{b,specified}}{\Gamma_b} |\mathbf{d}_n|$$

(34)



Contenidos

1 Breve introducción teórica al método de los volúmenes finitos (FVM)

- Planteamiento del problema de conservación
- Forma discreta del problema de conservación
- Caso escalar térmico
 - Conducción térmica estacionaria con fuente
 - Conducción térmica transiente con fuente
 - Convección y Conducción térmica transiente con fuente
 - Condiciones de contorno

2 Implementacion en 1D

- Difusión con fuente estacionaria
- Términos advectivos
- Discretización temporal en 1D

3 OpenFOAM®

- Qué es OpenFOAM®?
- Organización de la librería
- Solvers y utilidades
- Organización de las simulaciones
- Ejemplos en OpenFOAM®
- Trabajos Prácticos

Contenidos

1 Breve introducción teórica al método de los volúmenes finitos (FVM)

- Planteamiento del problema de conservación
- Forma discreta del problema de conservación
- Caso escalar térmico
 - Conducción térmica estacionaria con fuente
 - Conducción térmica transiente con fuente
 - Convección y Conducción térmica transiente con fuente
 - Condiciones de contorno

2 Implementacion en 1D

- Difusión con fuente estacionaria
- Términos advectivos
- Discretización temporal en 1D

3 OpenFOAM®

- Qué es OpenFOAM®?
- Organización de la librería
- Solvers y utilidades
- Organización de las simulaciones
- Ejemplos en OpenFOAM®
- Trabajos Prácticos

Conducción del calor con fuente en 1D

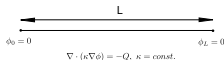


Diagram of a 1D domain of length L with boundary conditions $\phi_0 = 0$ and $\phi_L = 0$. The governing equation is $\nabla \cdot (\kappa \nabla \phi) = -Q$, where $\kappa = \text{const.}$

Figure : Difusión estacionaria.

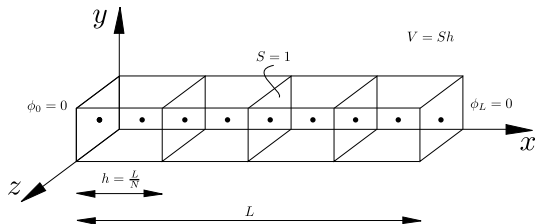
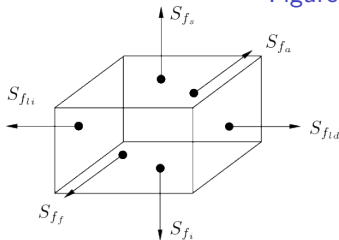


Figure : Discretización cuasi 1D



s : superior
i : inferior
a : atras
f : frente
li : lateralizquierda
ld : lateral derecha

$$-S_{f_{li}} = S_{f_{ld}} = (S; 0; 0), S_{f_s} = -S_{f_i} = (0; S; 0), S_{f_f} = -S_{f_a} = (0; 0; S)$$

Conducción del calor con fuente en 1D

$$Q_C^\phi \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh} + \sum_{f \in \Gamma_C} \underbrace{(\Gamma_f^\phi (\nabla \phi)_f \cdot \mathbf{S}_f)}_{\mathbf{J}_f^\phi} \underbrace{\pm S_i}_{\pm S_i} = 0 \quad (35)$$

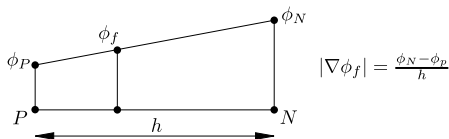


Figure : Interpolación de los gradientes en 1D sobre las caras. $P = C$

$$(\nabla \phi)_f = \left(\frac{\phi_N - \phi_P}{h}; 0; 0 \right). \quad (36)$$

Conducción del calor con fuente en 1D

sobre $f = ld \rightarrow N = E$ y $f = li \rightarrow N = W$

$$\begin{aligned}
 Q_C^\phi \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh} + \sum_{f=li,ld} \underbrace{(\Gamma_f^\phi(\nabla\phi)_f \cdot \mathbf{S}_f)}_{\mathbf{J}_f^\phi} \underbrace{\pm \mathbf{S}_i}_{\pm Si} &= 0 \\
 Q_C^\phi S h + \Gamma_{ld}^\phi(\nabla\phi)_{ld} \cdot \mathbf{i} S + \Gamma_{li}^\phi(\nabla\phi)_{li} \cdot (-\mathbf{i}) S &= 0 \\
 Q_C^\phi S h + \Gamma_{ld}^\phi \frac{\phi_E - \phi_C}{h} S - \Gamma_{li}^\phi \frac{\phi_C - \phi_W}{h} S &= 0
 \end{aligned} \tag{37}$$

Celdas interiores $C = 2$ y $C = 3$

$$\begin{aligned}
 Q_2^\phi S h + \Gamma_+^\phi S \frac{\phi_3 - \phi_2}{h} - \Gamma_-^\phi S \frac{\phi_2 - \phi_1}{h} &= 0 \\
 Q_3^\phi S h + \Gamma_+^\phi S \frac{\phi_4 - \phi_3}{h} - \Gamma_-^\phi S \frac{\phi_3 - \phi_2}{h} &= 0
 \end{aligned} \tag{38}$$

Conducción del calor con fuente en 1D

Celdas del contorno $C = 1$ y $C = 4$

$$\begin{aligned}
 Q_1^\phi S h + \Gamma_+^\phi S \frac{\phi_2 - \phi_1}{h} - \Gamma_-^\phi \frac{\phi_1 - \phi_0}{h/2} S &= 0 \\
 Q_4^\phi S h + \Gamma_+^\phi S \frac{\phi_L - \phi_4}{h/2} - \Gamma_-^\phi S \frac{\phi_4 - \phi_3}{h} &= 0
 \end{aligned} \tag{39}$$

Asumiendo $\Gamma_+^\phi = \Gamma_-^\phi = \kappa \quad \forall f \in \Gamma_C$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\kappa}{h} (-3\phi_1 + \phi_2) = -Qh - \frac{2\kappa}{h} \phi_0 \\ \frac{\kappa}{h} (\phi_1 - 2\phi_2 + \phi_3) = -Qh \\ \frac{\kappa}{h} (\phi_2 - 2\phi_3 + \phi_4) = -Qh \\ \frac{\kappa}{h} (\phi_3 - 3\phi_4) = -Qh - \frac{2\kappa}{h} \phi_L \end{array} \right. , \tag{40}$$

Contenidos

1 Breve introducción teórica al método de los volúmenes finitos (FVM)

- Planteamiento del problema de conservación
- Forma discreta del problema de conservación
- Caso escalar térmico
 - Conducción térmica estacionaria con fuente
 - Conducción térmica transiente con fuente
 - Convección y Conducción térmica transiente con fuente
 - Condiciones de contorno

2 Implementacion en 1D

- Difusión con fuente estacionaria
- Términos advectivos
- Discretización temporal en 1D

3 OpenFOAM®

- Qué es OpenFOAM®?
- Organización de la librería
- Solvers y utilidades
- Organización de las simulaciones
- Ejemplos en OpenFOAM®
- Trabajos Prácticos

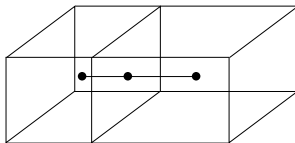
$$Q_C^\phi \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh} + \sum_{f=li,ld} \underbrace{((\Gamma_f^\phi \nabla \phi - \mathbf{v} \phi)_f \cdot \mathbf{S}_f)}_{\mathbf{J}_f^\phi = \mathbf{J}_f^{D,\phi} + \mathbf{J}_f^{C,\phi}} \underbrace{\pm \mathbf{S}_i}_{\pm \mathbf{S}_i} = 0 \quad (41)$$

$$Q_C^\phi S h + (\Gamma^\phi \nabla \phi - \mathbf{v} \phi)_{ld} \cdot \mathbf{i} S + (\Gamma^\phi \nabla \phi - \mathbf{v} \phi)_{li} \cdot (-\mathbf{i}) S = 0$$

$$Q_C^\phi S h + \Gamma_{ld}^\phi \frac{\phi_E - \phi_C}{h} S - \Gamma_{li}^\phi \frac{\phi_C - \phi_W}{h} S - v(\phi_{ld} - \phi_{li}) = 0$$

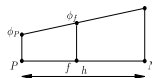
- Central Difference (CD)

$$\phi_f = f_x \phi_C + (1 - f_x) \phi_N \quad (42)$$



- Upwind Difference (UD)

$$\phi_f = \max(v, 0) \phi_C + \max(-v, 0) \phi_N \quad (43)$$



$$f_x = \overline{fN} / \overline{PN}$$

Figure : Aproximación para ϕ_f .

Contenidos

1 Breve introducción teórica al método de los volúmenes finitos (FVM)

- Planteamiento del problema de conservación
- Forma discreta del problema de conservación
- Caso escalar térmico
 - Conducción térmica estacionaria con fuente
 - Conducción térmica transiente con fuente
 - Convección y Conducción térmica transiente con fuente
 - Condiciones de contorno

2 Implementacion en 1D

- Difusión con fuente estacionaria
- Términos advectivos
- Discretización temporal en 1D

3 OpenFOAM®

- Qué es OpenFOAM®?
- Organización de la librería
- Solvers y utilidades
- Organización de las simulaciones
- Ejemplos en OpenFOAM®
- Trabajos Prácticos

Problemas no estacionarios en 1D

- (a) modelos semidiscretizados: solo discretizamos las derivadas espaciales quedando un sistema de ODEs a resolver
- (b) modelos de discretización total: también se discretiza las derivadas temporales por alguna técnica.

$$\int_{\Omega_j} \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Gamma_j} \rho \phi \mathbf{v} \cdot d\Gamma_j + \int_{\Omega_j} c \phi d\Omega = \int_{\Gamma_j} \Gamma^\phi \nabla \phi \cdot d\Gamma_j + \int_{\Omega_j} Q^\phi d\Omega$$

$$(a) \quad \rho \frac{d\phi_C}{dt} \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh} = \text{RHS}(t, \phi_C, \phi_F, \dots) \quad \text{ODE solvers}$$

$$\begin{aligned} \text{RHS} = & \sum_{f=li,ld} \underbrace{((\Gamma^\phi \nabla \phi)_f^{n+\theta})}_{\mathbf{J}_f^{D,\phi}} \cdot \underbrace{\mathbf{S}_f}_{\pm Si} + Q_C^\phi \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh} - \sum_{f=li,ld} \underbrace{((\rho \mathbf{v} \phi)_f^{n+\theta})}_{\mathbf{J}_f^{C,\phi}} \cdot \underbrace{\mathbf{S}_f}_{\pm Si} - \\ & c \phi_C^{n+\theta} \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh} \end{aligned}$$

(44)

$$\begin{aligned}
 (b) \quad & \rho \frac{\phi_C^{n+1} - \phi_C^n}{\Delta t} \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh} + \sum_{f=li,ld} \underbrace{((\rho \mathbf{v} \phi)_f^{n+\theta})}_{\mathbf{J}_f^{C,\phi}} \cdot \underbrace{(\mathbf{S}_f)}_{\pm Si} + c \phi_C^{n+\theta} \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh} = \\
 & \sum_{f=li,ld} \underbrace{((\Gamma^\phi \nabla \phi)_f^{n+\theta})}_{\mathbf{J}_f^{D,\phi}} \cdot \underbrace{(\mathbf{S}_f)}_{\pm Si} + Q_C^\phi \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh}
 \end{aligned} \tag{45}$$

$$\phi^{n+\theta} = \theta \phi^{n+1} + (1 - \theta) \phi^n$$

$\theta = 0$ método explícito

$\theta = 1$ método implícito

$\theta = 1/2$ método Crank Nicholson

Contenidos

1 Breve introducción teórica al método de los volúmenes finitos (FVM)

- Planteamiento del problema de conservación
- Forma discreta del problema de conservación
- Caso escalar térmico
 - Conducción térmica estacionaria con fuente
 - Conducción térmica transiente con fuente
 - Convección y Conducción térmica transiente con fuente
 - Condiciones de contorno

2 Implementación en 1D

- Difusión con fuente estacionaria
- Términos advectivos
- Discretización temporal en 1D

3 OpenFOAM®

- Qué es OpenFOAM®?
- Organización de la librería
- Solvers y utilidades
- Organización de las simulaciones
- Ejemplos en OpenFOAM®
- Trabajos Prácticos

Contenidos

1 Breve introducción teórica al método de los volúmenes finitos (FVM)

- Planteamiento del problema de conservación
- Forma discreta del problema de conservación
- Caso escalar térmico
 - Conducción térmica estacionaria con fuente
 - Conducción térmica transiente con fuente
 - Convección y Conducción térmica transiente con fuente
 - Condiciones de contorno

2 Implementación en 1D

- Difusión con fuente estacionaria
- Términos advectivos
- Discretización temporal en 1D

3 OpenFOAM®

- Qué es OpenFOAM®?
- Organización de la librería
- Solvers y utilidades
- Organización de las simulaciones
- Ejemplos en OpenFOAM®
- Trabajos Prácticos

Qué es OpenFOAM®

- OpenFOAM® significa Open Source Field Operation and Manipulation.
- OpenFOAM® es una librería en C++ usada para resolver PDEs y ODEs
- Provee varios ready-to-use métodos numéricos y utilidades para pre-processing y post-processing.
- Tiene licencia GNU General Public License (GPL). Lo cual lo hace de libre disponibilidad y provisto de código fuente.
- Tiene extensivas capacidades en multiphysics, a saber:
 - ▶ computational fluid dynamics (CFD),
 - ▶ conjugate heat transfer (CHT),
 - ▶ mass transfer,
 - ▶ stress analysis,
 - ▶ fluid-structure interaction,
 - ▶ chemical reactions, combustion,
 - ▶ acoustics,
 - ▶ electromagnetics,
 - ▶ rigid body motion, etc

OpenFOAM® is an excellent piece of C++ and software engineering. Decent piece of CFD code.

H. Jasak

- Tiene capacidades de ejecución en paralelo sobre computadoras de memoria compartida como distribuida.
- Gratis.
- Esta bajo activo y constante desarrollo y sus capacidades emulan otros paquetes CFD comerciales
- Cuenta con una amplia comunidad de usuarios en el mundo tanto en la industria como en la academia y en R&D

Qué es OpenFOAM®

Discretización e implementación

- Solver basado en Finite Volume Method (FVM).
- Emplea mallas no estructuradas (en general) poliédricas y las variables están colocadas en las celdas.
- Basado sobre aproximaciones de segundo orden en el espacio y en el tiempo con muchos esquemas de discretización disponibles.
- Acoplamiento Pressure-velocity via segregated methods (SIMPLE and PISO).
- Lagrangian particle tracking.
- Dynamic mesh handling.
- Adaptive mesh refinement.
- Massive parallelism through domain decomposition.
- Todos sus componentes implementados en una librería fácil de re-utilizar

Qué es OpenFOAM®

Estructura básica de los solvers

Los solvers están basados en el concepto de **Equation mimicking** Es una sintaxis obtenida mediante el uso de **object oriented programming (OOP)** tal como **herencia, clases templatizadas, funciones virtuales y sobrecarga de operadores** que le permite a los usuarios crear solvers personalizados con gran facilidad para ser reutilizados. Por ejemplo:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \phi \mathbf{U} - \nabla \cdot \mu \nabla \mathbf{U} = -\nabla p \quad (46)$$

```
fvm::ddt(rho, U)
+ fvm::div(phi, U)
- fvm::laplacian(mu, U)
==
- fvc::grad(p)
```

HAY UNA CORRESPONDENCIA CLARA ENTRE EL MODELO MATEMATICO Y LA IMPLEMENTACION

Qué es OpenFOAM®

Estructura básica

- El diseño apunta hacia la re-utilización del código
- OpenFOAM® está ensamblado a partir de componentes:
 - ▶ Librerías fundamentales conteniendo vectores, tensores, álgebra de campos, manipuleo de mallas, esquemas de discretización, aplicación de boundary conditions, solvers lineales, etc.
 - ▶ Librería de modelos físicos: thermo-physical models (liquids and gases), viscosity models, chemical reactions interface.
 - ▶ Utilidades: importar mallas, manipular mallas, procesamiento en paralelo, post-processing y manipuleo de resultados.
 - ▶ Solvers escritos de forma tal de garantizar optimización y eficiencia.
 - ▶ Reducida cantidad de líneas de código de forma de darle legibilidad apuntando al trabajo corporativo.
- Posibilidad de vincularlo con extensiones planteadas por los usuarios por fuera y un análisis al vuelo de datos.
- Model-to-Model interaction a través de interfaces comunes.

Contenidos

1 Breve introducción teórica al método de los volúmenes finitos (FVM)

- Planteamiento del problema de conservación
- Forma discreta del problema de conservación
- Caso escalar térmico
 - Conducción térmica estacionaria con fuente
 - Conducción térmica transiente con fuente
 - Convección y Conducción térmica transiente con fuente
 - Condiciones de contorno

2 Implementación en 1D

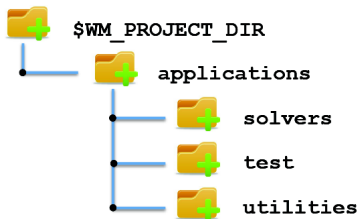
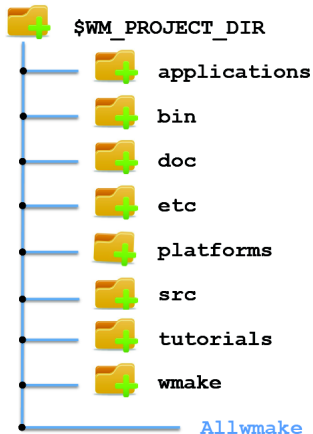
- Difusión con fuente estacionaria
- Términos advectivos
- Discretización temporal en 1D

3 OpenFOAM®

- Qué es OpenFOAM®?
- Organización de la librería
- Solvers y utilidades
- Organización de las simulaciones
- Ejemplos en OpenFOAM®
- Trabajos Prácticos

Qué es OpenFOAM®

Estructura de directorios para desarrollo



Qué es OpenFOAM®

Estructura de directorios para desarrollo



- **finiteVolume.** Esta librería provee todas las clases necesarias para la discretización en FVM, such as the fvMesh class, finite volume discretization operadores como (divergence, laplacian, gradient, fvc/fvm y otros), y las boundary conditions (fields/fvPatchFields). En el subdirectorio *lnInclude* se encuentra el archivo *fvCFD.H*, muy incluido en varias aplicaciones.
- **OpenFOAM.** Esta librería incluye definiciones de los contenedores usados por las operaciones, las definiciones de los campos, la declaración de la malla y sus *zones and sets*.
- **turbulenceModels,** contiene los modelos de turbulencia.

Qué es OpenFOAM®

Estructura de directorios para desarrollo



- visite todas las restantes subcarpetas que cuelgan del directorio, como la bin, doc, etc, y especialmente la de tutoriales como luego veremos.
- El directorio *doc* contiene la documentación de OpenFOAM®,
 - ▶ user guide, [\\$WM_PROJECT_DIR/doc/Guides-a4/UserGuide.pdf](#)
 - ▶ programmer's guide
[\\$WM_PROJECT_DIR/doc/Guides-a4/ProgrammersGuide.pdf](#)
 - ▶ Doxygen en html format. [firefox file://\\$WM_PROJECT_DIR/doc/Doxygen/html/index.html](#)
 - ★ para obtener el documento Doxygen compile tipenado *Allwmake doc* en el directorio `$WM_PROJECT_DIR`.
 - ★ o acceda al Doxygen desde internet.
<http://www.openfoam.org/docs/cpp/>

Contenidos

1 Breve introducción teórica al método de los volúmenes finitos (FVM)

- Planteamiento del problema de conservación
- Forma discreta del problema de conservación
- Caso escalar térmico
 - Conducción térmica estacionaria con fuente
 - Conducción térmica transiente con fuente
 - Convección y Conducción térmica transiente con fuente
 - Condiciones de contorno

2 Implementación en 1D

- Difusión con fuente estacionaria
- Términos advectivos
- Discretización temporal en 1D

3 OpenFOAM®

- Qué es OpenFOAM®?
- Organización de la librería
- **Solvers y utilidades**
- Organización de las simulaciones
- Ejemplos en OpenFOAM®
- Trabajos Prácticos

Dónde encontrar los solvers y las utilidades ?

In \$FOAM_SOLVERS (usar el alias `so/` para ir a ese directorio)

- `basic`
- `combustion`
- `compressible`
- `discreteMethods`
- `DNS`
- `electromagnetics`
- `financial`
- `heatTransfer`
- `incompressible`
- `lagrangian`
- `multiphase`
- `stressAnalysis`

El subdirectorio *basic* contiene los siguientes solvers:

- `laplacianFoam`,
 - ▶ editar el archivo `>> gedit basic/laplacianFoam/laplacianFoam.C`
 - ▶ Description: Solves a simple Laplace equation, e.g. for thermal diffusion in a solid.
- `potentialFoam`
 - ▶ editar el archivo `>> gedit basic/potentialFoam/potentialFoam.C`
 - ▶ Description: Simple potential flow solver which can be used to generate starting fields for full Navier-Stokes codes.
- `scalarTransportFoam`
 - ▶ editar el archivo `>> gedit basic/scalarTransportFoam/scalarTransportFoam.C`
 - ▶ Description: Solves a transport equation for a passive scalar

Solvers para flujo de fluidos

El subdirectorio *incompressible* contiene varios solvers entre los cuales destacamos aquí a los siguiente:

- icoFoam,
 - ▶ editar el archivo >> `gedit incompressible/icoFoam/icoFoam.C:`
 - ▶ Description: Transient solver for incompressible, laminar flow of Newtonian fluids.
- simpleFoam
 - ▶ editar el archivo >> `gedit incompressible/simpleFoam/simpleFoam.C:`
 - ▶ Description: Steady-state solver for incompressible, turbulent flow.
- pimpleFoam
 - ▶ editar el archivo >> `gedit incompressible/pimpleFoam/pimpleFoam.C:`
 - ▶ Description: Large time-step transient solver for incompressible flow using PIMPLE (PISO+SIMPLE) algorithm. Sub-models include:
 - ★ turbulence modelling, i.e. laminar, RAS or LES
 - ★ run-time selectable finite volume options, e.g. MRF, explicit porosity

En `$FOAM_UTILITIES` (use el alias *util*) podrá encontrar el código fuente de las utilidades disponibles en la instalación de OpenFOAM®.

- mesh
- miscellaneous
- parallelProcessing
- postProcessing
- preProcessing
- surface
- thermophysical

Utilidades para MESH

A modo de ejemplo veamos que posibles utilidades asociadas con el manejo de mallas (**mesh**) tenemos:

- conversion
- advanced
- manipulation
- generation, con subdirectorios:
 - ▶ blockMesh
 - ▶ extrude
 - ▶ extrude2DMesh
 - ▶ foamyHexMesh
 - ▶ foamyQuadMesh
 - ▶ snappyHexMesh

Como siempre, tambien dentro de los subdirectorios que cuelgan de utilities encontrará archivos *.C que muestran el código fuente de la utilidad, asi como una breve descripción de su funcionalidad.

Por ejemplo para snappyHexMesh/snappyHexMesh.C:

Description: Automatic split hex mesher. Refines and snaps to surface.

Utilidades para POSTPROCESSING

A modo de ejemplo veamos que posibles utilidades asociadas con el postproceso de campos, en este caso la velocidad, (`postProcessing/velocityField`) tenemos:

- Co
- enstrophy
- flowType
- Lambda2
- Mach
- Pe
- Q
- streamFunction
- uprime
- vorticity

Por ejemplo para Q/Q.C:

Calculates and writes the second invariant of the velocity gradient tensor.

$$Q = 0.5 * [\text{sqr}(\text{tr}(\text{grad}U)) - \text{tr}((\text{grad}U) \& (\text{grad}U))][1/s^2]$$

Contenidos

1 Breve introducción teórica al método de los volúmenes finitos (FVM)

- Planteamiento del problema de conservación
- Forma discreta del problema de conservación
- Caso escalar térmico
 - Conducción térmica estacionaria con fuente
 - Conducción térmica transiente con fuente
 - Convección y Conducción térmica transiente con fuente
 - Condiciones de contorno

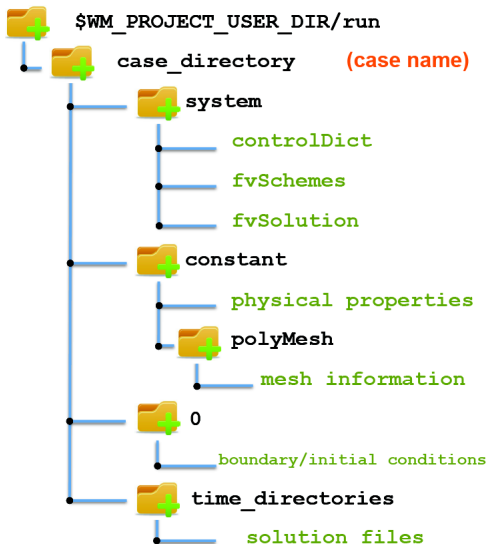
2 Implementación en 1D

- Difusión con fuente estacionaria
- Términos advectivos
- Discretización temporal en 1D

3 OpenFOAM®

- Qué es OpenFOAM®?
- Organización de la librería
- Solvers y utilidades
- **Organización de las simulaciones**
- Ejemplos en OpenFOAM®
- Trabajos Prácticos

Como están organizadas las simulaciones



case_directory: path to the case, often located in `$WM_PROJECT_USER_DIR/run`

system: contains run-time control and solver numerics.

constant: contains physical properties and turbulence modeling properties and so on.

constant/polyMesh: contains the polyhedral mesh information.

0: contains boundary conditions and initial conditions.

time_directories: contains the solution and derived fields.

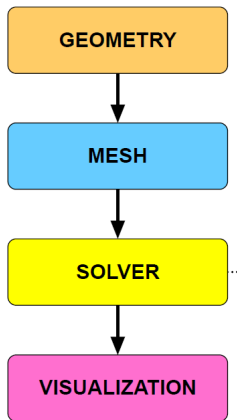
REMEMBER



You always run the solvers and utilities in the the **top level** of the case directory (the directory with the case name).

Not in the directory system, not in the directory constant, not in the directory 0.

Flujo de trabajo



- **Geometry**: a partir de un CAD, una STL, o de datos crudos procesables por algun mallador
- **Mesh**: a partir de
 - ▶ generador externo, ANSA, GID, GAMBITT, Tgrid, etc
 - ▶ generador como utilidad de OpenFOAM[®], blockMesh, snappyHexMesh, otros
- **Solver**: seleccionable entre los posibles o adaptado a nuestras necesidades
- **Visualization**: postproceso seleccionado de las utilidades de OpenFOAM[®] + paraview

Para comenzar tomamos

- Geometry & Mesh : blockMesh & utilities
- Solver : laplacianFoam, potentialFoam, scalarTransportFoam
- Visualization : utilities & paraFoam & paraview

Contenidos

1 Breve introducción teórica al método de los volúmenes finitos (FVM)

- Planteamiento del problema de conservación
- Forma discreta del problema de conservación
- Caso escalar térmico
 - Conducción térmica estacionaria con fuente
 - Conducción térmica transiente con fuente
 - Convección y Conducción térmica transiente con fuente
 - Condiciones de contorno

2 Implementación en 1D

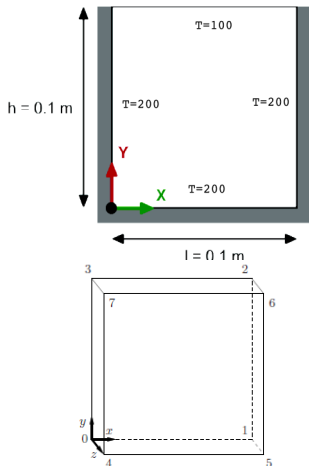
- Difusión con fuente estacionaria
- Términos advectivos
- Discretización temporal en 1D

3 OpenFOAM®

- Qué es OpenFOAM®?
- Organización de la librería
- Solvers y utilidades
- Organización de las simulaciones
- Ejemplos en OpenFOAM®
- Trabajos Prácticos

Ejemplo 1: Conducción del calor en una cavidad

Creamos ./run/scalarTransport/cavity



```

11     format      ascii;
12     class       dictionary;
13     object      blockMeshDict;
14 }
15 // *****
16
17 convertToMeters 0.1;
18
19 vertices
20 (
21     (0 0 0)
22     (1 0 0)
23     (1 1 0)
24     (0 1 0)
25     (0 0 0.1)
26     (1 0 0.1)
27     (1 1 0.1)
28     (0 1 0.1)
29 );
30
31 blocks
32 (
33     hex (0 1 2 3 4 5 6 7) (20 20 1) simpleGrading (1 1 1)
34 );
35
36 edges
37 (
38 );
39
40 boundary
41 (
42     movingWall
43     {
44         type wall;
45         faces
46         (
47             (3 7 6 2)
48         );
49     }
50     fixedWalls
51     {
52         type wall;
53         faces
54         (
55             (0 4 7 3)
56             (2 6 5 1)
57             (1 5 4 0)
58         );
59     }
60     frontAndBack
61     {
62         type empty;
63         faces
64         (

```

Ejemplo 1: Conducción del calor en una cavidad

- Mesh en `./constant/polyMesh/blockMeshDict`
- Propiedades físicas en `./constant/transportProperties`
- Esquemas de discretización empleados en `./system/fvSchemes`
- Selección de solvers para sistemas lineales en `./system/fvSolution`
- Selección de parámetros de control en `./system/controlDict`

Ejemplo 1: Conducción del calor en una cavidad

Típico archivo con condiciones de contorno e iniciales (ver ./0/T)

```

/*-----C++-----*/
|=====|
| \ / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
| \ / O p e r a t i o n | Version: 2.3.1 |
| \ / A n d | Web: www.OpenFOAM.org |
| \ / M a n i p u l a t i o n | |
/*-----*/

FoamFile
{
  version 2.0;
  format ascii;
  class volScalarField;
  object T;
}

// *****

dimensions [0 0 0 1 0 0 0];

internalField uniform 0;

boundaryField
{
  movingWall
  {
    type fixedValue;
    value 100
  }

  fixedWalls
  {
    type fixedValue;
    value 200
  }

  frontAndBack
  {
    type empty;
  }
}

// *****

```

Tabla de dimensiones

No.	Property	SI unit	USCS unit
1	Mass	kilogram (kg)	pound-mass (lbm)
2	Length	metre (m)	foot (ft)
3	Time	— — — —	second (s) — — — —
4	Temperature	Kelvin (K)	degree Rankine (°R)
5	Quantity	kilogram-mole (kgmol)	pound-mole (lbmol)
6	Current	— — — —	ampere (A) — — — —
7	Luminous intensity	— — — —	candela (cd) — — — —

Table 4.2: Base units for SI and USCS

El campo de velocidades por el momento puesto fijo en $\mathbf{v} = 0$ (ver archivo en ./0/U)

Ejemplo 1: Running

- **foamCleanTutorials** : If you want to erase the mesh and the solution in the current case folder, you can type in the terminal
- **foamClearPolyMesh** : If you are looking to only erase the mesh, you can type in the terminal,
- **foamListTimes -noZero | xargs rm -rf** : If you are only interested in erasing the saved solutions, in the terminal typ

Secuencia de comandos

- **blockMesh** : Genera la geometría y la malla
- **checkMesh** : controla la calidad de la malla, verificamos ortogonalidad, skewness, aspect ratio entre otras cosas
- **scalarTransportFoam > run.log** : aplicamos el solver y redireccionamos la salida a un archivo
- **pyFoamPlotRunner.py [options] <foamApplication>** (use -help para ver opciones)
- **paraFoam** : visualizamos los resultados

Ejemplo 1: Running

Controlando y refinando la solución

- **controlDict** : Archivo que permite controlar la corrida.
- **runTimeModifiable** : permite cambiar algunos parámetros en tiempos de corrida (run time)
- **stopAt writeNow** : permite parar la corrida en cualquier momento y grabar el estado actual o no grabar con **stopAt noWriteNow**
- **banana** : permite averiguar las distintas opciones que hay para un dado comando o variable del diccionario
- **Modificando el blockMeshDict** : para usar un degradee en la malla (cavityGrade)

Ejemplo 1: fvOptions (sources)

OpenFOAM[®] agrega términos fuentes a los modelos a través de una clase llamada `fvOptions()`. Buscar entre tutoriales archivo de nombre *fvOptions* en directorio *system* e incluir:

```
energySource1
{
    type            scalarSemiImplicitSource;
    active          true;
    timeStart       0.2;
    duration        2.0;
    selectionMode    points;
    points
    (
        (2.75 0.5 0)
    );

    scalarSemiImplicitSourceCoeffs
    {
        volumeMode    absolute;
        injectionRateSuSp
        {
            h          (10 0);
        }
    }
}
```

- *selectionMode cellZone* *eld points*
- *cellZone filter* *eld points*
- ver <http://www.cfd-online.com/Forums/openfoam-solving/119794-doubt-scalartransportfoam.html>
- <https://github.com/OpenFOAM/OpenFOAM-2.2.x/blob/a9d0f048e1a387af342531d50c79a2d11tutorials/lagrangian/reactingParcelFoam/filter/system/fvOptions>
- <http://www.openfoam.org/version2.2.0/fvOptions.php>

Contenidos

1 Breve introducción teórica al método de los volúmenes finitos (FVM)

- Planteamiento del problema de conservación
- Forma discreta del problema de conservación
- Caso escalar térmico
 - Conducción térmica estacionaria con fuente
 - Conducción térmica transiente con fuente
 - Convección y Conducción térmica transiente con fuente
 - Condiciones de contorno

2 Implementación en 1D

- Difusión con fuente estacionaria
- Términos advectivos
- Discretización temporal en 1D

3 OpenFOAM®

- Qué es OpenFOAM®?
- Organización de la librería
- Solvers y utilidades
- Organización de las simulaciones
- Ejemplos en OpenFOAM®

• Trabajos Prácticos

TP Nro 1 -

Manipuleo de datos geometricos para Método de Volúmenes Finitos

Consigna:

Dada una malla en formato nodos (xnod) y conectividades (icone) en 3D (hexas y tetras al menos)

Generar:

un código que calcule los arreglos de OpenFOAM®

- faces
- points
- owner
- neighbor

y las propiedades geometricas

- volumen de celda
- vector area normal
- centroide de celda
- centroide de cara

TP Nro 2 -

Ej 1 : Difusión con fuente en 1D

- Usando **Octave** genere un codigo que resuelva el problema:

$$\int_{\Omega_j} Q^\phi d\Omega + \int_{\Gamma_j} \Gamma^\phi \nabla \phi \cdot d\Gamma_j = 0$$

$$Q_C^\phi \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh} + \sum_{f=li,ld} \left(\underbrace{(\Gamma_f^\phi \nabla \phi \cdot \mathbf{S}_f)}_{\mathbf{J}_f^\phi = \mathbf{J}_f^{D,\phi}} \right) \underbrace{\pm \mathbf{S}_i}_{\pm \mathbf{S}_i} = 0 \quad (47)$$

$$Q_C^\phi S h + \Gamma_{ld}^\phi \frac{\phi_E - \phi_C}{h} S - \Gamma_{li}^\phi \frac{\phi_C - \phi_W}{h} S = 0$$

- Una forma sencilla seria generar un vector por celda con:
 - ▶ las fuentes Q_C^ϕ
 - ▶ los tamaños de las celdas h
 - ▶ las conductividades $\Gamma_C^\phi \rightarrow \Gamma_f^\phi = \Gamma_C^\phi \times (1 - g_f) + \Gamma_E^\phi \times g_f$
 - ▶ $g_f = \frac{d_{cf}}{d_{cf} + d_{fe}}$

TP - Ej 1: Difusión con fuente en 1D

- Loop sobre todas las celdas **for cell=1:Ncell**
 - calcular las contribuciones sobre las caras **for face=1:Nface**
 - ★ si la cara es interior

$$Eq_C + = \Gamma_f^\phi \frac{\phi_F - \phi_C}{d_{Cf} + d_{ff}} S \quad (48)$$

- ★ si la cara es de contorno Dirichlet $\phi_b = \phi_{b,specified}$

$$\mathbf{J}_b^{D,\phi} \cdot \mathbf{S}_b = (\Gamma^\phi \nabla \phi)_b \cdot \mathbf{S}_b \approx \Gamma_b^\phi \frac{(\phi_{b,specified} - \phi_C)}{|\mathbf{d}_{Cb} \cdot \mathbf{S}_b|} |\mathbf{S}_b|^2$$

$$Eq_C + = \Gamma_b^\phi \frac{(\phi_{b,specified} - \phi_C)}{d_{Cb}}$$
(49)

- ★ si la cara es de contorno Neumann $(\Gamma \nabla \phi)_b \cdot \frac{\mathbf{S}_b}{|\mathbf{S}_b|} = q_{b,specified}$

$$\mathbf{J}_b^{D,\phi} \cdot \mathbf{S}_b = \mathbf{J}_b^{D,\phi} \cdot \frac{\mathbf{S}_b}{|\mathbf{S}_b|} |\mathbf{S}_b| = q_{b,specified} |\mathbf{S}_b|$$

$$Eq_C + = q_{b,specified}$$
(50)

TP - Ej 1: Difusión con fuente en 1D

- ★ si la cara es de contorno mixtas $(\Gamma \nabla \phi)_b \cdot \mathbf{S}_b + h_\infty(\phi_b - \phi_\infty)$

$$\mathbf{J}_b^{D,\phi} \cdot \mathbf{S}_b = -(\Gamma \nabla \phi)_b \cdot \frac{\mathbf{S}_b}{|\mathbf{S}_b|} = h_\infty(\phi_b - \phi_\infty)$$

$$\text{Eq}_C + = - \left[\frac{h_\infty(\Gamma_b^\phi / d_{Cb})}{h_\infty + (\Gamma_b^\phi / d_{Cb})} |\mathbf{S}_b| \right] (\phi_\infty - \phi_C)$$
(51)

- ▶ calcular las contribuciones de la fuente sobre el volumen

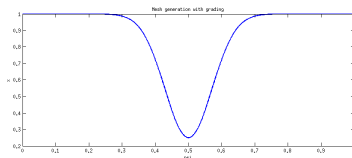
$$\text{Eq}_C + = Q_C^\phi S h$$
(52)

- ▶ ensamblar la ecuación en el sistema global
- Resolver el sistema de ecuaciones
- Visualizar la solución
- Calcular los flujos de calor por celda.

TP - Ej 1: Difusión con fuente en 1D

- $0 \leq x \leq L$
- Caso 1: $L = 1$, $\Gamma_C^\phi = 1$ $\phi(x = 0) = 0$ $\phi(x = 1) = 1$ $Q_C^\phi = 10$
 - ▶ Resolver para $h = 0.2, 0.1, 0.05, 0.025$
- Caso 2: idem Caso 1 pero con $\Gamma_C^\phi \frac{d\phi}{dx}(x = 1) = 1$
- Caso 3: Resolver el caso 1 con:
 - ▶ Malla: $\xi = (0 : 0.001 : 1)$; $h = 1 - 0.75e^{-\frac{(\xi-0.5)^2}{0.01}}$
 - ▶ 100 celdas en total
 - ▶ Fuente:

$$Q_C^\phi = \begin{cases} 10 & 0.25 \leq x \leq 0.75 \\ 0 & \text{fuera} \end{cases} \quad (53)$$



TP - Ej 1: Difusión con fuente en 1D

- Caso 4:
 - ▶ Agregamos a la ecuación original un término fuente proporcional a la temperatura.
 - ▶ ese termino genera una contribución al volumen del tipo $c\phi_C|\Omega_C|$
 - ▶ resuelva un caso como el 1 con $Q_C^\phi = 0.1$ y $c = 10$
- Caso 5: Resolver el caso 1 con una condición mixta en $x = 1$ usando $h_\infty = 10$ y $\phi_\infty = 2$

TP Nro 2 -

Ej 2 : Adveccion-Difusión con fuente en 1D transiente

- Usando **Octave** genere un codigo que resuelva el problema:

$$\int_{\Omega_j} \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Gamma_j} \rho \phi \mathbf{v} \cdot d\Gamma_j + \int_{\Omega_j} c \phi d\Omega = \int_{\Gamma_j} \Gamma^\phi \nabla \phi \cdot d\Gamma_j + \int_{\Omega_j} Q^\phi d\Omega$$

$$\rho \frac{\phi_C^{n+1} - \phi_C^n}{\Delta t} \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh} + \sum_{f=li,ld} \underbrace{((\rho \mathbf{v} \phi)_f^{n+\theta})}_{\mathbf{J}_f^{C,\phi}} \cdot \underbrace{(\mathbf{S}_f)}_{\pm Si} + c \phi_C^{n+\theta} \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh} =$$

$$\sum_{f=li,ld} \underbrace{((\Gamma^\phi \nabla \phi)_f^{n+\theta})}_{\mathbf{J}_f^{D,\phi}} \cdot \underbrace{(\mathbf{S}_f)}_{\pm Si} + Q_C^\phi \underbrace{|\Omega_C|}_{Sh}$$

$$\rho \frac{\phi_C^{n+1} - \phi_C^n}{\Delta t} h + c \phi_C^{n+\theta} h + \rho v (\phi_{ld}^{n+\theta} - \phi_{li}^{n+\theta}) =$$

$$\Gamma_{ld}^\phi \frac{\phi_E^{n+\theta} - \phi_C^{n+\theta}}{h} - \Gamma_{li}^\phi \frac{\phi_C^{n+\theta} - \phi_W^{n+\theta}}{h} + Q_C^\phi h$$

TP Nro 2 -

Ej 2 : Adveccion-Difusión con fuente en 1D transiente

- Esquema de discretización temporal, método θ

$$\phi^{n+\theta} = \theta \phi^{n+1} + (1 - \theta) \phi^n$$
- Esquema de discretización para la divergencia, aproximación de ϕ_f
 - ▶ CD : $\phi_f = g_f \phi_C + (1 - g_f) \phi_F$
 - ▶ UD : $\phi_f = \max(v, 0) \phi_C + \max(-v, 0) \phi_N$
 - ▶ γ method : $\phi_f = \gamma (\phi_f)_{UD} + (1 - \gamma) (\phi_f)_{CD}$

TP Nro 2 -

Ej 2 : Adveccion-Difusión con fuente en 1D transiente

- Caso 1) Resolver en estado estacionario en un dominio 1D dado por $0 \leq x \leq L$ con $L = 1$, para $\Gamma^\phi = 1$, $v = 1$, $c = 0$, $\rho = 1$, $\phi(x = 0) = 0$, $\phi(x = 1) = 1$, $Q^\phi = 0$, lo siguiente:
 - ▶ calcular la solución analítica
 - ▶ la solución numérica con UD y CD para una malla de 5, 10 y 20 celdas uniformes
 - ▶ grafique el error en función de h y concluya acerca del orden de precisión de cada aproximación
- Caso 2) Resolver el mismo problema anterior pero ahora con $\Gamma^\phi = 0.1$ y luego con $\Gamma^\phi = 0.01$

TP Nro 2 -

Ej 2 : Adveccion-Difusión con fuente en 1D transiente

- Caso 3) Resolver con UD un problema no estacionario con los mismos datos anteriores (Caso 1) salvo $\Gamma^\phi = 0.01$ y una condición inicial como $\phi(x, t = 0) = 1$ durante 1 segundo. Grafique la evolución de la solución usando una malla de 20 celdas.
 - ▶ usando un método explícito, con un paso de tiempo que lo haga estable
 - ▶ usando un método implícito, con un paso de tiempo tal que el Courant sea el mismo que en el caso explícito y luego con un paso del doble del anterior.
 - ▶ usando un método semi-implícito con un paso de tiempo tal que el Courant sea el mismo que en el caso explícito y luego con un paso del doble del anterior.

TP Nro 3 -

Ej 1 : Adveccion-Difusión con fuente en 2D transiente con OpenFOAM®

- Genere una malla en OpenFOAM®simil 1D en el intervalo $0 \leq x \leq L$ con $L = 1$, con un tamaño de malla uniforme y resuelva el problema del caso 2) del TP Nro 2 usando el solver *scalarTransportFoam* con CD y UD. Verifique el orden del error.
- refine la malla usando la funcionalidad denominada *grading* de blockMesh para hacer que la malla se refine hacia el extremo $x = L$. Resuelva nuevamente usando UD y CD y verifique el orden del error.

TP Nro 3 -

Ej 1 : Adveccion-Difusión con fuente en 2D transiente con OpenFOAM®

- Genere un dominio cuadrado alineado con los ejes como el que se muestra en la figura. Genere una malla de $N \times N$ con N variable igual a 10, 20, 40 usando blockMesh. Utilice una velocidad $\mathbf{v} = [1, 1]$ y una difusión $\Gamma^\phi = 0.01$. Resuelva usando *scalarTransportFoam* y grafique:
 - ▶ un corte de la solución en $x = L/2$
 - ▶ un corte de la solución en $y = L$
 - ▶ un snapshot con la función ϕ en todo el dominio.
 - ▶ distintas isothermas
- Resuelva el tutorial de la cavidad cuadrada con icoFoam denominado *cavity*. Modifique la viscosidad de forma de que el número de Reynolds ($Re = \frac{|\mathbf{v}|L}{\nu}$) sea 400, donde $\nu = \mu/\rho$ es la viscosidad cinemática, \mathbf{v} es la velocidad impuesta en la tapa superior de la cavidad y L es la longitud del lado del cuadrado. Obtenga un campo de velocidades una vez que la solución se encuentra convergida.

TP Nro 3 -

Ej 1 : Adveccion-Difusión con fuente en 2D transiente con OpenFOAM®

- arme un caso para la misma cavidad que resuelva el transporte de la temperatura usando ese campo de velocidad recién hallado.