

Введение

Для современного исследователя конечно-объемное моделирование, относящееся к вычислительной гидродинамике (CFD), является одним из основных научных инструментов, заменяющих дорогостоящие эксперименты и позволяющих проверять теоретические гипотезы. Гибкость и численная устойчивость данных методов привела их к широкому использованию в инженерии и созданию широко используемых промышленных пакетов, таких как Ansys CFX и Ansys Fluent. Однако, за простой интерфейса последних скрывается большая наука, связанная с построением сеток и составлением численных схем. И чем лучше исследователь понимает принципы работы и особенности используемых методов, тем более он может быть уверен в результатах своих численных экспериментов. В данном пособии рассмотрено использование открытой платформы для моделирования сплошной среды OpenFOAM, которая на первый взгляд может показаться менее дружелюбной, чем промышленные аналоги, однако (по мнению авторов), позволяет глубже и прочнее разобраться в сущности конечно-объемных методов.

Основные сведения об OpenFOAM

OpenFOAM (Open Field Operation and Manipulation) — свободно распространяемый программный комплекс с открытым исходным кодом для решения задач механики сплошной среды, состоящий из набора библиотек и утилит для численного решения систем дифференциальных уравнений. Пакет написан на языке C++ и по сути представляет собой расширяемый конструктор для решения различных задач гидроаэромеханики. В стандартной поставке отсутствует графический интерфейс,

взаимодействие пользователя происходит через модификацию текстовых конфигурационных файлов, запуск необходимых утилит в консоли, а диагностика осуществляется по текстовому выводу программы, который возможно журналировать. Ниже приведен пример последовательности команд, которые необходимо выполнить в консоли в рабочем каталоге проекта для запуска расчета и вывода результатов:

```
1 blockMesh # генерация сетки
2 simpleFoam # запуск решателя
3 postProcess -func sampleDict # обработка результатов
4 paraFoam # визуализация в ParaView
```

Визуализация результата возможна при помощи поставляемого вместе с OpenFOAM пакета ParaView (рис. 1).

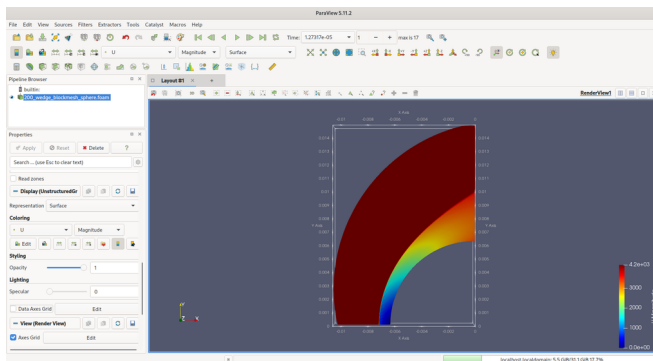


Рис. 1: Пример визуализации при помощи ParaView

Версия OpenFOAM

Исторически, существуют различные параллельно развиваемые варианты OpenFOAM, основными поставщиками являются:

- OpenCFD Ltd (ESI Group), с версионированием, соответствующим году и полугодию выпуска, например, v2306.
- The OpenFOAM Foundation, с версионированием натуральными числами, например, v11.

При составлении пособия использовалась версия OpenFOAM v2306, однако, включенные в него лабораторные работы без труда могут быть реализованы на любой другой актуальной версии с небольшими изменениями. Для систем на основе ядра Linux установка чаще всего производится при помощи готовых пакетов из репозитория, но также возможна самостоятельная сборка из исходных кодов, на Windows рекомендуется использовать подсистему WSL (Windows Subsystem for Linux). Более подробно об установке можно узнать на сайтах поставщиков.

Основные шаги численного моделирования

Численное моделирование задач механики возможно представить в виде следующей общей схемы.

Постановка проблемы

В первую очередь формулировка проблемы: что необходимо выяснить и как возможно будет проверить результат. На этом этапе необходимо удостовериться, что конечный результат в принципе возможно получить и сравнить с существующими и уже верифицированными данными, тем самым не отрываясь от физики проблемы в область чистых численных методов.

Математическая модель

В случае гидромеханики это выбор системы уравнений сплошной среды, например, выбор уравнений Навье–Стокса в условиях достаточной сплошности среды, или выбор уравнений Эйлера, когда возможно пренебречь вязкостью. Помимо этого необходимо решить вопрос вычисления правых частей системы и входящих в неё переменных величин, что включает в себя применение моделей различных физико-химических свойств и турбулентности. Уже на этом этапе важно оценить, охватывают ли выбранные модели диапазон возможных параметров и присущие изучаемому явлению эффекты.

Подготовка начальных данных

На этом шаге необходимо определить геометрию задачи и соответствующие граничные и начальные условия используемых уравнений. При необходимости может быть произведена переформулировка начальных и граничных условий в терминах выбранных моделей и геометрии, а также пересчёт величин в нужных единицах. Часто возможно сэкономить вычислительные ресурсы, задействуя симметрию задачи путем применения специальных граничных условий.

Создание вычислительной сетки

В случае конечно-объемного моделирования одним из фундаментальных этапов является создание качественной расчетной сетки, соответствующей геометрии задачи. Правильно построенная сетка — это залог успешной сходимости численных алгоритмов. Чем сложнее геометрия, тем труднее сделать для нее качественную сетку, поэтому иногда полезнее её упростить, избавившись от острых углов и криволинейных границ там, где они не оказывают большого влияния. Размер сетки можно оценить исходя из требуемой точности вычислений и сеточной сходимости, но она не должна быть слишком мелкой, чтобы не нарушать гипотезы сплошности при которых выведены используемые уравнения.

Численное решение

Наконец, необходимо выбрать подходящий для задачи решатель, а иногда даже попробовать несколько на упрощенных постановках и сравнить их между собой. Универсальные алгоритмы редко становятся оптимальными, например, решатели для сверхзвуковых потоков не всегда корректно работают на дозвуковых и высокоскоростных (гиперзвуковых) потоках. После выбора подходящего решателя требуется настройка параметров, таких как способ дискретизации, ограничение потока, количество циклов в случае итерационных алгоритмов, для улучшения сходимости и минимизации погрешности в виду численной диффузии и осцилляций.

Постобработка

После получения качественного решения возможно провести преобразование полученных величин в удобные для анализа и сравнения, построения графиков, тепловых карт, линий тока и другие виды визуализации. Для проверки результатов на адекватность проводится валидация и верификация: сравнение с экспериментальными данными и аналитическими решениями, последующий анализ результатов.

Структура OpenFOAM

OpenFOAM представляет собой набор программных библиотек и использующих их исполняемых файлов — решателей и вспомогательных утилит. Также в поставке содержится исходный код, документация и примеры проектов. На рис. 2 представлено дерево каталогов пакета OpenFOAM.

\$WM_PROJECT_DIR

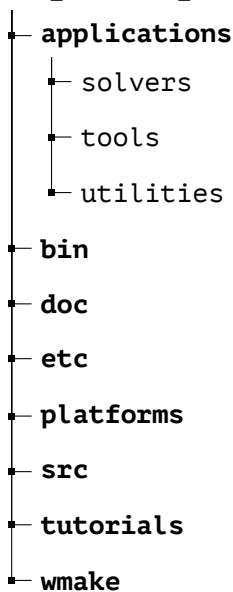


Рис. 2: Структура каталога OpenFOAM

В каталоге *applications* содержится исходный код для решателей (*solvers*) и вспомогательных утилит (*tools, utilities*). В *bin* находятся разнообразные скрипты на языке Bash, в *doc* содержится документация, в *etc* содержатся конфигурационные файлы для компиляции и запуска, например, местоположения рабочей директории. В каталоге *platforms* содержатся исполняемые файлы для конкретных платформы, архитектуры и компилятора. В *src* содержатся исходные коды функций и примитивов, используемые решателями из *applications*. Например, *finiteVolume* содержит класс для оператора дискретизации и граничных условий. Каталог *tutorials* представляет собой набор преднастроенных проектов, иллюстрирующих возможности библиотеки, а также оптимальные параметры. В *wmake* находится одноименный скрипт на языке Bash, запускающий компиляцию согласно выбранным настройкам. Корневой каталог также содержит скрипт *Allwmake*, запускающий полную компиляцию OpenFOAM, вызывая остальные *Allwmake*-скрипты в подкаталогах.

Общие советы по работе с OpenFOAM

OpenFOAM — это прежде всего удобная платформа, нежели готовое промышленное решение, поэтому будьте готовы внимательно изучать справочные материалы и исходный код. Исходный код OpenFOAM хорошо структурирован и документирован. При возникновении ошибки необходимо внимательно изучить её текст, там может содержаться как и указания по исправлению, так и направление для поиска. Даже если произошла ошибка сегментации или деление на ноль, важно понимать, на каком этапе вычислений она произошла. Большое количество полезной информации содержится и в сети Интернет, порой разбросанной по обсуждениям на форумах или в качестве материалов к мастер-классам и конференциям. При работе с такой информацией важно осознавать, применимы ли конкретные советы к используемой версии OpenFOAM.

При работе с конкретной задачей прежде всего необходимо убедиться в качестве расчетной сетки. Параметры расчетных алгоритмов и схем дискретизации возможно исправлять прямо во время вычисления, поэтому для начала можно использовать более надежные установки, а затем, по мере сходимости решения, переходить к более точным.

Полезно иметь какой-либо уровень понимания всех аспектов вычислений, понимание физической и математической сути уравнений и механики расчетных алгоритмов делает работу с OpenFOAM более конкретной, как с налаженным механизмом, нежели с черным ящиком. Именно это понимание и составляет ремесло вычислительной гидродинамики.

Краткое описание лабораторных работ

В каждой из них раскрывается какой-то аспект работы с OpenFOAM. В первой работе изучается структура проекта в OpenFOAM на примере известной модельной задачи: течения в ударной трубе. Во второй работе, на примере обтекания цилиндра обсуждается алгоритм PISO и производится визуализация результатов в ParaView. В третьей работе, на примере задачи сверхзвукового обтекания ромба обсуждаются алгоритмы для сжимаемых течений. В четвертой работе на примере задачи течения в трубе изучаются осесимметричные граничные условия и модели турбулентности.