

I Congresso Brasileiro de Fluidodinâmica Computacional

# Introdução à CFD usando o OpenFOAM

Prof. Livia Jatobá

Universidade do Estado do Rio de Janeiro Instituto Politécnico

# O que é CFD?

Computational Fluid Dynamics
ou
Dinâmica dos Fluidos Computacional

É a solução numérica das equações que governam o escoamento de fluidos.

# Por que CFD?

- \* Necessidade de predição.
- Custo (ou impossibilidade) de experimentos.
- \* Obter melhor entendimento do problema estudado.
- \* Avanço dos recursos computacionais.
- \* Ferramentas de simulação acessíveis e adotas em projetos de engenharia.

# Por que OpenFOAM?

#### Open source Field Operation And Manipulation

:-)

- \* Open-Source (GLP)
- \* Redução de custos (eliminação do custo de licenças).
- \* Desenvolvimento colaborativo.
- Desenvolvimento de novos métodos é acelerado pois parte de um código já existente.

:-(

- \* Grande esforço para aprender como usar e estender a plataforma.
- \* Multidisciplinar:
  - \* Conhecimento geral da física do escoamento de fluidos.
  - \* CFD / Métodos Numéricos.
  - \* Desenvolvimento de software e programação em C++.
  - Computação paralela.

### Particularidades de uma simulação CFD

- \* A validade dos resultados simulados é determinada frente à resultados experimentais.
- \* O fenômeno termo-físico simulado precisa de uma modelagem matemática apropriada.
- \* O engenheiro precisa fazer as escolhas apropriadas.
- \* A qualidade dos resultados depende:
  - \* Modelos que representem o problema físico com acurácia.
  - \* Métodos numéricos e algoritmos que resolvam as equações com baixo erro.

#### Considerações gerais:

- \* O que espera-se da simulação CFD?
- \* Qual a metodologia adotada para validar os resultados?
- « Qual o grau de acurácia dos resultados?
- \* Quanto tempo existe disponível para o projeto?

#### Termo-física:

- \* O escoamento é laminar, turbulento ou transicional?
- \* O escoamento é compreensível ou incompressível?
- O escoamento envolve mais de uma fase ou mais de uma espécie química?
- \* A troca térmica é importante para o problema?
- \* As propriedades dos materiais são funções de variáveis dependentes?
- \* Existe informação suficiente em relação às condições de contorno?
- \* As condições de contorno são modeladas ou aproximadas de forma apropriada?

#### Domínio computacional (geometria e malha):

- \* Pode-se construir uma representação discreta do domínio de escoamento de forma acurada?
- \* Qual complexidade do domínio pode ser reduzida sem impactar na acurácia da solução?
- \* O domínio computacional irá deformar ou mover durante a simulação?

#### Recursos computacionais:

- \* Uma simulação será suficiente ou serão necessárias múltiplas simulações CFD para realizar a análise?
- \* Quanto tempo existe disponível para cada simulação?
- \* Qual tipo de recurso computacional está disponível?

- 1<sup>a.</sup> Etapa: pré-processamento
- 2<sup>a.</sup> Etapa: solução

```
Courant Number mean: 0.116925 max: 0.852134 velocity magnitude: 0.852134

DILUPBICG: Solving for Ux, Initial residual = 1.89493e-07, Final residual = 1.89493e-07, No Iterations 0

DILUPBICG: Solving for Uy, Initial residual = 4.14522e-07, Final residual = 4.14522e-07, No Iterations 0

DICPCG: Solving for p, Initial residual = 1.06665e-06, Final residual = 3.39604e-07, No Iterations 1

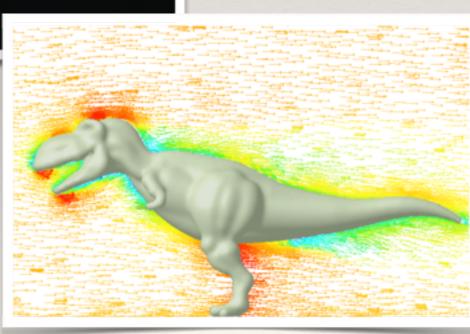
time step continuity errors: sum local = 5.25344e-09, global = 5.55948e-19, cumulative = 3.27584e-18

DICPCG: Solving for p, Initial residual = 5.36118e-07, Final residual = 5.36118e-07, No Iterations 0

time step continuity errors: sum local = 6.86432e-09, global = -9.66312e-19, cumulative = 2.30953e-18

ExecutionTime = 0.25 s ClockTime = 0 s
```

3<sup>a.</sup> Etapa: pós-processamento



### 1<sup>a.</sup> Etapa: pré-processamento

- \* Modelo matemático do problema físico:
  - \* Equações de conservação.
  - \* Equações constitutivas e propriedades do fluido.
  - \* Hipóteses simplificadoras.
  - \* Condição de inicial e de contorno.
- \* Modelo geométrico.
- Discretização do modelo geométrico (malha).
- Discretização das equações diferenciais (método numérico).
- \* Sequência de solução das equações discretizadas (algoritmo).
- \* Critérios de convergência.

### 1<sup>a.</sup> Etapa: pré-processamento

- \* Modelo matemático do problema físico:
  - \* Equações de conservação.
  - \* Equações constitutivas e propriedades do fluido.
  - \* Hipóteses simplificadoras.
  - \* Condição de inicial e de contorno.
- \* Modelo geométrico.
- Discretização do modelo geométrico (malha).
- Discretização das equações diferenciais (método numérico).
- Sequência de solução das equações discretizadas (algoritmo).
- \* Critérios de convergência.

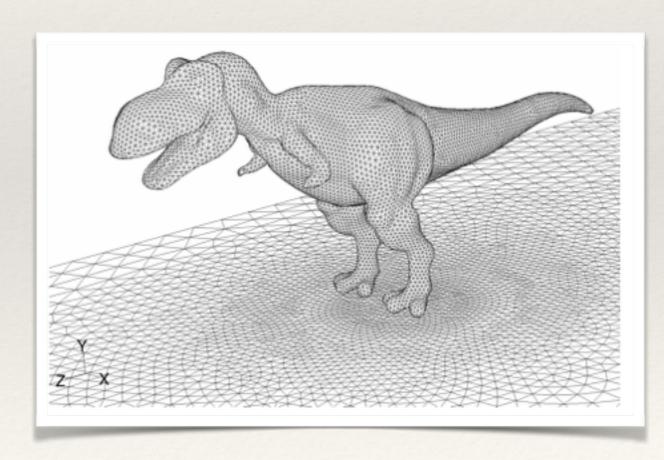
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau'} + \rho \mathbf{f}_{m}$$

$$\frac{\partial (\rho e_{tot})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e_{tot} \mathbf{U}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{U}) - \nabla \cdot \mathbf{q} + \dot{q}_{v}$$

### 1<sup>a.</sup> Etapa: pré-processamento

- \* Modelo matemático do problema físico:
  - \* Equações de conservação.
  - \* Equações constitutivas e propriedades do fluido.
  - \* Hipóteses simplificadoras.
  - \* Condição de inicial e de contorno.
- \* Modelo geométrico.
- Discretização do modelo geométrico (malha).
- Discretização das equações diferenciais (método numérico).
- \* Sequência de solução das equações discretizadas (algoritmo).
- \* Critérios de convergência.



### 2<sup>a.</sup> Etapa: solução

\* Solução do sistema algébrico formado.

```
Time = 0.5

Courant Number mean: 0.116925 max: 0.852134 velocity magnitude: 0.852134

DILUPBICG: Solving for Ux, Initial residual = 1.89493e-07, Final residual = 1.89493e-07, No Iterations 0

DILUPBICG: Solving for Uy, Initial residual = 4.14522e-07, Final residual = 4.14522e-07, No Iterations 0

DICPCG: Solving for p, Initial residual = 1.06665e-06, Final residual = 3.39604e-07, No Iterations 1

time step continuity errors: sum local = 5.25344e-09, global = 5.55948e-19, cumulative = 3.27584e-18

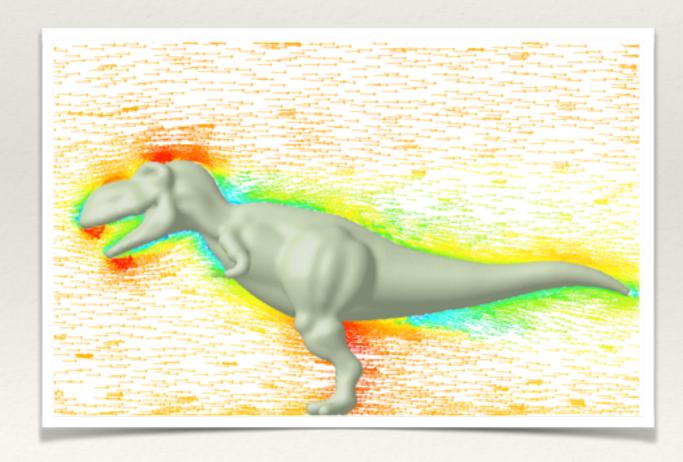
DICPCG: Solving for p, Initial residual = 5.36118e-07, Final residual = 5.36118e-07, No Iterations 0

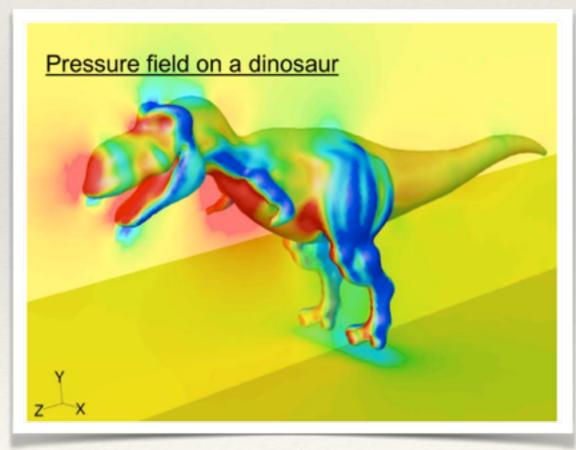
time step continuity errors: sum local = 6.86432e-09, global = -9.66312e-19, cumulative = 2.30953e-18

ExecutionTime = 0.25 s ClockTime = 0 s
```

### 3<sup>a.</sup> Etapa: pós-processamento

- \* Análise dos resultados.
- \* Revisão do modelo matemático e hipóteses simplificadoras.





### Equações Básicas

#### Modelo matemático do problema físico:

- Podemos identificar termos semelhantes nas diferentes equações de conservação:
  - \* Acúmulo
  - Transporte Advectivo
  - Transporte Difusivo
  - \* Termos volumétricos.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau'} + \rho \mathbf{f}_{m}$$

$$\frac{\partial (\rho e_{tot})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e_{tot} \mathbf{U}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{U}) - \nabla \cdot \mathbf{q} + \dot{q}_{v}$$

# $\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}\phi) = \nabla \cdot \mathbf{t}_{\phi} + S_{\phi}$

Forma Geral da Equação de Conservação

Advectivo Difusivo Fonte

 $\varphi$  é uma propriedade volumétrica qualquer,  $\mathbf{t}_{\varphi}$  depende do modelo de transporte molecular e  $S_{\varphi}$  é o termo volumétrico.

### Solução Numérica

- \* Consiste na substituição das <u>equações diferenciais</u> por um sistema de <u>equações algébricas</u>.
- \* A construção dessa solução é feita em duas etapas:
  - \* Discretização do domínio (malha).
  - \* Discretização das equações (Método dos Volumes Finitos).

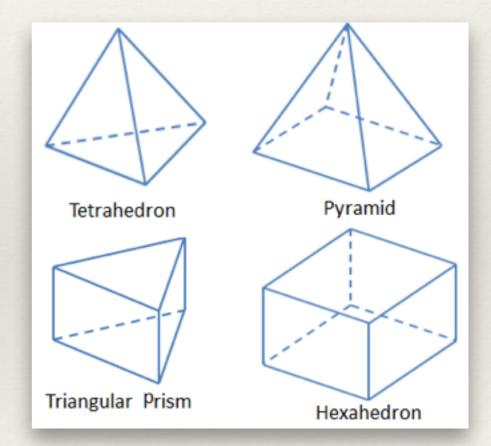
$$\underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\text{Acúmulo}} + \underbrace{\nabla \cdot (\mathbf{U}\phi)}_{\text{Advectivo}} = \underbrace{\nabla \cdot \mathbf{t}_{\phi}}_{\text{Difusivo}} + \underbrace{S_{\phi}}_{\text{Fonte}}$$

$$\underline{\mathbf{A} \cdot \mathbf{x}} = \mathbf{b}$$

### Malha

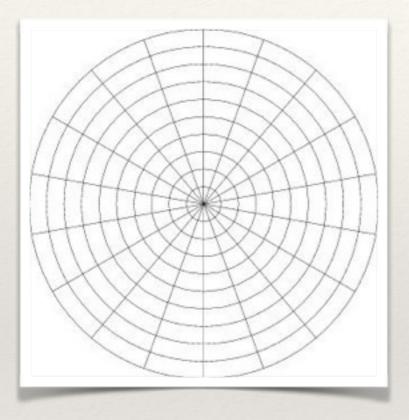
#### É a discretização do modelo geométrico.

- \* <u>Geometria</u> é a representação 3D da região de escoamento.
- \* Malha é a divisão da geometria em vários volumes.
- Quanto <u>maior o número de volumes</u>, <u>menor será o</u> <u>erro.</u>
- A forma do volume afeta o erro da solução numérica.
- De modo geral, a malha precisa ser <u>refinada</u> nas regiões do escoamento onde o <u>gradiente</u> da propriedade é <u>alto</u>.
- \* A construção da malha é uma etapa crítica para garantir a convergência da simulação.

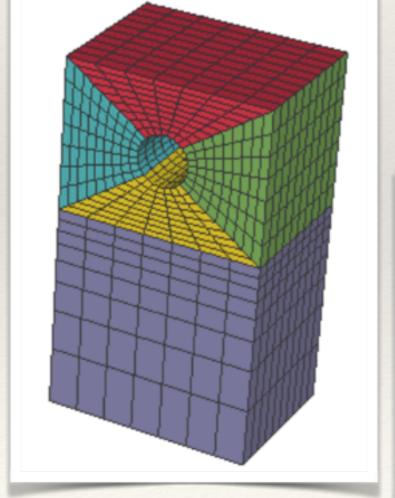


# Tipos de malha

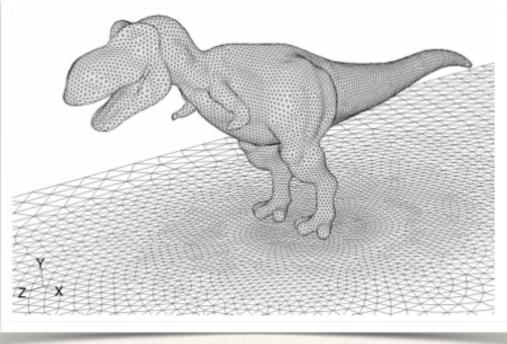
#### Estruturada



Estruturada por blocos



Não estruturada



### Fronteiras da malha

- \* As fronteiras (ou contorno) da malha precisam receber propriedades topológicas.
- No OpenFoam, essas propriedades são atribuídas através de um tipo de patch.
  - \* Os principais tipos são:
    - \* **patch:** descrição mais geral, podendo receber qualquer tipo de condição de contorno.
    - \* wall: permite o uso funções de parede em modelos de turbulência.
    - \* symmetryPlane: plano de simetria.
    - \* empty: usados em casos 2D ou 1D.

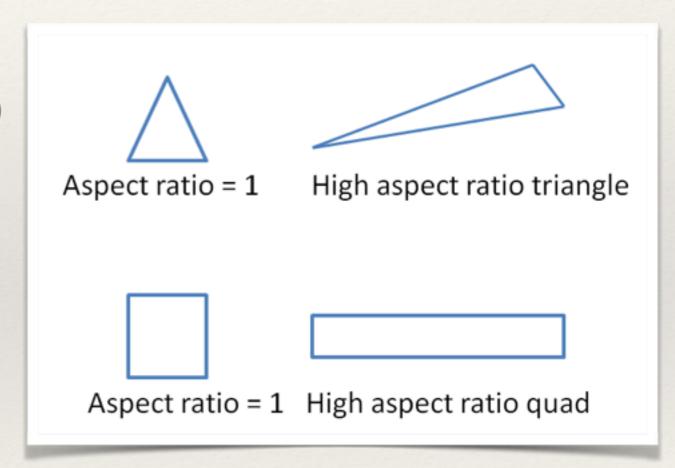
# Estão associados ao formato geométrico do volume e a conectividade com seus vizinhos:

- \* Razão de aspecto (aspect ratio)
- \* Assimetria (distorção ou skewness)
- Ortogonalidade (orthogonality)

O checkMesh é um utilitário do OpenFOAM que fornece as métricas da malha.

# Estão associados ao formato geométrico do volume e a conectividade com seus vizinhos:

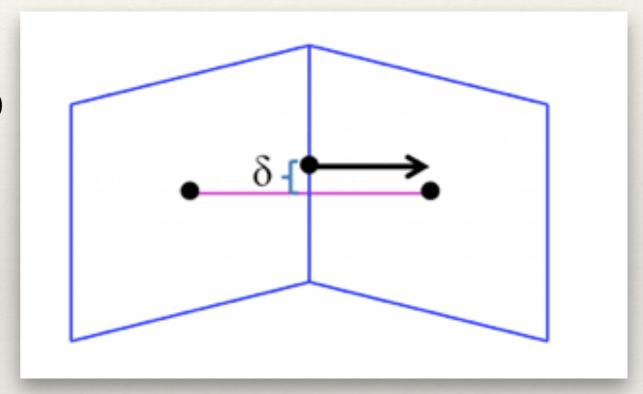
- \* Razão de aspecto (aspect ratio)
- \* Assimetria (distorção ou skewness)
- \* Ortogonalidade (orthogonality)



É a razão entre a maior e a menor aresta do elemento.

# Estão associados ao formato geométrico do volume e a conectividade com seus vizinhos:

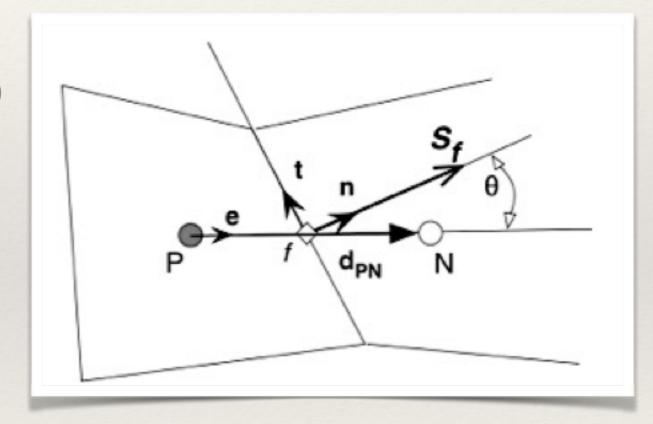
- \* Razão de aspecto (aspect ratio)
- \* Assimetria (distorção ou skewness)
- \* Ortogonalidade (orthogonality)



É a distância ( $\delta$ ) entre o vetor que conecta o centro dos volumes vizinhos e o centro da face.

# Estão associados ao formato geométrico do volume e a conectividade com seus vizinhos:

- \* Razão de aspecto (aspect ratio)
- \* Assimetria (distorção ou skewness)
- Ortogonalidade (orthogonality)

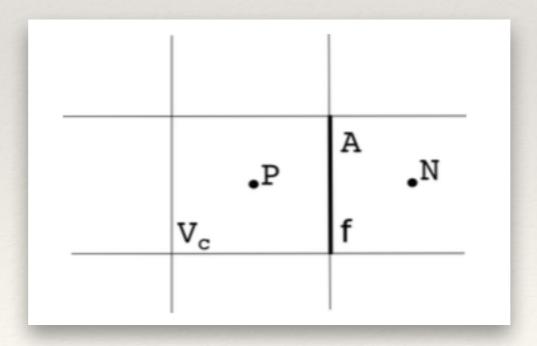


É o ângulo entre o vetor que conecta o centro dos volumes adjacentes e o vetor normal à superfície entre eles.

#### Discretização das equações diferenciais.

Consiste na integração da equação de conservação em cada um dos volumes de controle da malha.

$$\int_{t}^{t+\Delta t} \int_{V_{c}} \left( \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}\phi) \right) dV dt = \int_{t}^{t+\Delta t} \int_{V_{c}} \left( \nabla \cdot \mathbf{t}_{\phi} + S_{\phi} \right) dV dt$$



#### Integração do termo de acúmulo:

$$\int_{t}^{t+\Delta t} \int_{V_{c}} \frac{\partial \phi}{\partial t} \, dV \, dt \approx \int_{t}^{t+\Delta t} \int_{V_{c}} \left(\frac{\phi^{n} - \phi^{o}}{\Delta t}\right) \, dV \, dt$$

$$\approx \int_{t}^{t+\Delta t} \left(\frac{\phi^{n} - \phi^{o}}{\Delta t}\right) V_{c} \, dt$$

#### Integração do termo advectivo:

$$\int_{t}^{t+\Delta t} \int_{V_{c}} \nabla \cdot (\mathbf{U}\phi) \, dV \, dt = \int_{t}^{t+\Delta t} \sum_{f} \int_{A_{f}} (\mathbf{U}\phi) \cdot \mathbf{n} \, dA \, dt$$

$$\approx \int_{t}^{t+\Delta t} \sum_{f} \underbrace{\phi_{f}(\mathbf{U} \cdot \mathbf{n})_{f}}_{\text{fluxo advectivo}} A_{f} \, dt$$

n é o vetor unitário normal externo a face.

#### Integração do termo difusivo:

$$\int_{t}^{t+\Delta t} \int_{V_{c}} \nabla \cdot \mathbf{t}_{\phi} \, dV \, dt = \int_{t}^{t+\Delta t} \sum_{f} \int_{A_{f}} \mathbf{t}_{\phi} \cdot \mathbf{n} \, dA \, dt$$

$$\approx \int_{t}^{t+\Delta t} \sum_{f} \underbrace{(\mathbf{t}_{\phi} \cdot \mathbf{n})_{f}}_{\text{fluxo difusivo}} A_{f} \, dt$$

#### Integração do termo fonte:

$$\int_{t}^{t+\Delta t} \int_{V_{c}} S_{\phi} \, dV \, dt \approx \int_{t}^{t+\Delta t} (S_{\phi})_{P} V_{c} \, dt$$

#### Discretização temporal explicita:

$$\int_{t}^{t+\Delta t} \left[ \left( \frac{\phi^{n} - \phi^{o}}{\Delta t} \right) V_{c} + \sum_{f} \phi_{f}^{o} \left( \mathbf{U}^{o} \cdot \mathbf{n} \right)_{f} A_{f} - \sum_{f} \left( \mathbf{t}_{\phi}^{o} \cdot \mathbf{n} \right)_{f} A_{f} - \left( S_{\phi}^{o} \right)_{P} V_{c} \right] dt = 0$$

#### Discretização temporal implicita:

$$\mathbf{t}_{\phi} = \Gamma \nabla \phi$$

$$\int_{t}^{t+\Delta t} \left[ \left( \frac{\phi^{n} - \phi^{o}}{\Delta t} \right) V_{c} + \sum_{f} \phi_{f}^{n} \left( \mathbf{U}^{o} \cdot \mathbf{n} \right)_{f} A_{f} - \sum_{f} \left( \Gamma \nabla \phi^{n} \cdot \mathbf{n} \right)_{f} A_{f} - \left( S_{\phi}^{o} \right)_{P} V_{c} \right] dt = 0$$

#### A escolha dos esquemas de interpolação:

- \* Interpolação de  $\phi_f$
- Aproximação do fluxo advectivo na face
- \* Aproximação do fluxo difusivo na face

$$\left(\frac{\phi^n - \phi^o}{\Delta t}\right) V_c + \sum_f \phi_f^n \left(\mathbf{U}^o \cdot \mathbf{n}\right)_f A_f - \sum_f \left(\Gamma \nabla \phi^n \cdot \mathbf{n}\right)_f A_f = \left(S_\phi^o\right)_P V_c$$

O <u>fvSchemes</u> é o arquivo onde essas escolhas são feitas.

#### Principais escolhas para o termo advectivo:

- Diferenças Centrais (CDS): Gauss linear
- Upwind (UDS): Gauss upwind
- \* TVD (Total Variation Diminishing):
  - Gauss vanLeer
  - Gauss SuperBee
  - Gauss vanAlbada

A escolha da função de interpolação do termo advertido é feita no subdicionário divSchemes no arquivo <u>fvSchemes</u>.

### Condições de Contorno

- \* Dirichlet: valor de φ é constante.
- \* Newmann: valor do gradiente normal de φ na face é constante.
- \* Mista.

A escolha da condição de contorno depende do problema. Veremos mais detalhes nos tutoriais.

# Solução do Sistema Algébrico

- Método Direto: Eliminação Gaussiana.
- Método Iterativo:
  - \* Especificação de um critério de convergência (tolerance).
  - \* Pode-se adotar um fator de relaxação (relaxationFactors) para acelerar a convergência.
  - Exemplos:
    - \* Gradiente Conjugado Pré-condicionado (PCG)
    - \* Gradiente Biconjugado Pré-condicionado (PBiCG)
    - \* Generalized Geometric Algebraic Multigrid (GAMG)

O <u>fvSolutions</u> é o arquivo onde essas escolhas são feitas.

### Tipos de convergência:

- \* Convergência de malha.
- Convergência da solução numérica.

O **foamLog** é um utilitário que permite extrair dados para análise de convergência.

#### Tipos de convergência:

- \* Convergência de malha.
- Convergência da solução numérica.

A convergência de malha é garantida quando a solução não muda a medida que a malha é refinada.

### Tipos de convergência:

- \* Convergência de malha.
- Convergência da solução numérica.

#### Monitore os seguintes parâmetros:

- resíduos da solução do sistema algébrico;
- uma variável de interesse em uma dada região do domínio;
- propriedades integradas (força, fluxos, temperatura média);
- a conservação das propriedades.

#### Tipos de convergência:

- \* Convergência de malha.
- Convergência da solução numérica.

#### Sobre simulações que atingem o estado estacionário:

- O estado estacionário será atingido quando o valor da variável de interesse não muda mais ao longo das novas iterações.
- \* Se a simulação atinge o estado estacionário, o resíduo inicial do sistema algébrico diminui ao longo das iterações.

## Convergência, erros e incertezas

#### Tipos de convergência:

- \* Convergência de malha.
- Convergência da solução numérica.

#### Sobre simulações transientes:

- \* É necessário garantir a convergência em cada passo de tempo.
- \* Não será observada a queda do resíduo inicial ao longo da simulação.
- Deve-se acompanhar o valor de uma dada propriedade.

# Convergência, erros e incertezas

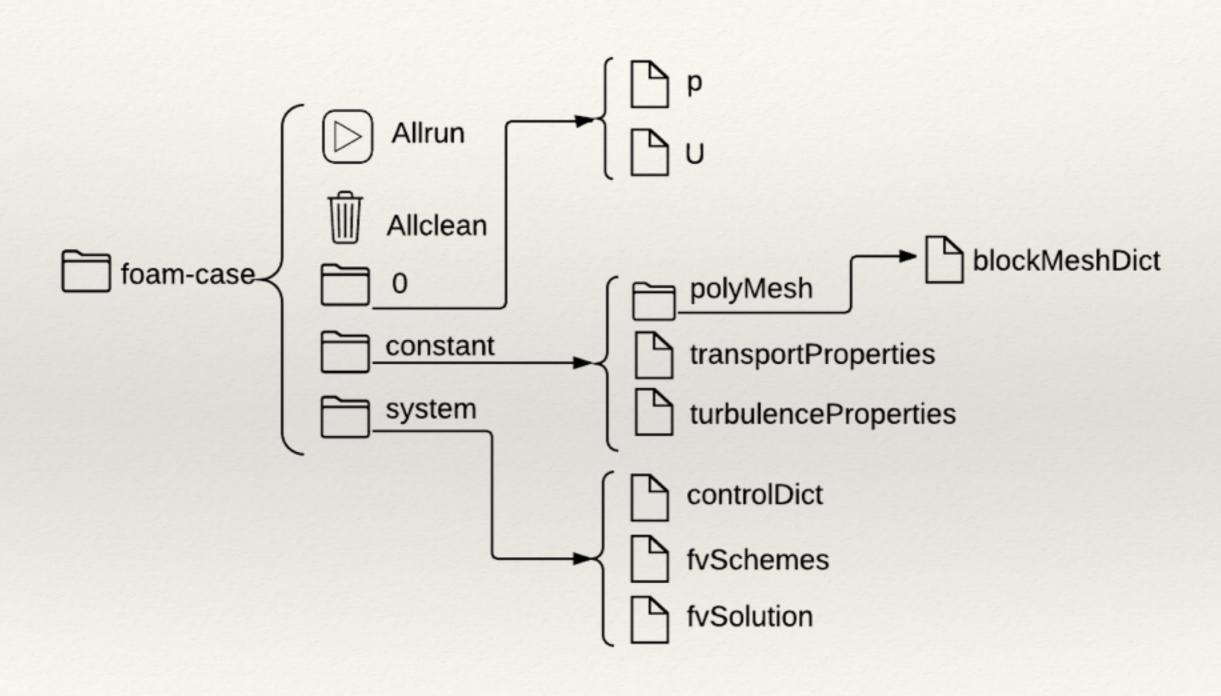
#### Problemas de convergência?

- \* Reduza os valores adotados no critério de convergência.
- Aumente o número de iterações.
- Utilize soluções simplificadas como condição inicial.
- \* Reduza o número de Courant.
- \* O fator de relaxação pode ser utilizado para estabilizar a solução em algoritmos do tipo *pressured-based*. Se a solução apresentar instabilidades, reduza os fatores de relaxação.
- \* Quer acelerar a convergência? Aumente o fator relaxação ou o Courant gradualmente.
- \* Instabilidades numéricas podem ocorrer por problemas na:
  - \* condição de contorno.
  - malhas de baixa qualidade.
  - \* configurações inapropriadas na solução.

# Estrutura do OpenFOAM

- \* Diretório de instalação:
  - \* applications: código fonte dos solvers e utilitários.
  - \* bin: shell-scripts.
  - doc: manuais
  - \* etc: arquivos de configuração para compilação.
  - \* platforms: binários compilados
  - \* **src**: código fonte básico (classes e templates das operações de campo, modelos de transporte).
  - \* tutorials: casos pré-configurados para cada solver.
  - \* wmake: scripts de compilação.

# Estrutura do OpenFOAM

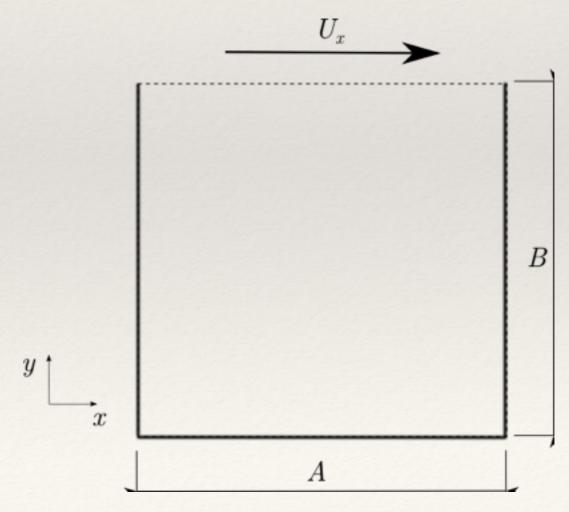


#### Definição do problema:

\* Escoamento de um fluido Newtoniano, isotérmico, incompressível em uma cavidade, onde a fronteira superior desloca-se com velocidade conhecida e as demais fronteiras são estacionárias.

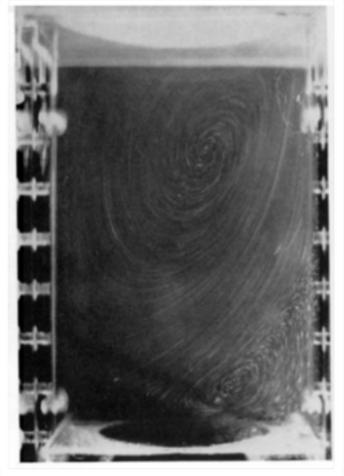
Número de Reynolds

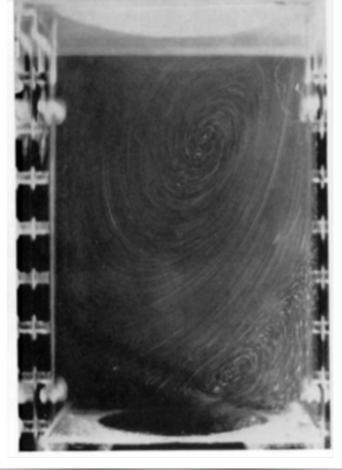
$$Re = \frac{U_x A}{\nu}$$

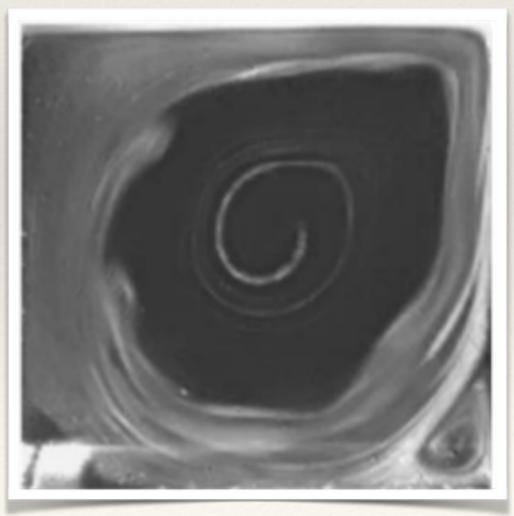


#### Definição do problema:

Gera linhas de corrente fechadas onde a natureza do vórtice depende da razão de aspecto (razão da altura pela largura) da cavidade e do número de Reynolds.







Re = 1.070

Re = 4.030

#### Modelagem matemática:

Conservação de Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U} - \nu \nabla^2 \mathbf{U} = -\frac{1}{\rho} \nabla p$$

Equação da Pressão:

$$\frac{1}{\rho}\nabla^2 p = -\nabla \cdot [\mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U}]$$

Algoritmos de acoplamento pressão-velocidade: PISO, PIMPLE ou SIMPLE

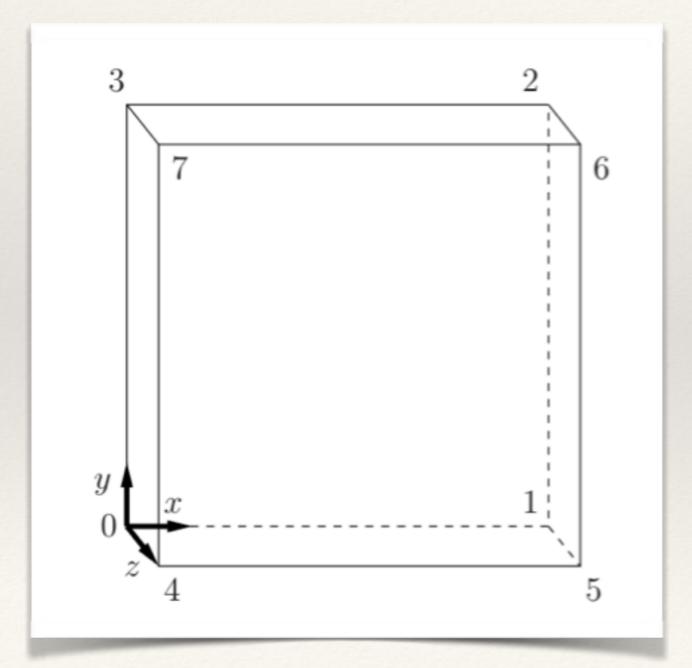
#### Solvers do OpenFOAM:

- \* **pisoFoam**: Escoamento incompressible, transiente (PISO), laminar ou turbulento, fluido Newtoniano ou na o-Newtoniano.
- \* **pimpleFoam**: Escoamento incompressible, estaciona rio (PIMPLE), laminar ou tur-bulento, fluido Newtoniano ou na o-Newtoniano.
- \* **simpleFoam**: Escoamento incompressible, estaciona'rio (SIMPLE), laminar ou tur- bulento, fluido Newtoniano ou na o-Newtoniano.
- \* **icoFoam**: Escoamento incompressible, transiente, laminar e fluido Newtoniano.

#### Solvers do OpenFOAM:

- pisoFoam: Escoamento incompressible, transiente (PISO), laminar ou turbulento, fluido Newtoniano ou na o-Newtoniano.
- \* **pimpleFoam**: Escoamento incompressible, estaciona rio (PIMPLE), laminar ou tur-bulento, fluido Newtoniano ou na o-Newtoniano.
- \* **simpleFoam**: Escoamento incompressible, estaciona'rio (SIMPLE), laminar ou tur- bulento, fluido Newtoniano ou na o-Newtoniano.
- \* icoFoam: Escoamento incompressible, transiente, laminar e fluido Newtoniano.

#### Geometria: A=B=0,1m



Courant

$$Co = \frac{\delta t |\mathbf{U}|}{\delta x}$$

$$\delta x = \frac{d}{n} = \frac{0.1}{20} = 0.005 \text{ m}$$

$$\delta t = \frac{Co \ \delta x}{|\mathbf{U}|} = \frac{1 \times 0.005}{1} = 0.005 \ \mathrm{s}$$

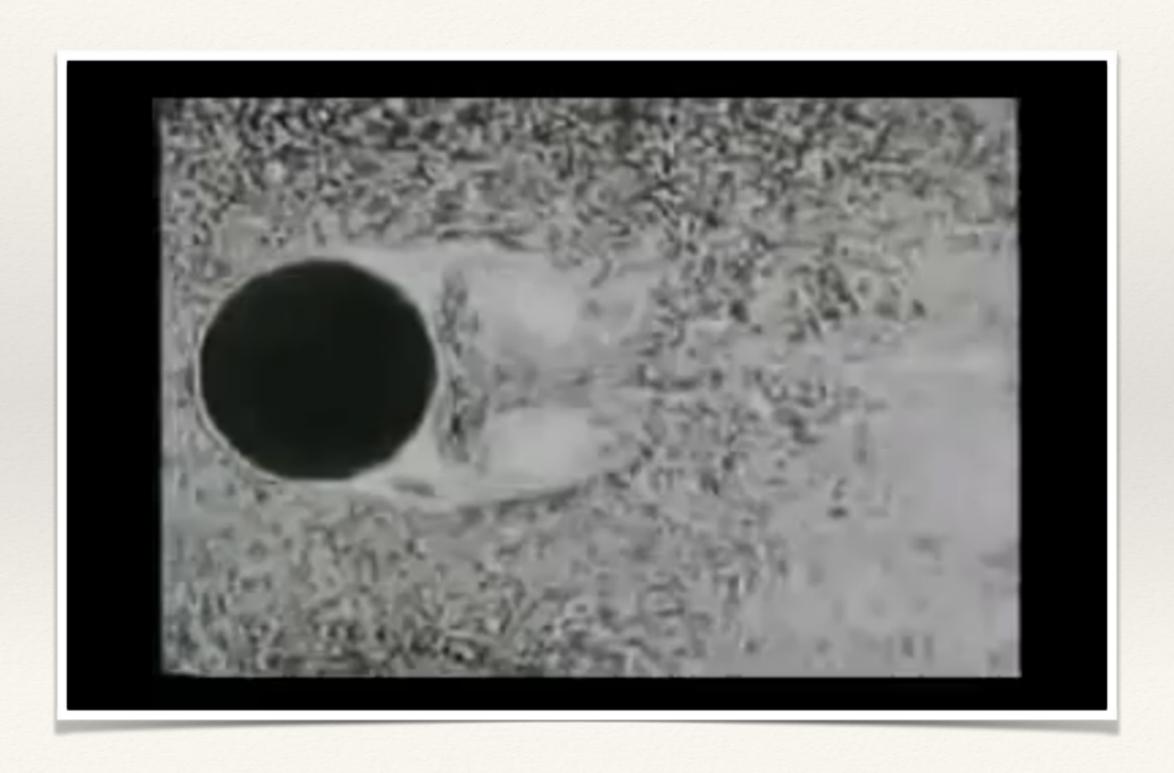
#### transportProperties:

#### Dimensões no OpenFOAM:

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	———— mole (mol) ————	
6	Current	———— ampere (A) ————	
7	Luminous intensity	candela (cd) $$	

KEEP CALM **AND** KEEP **FOAMing** 

### Escoamento em torno de um cilindro



KEEP **FOAMing AND** SHARE

## Referências

- \* The OpenFOAM Technology Primer, T. Maric, J. Hopken, K. Mooney, sourceflux, 2014.
- User Guide, OpenFOAM.
- \* An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method, H. Versteeg, W. Malalasekera, 2nd Edition, 2007.
- \* Wolf Dynamics, OpenFOAM Tutorials: <a href="www.wolfdynamics.com/">www.wolfdynamics.com/</a> tutorials/openfoam\_tutorials/overview.html