XI Bienal de Matemática 2024
Universidade Federal de São Carlos - UFSCar
29 de julho a 02 de agosto de 2024

O software OpenFOAM na solução de EDP's pelo Método de Volumes Finitos.

Santos, Alana[1]

Resumo: *O OpenFOAM é um software de código aberto no qual estão implementadas várias bibliotecas para a discretização de Equações Diferenciais Parciais (EDP's) pelo Método de Volumes Finitos (MVF). A sua utilização de forma eficiente requer um estudo teórico prévio sobre as Equações Diferenciais, o próprio MVF juntamente com as técnicas de discretização dos termos da equação. Sendo assim, estudou-se uma EDP de segunda ordem, o MVF para discretizá-la em duas dimensões e fazer a implementação numérica da equação no OpenFOAM.*

Palavras-chave: *OpenFOAM. Discretização. EDP.*

1. Introdução

A computação numérica pode oferecer percepções e dados importantes que são difíceis ou demasiadamente custosos financeiramente, para medir ou testar de forma experimental. Assim, percebe-se a importância da ciência computacional. Um dos focos principais desta ciência é a Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD), que é o objeto de estudo deste trabalho.

Softwares capazes de calcular propriedades importantes e simular fenômenos da dinâmica dos fluidos, fazem-se muito necessários para o desenvolvimento do estudo da Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD). Dentre as tecnologias disponíveis, destacamos o OpenFOAM [1], que é um software de código aberto gratuito, que tem sido utilizado em larga escala e consegue fazer uma simulação satisfatória. Nesse sentido, o fato de o OpenFOAM ser gratuito facilita o seu acesso e utilização, principalmente em ambientes acadêmicos.

A sigla OpenFOAM significa Open Source Field Operation and Manipulation, traduzindo, Operação e Manipulação de Campo de Código Aberto.

Sendo assim, neste trabalho, foi escolhido a utilização deste software para simular os métodos de volumes finitos para resolver EDP's e em específico para este trabalho resolveremos a equação de convecção e difusão.

2. OpenFOAM

Buscamos expor como funciona este software, para isso mostraremos solução numérica para problemas bidimensionais, onde a aplicação pode ser exibida no OpenFOAM [1].

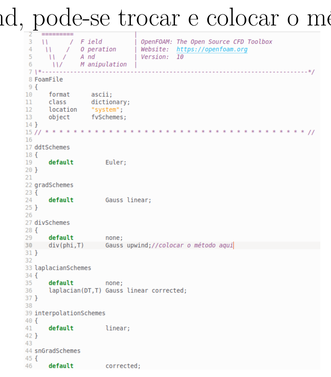
Primeiramente, dissertando um pouco sobre o OpenFOAM, ele é capaz de simular o comportamento do fluido em malhas 2D e 3D, porém para este momento do trabalho, estudaremos o comportamento somente em duas dimensões. Para isso, como já falamos dos métodos, procurou-se fazer uma simulação de um problema, onde construiu-se uma malha com determinadas condições de contorno e fez-se a comparação dos resultados utilizando o Upwind e o QUICK.

O OpenFOAM é um software de código aberto, com linguagem C++, onde podemos montar a estrutura do problema que queremos simular. Para isso, é necessário seguir alguns passos. De maneira resumida, pretende-se mostrar o que foi feito para simular este problema.

Primeiramente, dentro do OpenFOAM, temos algumas pastas que contém suas informações e condições de aplicação, as quais podem ser copiadas e modificadas para atender às condições do usuário. Nesse sentido, Dentre essas pastas, temos os *solvers*, são eles que definem como o problema será resolvido. O *solver* utilizado para a simulação tratada neste trabalho é chamado de *scalarTranspotFoam*. Assim, segue o código do *scalarTranspotFoam*:

Definido o *solver*, temos que escolher qual caso queremos simular e qual método vamos utilizar. Para isso, precisamos adequar a malha, no *blockMesh*. Nesse arquivo, podemos definir como será a malha trabalhada, desde os vértices, os formatos, quais faces serão móveis e outras funcionalidades necessárias para a criação da malha.

O método é definido no arquivo *fvSchemes*. Onde podemos escolher o esquema de discretização que iremos usar para resolver o problema proposto. Para isso, observando a figura , na linha 30 do código, onde está escrito upwind, pode-se trocar e colocar o método que se deseja.

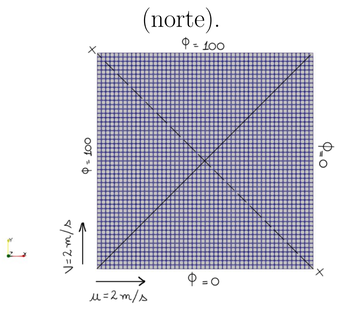


Além disso, podemos definir durante quanto tempo o problema vai correr e quantas etapas queremos calcular, definimos isso no *controlDict*.

Definidos estes aspectos, podemos simular o problema. Para utilizar e entender o funcionamento deste software escolhemos simular um fenômeno da dinâmica dos fluidos, representado por uma EDP, que é a convecção e difusão. A equação que representa este fenômeno é:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\phi u) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S\phi \qquad (1)$$

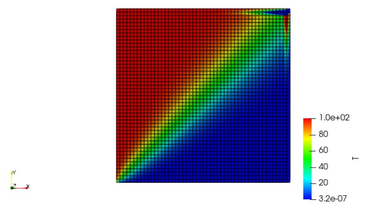
Neste trabalho tomaremos o problema, retirado de Versteeg e Malalasekera (2007) [4], seguinte: Em um domínio onde a velocidade é uniforme, $v = u = 2m/s$, e é paralela à diagonal da malha. As condições de contorno são $\phi = 0$ na face de baixo (sul) e na face à direita (leste) e $\phi = 100$ na face à esquerda (oeste) e na face de cima (norte).

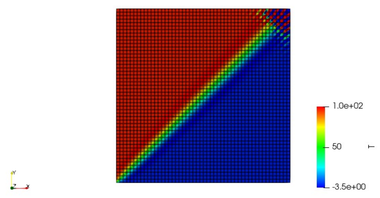


Neste problema, fazemos uma comparação entre o esquema Upwind e o QUICK podendo mostrar, sob essas condições, um teste para um caso bidimensional em uma malha de 50 X 50.

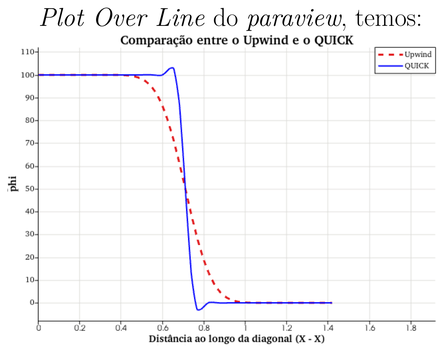
Assim, geramos a malha, com o *blockMesh* e aplicamos o *solver*, *scalarTransportFoam*, e para visualizar a malha, utilizamos o *paraview*, que é um visualizador que abre arquivos com a extensão *.foam*, o qual criamos com os comandos *paraFoam -touch* para gerar um arquivo *.OpenFOAM* e depois usamos o *mv .OpenFOAM .foam*. Assim, podemos abrir a malha no visualizador, pois já temos a extensão necessária para abrir o arquivo. Assim, colocamos o problema para rodar.

Temos assim, duas malhas geradas no OpenFOAM, sendo a primeira , gerada utilizando o método Upwind e a segunda , gerada pelo método QUICK:





Agora, mostrando graficamente as soluções, utilizando a ferramenta *Plot Over Line* do *paraview*, temos:



Pelo gráfico, pode-se observar que o esquema QUICK coincide muito mais precisamente com a solução exata do problema, do que o Upwind .

No upwind existe uma suavização da solução do problema. O Esquema QUICK é mais próximo da solução real, no entanto, pode causar, mínimas, falhas por subestimação e superestimação, como evidenciado na Figura , onde existe uma pequena elevação tanto acima (na linha 100) quanto abaixo (na linha 0) no gráfico. Porém, ainda sim, o QUICK mostra-se uma aproximação mais exata. Mas, possibilidade de subestimações e superestimações deve ser considerada ao interpretar as soluções dadas por este método.

3. Conclusão

Tentamos mostrar o quanto os softwares, e mais especificamente o OpenFOAM, são relevantes na resolução de problemas como esse (solução de EDP's) em que os métodos para a solução da equação podem ser implementados computacionalmente, o que facilita sua compreensão e permite a visualização de sua eficiência.

Referências

[1] **OpenFOAM**, https://www.openfoam.com/. Acesso em : 3 nov., 2023.

[2] **OpenFOAM**, https://www.openfoam.com/governance/overview. Acesso em : 3 nov., 2023.

[3] **OpenFOAM**, https://www.openfoam.com/news/history. Acesso em : 6 dez., 2023.

[4] VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics: THE FINITE VOLUME METHOD**. 2 ed. Inglaterra: Pearson Education Limited, 2007.

Apoios:

[1]Universidade Federal do Pará (UFPA). Esta autora foi apoiada pelo PPGME