

Các phương pháp CFD

Phương pháp sai phân hữu hạn. Phương pháp thể tích hữu hạn. Phương pháp phần tử hữu hạn.

1. Đôi lời mở đầu và những khái niệm cơ bản	1
2. Phương pháp sai phân hữu hạn	3
3. Phương pháp thể tích hữu hạn	4
4. Phương pháp phần tử hữu hạn	6
5. Nhận xét tổng quan	10

1. Đôi lời mở đầu và những khái niệm cơ bản

Phương pháp sai phân hữu hạn, phương pháp thể tích hữu hạn, phương pháp phần tử hữu hạn, ... là những khái niệm rất thường gặp khi bạn đọc các tài liệu CFD. Nhưng cụ thể nó là cái gì, chắc không phải tất cả mọi người đều có một cách hiểu đúng đắn và thống nhất. Một số bạn có gửi thư cho tôi để đặt câu hỏi và khi đề cập đến các thuật ngữ này các bạn đã ám chỉ các phạm trù khác. Không ít người đề nghị và nhiều lần thúc giục tôi viết một bài tổng quan về vấn đề này. Thú thật là đến tận hôm nay mới có chút thời gian rỗi để mà viết, mong các bạn hết sức thông cảm.

Bài viết với văn phong hội thoại, đơn giản và dễ hiểu nhất để các bạn dễ tiếp nhận. Nội dung của nó cũng chỉ ở mức độ khái niệm phạm trù giúp dễ hình dung chứ hoàn toàn không phải là một công trình nghiên cứu phức tạp và nghiêm túc. Vì thế các mô hình được xét cũng được đơn giản hóa, các công thức toán học cũng được giản lược bớt để tập trung về phương diện hình thức hóa.

FDM, FVM, FEM, ... sử dụng trong CFD, được gọi chung là các phương pháp CFD. Ta có phương pháp sai phân hữu hạn (Finite Differences Method — FDM), phương pháp thể tích hữu hạn (Finite Volume Method — FVM), phương pháp phần tử hữu hạn (Finite Element Method — FEM) (tất nhiên là còn nhiều phương pháp khác nữa, nhưng trong bài mình chỉ giới hạn các phương pháp kể trên).

Không mất tính tổng quát và để đơn giản hóa việc diễn giải, các ví dụ được xét trong không gian một chiều hoặc hai chiều. Các thuật ngữ sẽ được giải thích trước khi sử dụng.

Đầu tiên ta phải hiểu sơ đồ sai phân là gì. Giả sử có hàm số $f(x)$ liên tục trên miền D nào đó. Chia miền D thành các đoạn có độ dài là h , mà sau này ta gọi đó là lưới tính toán. Khai triển Taylor đúng hàm $f(x)$ tại điểm x_i ta có:

$$f(x_i + h) = f(x_i) + hf'(x_i) + \dots$$

$$\text{Từ đó: } f'(x_i) = \frac{f(x_i + h) - f(x_i)}{h} + O(h)$$

Trong tính toán bằng phương pháp số ta xấp xỉ nghiệm cần tìm bằng nghiệm gần đúng. Giả sử cần tính $f'(x_i)$ với độ chính xác bậc nhất, khi đó có thể sử dụng công thức khai triển Taylor gần đúng ở trên, tức là $f'(x_i) = \frac{f(x_i + h) - f(x_i)}{h} + O(h)$.

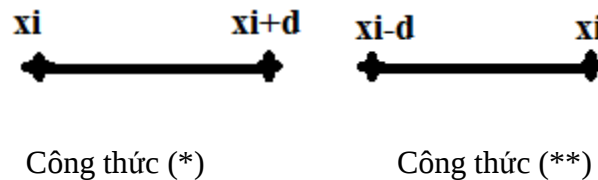
Rõ ràng h có thể nhận giá trị bất kì, ngoại trừ 0. Giả sử $|h| = d > 0$, từ công thức trên ta có các khả năng sau:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i + d) - f(x_i)}{d} + O(d), \quad (*)$$

hoặc

$$f'(x_i) = \frac{-f(x_i - h) + f(x_i)}{d} + O(d). \quad (**)$$

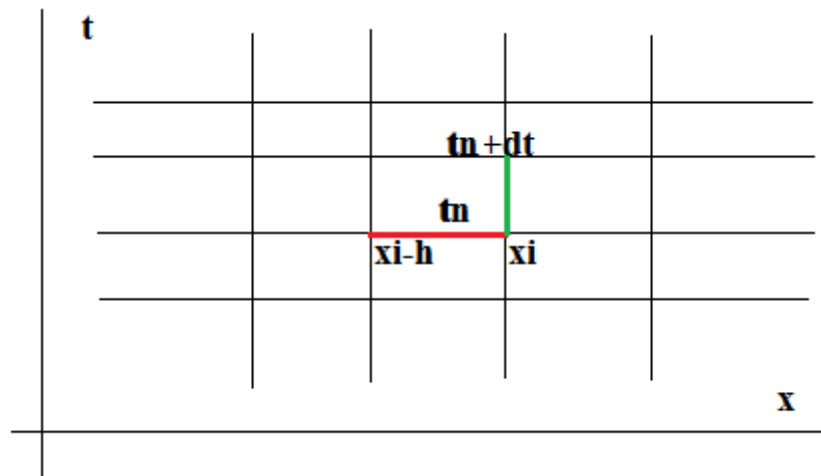
Để dễ hình dung người ta sử dụng việc ghi nhớ công thức nhờ vào sơ đồ hình tượng, ứng với công thức (*) ta vẽ điểm x_i và điểm x_i+d để ghi nhớ là khi tính $f'(x_i)$ thì sử dụng đến giá trị của $f(x)$ tại hai điểm này. Tương ứng ta cũng có một hình biểu diễn điểm x_i và điểm x_i-d cho công thức (**). Xem các hình dưới đây:



Sơ đồ sai phân (hay là sai phân hữu hạn) được hiểu một cách nôm na như vậy.

2. Phương pháp sai phân hữu hạn

Phương pháp sai phân hữu hạn sử dụng sơ đồ sai phân để xấp xỉ các toán tử (toán tử đạo hàm riêng, toán tử tích phân, ...) để giải các hệ phương trình mà không xét đến các đặc tính vật lý của mô hình. Ví dụ, ta xét phương trình đối lưu sau có dạng $du/dt + du/dx = 0$ trong một miền D nào đó. Giả sử các điều kiện đầu, điều kiện biên đã biết và có thể cho nếu cần thiết.



Sử dụng công thức (*) để xấp xỉ toán tử đạo hàm riêng theo x cũng như theo t , ta có: $(u(x_i, t_n + dt) - u(x_i, t_n))/dt + (u(x_i, t_n) - u(x_i - h, t_n))/h = 0$. Từ đó dễ dàng tính được $u(x_i, t_n + dt)$ theo các giá trị đã biết là $u(x_i, t_n)$, $u(x_i - h, t_n)$.

Thêm một ví dụ nữa để minh họa phương pháp sai phân, xét hệ phương trình khí động lực học một chiều (hệ phương trình Euler một chiều):

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u u + p) = 0 \\ \frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \rho u (e + pu) = 0 \end{cases}$$

Phương trình thứ nhất của hệ trên là phương trình bảo toàn khối lượng. Sử dụng sơ đồ sai phân như ở hình trên ta rời rạc hóa phương trình định luật bảo toàn khối lượng như sau:

$$\frac{\rho(x_i, t_n + dt) - \rho(x_i, t_n)}{dt} + \frac{(\rho u)(x_i, t_n) - (\rho u)(x_i - h, t_n)}{h} = 0$$

Đối với các phương trình còn lại là phương trình định luật bảo toàn động lượng và năng lượng ta rời rạc hóa tương tự.

Phương pháp sai phân hữu hạn đại khái như vậy.

3. Phương pháp thể tích hữu hạn

Giờ ta sang *phương pháp thể tích hữu hạn* (FVM — Finite Volume Method). Hiểu nôm na thể tích hữu hạn là một đơn vị thể tích không gian không lớn quá, cũng không nhỏ quá. Ví dụ như trong vật lý khi khoanh vùng vật chất để xét, ta chọn một vùng vừa phải để nó đủ nhỏ, để có thể xem tính chất của các hạt nằm trong phạm vi đang xét gần gần nhau, nhưng thể tích ta đang xét không quá nhỏ để số lượng hạt vật chất chứa trong đó là vô cùng lớn. Trong miền tính toán, ta chọn một thể tích hữu hạn V được bao bởi mặt kín S . Trong trường hợp một chiều

(hai chiều nếu tính cả chiều thời gian) thì thể tích V được thay bằng miền D và mặt S được hiểu là biên G của miền D . Thể tích hữu hạn và mặt bao của nó được gọi là thể tích kiểm soát và mặt kiểm soát. Thông thường chúng cố định trong không gian theo thời gian, nhưng về nguyên tắc không nhất thiết lúc nào cũng như vậy. Lấy tích phân phương trình định luật bảo toàn khối lượng ta được phương trình định luật bảo toàn khối lượng dạng tích phân:



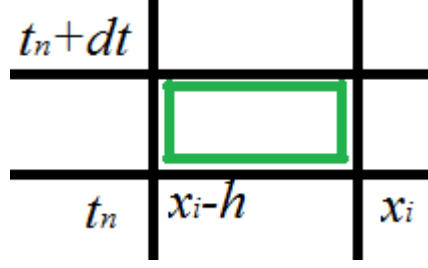
$$\oint_S \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} \right) dx dt = 0$$

Theo công thức *Green* ta có:

$$\oint_D \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} \right) dx dt = \oint_G \rho dx - \rho u dt = 0$$

$$\oint_G \rho dx - \rho u dt = 0$$

Có nhiều cách khác nhau để chọn *thể tích kiểm soát*, trong trường hợp đơn giản nhất *mặt kiểm soát* sẽ chọn trùng với các mặt của ô lưới tính toán. Trong trường hợp này (xem hình dưới) công thức tích phân ở công thức cuối cùng ở trên được viết lại như sau:



$$\oint_G \rho dx - \rho u dt = \int_{x_i-h}^{x_i} \rho(x, t_n) dx - \int_{x_i-h}^{x_i} \rho(x, t_n + t) dx + \int_{t_n}^{t_n+dt} \rho u(x_i, t) dt - \int_{t_n}^{t_n+dt} \rho u(x_i - h, t) dt = 0$$

Đó chính là công thức cho phương trình bảo toàn động lượng trong *phương pháp thể tích hữu hạn*. Các tính các tích phân theo các đường, hay nói đúng hơn là theo các mặt của ô lưới tính toán tôi không đề cập đến trong bài này.

Phương pháp thể tích hữu hạn nó đại khái là vậy.

4. Phương pháp phần tử hữu hạn

Tiếp theo là *phương pháp phần tử hữu hạn*. Phần tử hữu hạn nó là cái gì? Xin thưa với các bạn (tôi nói trong ngữ cảnh lĩnh vực CFD và cũng chỉ đề cập đến lĩnh vực này mà thôi) phần tử ở đây là các hàm số cơ sở, và hữu hạn là vì không gian xác định của các hàm số cơ sở này là hữu hạn. Một phương pháp khá phổ biến và phát triển ngày nay mà mình biết đến là phương pháp phần tử hữu hạn không liên tục Galerkin (Discontinuous Finite Element Method Galerkin). Thông thường, các hàm cơ sở được định nghĩa trên miền kiểm soát (thể tích kiểm soát). Các hàm số (hay chính xác hơn là lời giải bài toán mà ta cần tìm) trên miền kiểm soát sẽ được phân tích trong không gian hàm theo các hàm cơ sở đã chọn. Không gian hàm cơ sở mà ta chọn cho một bài toán có dạng như nhau trên các miền kiểm soát khác nhau, chúng chỉ khác nhau về tập xác định. Xét bài toán ví dụ dưới đây các bạn sẽ dễ hình dung vấn đề hơn.

Ví dụ, xét bài toán biên phương trình đối lưu với sự có mặt của phần tử nguồn sau đây:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} = S(x), 0 < x < 1 \\ u(0, t) = 0 \\ u(x, 0) = 0 \end{cases} \quad (1)$$

Gọi K — bậc của không gian hàm (là bậc cao nhất của các hàm cơ sở, giả sử các hàm cơ sở có dạng đa thức), K_f — số lượng hàm cơ sở trong mỗi phần tử (trong mỗi thể tích kiểm soát), rõ ràng là $K_f = K + 1$. $\{\varphi_i\}$ — các hàm cơ sở,

$$\varphi_1 = 1, \varphi_2 = \frac{x - x_i}{h}, \varphi_3 = \left(\frac{x - x_i}{h}\right)^2, \dots$$

$S(x) = x$ — phần tử nguồn góp mặt trong phương trình đối lưu ở trên.

Sau khi đã định nghĩa xong các khái niệm cần thiết, nghiệm cần tìm trong mỗi phần tử sẽ được tái tổ chức lại (reconstruction) theo công thức sau:

$$u^j(x) = u^j + \sum_{i=1}^{K_f} p_i^j \varphi_i, \text{ tức là nó sẽ được khai triển theo các hàm cơ sở.}$$

Lần lượt nhân phương trình (1) cho từng hàm số trong không gian hàm cơ sở rồi lấy tích phân theo thể tích kiểm soát, ta có:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} \varphi_i dx + \int_{\Omega} \varphi_i \frac{\partial u}{\partial x} dx = \int_{\Omega} S \varphi_i dx \quad (2)$$

Sử dụng công thức tính tích phân từng phần:
$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \varphi_i \frac{\partial u}{\partial x} dx = \varphi_i u \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} - \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} dx$$

cho biểu thức (2) đối với từng phần tử thứ i ta có:

$$\begin{cases} M \left(\frac{\Delta u p_i^j}{\Delta t} \right) = \left(\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} S \varphi_i dx + \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \nabla \varphi_i u dx - U \varphi_i \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \right) = \vec{R}(\vec{u}p) \\ U \left(x_{i+\frac{1}{2}} \right) = u \left(x_{i+\frac{1}{2}} \right) = \sum_1^{K_f} u p_i^j \varphi_i \\ U \left(x_{i-\frac{1}{2}} \right) = u \left(x_{i-\frac{1}{2}} \right) = \sum_1^{K_f} u p_i^{j-1} \varphi_i \end{cases} \quad (3)$$

Ở đây ta sử dụng up để kí hiệu nghiệm nhận được trong quá trình tính toán để phân biệt với nghiệm đúng, nghiệm giải tích u .

Công thức tính nghiệm ở lớp trên (ở bước thời gian tiếp theo) như sau:

$$\vec{u}p^{new} = \vec{u}p^{old} + \Delta t M^{-1} \vec{R}(\vec{u}p),$$

trong đó $M = \begin{pmatrix} \int \varphi_1 \varphi_1 & \dots & \int \varphi_1 \varphi_{K_f} \\ \dots & \dots & \dots \\ \int \varphi_{K_f} \varphi_1 & \dots & \int \varphi_{K_f} \varphi_{K_f} \end{pmatrix}$ là ma trận đôi trọng (matrix of weights), $\vec{R}$ —

vector sai số kép của nghiệm. Phần tử j của vector sai số kép được tính theo công

$$\text{thức: } R_j = \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} S \varphi_j dx + \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} dx - U \varphi_j \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}}, \text{ где } u^i(x) = u^i + \sum_{j=1}^{K_f} p_j^i \varphi_j.$$

Như một bài thực hành đơn giản, các bạn có thể xét một số trường hợp cụ thể sau đây:

1. Xấp xỉ nghiệm bậc nhất (sử dụng không gian hàm cơ sở có bậc 0)
 $K = 0, K_f = 1, \varphi_1 = 1$
 $M = [1]$
 $M^{-1} = [1]$

$$\bar{R} = \left[\frac{x^2}{2} \Big|_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} - (UR - UL) \right] = \left[hx_i - \left(U \left(x_{i+\frac{1}{2}} \right) - U \left(x_{i-\frac{1}{2}} \right) \right) \right], \text{ trong đó}$$

$$U \left(x_{i+\frac{1}{2}} \right), U \left(x_{i-\frac{1}{2}} \right) \text{ tính theo công thức (3).}$$

2. Xấp xỉ nghiệm với độ chính xác bậc 2 (sử dụng không gian hàm cơ sở bậc nhất)

$$K = 1, K_f = 2, \{\varphi_1, \varphi_2\} = \left\{ 1, \frac{x - x_i}{h} \right\}$$

$$M = \begin{pmatrix} h & 0 \\ 0 & \frac{h}{12} \end{pmatrix}$$

$$M^{-1} = \frac{12}{h} \begin{pmatrix} \frac{1}{12} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\bar{R} = \begin{bmatrix} R_1 \\ R_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} hx_i - (UR - RL) \\ \frac{h^2}{12} + up_1^i - \left(\varphi_2 \left(x_{i+\frac{1}{2}} \right) UR - \varphi_2 \left(x_{i-\frac{1}{2}} \right) UL \right) \end{bmatrix}$$

3. Xấp xỉ nghiệm với độ chính xác bậc 3 (sử dụng không gian hàm cơ sở có bậc 2)

$$K = 1, K_f = 2, \{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3\} = \left\{ 1, \frac{x - x_i}{h}, \left(\frac{x - x_i}{h} \right)^2 \right\}$$

$$M = h \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{1}{12} \\ 0 & \frac{1}{12} & 0 \\ \frac{1}{12} & 0 & \frac{1}{80} \end{pmatrix}$$

$$M^{-1} = \frac{1}{h} \begin{pmatrix} \frac{9}{4} & 0 & -15 \\ 0 & 12 & 0 \\ -15 & 0 & 180 \end{pmatrix}$$

Phương pháp phần tử hữu hạn đại khái là vậy.

5. Nhận xét tổng quan

Xét về độ phức tạp ta thấy phương pháp FDM là đơn giản nhất, dễ code và code chạy mượt mà nhất, ít tốn kém tài nguyên máy tính nhất. Phương pháp FVM đòi hỏi code công phu và tốn kém tài nguyên hơn. Phương pháp FEM, theo quan điểm cá nhân tôi, là phức tạp nhất, và còn nhiều vấn đề chưa rõ ràng về phương pháp này. Nhìn chung trong CFD ngày nay, các phần mềm công nghiệp hiện đại chủ yếu sử dụng FVM. FEM đang trong quá trình debug và testing.

Xét về độ tin cậy của các phương pháp trong CFD. FDM là phương pháp không bảo toàn, vì thế nghiệm thu được không phải lúc nào cũng bảo đảm được các tính chất vật lý cần thiết của từng bài toán (nghiệm không xác thực). FVM là phương pháp bảo toàn, vì thế nó tốt hơn về phương diện này. Thường thì nghiệm thu được nhờ FVM sẽ đảm bảo được các tính chất bảo toàn và định luật tăng entropy. FEM xây dựng cơ sở hàm tỉ mỉ công phu cũng có thể đáp ứng các tính chất vật lý cần thiết một cách đúng đắn. Tuy vậy, tiến hành debug FEM cho nhiều lớp bài toán cần tốn nhiều thời gian công sức hơn so với FVM.

Các vấn đề về tính ổn định trong FDM là rõ ràng nhất. FEM khó đánh giá tính ổn định do sự góp mặt của các phần tử phi tuyến là các vector sai số kép cùng ma trận đối trọng. Câu hỏi lớn đặt ra khi xét đến bài toán hội tụ trong FEM.

Nhìn chung FDM phù hợp với việc nghiên cứu, tiếp cận phương pháp CFD cho các đối tượng mới. FVM đáp ứng nhu cầu các bài toán thực tiễn. FEM là đối tượng nghiên cứu, và tiềm năng, rất có thể nó sẽ là sự lựa chọn của tương lai vì rất nhiều tinh túy đều tập trung ở đây và nhiều công sức của các nhà bác học cũng đang đổ dồn vào đây.

Hi vọng các bạn đã có thể hình dung được đôi chút về từng phương pháp sử dụng trong CFD.