

# Сравнение эффективности вычислительных алгоритмов пакетов *OpenFOAM* и *STAR-CCM+* при моделировании сверхзвуковых струйных течений

А. Аль-Зуби, Й. Белке (Ingenieurbüro Dr. Beilke), М.Д. Калугин, В.Н. Корчагова, М.В. Крапошин (ИСП им. В.П. Иванникова РАН)

## 1. Введение

На сегодняшний день программное обеспечение, основанное на методах вычислительной гидро-, аэро- и газодинамики, является незаменимым и обязательным инструментом при решении прикладных задач проектирования и эксплуатации технических устройств во всех отраслях промышленности. В связи с этим успешность решения прикладной задачи во многом обеспечивается выбором наиболее подходящего вычислительного метода и его реализации.

Существующее разнообразие численных подходов и использующих их программных средств делают задачу выбора оптимального CAE-инструмента весьма непростой. Обычно поиск инструмента начинается с формирования набора требований, позволяющих судить о соответствии того или иного программного комплекса поставленным целям и задачам исследования. На основе этих требований формируется список объективных показателей, определяющих степень пригодности подхода (программы) для решения рассматриваемой проблемы. Основным источником информации об объективных показателях, как правило, является эксплуатационная документация прикладных программ: различные руководства пользователя, программиста и оператора, материалы по верификации моделей, мнения экспертов и т.д.

На содержание документации и форму подачи материала в ней существенно влияют такие факторы, как специализация программ (исторически сложившаяся, если речь идет о многофункциональных программах), личный опыт разработчиков, а также имеющиеся вычислительные ресурсы. Подобранные тестовые примеры в документации, способы оценки результатов тестирования, описания математических моделей и численных методов могут быть освещены по-разному. Это зачастую делает невозможным непосредственное сравнение на основе эксплуатационной документации.

Задача усложняется при сравнении программного обеспечения (ПО) с открытым и закрытым исходным кодом: описание возможностей свободного программного обеспечения (СПО) и тестовых примеров в документации часто носят фрагментированный, а иногда и незаконченный характер.

Не вызывает сомнений, что сегодня СПО широко используется в коммерческих проектах информационной и сетевой отраслей. Однако, несмотря на растущий интерес к открытому ПО со стороны предприятий машиностроительной промышленности, внедрение СПО для численного моделирования там

происходит достаточно медленно. Это связано как с консервативностью самой отрасли и исторически сложившегося выбора в пользу коммерческих программ, так и с недостатками СПО; в первую очередь здесь следует назвать плохо очерченную область применимости, отсутствие графического интерфейса, а также высокие затраты на систему подготовки специалистов и поддержку пользователей (а то и полное её отсутствие). В связи с этим практический интерес представляют анализ осуществимости взаимной замены открытого и проприетарного ПО в области численного моделирования и сопоставление их функциональных возможностей [1-3].

Численное решение задач механики сплошных сред обычно включает три этапа:

- 1) подготовка исходных данных (препроцессинг);
- 2) решение задачи средствами численных алгоритмов;
- 3) анализ полученных результатов (постпроцессинг).

Поскольку этап численного решения задачи в наименьшей степени зависит от квалификации пользователя (при правильно сформированных исходных данных), условимся, что анализируемая эффективность вычислительных алгоритмов ПО определяется точностью и скоростью решения тестовых примеров из выбранной прикладной области. Вопросы, касающиеся оценки эффективности программы с точки зрения простоты интерфейса пользователя, а также стоимости подготовки специалистов и поддержки пользователей, могут быть отнесены в первую очередь к этапам пре- и постпроцессинга. Такое разделение, пусть и несколько примитивное, позволяет не только сравнить две программы в условиях существенного различия бизнес-моделей, но и оценить степень их взаимозаменяемости.

Одним из актуальных направлений исследований, возникающих во многих промышленных приложениях газодинамики (работа систем генерации газа в подушках безопасности автомобиля, процессы при старте ракеты-носителя и пр.), является моделирование сверхзвуковых струй вязкого сжимаемого газа. Для сравнения выберем пакет *STAR-CCM+* среди коммерческих программных комплексов, и *OpenFOAM* – среди открытых программ. Этот выбор обосновывается следующими факторами:

- наличие опыта решения вышеуказанных газодинамических задач (*OpenFOAM*, Россия, и *STAR-CCM+*, Германия);

- идеологическое сходство численных алгоритмов, реализованных в данных программных комплексах;

- наличие коммерческой лицензии *STAR-CCM+* у авторов.

Таким образом, целью работы является сравнение производительности открытого (*OpenFOAM*) и коммерческого (*STAR-CCM+*) программного обеспечения, чтобы получить представление о преимуществах и недостатках их вычислительных алгоритмов, используемых при решении типовых задач моделирования течения сжимаемых сверхзвуковых струй. Результаты сравнения производительности могут оказаться полезными для специалистов, желающих заранее оценить целесообразность привлечения этих программ в качестве “вычислителя” и возможность их взаимной замены.

## 2. Методика сравнения пакетов

Поскольку эффективность ПО в нашем случае оценивается только для этапа численного решения (т.е. программы выступают в качестве “вычислителей”), для корректного сравнения необходимо:

- задаться критериями оценки эффективности их численных алгоритмов;

- определиться с используемыми вычислительными ресурсами (оборудованием);

- подобрать тестовые задачи, по результатам решения которых будет проводиться сравнение программ.

При сравнении вычислительных алгоритмов двух программ в качестве объективных показателей выбраны два ключевых параметра:

- 1 точность решения – насколько точно полученное численное решение соответствует реальной физической картине, экспериментальным данным или известному аналитическому решению;

- 2 скорость вычислений – насколько быстро можно получить численное решение на имеющейся машине.

На точность расчета влияют допущения, выбранные на этапе построения математической модели (ММ), способ аппроксимации полученных уравнений ММ, а также реализация вспомогательных процедур численного алгоритма. Для соблюдения объективности сравнения производительности программ необходимо выбрать “максимально близкие” настройки численных моделей обоих программных комплексов, обеспечивающие приемлемую точность вычислений.

При запуске тестовых задач в разных программных комплексах важно использовать идентичные сетки. Из-за особенностей реализации обоих программных комплексов не представляется возможным обеспечить полное совпадение их численных моделей, поэтому необходимо подобрать такие настройки (математические модели и способ их аппроксимации), чтобы результаты решения одной и той же задачи на одинаковых сетках были схожими.

На скорость вычислений (производительность) оказывают влияние в первую очередь следующие факторы:

- количество шагов по времени, которое необходимо совершить для достижения требуемого момента или состояния;

- вычислительная сложность одного шага по времени;

- эффективность параллельной реализации (затраты на обмен данными между параллельными потоками выполнения);

- ввод-вывод данных во время выполнения расчета.

Параметры тестовых примеров подбираются так, чтобы время расчета было существенно больше затрат времени на ввод-вывод данных, что делает этот фактор несущественным.

Количество шагов по времени определяется разными способами в зависимости от критерия завершения расчета (достигнут заданный момент времени либо удовлетворено условие достижения стационарного состояния). В первом случае количество шагов (итераций) определяется устойчивостью численного алгоритма и численной вязкостью (требуемой точностью расчета), во втором – скоростью сходимости алгоритма.

Вычислительную сложность одной итерации по времени определяет множество факторов:

- выбор схем аппроксимации слагаемых уравнений;

- настройки внутренних параметров выбранных численных схем;

- способ решения системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) в случае использования неявных схем;

- эффективность программной реализации численных схем.

Для сопоставления по указанным параметрам (точность/скорость вычисления) авторами были выбраны две задачи: модельная и промышленная. Модельная задача позволяет сопоставить различные характеристики двух вычислительных алгоритмов и подобрать оптимальные настройки численных схем для данной прикладной области. Сравнение на основе промышленной задачи позволяет проанализировать поведение программ в условиях, приближенных к реальности, а также понять, насколько переносимы на реальный случай выводы, сделанные при анализе модельной задачи.

Программный комплекс *OpenFOAM* был установлен на кластере ИСП РАН (*HP ProLiant BL2x220 – 20* двухъядерных машин с *Intel Xeon CPU X5670 2.93GHz*, соединенных *Infiniband DDR*).

Комплекс *STAR-CCM+* установлен на рабочей станции *Ingenieurbüro Dr. Beilke* с шестиядерным процессором *Intel Xeon E5-1650 v3*.

Поскольку вычислительные ресурсы ИСП РАН ([www.unicfd.ru](http://www.unicfd.ru)) и *Ingenieurbüro Dr. Beilke* ([www.beilke-cfd.de](http://www.beilke-cfd.de)) различаются по производительности, необходимо провести оценку скорости работы на машинах каждой из сторон с тем, чтобы дальнейшее сопоставление производительности было корректным.

Итак, исследование состояло из следующих этапов:

1) на первом этапе выбирались настройки численных схем *STAR-CCM+* и *OpenFOAM*, при которых схемы обоих программных комплексов были достаточно близки друг к другу, и при этом полученное численное решение было наиболее близко к эталонным экспериментальным данным для модельной задачи;

2) на втором этапе сравнивалась производительность *STAR-CCM+* и *OpenFOAM* при решении модельной задачи;

3) на заключительном этапе сравнивалась производительность *STAR-CCM+* и *OpenFOAM* при решении задачи индустриального масштаба.

### 3. Описание тестовых задач

Для тестирования были выбраны следующие задачи:

- **модельная задача** об образовании диска Маха при истечении из сопла струи вязкого сжимаемого газа, характеристики которой определены из эксперимента Ладенбурга [4];

- **индустриальная задача** – моделирование течения газа в имитаторе системы генерации подушки безопасности автомобиля.

#### 3.1. Модельная задача: течение в сверхзвуковом сопле Ладенбурга

Выбранная задача позволяет оценить точность вычислительных алгоритмов двух программ и сопоставить их настройки на основе сравнения с экспериментальными данными. В рассматриваемом случае истечения сверхзвуковой струи при её расширении после среза сопла образуется структура, называемая Маховским отражением или диском Маха (рис. 1). Течение в области между срезом сопла и первой ударной волной может рассматриваться как невязкое и осесимметричное. Наличие диска Маха, его высота и расстояние от него до среза сопла, известные из эксперимента [4], являются величинами, надежно характеризующими вычислительный алгоритм.

Для выбранного из [4] случая исходные данные следующие: рабочим телом является воздух с молярной массой  $W = 28.96$  г/моль, уравнением состояния совершенного газа, удельной теплоемкостью при постоянном давлении  $C_p = 1004.5$  Дж/(кг·К), коэффициентом динамической вязкости, зависящим от температуры по закону Сюзерланда. В начальный момент времени температура воздуха во всей расчетной области равна 298 К, давление – 1 бар, скорость  $U$  – нулю. На выходном сечении сопла характеристики струи заданы постоянными:  $T = 247.1$  К,  $p = 2.72$  бар,  $U = 315.6$  м/с. Вектор скорости на срезе сопла направлен вдоль оси струи. Геометрия Маховского отражения следующая: высота диска Маха  $H_M$  равна 1.7 мм, его положение  $L_M$  – 13.3 мм от среза сопла.

#### 3.2. Индустриальная задача: имитатор системы генерации газа подушки безопасности

Рассматривается течение газа в экспериментальной установке (рис. 2а), представляющей собой имитатор работы системы генерации газа (ГГ) при срабатывании подушки безопасности (ПБ) автомобиля [5,6]. Экспериментальная установка состоит из модели газогенератора, помещенной в герметичный корпус и прифланцованной к устройству подачи сжатого воздуха гиперзвукового канала *H2K DLR* Института аэродинамики и гидромеханики (гор. Кёльн). Имитатор газогенератора состоит из двух цилиндров (рис. 2б), один из которых проходит сквозь другой с образованием кольцевого зазора. По внутреннему цилиндру сжатый воздух направляется в зазор. В зазоре воздух распределяется по периметру и выходит из него в радиальном направлении через набор отверстий, выточенных в обечайке внешнего цилиндра. Отверстия во внешнем цилиндре равномерно расположены по его периметру четырьмя симметричными кольцевыми рядами по 10 отверстий в каждом ряду.

Получившиеся сверхзвуковые свободные струи отвечают за раскрытие воздушного мешка подушки безопасности в салоне автомобиля в случае аварии. Анализ структуры течения этих струй позволяет ответить на вопросы, касающиеся известной проблемы

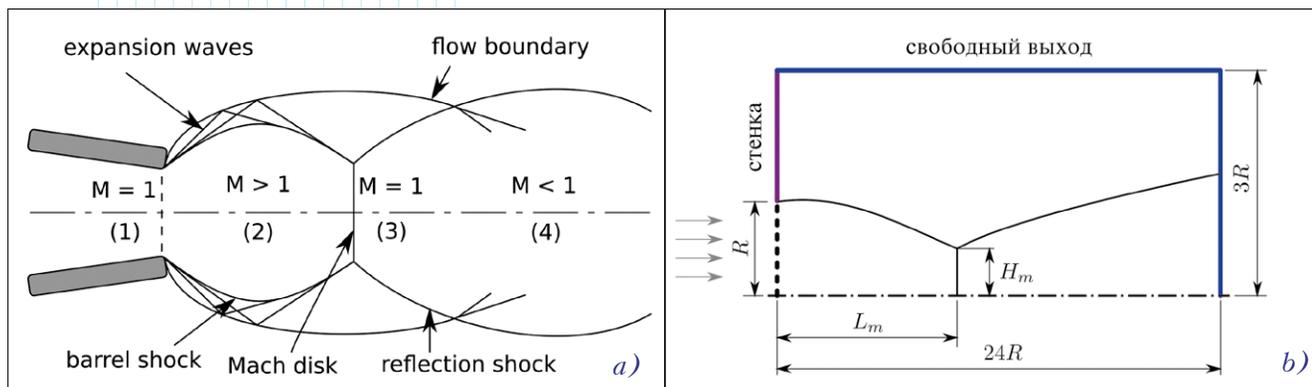


Рис. 1. Диск Маха: а) иллюстрация формирования диска ( $M$  – число Маха); б) расчетная схема решения задачи о моделировании сверхзвуковой струи

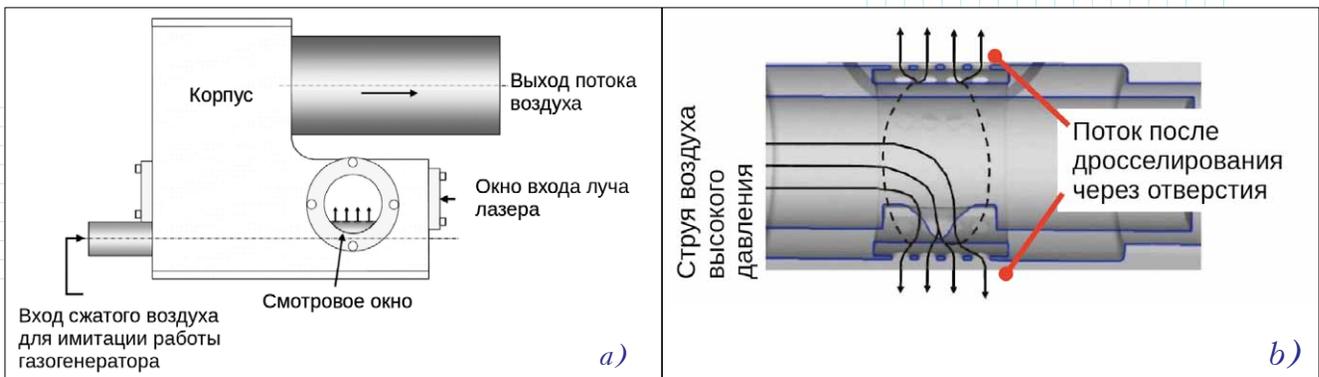


Рис. 2. Экспериментальная установка: а) общая схема; б) схема модели газогенератора

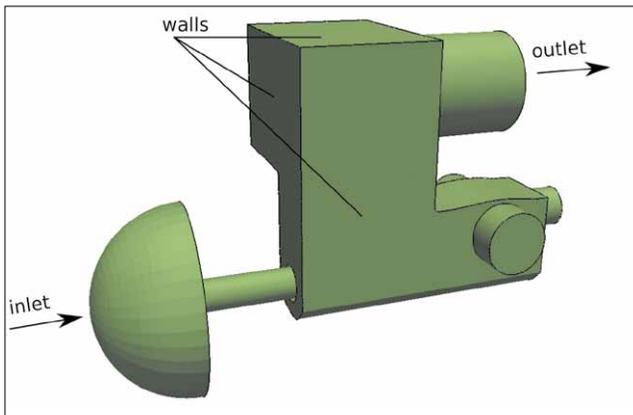


Рис. 3. Расчетная схема имитатора ГГ ПБ

снижения риска получения травм вследствие раскрытия самой подушки. В экспериментальной установке воздушный мешок не учитывался.

Расчетная схема имитатора ГГ ПБ, разработанная в *Ingenieurbüro Dr. Beilke*, представлена на рис. 3. Расчетная область включает в себя порядка 3 млн. гексаэдральных элементов. Принимается, что рабочим телом является воздух с уравнением состояния совершенного газа.

Параметры торможения потока газа на входе заданы следующим образом: полное давление равно 400 бар, температура торможения – 760 К. Параметры среды в начальный момент времени в расчетной области и на выходе из нее соответствуют нормальным условиям.

### 3.3. Настройки численных схем

Многообразие настроек вычислительных алгоритмов обоих программных комплексов можно условно разбить на три группы, оказывающие наибольшее влияние на численное решение:

- алгоритм решения системы уравнений газодинамики (совместное (*coupled*) решение уравнений, расщепление по физическим процессам);
- способ расчета численных потоков массы, энергии и импульса (схемы *HLL*, *AUSM* и др.);
- способ аппроксимации физических величин при расчете потоков через грани контрольных

объемов (использование различных типов интерполяции и ограничителей численных потоков).

При решении задачи средствами пакета *OpenFOAM* использовалось приложение-решатель ***rhoPimpleCentralFoam*** [7,8], разработанное коллективом сотрудников ИСП РАН для моделирования течения сжимаемых сред в широком диапазоне числа Маха. Для расчета численных потоков применялась схема Курганова (аналог схемы *Harten – Lax – van Leer*); для аппроксимации физических величин на гранях ячеек – интерполяция с ограничителем потоков *Minmod*; для решения уравнений газодинамики – алгоритм с расщеплением по процессам *PIMPLE (PISO-SIMPLE)*. Динамический шаг по времени подбирался с помощью числа Куранта, значение которого не должно превышать  $\frac{1}{2}$  для выполнения условия устойчивости алгоритма. Стационарное течение средствами *OpenFOAM* было получено с помощью метода установления с локальным шагом по времени (***LTS – Local Time Stepping***).

В пакете *STAR-CCM+* использовались следующие конфигурации:

- 1) алгоритмы на основе расщепления по физическим процессам (стандартные решатели *Transient SIMPLE* и *PISO Unsteady*) со схемой *MUSCL* для интерполяции потоков;
- 2) алгоритм совместного решения системы уравнений газодинамики (стандартный решатель *Transient Coupled*) со схемой *AUSM* для расчета численных потоков в сжимаемой среде (для данного алгоритма число Куранта может существенно превышать единицу, что позволяет вести расчет с большим шагом по времени).

В обоих пакетах расчеты проводились как с включенной *URANS*-моделью турбулентности *k- $\omega$  SST*, так и без нее.

## 4. Результаты сравнения производительности и их анализ

При сравнении результатов расчетов использовались следующие условные обозначения:

- используемый пакет – *OpenFOAM (OF)* или *STAR-CCM+ (CCM+)*;
- используемый решатель:

– в пакете *OpenFOAM* – *rhoPimpleCentralFoam*;  
 – в пакете *STAR-CCM+* – *Transient Coupled*,  
*Transient SIMPLE*, либо *PISO Unsteady*;

• модель турбулентности, если используется (*kOmegaSST*);

• число Куранта (максимальное значение – *Max Co* для *OpenFOAM*; среднее и максимальное значения – *Mean Co* и *Max Co* – для *STAR-CCM+*) для режимов с нестационарным режимом расчета, либо указание на режим расчета *LTS*.

Поскольку на производительность вычислительного алгоритма существенное влияние оказывают настройки численных схем, определяющие также точность численного решения, то и сравнение пакетов необходимо выполнять для настроек, обеспечивающих наилучшее и сопоставимое качество решения.

#### 4.1. Сравнение точности вычислительных алгоритмов двух пакетов

Расчеты течения в модельной задаче с использованием пакетов *OpenFOAM* и *STAR-CCM+* показали, что все выбранные конфигурации настроек обеих программ позволяют воспроизвести Маховское отражение (табл. 1). Отклонение расчетного положения диска Маха от экспериментального варьируется в пределах от 0.7% для *STAR-CCM+* до 5% для *OpenFOAM*. Отклонение расчетной высоты диска Маха от экспериментальных значений варьируется от 5% (*OpenFOAM*) до 23% (*STAR-CCM+*). В целом можно сказать, что пакет *STAR-CCM+* дает более близкое к эксперименту положение диска  $L_m$ , но завышает его размер  $H_m$  по сравнению с *OpenFOAM*, который

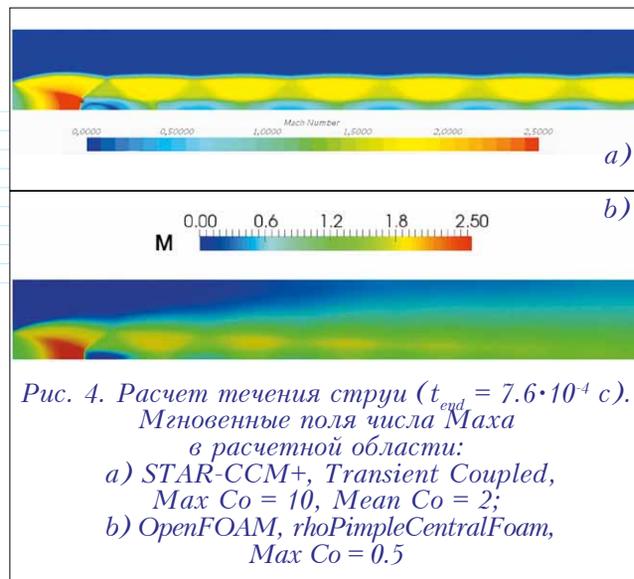


Рис. 4. Расчет течения струи ( $t_{end} = 7.6 \cdot 10^{-4}$  с).  
 Мгновенные поля числа Маха  
 в расчетной области:  
 а) *STAR-CCM+*, *Transient Coupled*,  
*Max Co* = 10, *Mean Co* = 2;  
 б) *OpenFOAM*, *rhoPimpleCentralFoam*,  
*Max Co* = 0.5

прогнозирует большее расстояние до диска Маха при достаточно хорошем совпадении с экспериментом по размеру  $H_m$ .

Качественный анализ картин течения позволяет сделать вывод, что проведение расчетов с большим значением числа Куранта (в данном случае – с помощью решателя *STAR-CCM+ Transient Coupled*) приводит к внесению численной диффузии, которая сглаживает решение, в результате чего получаемая картина течения близка к стационарной (рис. 4а). К похожему результату приводит привлечение *URANS*-моделей (таких, как *k- $\omega$  SST*), используемых для

Табл. 1. Сопоставление экспериментальных и расчетных данных измерений положения и размера диска Маха

Условное обозначение режима расчета	$L_m$ , мм	$ L_m - L_{m\_exp}  / L_{m\_exp} \cdot 100\%$	$H_m$ , мм	$ H_m - H_{m\_exp}  / H_{m\_exp} \cdot 100\%$
Эксперимент		$L_{m\_exp} = 13.3$		$H_{m\_exp} = 1.7$
<i>OF</i> , <i>rhoPimpleCentralFoam</i> , <i>Max Co</i> = 0.5	13.82	3.9%	1.70	0
<i>OF</i> , <i>rhoPimpleCentralFoam</i> + <i>kOmegaSST</i> , <i>Max Co</i> = 0.5	13.80	3.7%	1.70	0
<i>CCM+</i> , <i>Transient Coupled</i> , <i>Mean Co</i> = 2, <i>Max Co</i> = 10	13.15	1.1%	2.10	23%
<i>CCM+</i> , <i>Transient Coupled</i> + <i>kOmegaSST</i> , <i>Mean Co</i> = 2, <i>Max Co</i> = 2	13.40	0.7%	2.00	17.6%
<i>CCM+</i> , <i>Transient Coupled</i> , <i>Mean Co</i> = 0.5, <i>Max Co</i> = 0.5	13.41	0.8%	1.49	12.3%
<i>CCM+</i> , <i>Transient SIMPLE</i> , <i>Mean Co</i> = 0.5, <i>Max Co</i> = 0.5	13.06	1.8%	1.93	13.5%
<i>CCM+</i> , <i>PISO Unsteady</i> , <i>Mean Co</i> = 0.5, <i>Max Co</i> = 10	10.60	20%	1.47	13.5%
<i>OF</i> , <i>rhoPimpleCentralFoam</i> , <i>LTS</i>	14.00	5.2%	1.65	2.9%
<i>OF</i> , <i>rhoPimpleCentralFoam</i> + <i>kOmegaSST</i> , <i>LTS</i>	13.95	4.8%	1.60	5.8%

получения усредненной картины течения. В обоих случаях решение дополнительно сглаживается начиная со второй “бочки”, но при этом положение диска Маха меняется незначительно. Стационарное состояние достигается при этом за время моделирования порядка  $10^{-3}$  с. При расчетах с числом Куранта порядка 0.5 размывание решения будет значительно ниже, проявляется неустойчивость течения, возникновение которой носит периодический характер. Численное решение, наиболее близкое к эксперименту, получается при использовании программы-решателя *rhoPimpleCentralFoam* пакета *OpenFOAM* в нестационарном режиме расчетов, а также солверов *Transient SIMPLE* и *Transient Coupled* пакета *STAR-CCM+*.

#### 4.2. Сравнение производительности вычислительных алгоритмов двух пакетов на модельной задаче

Проанализируем быстродействие вычислительных алгоритмов программных комплексов при решении модельной задачи. На рис. 5 приведены диаграммы, показывающие вычислительные затраты, приведенные к одному процессорному ядру. На диаграммах отражены результаты сравнения производительности пакетов *STAR-CCM+* и *OpenFOAM* в зависимости от основных настроечных параметров численных схем и используемого вычислительного оборудования. Все величины приведены в относительных единицах. Показатели производительности на рис. 5а и 5с

нормировались на производительность рабочей станции *Ingenieurbüro Dr. Beilke* (столбец №2).

Прежде всего, сравним производительность машин, на которых были проведены вычисления. Из первых двух столбцов диаграммы 5а видно, что скорость расчетов на процессорах *Ingenieurbüro Dr. Beilke* примерно в два раза выше, чем на кластере ИСП РАН. В дальнейшем измеренная производительность приводится к производительности 1 ядра рабочей станции *Ingenieurbüro Dr. Beilke*.

Сравнение вычислительных затрат показывает, что при схожих настройках вычислительных алгоритмов в обеих программах и при максимальном числе Куранта, равном 0.5, скорость расчета с помощью *OpenFOAM* будет примерно в два раза выше, чем при использовании любого из выбранных алгоритмов *STAR-CCM+* (рис. 5с). Вычислительные затраты на одну итерацию, выполняемую с помощью реализованного в *STAR-CCM+* алгоритма совместного решения системы уравнений, могут быть кратно (в два и более раз) выше, чем при использовании алгоритма расщепления по процессам, применяемого в *OpenFOAM*. В то же время пакет *STAR-CCM+*, в отличие от *OpenFOAM*, позволяет вести расчеты с большими значениями числа Куранта, что дает серьезный выигрыш по времени вычислений за счет существенного снижения общего количества шагов по времени (рис. 5б).

Таким образом, если требуется с минимальными вычислительными затратами получить усредненную картину течения, соответствующую определенному срезу времени, то, без сомнения, более эффективен пакет *STAR-CCM+*, поскольку понадобится

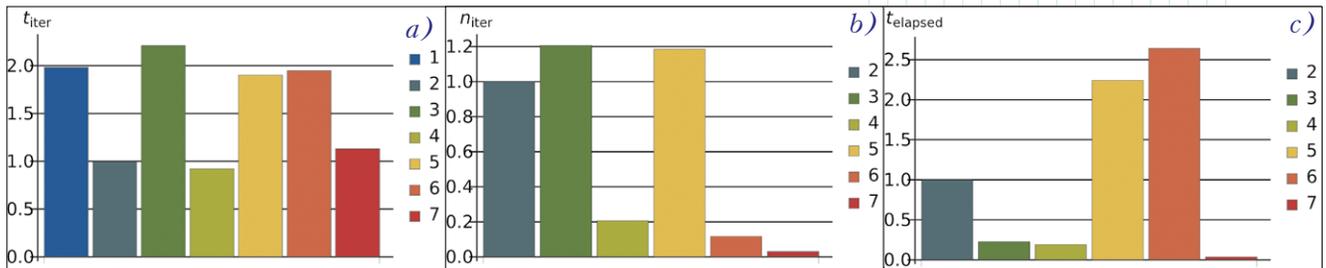


Рис. 5. Сравнение производительности вычислительных алгоритмов пакетов *OpenFOAM* и *STAR-CCM+* для модельной задачи течения сверхзвуковой струи:

- а) сопоставление вычислительных затрат на один временной шаг по времени;
- б) сопоставление общего количества шагов по времени, выполненных при моделировании;
- в) сопоставление общих временных затрат на решение модельной задачи.

Обозначения:

- 1 – решатель *rhoPimpleCentralFoam* *OpenFOAM*,  $Max Co = 0.5$ , запущен на кластере ИСП РАН;
- 2 – решатель *rhoPimpleCentralFoam*,  $Max Co = 0.5$ , запущен на рабочей станции *Ingenieurbüro Dr. Beilke*;
- 3 – решатель *STAR-CCM+ Transient SIMPLE*,  $Mean Co = 0.5$ ,  $Max Co = 0.5$ , запущен на рабочей станции *Ingenieurbüro Dr. Beilke*;
- 4 – решатель *STAR-CCM+ PISO Unsteady*,  $Mean Co = 0.5$ ,  $Max Co = 2$ , запущен на рабочей станции *Ingenieurbüro Dr. Beilke*;
- 5 – решатель *STAR-CCM+ Transient Coupled*,  $Mean Co = 0.5$ ,  $Max Co = 0.5$ , запущен на рабочей станции *Ingenieurbüro Dr. Beilke*;
- 6 – решатель *STAR-CCM+ Transient Coupled*,  $Mean Co = 2$ ,  $Max Co = 10$ , запущен на рабочей станции *Ingenieurbüro Dr. Beilke*;
- 7 – решатель *OpenFOAM rhoPimpleCentralFoam* в LTS-модификации,  $Max Co = 0.5$ , запущен на рабочей станции *Ingenieurbüro Dr. Beilke*.

Величины, демонстрируемые на диаграммах, отнесены к значениям, соответствующим режиму 2.

меньшее количество шагов по времени. Если же требуется детальное моделирование динамики процесса с наименьшими вычислительными затратами, то целесообразно выбрать *OpenFOAM*.

При поиске стационарного состояния средствами *OpenFOAM*, альтернативой алгоритму *PIMPLE* может служить метод установления *LTS*. Вычислительные затраты для алгоритма *rhoPimpleCentralFOAM* с использованием модификации *LTS* будут примерно такими же, как и для “обычного” алгоритма, но при этом общее количество шагов до достижения установившегося состояния может оказаться значительно меньшим (рис. 5б). Таким образом, за счет уменьшения общего числа итераций можно снизить вычислительные издержки *OpenFOAM* и сделать его конкурентоспособным при решении задач поиска стационарного решения. Сам алгоритм установления вносит изменения в численную схему, сказывающиеся на точности моделирования, из-за чего она может снизиться (табл. 1).

Технология параллельных вычислений, основанная на использовании систем с распределенной памятью и реализованная в пакетах *OpenFOAM* и *STAR-CCM+*, позволяет достигать достаточно высокой эффективности масштабирования – порядка 80–90%. При этом, за счет существенного различия в финансовых затратах на одно вычислительное ядро, экономическая целесообразность применения *OpenFOAM* может оказаться выше, чем в случае *STAR-CCM+*. Если затраты на вычисления пропорциональны числу ядер (отметим, что это очень грубое предположение, сильно упрощающее дальнейшие рассуждения), а расчет нужно провести за заданное время, то стоимость затрат на вычисления с помощью *STAR-CCM+* будет составлять  $n_{cores} \cdot (S_{core} + S_{lic})$ , где  $S_{core}$  – стоимость действующей вычислительной техники, включая обслуживание в расчете на 1 вычислительное ядро в единицу времени,  $S_{lic}$  – стоимость лицензии на 1 вычислительное ядро в единицу времени,  $n_{cores}$  – количество ядер, необходимое для решения задачи за заданный период времени. При использовании вычислительного ядра *OpenFOAM* лицензионные отчисления равны нулю.

Условимся, что если некоторый расчет с помощью пакетов *STAR-CCM+* и *OpenFOAM*

необходимо завершить за одинаковое время, то для первого потребуется  $n_{cores}$  ядер, а для второго –  $K_p \cdot n_{cores}$  ядер. Введенный коэффициент  $K_p$  связывает производительность обоих пакетов с помощью отношения вычислительных затрат на один шаг по времени и через отношение общего числа шагов, необходимых для моделирования:

$$K_p = (T^{OF} / T^{CCM}) \times (Co^{CCM} / Co^{OF}),$$

где  $T^{OF}$  – вычислительные затраты (время в секундах) для расчета одного шага по времени на одном процессоре с помощью *OpenFOAM*;  $T^{CCM}$  – вычислительные затраты (время в секундах) для расчета одного шага по времени на одном процессоре с помощью *STAR-CCM+*;  $Co^{OF}$  – средний безразмерный шаг по времени при решении задачи с помощью *OpenFOAM*;  $Co^{CCM}$  – средний безразмерный шаг по времени при решении задачи с помощью *STAR-CCM+*.

Чтобы можно было говорить об экономической эффективности вычислительного ядра пакета *OpenFOAM* по сравнению со *STAR-CCM+*, стоимость вычислений  $S^{OF} = K_p \cdot n_{cores} \cdot S_{core}$  с его помощью должна быть равной или меньшей стоимости вычислений  $S^{CCM} = n_{cores} (S_{core} + S_{lic})$  с помощью *STAR-CCM+*:

$$S^{OF} \leq S^{CCM}.$$

Это означает, что коэффициент пропорциональности вычислительных затрат  $K_p$  пакетов *OpenFOAM* и *STAR-CCM+* должен удовлетворять неравенству:

$$K_p \leq 1 + S_{lic} / S_{core}.$$

Например, как мы уже выяснили, вычислительный алгоритм *rhoPimpleCentralFoam* пакета *OpenFOAM* требует примерно вдвое меньше затрат процессорного времени на один временной шаг моделируемого процесса, чем аналогичные вычислительные алгоритмы пакета *STAR-CCM+*. Следовательно, вычислительное ядро *OpenFOAM* может служить эффективной заменой *STAR-CCM+* при моделировании процессов, для численного исследования которых последний используется с безразмерным шагом по времени  $Co < 1$ .

Табл. 2. Данные о производительности на индустриальной задаче

	<i>OpenFOAM</i>	<i>STAR-CCM+</i>
Кол-во шагов по времени	203 909	115 167
Время выполнения 1 шага по времени (на 1 ядре машины <i>Ingenieurbüro Dr. Beilke</i> )	25 сек	57 сек
Кол-во и тип используемых ядер	144 ядра кластера <i>HP ProLiant BL2x220</i> ИСП РАН	6 ядер рабочей станции <i>Intel Xeon E5-1650 v3 Ingenieurbüro Dr. Beilke</i>
Фактическое время расчета	225 724 сек (2.61 дня)	1 097 210 сек (12.6 дня)

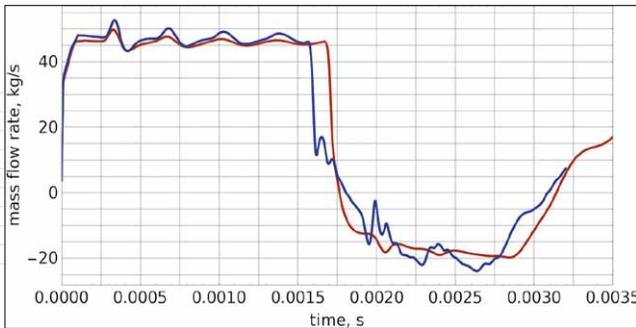


Рис. 6. Сопоставление динамики массового расхода через узкую часть входного участка, рассчитанного с помощью STAR-CCM+ и OpenFOAM // SIMPLE = Implicit Unsteady

Таким образом, если стоимость лицензии коммерческого ПО существенно превышает стоимость вычислительной техники в расчете на одно ядро, то применение свободного ПО может стать выгодным за счет увеличения числа ядер. Чем ниже вычислительные затраты открытого пакета OpenFOAM и чем выше максимально допустимый шаг по времени OpenFOAM по сравнению со STAR-CCM+, тем ощутимее может быть выгода от замены ПО с закрытым кодом на свободно распространяемые программы. В частности, эффективность OpenFOAM можно существенно повысить за счет реализации подходов для решения системы уравнений баланса импульса, массы и энергии с критерием устойчивости  $Co > 1$ .

#### 4.3. Сравнение пакетов на индустриальном примере

Сопоставление значений массового расхода через входное сечение трубы газогенератора, рассчитанных с помощью пакетов OpenFOAM и STAR-CCM+, показывает хорошее совпадение результатов в первой половине переходного процесса и

удовлетворительное – во второй половине (рис. 6). Различия во второй половине переходного процесса могут быть связаны как с особенностями численных схем, так и с высокими значениями числа Куранта ( $Co = 1$  при  $t = 0 \dots 0.0231$ ;  $Co = 2.5$  при  $t > 0.0231$ ) в расчете с использованием STAR-CCM+. Наблюдается качественное совпадение картин течения (рис. 7).

Расчет с помощью пакета STAR-CCM+ всего времени процесса на машине с шестью ядрами занимает примерно 12.5 дней (1 097 210 с), на 144-х ядрах кластера ИСП РАН – 2.61 дня (225 724 с), см. табл. 2. С учетом двукратной разницы в быстродействии вычислительной машины Ingenieurbüro Dr. Veilke и кластера ИСП РАН (см. раздел 4.2), а также высоких накладных затрат на параллельные вычисления в действующей системе ИСП РАН (порядка 50%), время расчета с помощью OpenFOAM на современной вычислительной системе может составлять либо  $12.5 / 2 / 2 = 0.65$  дня (16 часов) на 144-х ядрах, либо те же  $0.65 \times (144 / 36) = 2.6$  дня, но на 36-ти ядрах. При использовании же 144-х ядер и пакета STAR-CCM+ время счета должно было бы составить не менее  $12.5 \times 6 / 144 = 0.52$  дня (без учета потерь, связанных с обменом данными, и с  $Co$ , меняющимся в диапазоне от 0.5 до 2).

Таким образом, производительность открытого пакета OpenFOAM при решении задач промышленного масштаба может быть не ниже, чем у коммерческого пакета STAR-CCM+.

#### Заключение

Взаимозаменяемость открытого и проприетарного ПО в сфере численного моделирования технических устройств может стать основой одного из способов обеспечения технологической безопасности и эффективности предприятия. В ИТ-индустрии открытое программное обеспечение уже является стандартом во многих областях. При этом в области численного моделирования преимущественно используются коммерческие

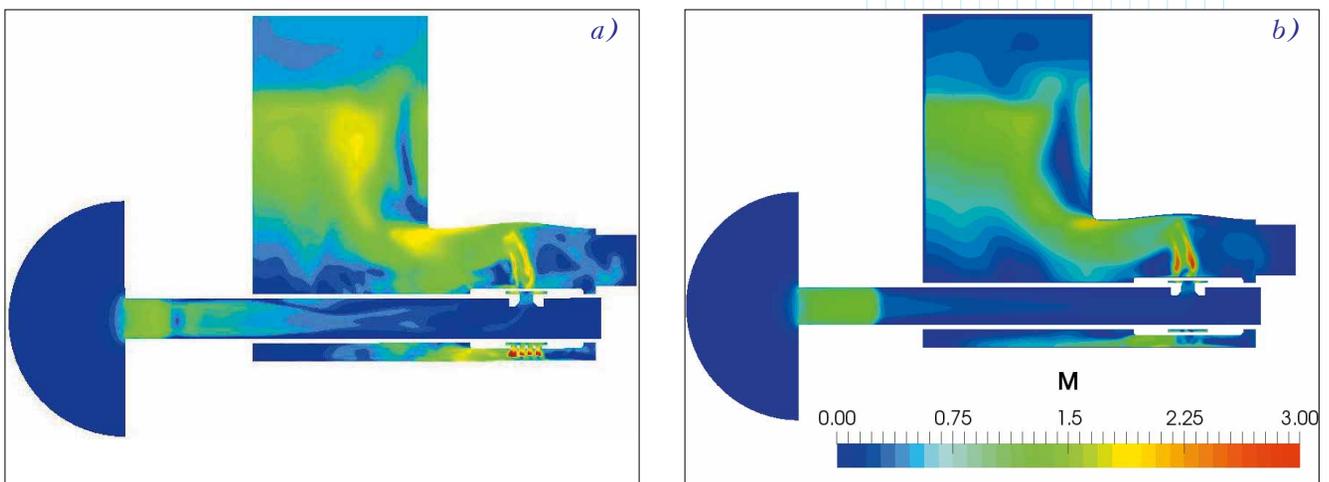


Рис. 7. Распределение числа Маха в момент времени  $t = 0.0015$  с:  
 а) STAR-CCM+, Transient SIMPLE,  $Co_{mean} = 0.5$ ,  $Co_{max} = 2$ ;  
 б) OpenFOAM, rhoPimpleCentralFoam,  $Co = 0.5$

программные пакеты, поскольку внедрению открытых пакетов препятствует ряд причин, среди которых можно указать: недостаток опыта их применения для решения промышленных задач, отсутствие достаточного объема работ по валидации и верификации, а также нехватка инженеров, занимающихся проектированием. В то же время, некоторые коммерческие компании (например – *Volkswagen, Audi*, см. [www.openfoam.com/community/partners.php](http://www.openfoam.com/community/partners.php)) ведут работы в этом направлении и расширяют область промышленного применения открытых пакетов.

Данная работа была посвящена актуальному вопросу сравнительного анализа эффективности вычислительных алгоритмов программного обеспечения с закрытым (*STAR-CCM+*) и открытым (*OpenFOAM*) исходным кодом для решения задач численного моделирования сжимаемых струйных течений. На примере задач об истечении сверхзвуковой струи и работе имитатора газогенератора подушки безопасности автомобиля авторы сравнили вычислительные алгоритмы, используемые в пакетах *OpenFOAM* и *STAR-CCM+*, по точности и производительности расчетов.

В результате было получено, что при наиболее близких друг к другу настройках численных схем, выполнении критерия  $Co < 1$  и удовлетворительно совпадающем численном решении, вычислительные затраты программы-решателя *rhoPimpleCentralFoam* пакета *OpenFOAM* оказались примерно в два раза ниже, чем у аналогичных алгоритмов, реализованных в *STAR-CCM+*. Таким образом, при рассмотрении вопроса возможности замены вычислительного алгоритма пакета *STAR-CCM+* на вычислительный алгоритм открытого пакета *OpenFOAM* следует иметь в виду, что последний имеет двукратное “преимущество”, поскольку позволяет получить аналогичное численное решение с вдвое меньшими вычислительными затратами.

Важным преимуществом коммерческого пакета *STAR-CCM+* следует назвать наличие подходов, позволяющих осуществлять численное интегрирование по времени с большими временными шагами (с числом Куранта  $Co > 1$ ). Такие алгоритмы позволяют добиться кратного преимущества в производительности по сравнению с открытым пакетом *OpenFOAM* при решении задач, связанных с поиском заданного конечного момента времени или стационарного состояния.

В качестве альтернативы *coupled*-подходу в пакете *OpenFOAM* реализован основанный на использовании локального шага по времени метод поиска стационарного решения установившемся. Вычислительная сложность одного шага такого метода сопоставима с методом *PIMPLE*, при этом общее число итераций, необходимое для достижения стационарного состояния, может быть существенно ниже, чем при разрешении переходного процесса.

Таким образом, можно отметить, что **вычислительный алгоритм открытого пакета OpenFOAM вполне может составить конкуренцию коммерческому пакету STAR-CCM+** в задачах моделирования сжимаемых течений, требующих либо подробного разрешения динамики переходных процессов, либо наоборот – оценки осредненного по времени стационарного состояния.

В качестве направления дальнейшего развития вычислительных алгоритмов открытого пакета *OpenFOAM* можно указать необходимость развития подходов, которые позволят ослабить ограничения, накладываемые на величину шага по времени. ☺

### Литература

1. Васильев В.А., Ницкий А.Ю. Исследование масштабируемости задач вычислительной гидроаэродинамики на различных многоядерных и многопроцессорных архитектурах // Уфа: УГАТУ, 2010, т. 14, №5(40), с. 126–132.
2. Welahetti P., Vaagsaether K. Comparison of OpenFoam and ANSYS Fluent: Computational Fluid Dynamic Simulation of Gas-Gas Single Phase Mixing with and without Static Mixer // 9<sup>th</sup> EUROSIM Congress on Modelling and Simulation Oulu, Finland, 12–16 September, 2016, pp. 949–954.
3. Cavar D., Reethoree P.-E., Bechmann A. et al. Comparison of OpenFOAM and EllipSys3D for neutral atmospheric flow over complex terrain // Wind Energy Science Discussions, 2016, vol. 1, pp. 55–70.
4. R. Ladenburg, J. Winckler, and C. C. Van Voorhis. Interferometric Studies of Faster than Sound Phenomena. Part I. The Gas Flow around Various Objects in a Free, Homogeneous, Supersonic Air Stream // Physical Review, 1949, vol. 73, issue 11, pp. 1359–1377.
5. Voges M., Klinner J., Willert C., Blümcke E. PIV Messungen in interagierenden Überschall-Freistrahlen in druckbelasteter Umgebung // GALA 2007, 15. Fachtagung “Lasermethoden in der Strömungsmesstechnik”. Rostock, September 4–6, 2007.
6. Klinner J., Willer C., Glumm M.-S., Blümcke E. Time resolved visualization of density-gradients within the flow field of airbag gas generators. – 16. Fachtagung “Lasermethoden in der Strömungsmesstechnik”. Karlsruhe, September 9–11, 2008.
7. Kraposhin M., Bovtrikova A., Strijhak S. Adaptation of Kurganov–Tadmor numerical scheme // 4<sup>th</sup> International Young Scientists Conference on Computational Science. Procedia Computer Science, 2015, vol. 66, pp. 43–52.
8. Kraposhin M., Banholzer M., Pfitzner M., Marchevsky I. A hybrid pressure-based solver for non-ideal single-phase fluid flows at all speeds. International Journal for Numerical Methods in Fluids, May 8, 2018, [DOI 10.1002/flid.4512](https://doi.org/10.1002/flid.4512)