

# Modification of RhoCentralFoam Solvers Based on OpenFOAM and RapidCFD to Calculate High-Speed Flows. Speed Comparison of GPU and CPU Solvers

Vladimir Kurashov

*Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, 141001, Russia*

*Central Research Institute of Machine Building, Korolev, 141070, Russia*

vladimir.kurashov@phystech.edu

## Abstract

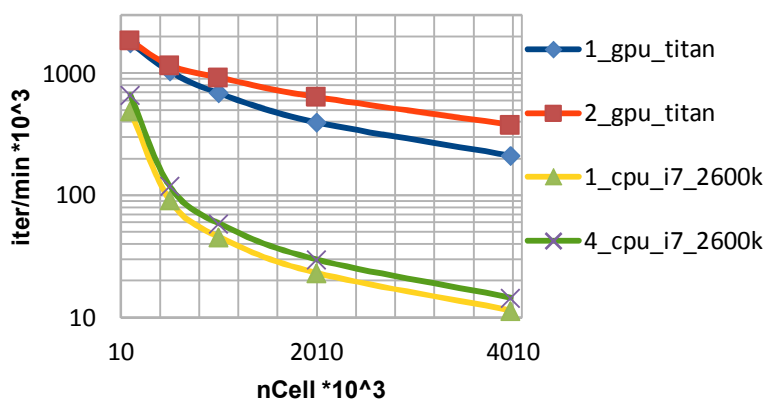
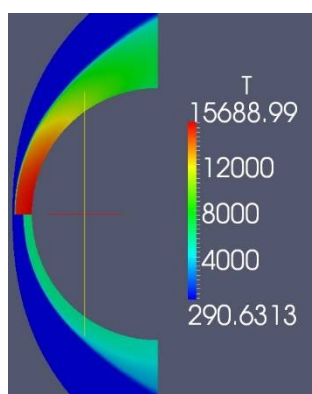
OpenFOAM is an open source library which is popular among cfd-specialists. Standard rhoCentralFoam solver is suitable for high-speed flows, however, the standard thermodynamic models and a limited selection of schemes for the calculation of convective flux are limited. It is not possible to decide really high-speed problem. As a result, there is a new thermodynamic library that is using two-parameter model of the equilibrium air, also new schemes (Roe, HLLC, AUSM+up) are added into the solver for the convective flux calculation. All modifications are made for the standard version of OpenFOAM 3.0.0 and for RapidCFD version with thrust library to calculate fields on the graphic accelerators.

The problem of sphere flow by supersonic flow has been solved.

A comparison of the calculation results and operation time of modified for CPU and GPU solvers has been made.

Keywords: OpenFOAM, RapidCFD, rhoCentralFoam, ROE, HLLC, AUSM.

The results of solvers' work are showed below. Up temperature field is a perfect gas model, low temperature field is a equilibrium gas model:



The new thermodynamic library is possible to model the really high-speed flows. GPU solver is 25 times faster than CPU solver

УДК 629.7.015.

# Модификация решателей rhoCentralFoam на базе OpenFOAM и RapidCFD для расчета параметров высокоскоростных течений. Сравнение работы решателей на GPU и CPU

**В.В. Курашов**

*Московский физико-технический институт,  
Россия, г. Долгопрудный, 141001, Институтский переулок д.9  
Центральный научно-исследовательский институт машиностроения,  
Россия, г. Королев, 141070, ул. Пионерская д.4  
vladimir.kurashov@phystech.edu*

## Аннотация

OpenFOAM — библиотека с открытым исходным кодом, которая пользуется популярностью среди специалистов по вычислительной гидрогазодинамике. Стандартный решатель rhoCentralFoam подходит для решения задач высокоскоростных течений, однако стандартные термодинамические модели и ограниченный выбор схем для расчета конвективных потоков сужают сферу применения этого решателя. В связи с этим в данной работе была предложена новая термодинамическая библиотека, использующая двухпараметрическую модель равновесного воздуха, а также в решатель добавлены схемы: ROE, HLLC, AUSM+up для расчета конвективных потоков. Все модификации сделаны для стандартной версии OpenFOAM 3.0.0, а также для версии RapidCFD с использованием thrust библиотеки для параллельного расчета полей на графических ускорителях. Для примера была решена задача обтекания сферы сверхзвуковым потоком воздуха. Проведено сравнение результатов расчетов и времени работы стандартных и модифицированных под CPU и GPU решателей.

Ключевые слова: OpenFOAM, RapidCFD, rhoCentralFoam, ROE, HLLC, AUSM.

## 1. Введение

OpenFOAM — популярный пакет для решения задач механики сплошных сред с помощью метода контрольного объема. Для решения задач высокоскоростных течений в данной библиотеке существует два стандартных решателя: sonicFoam и rhoCentralFoam. Сравнение работы данных солверов приведено в статье [1]. По результатам данной работы rhoCentralFoam больше подходит для расчета сжимаемых течений, однако используемая схема Курганова–Тадмора для расчета конвективных потоков зачастую дает худший результат [2], чем другие схемы, либо приводит к образованию нефизичных, паразитных решений.

Для сжимаемых течений в OpenFOAM существуют две термодинамические библиотеки для: psiThermo, rhoThermo, каждая из которых использует модель идеального газа для расчета всех термодинамических параметров. Кроме того, в данных библиотеках основными переменными, через которые пересчитываются все остальные, являются: температура и давление, что является стандартом для несжимаемых задач, однако крайне неудобно для расчета высокоскоростных течений.

Существует несколько веток развития библиотеки OpenFOAM, каждая из которых имеют свои особенности. Одной из таких веток является библиотека RapidCFD, которая интересна возможностью использования CUDA библиотек для расчетов на GPU.

## 2. Алгоритм решения задач в rhoCentralFoam

Солвер rhoCentralFoam решает уравнения Навье – Стокса

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} &= 0, \\ \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} &= \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}, \\ \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial[(\rho E + p)u_j]}{\partial x_j} &= \frac{\partial(u_i \sigma_{ij})}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right), \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\rho$  – плотность;  $u_i$  – скорость;  $p$  – давление;  $E = e + u^2/2$  – полная энергия;  $T$  – температура;  $k$  – теплопроводность. Так же используется уравнение состояния

$$p = (\rho, e), \quad T = (\rho, e) \quad (2)$$

Тензор напряжений записывается в форме:

$$\sigma_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \lambda \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}, \quad (3)$$

где  $\mu$  – вязкость и  $\lambda$  – вторая вязкость. Данные уравнения (3) можно записать в интегральной форме

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V U dv + \int_S F_c^j n_j dS = \int_S F_v^j n_j dS, \quad (4)$$

где  $U = [\rho, \rho u_i, \rho E]$  – вектор консервативных переменных;  $F_c = [\rho u_j, \rho u_j u_i + \delta_{ij} p, \rho H u_j]$  – вектор конвективных потоков;  $F_v$  – вектор диффузионных потоков;  $H = E + p/\rho$  – энтальпия.

RhoCentralFoam использует стандартный алгоритм решения данных уравнений методом контрольного объема, который представлен на рис. 1. Решение системы идет в два этапа: явно учитываются конвективные потоки, затем неявным методом добавляются вязкие потоки.

## 3. Термодинамическая библиотека

В данной работе предложена и реализована двухпараметрическая табулированная модель равновесного воздуха [3, 4]. Для всех термодинамических переменных:  $c_p$  – теплоемкость;  $M$  – молярный вес;  $T$  – температура;  $\frac{\partial p}{\partial \rho}$  и  $\frac{\partial p}{\partial e}$  – частные производные давления по плотности и внутренней энергии соответственно, а так же для коэффициентов переноса:  $\mu$  – вязкость и  $k$  – теплопроводность, в некотором интервале рассчитаны значения в зависимости от  $\rho$  и  $e$  и занесены в табл. 1:

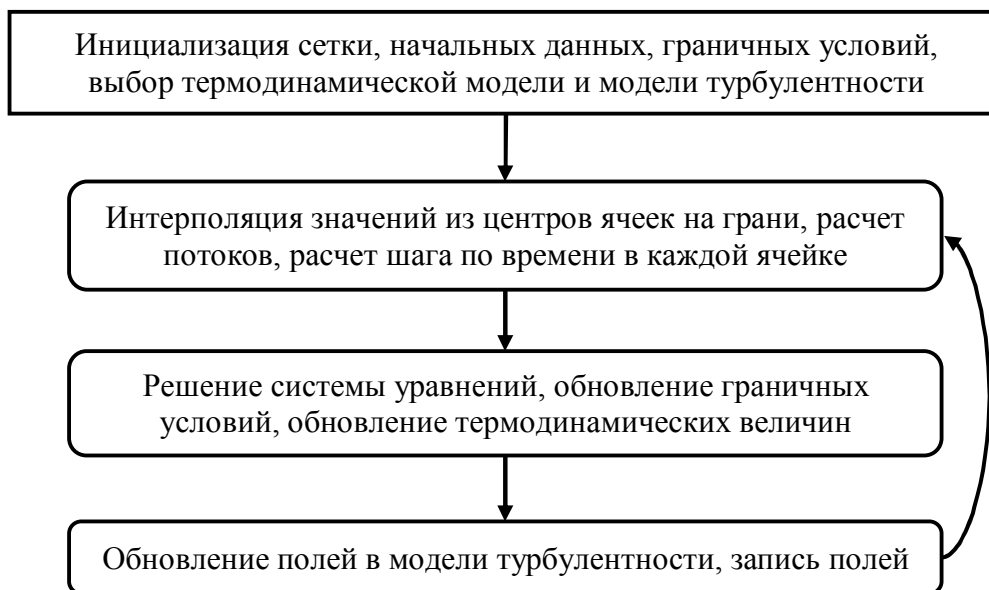


Рис. 1. Алгоритм решения уравнений методом контрольного объема

Таблица 1

**Термодинамические параметры для воздуха**

| Rho = 1.0E-06    |           |           |           |           |           |           |           |
|------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| T                | e         | M         | dp/drho   | dp/de     | Cp        | μ         | k         |
| 139.             | 1.000E+02 | 2.884E+01 | 1.000E+00 | 4.000E-01 | 1.009E+00 | 1.021E-05 | 1.495E-05 |
| 549.             | 4.000E+02 | 2.884E+01 | 1.000E+00 | 3.806E-01 | 1.046E+00 | 3.036E-05 | 4.585E-05 |
| 924.             | 7.000E+02 | 2.884E+01 | 1.000E+00 | 3.420E-01 | 1.131E+00 | 4.352E-05 | 7.083E-05 |
| 1266.            | 1.000E+03 | 2.884E+01 | 1.000E+00 | 3.167E-01 | 1.199E+00 | 5.374E-05 | 9.271E-05 |
| 1568.            | 1.300E+03 | 2.881E+01 | 1.005E+00 | 2.506E-01 | 1.503E+00 | 6.190E-05 | 1.477E-04 |
| ...              |           |           |           |           |           |           |           |
| Rho = 3.1623E-06 |           |           |           |           |           |           |           |
| T                | e         | M         | dp/drho   | dp/de     | Cp        | μ         | k         |
| 139.             | 1.000E+02 | 2.884E+01 | 1.000E+00 | 4.000E-01 | 1.009E+00 | 1.021E-05 | 1.495E-05 |
| 549.             | 4.000E+02 | 2.884E+01 | 1.000E+00 | 3.806E-01 | 1.046E+00 | 3.036E-05 | 4.585E-05 |
| 924.             | 7.000E+02 | 2.884E+01 | 1.000E+00 | 3.420E-01 | 1.131E+00 | 4.352E-05 | 7.083E-05 |
| 1266.            | 1.000E+03 | 2.884E+01 | 1.000E+00 | 3.173E-01 | 1.197E+00 | 5.374E-05 | 9.246E-05 |
| 1576.            | 1.300E+03 | 2.882E+01 | 1.003E+00 | 2.674E-01 | 1.404E+00 | 6.210E-05 | 1.338E-04 |

При обновлении термодинамических переменных данные восстанавливаются с таблицы путем линейной, либо ENO-интерполяции. Такой подход позволяет правильно и быстро находить значения термодинамических величин для воздуха. Для ускорения поиска диапазона значений плотности и энергии все переменные записаны через равные интервалы по энергии и логарифму плотности (см. Табл. 1). Такой подход позволяет правильно и быстро находить значения термодинамических величин для воздуха. Вместо воздуха можно составить аналогичную таблицу и для других составов газов и пользоваться предложенной библиотекой.

В качестве валидации была выбрана задача обтекания сферы сверхзвуковым потоком воздуха [5] со следующими параметрами:  $R=0.0645$  м,  $V=4 \div 5.5$  км/с,  $T=293$  К,  $p=1315$  Па. С экспериментом сравнивался отход ударной волны от сферы. Задача решалась методом установления в трехмерной невязкой постановке на неструктурированной призматической сетке (рис. 2, а). Алгоритм построения сетки подробно описан в [9]. Качественное сравнение решений – рис. 2, б. Результаты представлены на рис. 2, в.

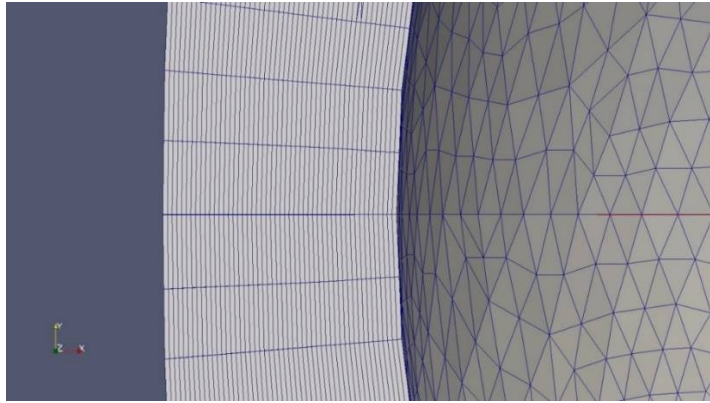


Рис. 2, а. Неструктурированная призматическая сетка (50 слоев, 415100 ячеек, 1049802 грани)

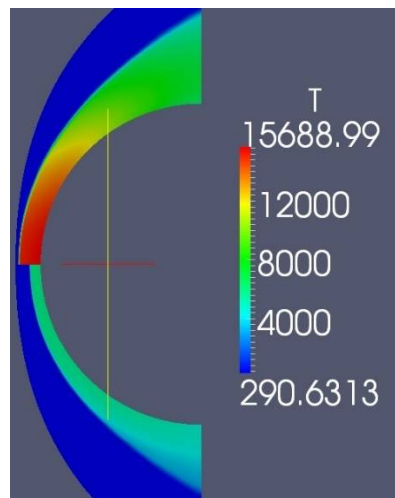


Рис. 2, б. Поле температуры с использованием модели идеального газа (верхняя часть) и модели равновесного воздуха (нижняя часть)

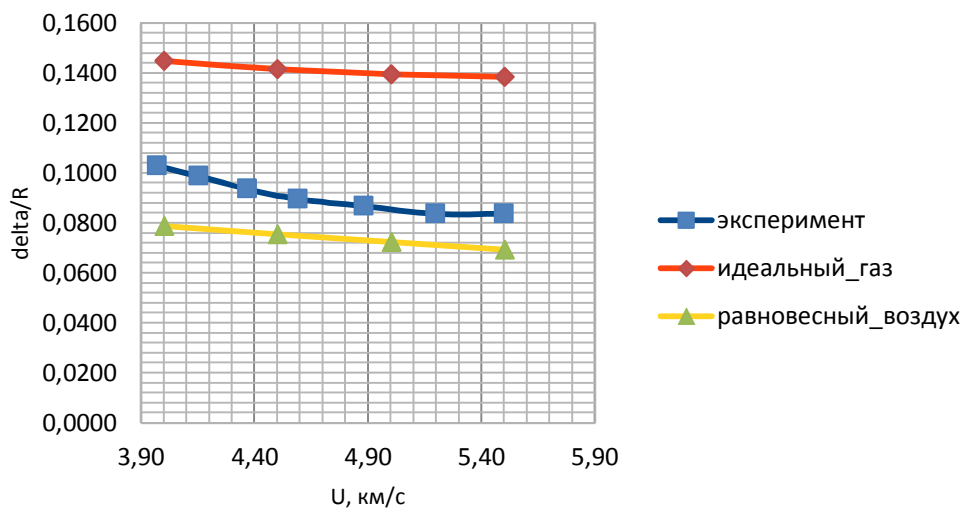


Рис. 2, в. Отход ударной волны

В эксперименте воздух не достиг режима полного равновесия, поэтому результаты расчета несколько занижают расстояние отхода ударной волны. Результаты показывают неприменимость модели идеального газа для моделирования течения на таких режимах, когда существенными оказываются эффекты диссоциации и ионизации, которые учитывает модель равновесного воздуха.

#### 4. Схема расчета конвективных потоков

Для расчета  $F_c$  в решателе rhoCentralFoam используются схемы Курганова и Тадмора [6]. Данные схемы являются простыми в реализации и быстро работают на практике, однако для различных задач другие схемы зачастую подходят лучше. В связи с этим в rhoCentralFoam были реализованы схемы: ROE[3], HLLC[7], AUSM+up[8].

Для сравнения предложенных схем была выбрана стандартная задача из демонстрационных примеров OpenFOAM: forwardStep — обтекание прямого уступа сверхзвуковым потоком.

В примере моделируется течение газа со следующими параметрами:  $\gamma=1.4$ , где  $\gamma=C_p/C_v$  — показатель адиабаты;  $\mu=11640.3$ , где  $\mu$  — молярная масса;  $M=3$ , где  $M$  — число Маха в набегающем потоке;  $T=1$  К;  $p=1$  Па. Молярная масса подобрана так, чтобы при температуре в 1 К скорость звука равнялась бы 1 м/с. Задача решалась в двумерной нестационарной постановке на декартовой сетке: количество ячеек = 1032192.

На четвертой секунде моделируемого течения за «диском Маха» возникает зона контактного разрыва. На структуру контактного разрыва влияют несколько факторов: порядок аппроксимации, размер сетки, а также выбранная схема. Результаты расчета представлены на рисунках ниже.

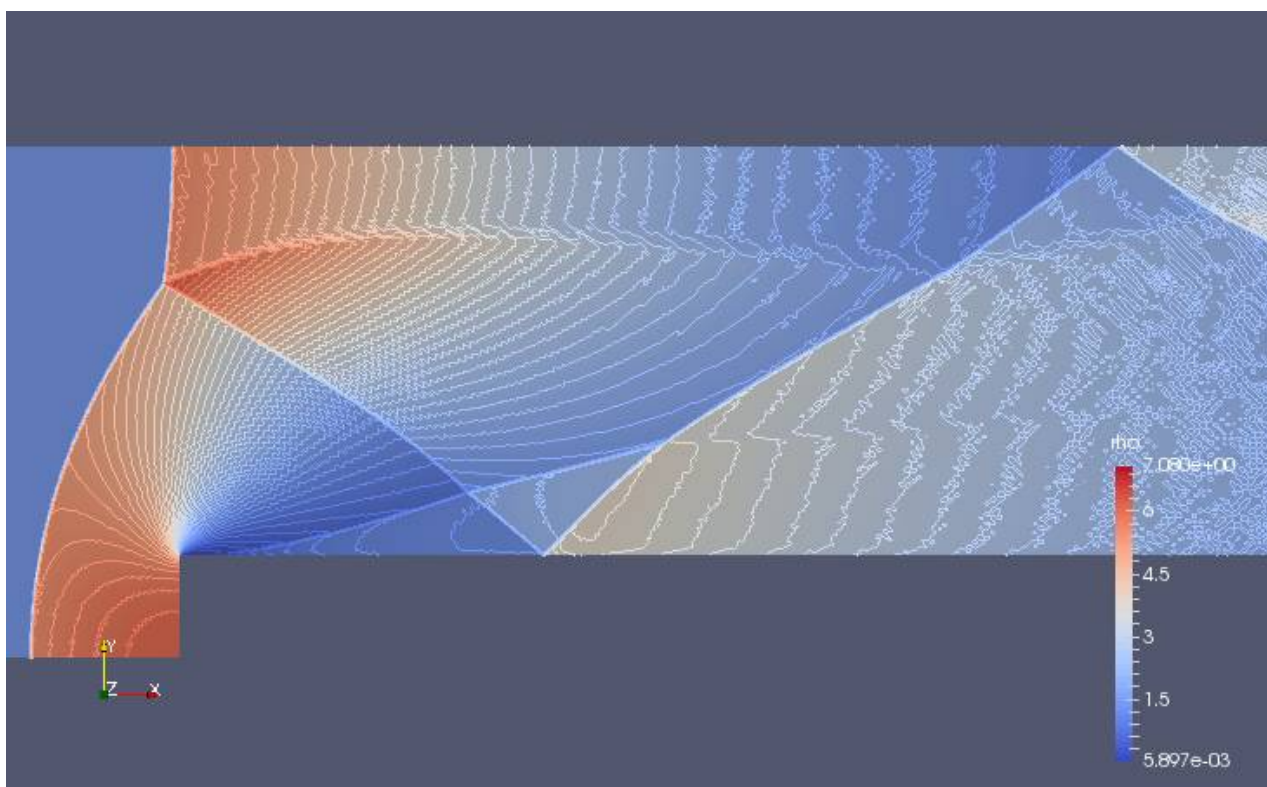


Рис. 3. Поле плотности, схема Курганова с лимитером Ван-Лера, первый порядок по времени

Стандартная схема Курганова обладает излишней диссипацией и заметно мазет контактный разрыв даже при втором порядке аппроксимации, однако осцилляции решения заметны только в небольшой области течения.

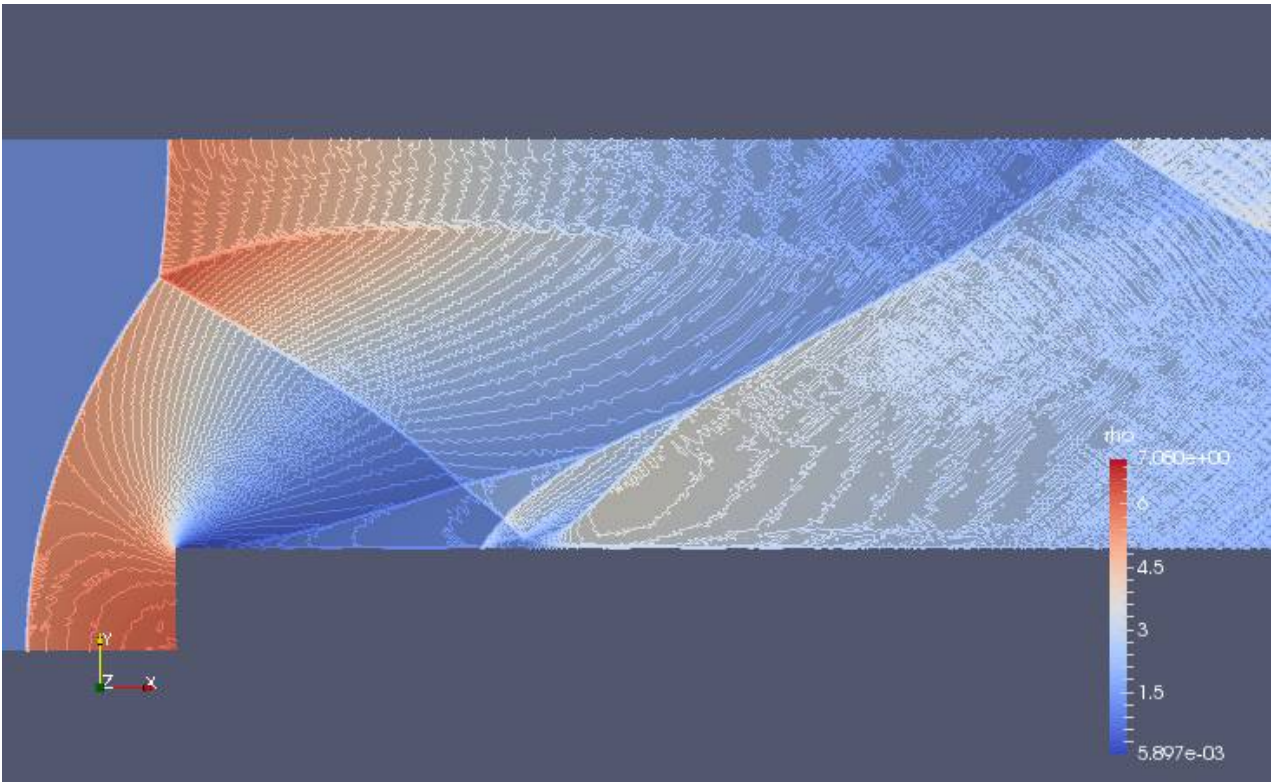


Рис. 4, а. Поле плотности, схема HLLC с лимитером Ван-Лера, первый порядок по времени

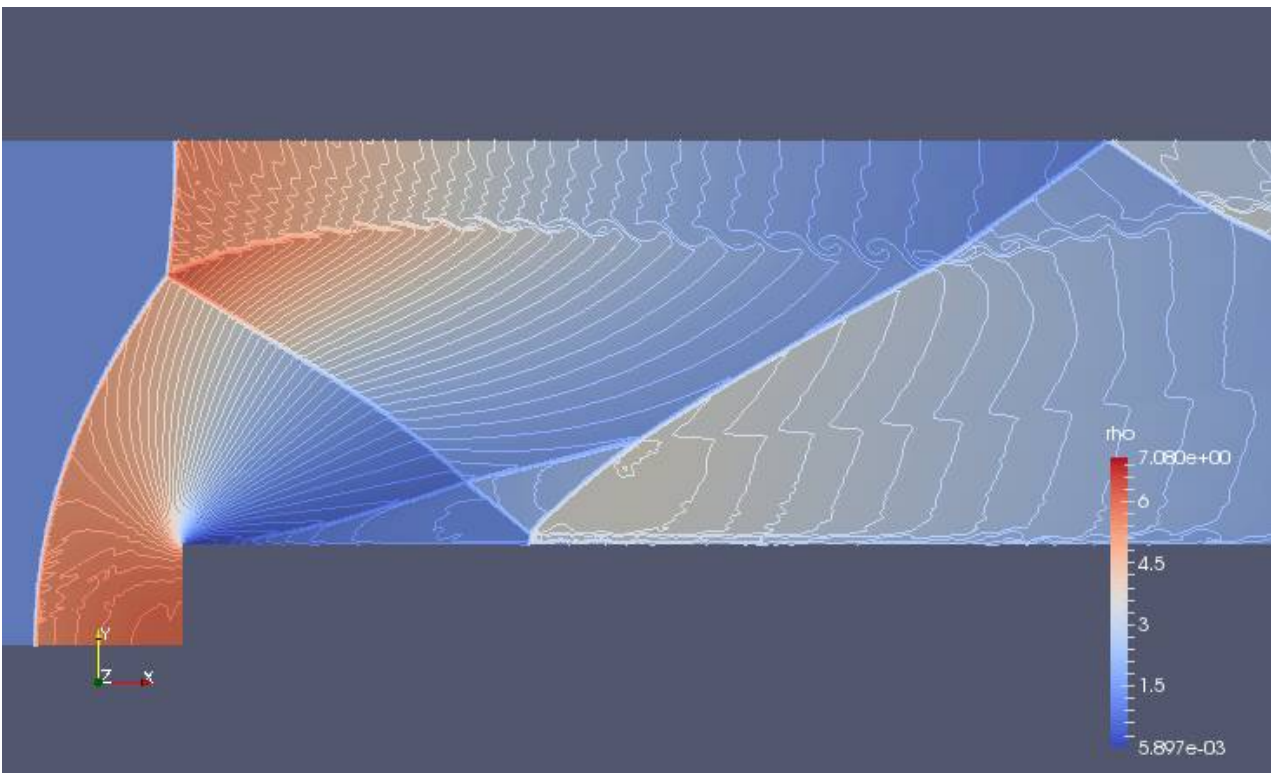


Рис. 4, б. Поле плотности, схема HLLC с лимитером Ван-Лера, четвертый порядок по времени

HLLC несколько меньше мажет решение, но дает артефакт при взаимодействии отраженной ударной волны со стенкой. Метод Рунге–Кутты 4-го порядка позволяет заметно уменьшить осцилляции.



Рис. 5. Поле плотности, схема Roe с лимитером Ван-Лера, второй порядок, первый порядок по времени

Схема Roe так же обладает заметно меньшей диссипацией, но сильно осциллирует практически во всей области течения.

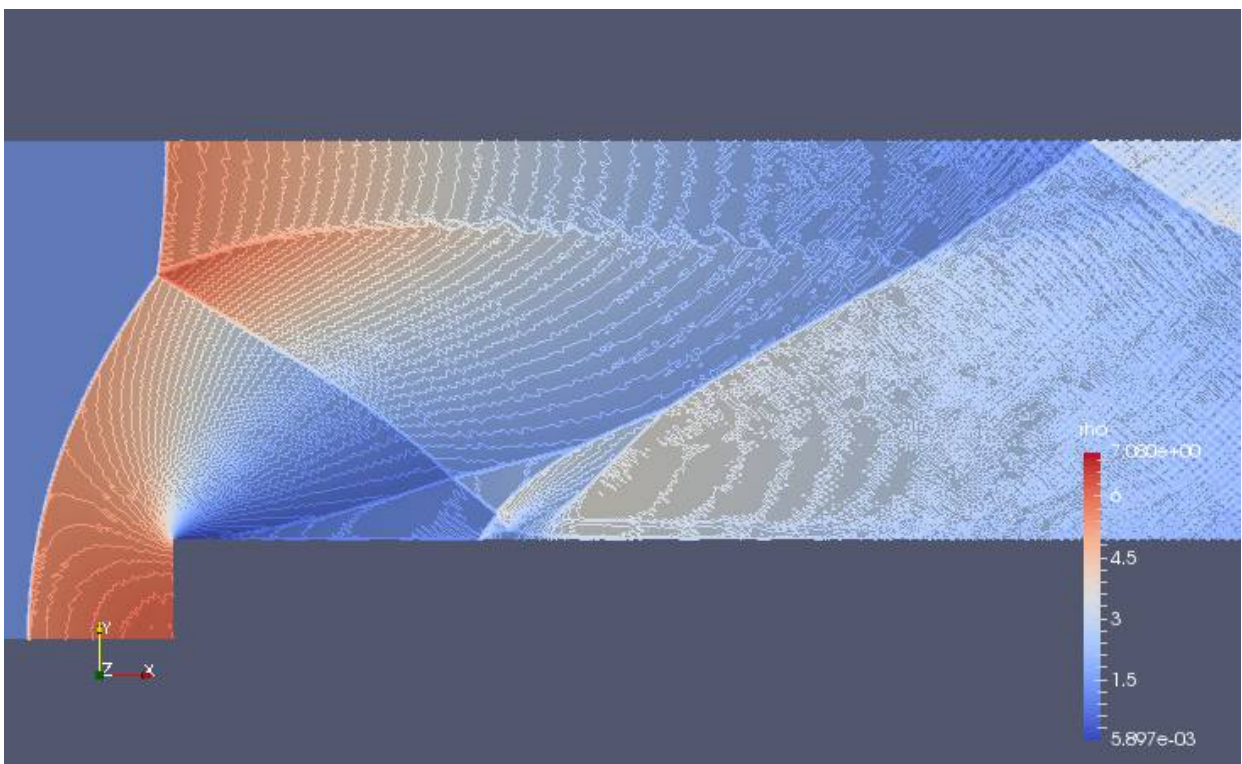


Рис. 6, а. Поле плотности, схема AUSM+up с лимитером Ван-Альбада, первый порядок по времени



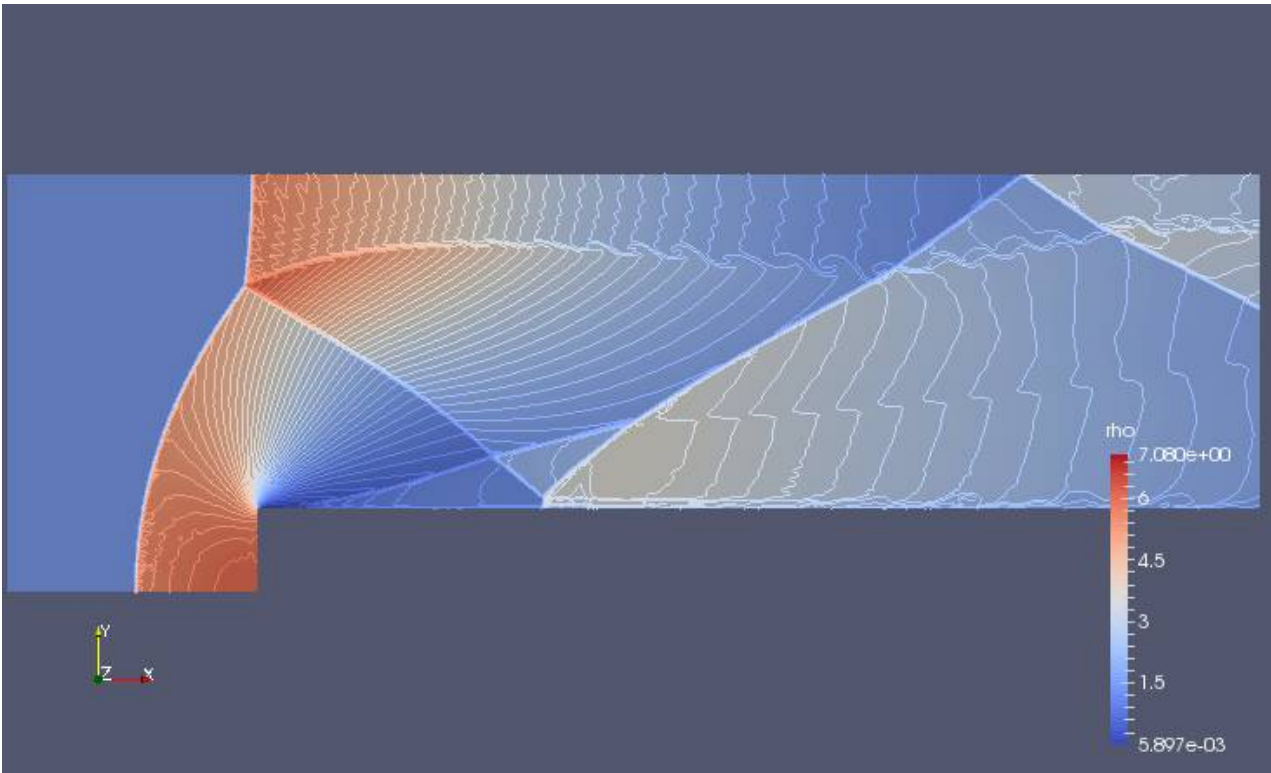


Рис. 6, б. Поле плотности, схема AUSM+up с лимитером Ван-Лири, четвертый порядок по времени

Среди всех представленных схем AUSM+up обладает заметно меньшей вязкостью, однако так же подвержена осцилляциям.

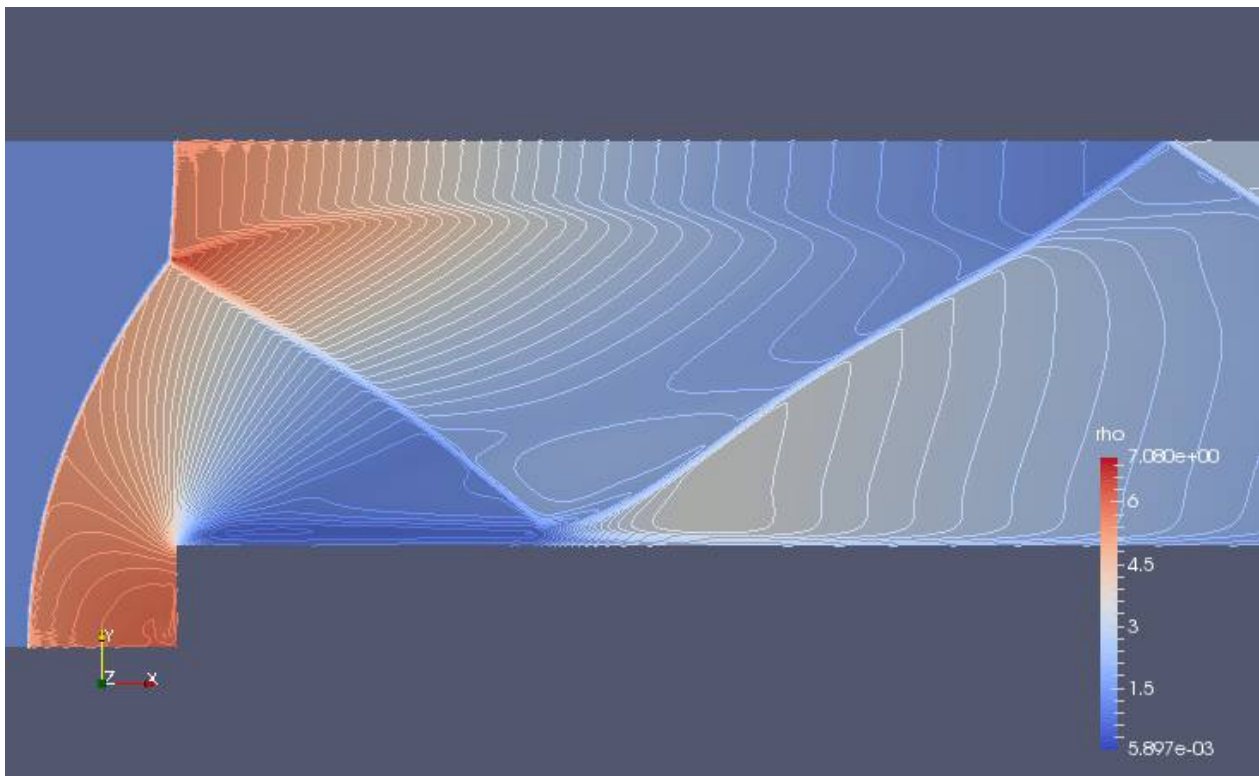


Рис. 7. Поле плотности, схема AUSM+up, первый порядок по пространству и по времени

На рис. 7 для сравнения представлено поле плотности для схемы AUSM+up с первым порядком аппроксимации.

По результатам моделирования можно сказать, что стандартная схема Курганова, реализованная в rhoCentralFoam, обладает большой численной вязкостью и мажет решение даже при втором порядке аппроксимации по пространству. Схема HLLC так же является излишне диссипативной. Схемы Roe и AUSM+up лучше остальных воспроизводят структуру контактного разрыва, однако в остальной области заметны существенные осцилляции при первом порядке интегрирования по времени. Результат заметно улучшается при использовании метода Рунге-Кутты 4-го порядка точности.

## 5. Сравнение работы CPU и GPU решателей

Все предложенные идеи были реализованы в OpenFOAM 3.0.0, а так же в RapidCFD. RapidCFD — переработанная версия OpenFOAM 2.4.0, которая распараллелена при помощи библиотеки CUDA thrust для расчета на графических ускорителях. Несомненным плюсом данной версии является тот факт, что все операции с полями, а так же с матрицами выполняются полностью на видеокарте, что дает значительный прирост скорости при работе с сетками, которые имеют большое число ячеек. В связи с этим были проведены тесты на сравнение скорости расчета в зависимости от размера сетки. Расчеты проводились на 1 и 2 видеокартах EVGA Nvidia Titan (6Гб), и на 1 и 4 CPU i7-2600K на призматических сетках с разным количеством ячеек: 20800 ÷ 3982000. Данный интервал ограничен объемом памяти одной видеокарты. Время расчета стандартной и предложенной термодинамической библиотеками, а так же время расчета потоков различными схемами отличаются незначительно, поэтому в данном тесте интерес представляет сравнение времени работы идентичных решателей на CPU и GPU в зависимости от размера сетки. Результаты представлены в табл. 2. По данным этой таблицы ниже приведен график (рис. 8).

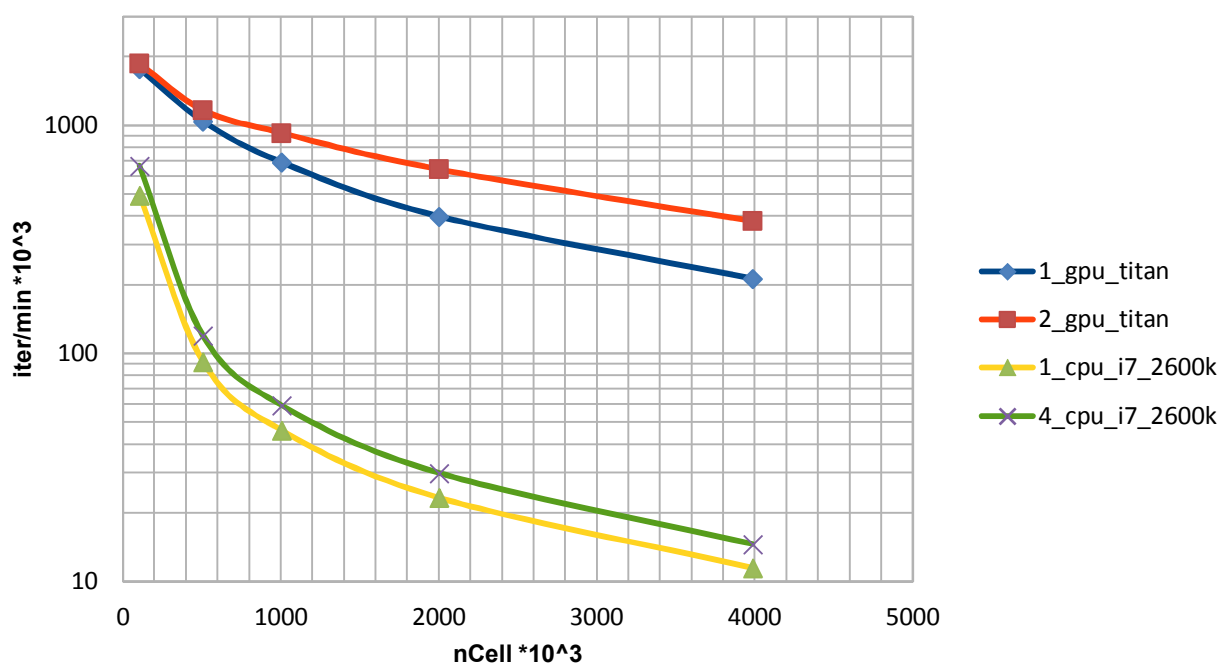


Рис. 8. Сравнение скорости работы CPU и GPU решателей, где nCell – количество ячеек сетки, iter/min – число итераций в минуту

Таблица 2

## Скорость расчета (iter/min)

|                                | GPU      |          |          |          |         |          |
|--------------------------------|----------|----------|----------|----------|---------|----------|
| nDevice\nCells*10 <sup>3</sup> | 20,8     | 104      | 506      | 1004     | 2000    | 3982     |
| 1                              | 3331     | 1782     | 1047     | 691      | 400     | 213      |
| 2                              | 2753     | 1869     | 1169     | 929      | 643     | 381      |
|                                | CPU      |          |          |          |         |          |
| nDevice\nCells*10 <sup>3</sup> | 20,8     | 104      | 506      | 1004     | 2000    | 3982     |
| 1                              | 2400     | 495,8678 | 92,30769 | 46,15385 | 23,3463 | 11,51631 |
| 4                              | 4615,385 | 666,6667 | 120      | 59,40594 | 30      | 14,63415 |

Расчет на видеокартах обеспечивает ускорение по сравнению с CPU до 25 раз, но ограничен объемом памяти видеокарты. Следует отметить, что на сайте <https://sim-flow.com/rapid-cfd-gpu/> представлены результаты сравнения работы решателя pisoFoam, где производительность GPU не столь внушительна. Дело в том, что в pisoFoam основное время расчета занимает решение линейной системы уравнений, в то время как в rhoCentralFoam, если решаются невязкие задачи, о которых везде шла речь выше, основное время занимает расчет потоков и обновление термодинамических величин. Конвективные члены учитываются явно, поэтому итоговая система линейных уравнений получается с диагональной матрицей и не требует значительных затрат времени для решения.

## 6. Заключение

Стандартный решатель rhoCentralFoam пакета OpenFOAM— успешно позволяет решать невязкие задачи, связанные с высокоскоростным течением газа. Дополнительные схемы и термодинамическая библиотека расширяют класс задач, с которыми справляется данный решатель. Благодаря CUDA версии солвера значительно сокращается время расчета (до 25 раз).

## Литература

1. Карвацкий А.Я., Пулинец И.В., Лазарев Т.В., Педченко А.Ю. Численное моделирование сверхзвукового обтекания клина с применением свободного открытого программного кода OpenFOAM. 2015. 6 с.
2. Analysis on capabilities of density-based solvers within OpenFOAM to distinguish aerothermal variables in diffusion boundary layer. 2013. 10 с.
3. Куликовский А.Г., Погорелов Н.В., Семенов А.Ю.. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. 608 с.
4. Лунёв В.В. Течение реальных газов с большими скоростями.— М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. 760 с.
5. Palmer G. An improved Flux-Split Algorithm Applied to Hypersonic Flows in Chemical Equilibrium. AI AA-88-2693. 1988. 14 с.
6. Kurganov A., Tadmor E. New High-Resolution Central Schemes for Nonlinear Conservation Laws and Convection-Diffusion Equations. Journal of Computational Physics 160, 241–282 (2000). 40 с.
7. Toro E.F. Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics. 2009. 719 с.
8. Liou M. A sequel to AUSM, part 2: AUSM+-up for all speeds. 2006. 35с.
9. Тихонычев П.С. Метод построения пространственных слоистых сеток для задач обтекания летательных аппаратов с изменяющейся формой, основанный на электростатической аналогии// Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2016. Т. 17, вып. 3. <http://chemphys.edu.ru/issues/2016-17-3/articles/647/>

Статья поступила в редакцию 17 января 2017 г.