

## USING OPEN-SOURCE SOFTWARE OPENFOAM® WITH TENSORIAL OBJECT-ORIENTED APPROACH IN FLUID DYNAMICS SIMULATIONS

### KORIŠTENJE SOFTVERA SA OTVORENIM KODOM OPENFOAM® SA TENZORSKIM OBJEKTNO-ORJENTISANIM PRISTUPOM U SIMULACIJAMA MEHANIKE FLUIDA

V. prof. dr. Edin Berberović  
Polytechnic faculty in Zenica, University of Zenica  
Bosnia and Herzegovina

#### REZIME

*U ovom radu opisan je softver sa otvorenim kodom OpenFOAM® za računarsku mehaniku fluida. Softver se bazira na metodi konačnih volumena uz tenzorski pristup rješavanju problema u transportnim fenomenima, implementiran koristeći najviši nivo objektno-orjentisane paradigme u programiranju u jeziku C++. Osnovne karakteristike i primjena softvera su kratko objašnjeni, a posebno su istaknute neke osobine koje ga odlikuju u odnosu na ostale. Softver je nekomercijalan, na najvišem korisničkom nivou koristi sintaksu veoma blisku standardnoj matematičkoj notaciji, te omogućuje modeliranje kompleksnih fizikalnih transportnih fenomena na efikasan i fleksibilan način.*

**Ključne riječi:** OpenFOAM®, otvoreni kod, simulacija, računarska mehanika fluida

#### ABSTRACT

*In this paper the open-source software OpenFOAM® for computational fluid mechanics is described. The software is based on the finite volume method with tensorial approach for solving problems in transport phenomena, implemented using the highest level of the C++ object-oriented paradigm. Basic characteristics and the application of the software are outlined and some specific distinguished features are highlighted. The software is non-commercial, it utilizes a top-level syntax which is very close to the conventional mathematical notation, and enables efficient and flexible modeling of complex physical transport phenomena.*

**Keywords:** OpenFOAM®, open-source code, simulation, computational fluid dynamics

#### 1. UVOD

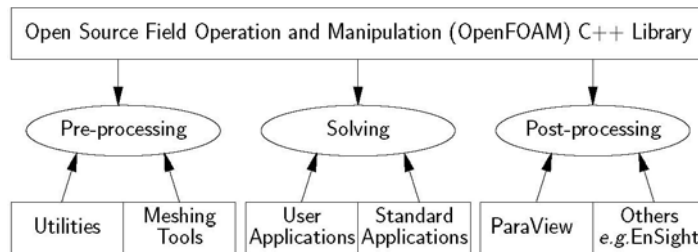
Fizikalni transportni fenomeni, koji se izučavaju u okviru inženjerskih nauka, baziraju se na fundamentalnim prirodnim zakonima održanja mase, količine kretanja, energije i povećanja entropije. Osnovni zakoni su matematski opisani komplikovanim sistemima parcijalnih diferencijalnih jednačina uz konstitutivne relacije za modeliranje pojedinih članova. Te sisteme je u opštem slučaju nemoguće riješiti analitički, osim za mali broj znatno pojednostavljenih slučajeva. Za inženjersku praksu, međutim, potrebno je riješiti te sisteme, kako bi se dobile vrijednosti za polja kinematskih i dinamičkih parametara koji određuju sistem, tj. osnovna polja

brzine, pritiska i temperature, kao funkcije vremena i prostornih koordinata. Za rješavanje se koriste numeričke metode kojima se sistemi parcijalnih diferencijalnih jednačina aproksimiraju ekvivalentnim kuplovanim sistemima algebarskih jednačina, koji su pogodni za programiranje i računarske simulacije i čija rješenja predstavljaju diskretna rješenja osnovnog sistema. U računarskoj mehanici fluida (CFD) i prenosu toplote (CHT) etablirana je numerička metoda konačnih zapremina [1]. U proteklih dvadeset do trideset godina usljed intenzivnog razvoja računarskog hardvera i softvera omogućena je šira primjena numeričkih metoda i računarskih simulacija za rješavanje kompleksnih, multifizikalnih transportnih fenomena. U tu svrhu razvijen je veći broj komercijalnih licenciranih računarskih aplikacija, a u posljednje vrijeme značajan je razvoj i softverskih rješenja sa otvorenim kodom koja su dostupna bez komercijalne licence. U današnje vrijeme softver OpenFOAM® zauzima primarno mjesto među njima.

## **2. SOFTVER ZA OTVORENIM KODOM OPENFOAM®**

Od komercijalnih licenciranih softvera danas su u širokoj primjeni softveri ANSYS Fluent [2] i Star CCM+ [3], pri čemu ovaj prvi razvija, održava i nudi na tržištu firma ANSYS koja je postala globalni lider u razvoju softvera za inženjerske simulacije. Uz komercijalni softver u proteklih decenijama se mnogo radilo na razvoju besplatnih softverskih rješenja (*open-source*), sa motivacijom da se široj naučno-istraživačkoj i stručnoj zajednici ponude rješenja sa istom funkcionalnošću kao što su i komercijalni softveri, s tim da budu besplatni. Ovo predstavlja najveću razliku u odnosu na komercijalne licencirane softvere i ogroman benefit, kako za profesionalne firme, tako i za naučno-istraživačke institucije. Naime, računarske simulacije u okviru CFD i CHT često zbog svoje kompleksnosti zahtijevaju provođenje paralelnog proračuna na superkompjuterima, tj. istovremeno na stotina ili hiljada procesora. Za svaki procesor mora postojati licenca softvera, tako da troškovi licenci za korištenje komercijalnog softvera mogu biti nekoliko hiljada US dolara godišnje (za akademske licence), a vrlo brzo prelaze iznos od nekoliko desetina hiljada US dolara godišnje (za profesionalne firme), zavisno od broja procesora. Upravo to je razlog za razvoj kvalitetnih besplatnih softverskih alata, od kojih se u posljednjih petnaestak godina čvrsto etablirao softver OpenFOAM®. Radi se o open-source CFD softveru, koji je razvila firma OpenCFD 2004. godine. Do danas je okupio ogromnu bazu korisnika iz različitih područja inženjerstva i nauke, kako iz profesionalnih kompanija, tako i iz akademskih i istraživačkih institucija. OpenFOAM® nudi izuzetno širok asortiman besplatnih aplikacija za rješavanje kompleksnih multifizikalnih transportnih fenomena strujanja fluida uključujući turbulentna strujanja, prenos toplote, hemijske reakcije, akustiku, elektromagnetne fenomene, pa čak i mehaniku čvrstih tijela. Softver obuhvata dva od tri glavna elementa računarske numeričke simulacije: predprocesiranje (generiranje mreže i ulazne postavke) i samo procesiranje (rješavanje), slika 1. Za postprocesiranje, koje slijedi nakon dobivenih rezultata proračuna, softver ima ugrađene mehanizme koji omogućavaju korištenje drugih besplatnih open-source alata za postprocesiranje. Također, osim vlastitog generatora mreže, softver i u fazi predprocesiranja omogućava uvoženje mreža kreiranih u drugim softverskim alatima i podržava standardne formate za geometriju i mreže, kao i specifične formate koji se dobiju iz komercijalnih softvera. Na taj način, cjelokupan proces numeričke simulacije, od početnog generiranja mreže, preko rješavanja sistema, do procesiranja i vizualizacije rješenja, moguće je u potpunosti provesti u open-source stilu, tj. bez potrebe posjedovanja i plaćanja licenci. Tokom vremena, došlo je do razvoja tri osnovne verzije ovog softvera: jednu oficijelno razvija i održava kompanija OpenCFD [4], drugu verziju razvija kompanija CFD Direct [5], a treću proširenu verziju razvila je pod nazivom foam-extend kompanija Wikki Ltd [6]. Tri verzije softvera imaju veoma sličnu strukturu i način rada, umnogome su međusobno kompatibilne, a razlikuju se u pojedinim segmentima koji su više ili manje razvijeni u pojedinačnim verzijama. Na primjer, kombinovani problemi strujanja fluida

za konjugovanim prenosom toplote riješeni su na različite načine u različitim verzijama, ali sve verzije omogućuju računarske simulacije ovog inženjerski značajnog problema.



Slika 1. Osnovni elementi u procesu numeričke simulacije [4].

Bitno je naglasiti da su sve tri verzije softvera dostupne za Linux i Windows platforme, pri čemu se mnogo više koristi i preporučuje verzija za Linux, zbog prednosti u pogledu stabilnosti i paralelnog računanja. Sve tri verzije besplatno su dostupne na internetskim repozitorijima na kojima se redovno aktualiziraju i objavljuju nove verzije. S obzirom da je softver besplatan, posebna pažnja u razvoju posvećuje se osiguranju kvaliteta kroz rigorozna testiranja. Proces verifikacije i validacije bazira se na velikom broju provedenih računarskih simulacija na benchmark-testovima kao i na rezultatima velikih industrijskih proračuna dobivenim tokom vremena. Testiranje se vrši s ciljem određivanja karakteristika softvera s obzirom na tačnost rezultata, efikasnost korištenja resursa (CPU i RAM) i efikasnost izvođenja izvornog koda.

### 3. KARAKTERISTIKE SOFTVERA OPENFOAM®

Naziv OpenFOAM® je skraćena punog engleskog naziva *Open-source Field Operation and Manipulation* (otvoreni kod za operacije i manipulacije nad poljima) i u suštini predstavlja sveobuhvatnu C++ biblioteku, sa preprogramiranim klasama za osnovne matematičke objekte (tenzorska, vektorska i skalarna polja), funkcijama za operacije nad njima, kako aritmetičke (npr. skalarni, vektorski i tenzorski proizvod), tako i diferencijalne (npr. operatori gradijenta, divergencije i rotora.), te gotovim aplikacijama za numeričke proračune, koje se mogu mijenjati i dorađivati. Softver je napisan u objektno-orijentisanom stilu u jeziku C++, na najvišem nivou tzv. generičkog programiranja, kroz predloške (*template*) za klase i pripadajuće funkcije. Sve izvorne datoteke su potpuno otvorene korisniku i omogućuju proizvoljno mijenjanje sadržaja. Na taj način obezbijedena je mašinerija za dodatno modeliranje i mijenjanje osnovnog koda za nove modele i simulacije. Interesantno je da softver podliježe tzv. GNU licenci, koja osigurava potpunu slobodu korištenja, dijeljenja i modifikiranja softvera, ali zabranjuje njegovu komercijalizaciju. Softver omogućava kreiranje korisničkih tipova podataka koji predstavljaju matematske objekte, tj. polja, a sintaksa koda vrlo blisko oponaša matematski zapis diferencijalnih jednačina i operatora. Na primjer, u okviru RANS modela [1] za turbulentno strujanje, transportna jednačina (1) za kinetičku energiju turbulencije programira se u svega par linija koda prikazanog na slici 2. Odmah se uočava izražena sličnost između stvarne modelske jednačine i njene jednostavne implementacije u softver.

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}k) - \nabla \cdot [(v + v_t) \nabla k] = v_t \left[ \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T) \right]^2 - \frac{\epsilon_o}{k_o} k. \quad \dots (1)$$

Implementacija transportnih jednačina na najvišem programerskom nivou (*top user level*) omogućena je korištenjem generičkog objektno-orijentisanog pristupa, uz ekstenzivno korištenje predložaka klasa i funkcija, nasljeđivanje, polimorfizam i preopterećenje operatora.

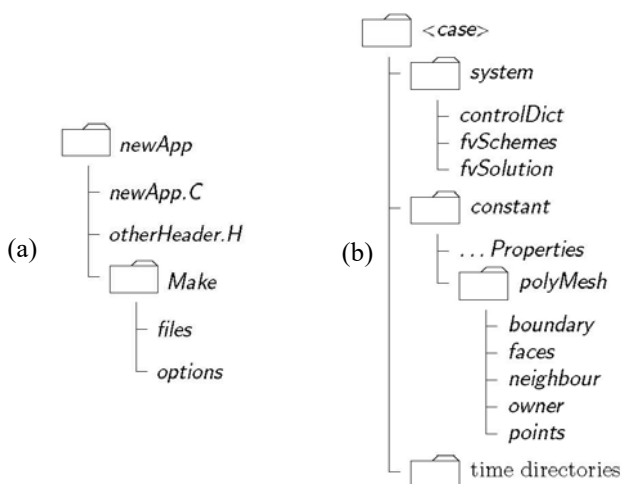
```

solve
(
    fvm::ddt(k)
  + fvm::div(phi, k)
  - fvm::laplacian(nu() + nut, k)
== nut*magSqr(symm(fvc::grad(U)))
  - fvm::Sp(epsilon/k, k)
);

```

Slika 2. OpenFOAM® sintaksa za jednačinu kinetičke energije turbulencije [7].

Bez obzira na svu kompleksnost implementacije baznog koda, osnovna struktura koda pojedine aplikacije na korisničkom nivou, kao i direktorija konkretnog problema koji se rješava je vrlo jednostavna i lako razumljiva za ljude koji se bave CFD-om, slika 3.



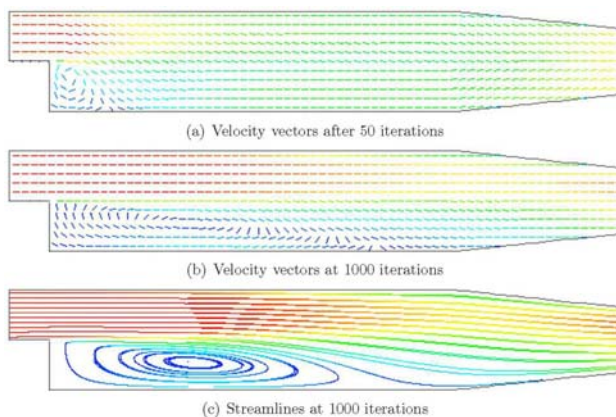
Slika 3. Struktura koda aplikacije (a) i direktorija problema koji se rješava (b) [4].

Softver daje mogućnost diskretizacije jednačina metodom konačnih zapremina, sa podrškom za proizvoljne poliedarske nestrukturirane 3-D numeričke mreže i svim dodatnim potrebnim alatima za CFD, uz podršku za masivne paralelne proračune (*massively parallel computing*). Za diskretizaciju jednačina dostupan je veliki broj shema diskretizacije nestacionarnih, konvektivnih, difuzionih i izvornih članova u transportnim jednačinama, a sve sheme biraju se tokom samog izvođenja koda (*run-time selection*) iz unaprijed zadanih postavki u ulaznim datotekama, neovisno od razmatranog problema. Fizikalno kuplovanje jednačina ostvaruje se u podvojenom pristupu (*segregated approach*), rješavanjem jednačina za svaku varijablu sistema odvojeno i iteriranjem do ispunjavanja kriterija konvergencije, ili korištenjem tzv. *block solvera*. Granični uslovi implementirani su kao sastavni dio polja koje se rješava, a dostupni su svi osnovni uslovi (Neumann i Dirichlet, simetrični i ciklični), kao i veliki broj uslova izvedenih njihovim kombinacijama. Za samo rješavanje sistema algebarskih jednačina, koje aproksimiraju stvarne diferencijalne jednačine, dostupan je veliki broj iterativnih solvera koji se takođe biraju tokom izvođenja koda, uključujući algebarske i geometrijske multimrežne solvere za ubrzanje konvergencije. Za paralelizaciju koda OpenFOAM® koristi dekompoziciju domene na poddomene, za svaki procesor po jedna. Nakon pokretanja simulacije, svakom procesoru šalje se posebna kopija kompajliranog izvedbenog koda, a za međuprocorsorsku

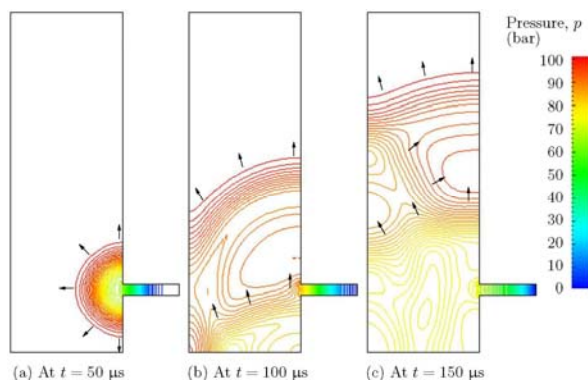
komunikaciju koristi se MPI (*Message Passing Interface*). Bitno je naglasiti da je međuprocorsorska komunikacija implementirana na nivou osnovnih klasa za sva polja, čime je omogućeno da svaki novi dio koda za rješavanje novih ili proširenje postojećih sistema diferencijalnih jednačina na najvišem korisničkom nivou automatski postaje paraleliziran. Osnovna dokumentacija za korisnika, koja uključuje priručnik za korištenje i programiranje, kao i tutorijale, također je dostupna i besplatna [4]. S obzirom da je OpenFOAM® postao općeprihvaćen kao odlična alternativa za skupe komercijalne softvere, na globalnom nivou je uspostavljena grupa koja okuplja ogroman broj korisnika širom svijeta. Zahvaljujući tome, razvijena je i online podrška za sve aspekte ovog softvera (<https://openfoamwiki.net/>), kako za početnike, tako i za napredne tehnike korištenja. Uz to, na globalnom forumu (<https://www.cfd-online.com/>) svakodnevno ogroman broj korisnika razmjenjuju iskustva i savjete, te je na taj način stvorena ogromna globalna mreža, koja veže zainteresovane naučnike, inženjere i profesionalce, te direktno podržava dalji razvoj softvera.

#### 4. PRIMJERI PRIMJENE

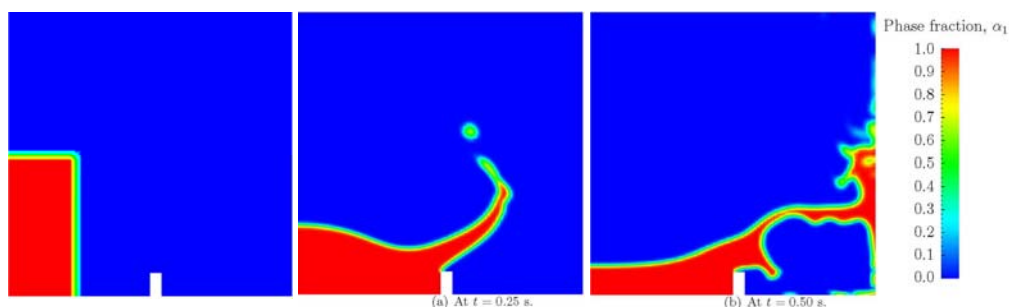
Brojni su primjeri primjene u naučno-istraživačkim i stručnim projektima koji su rađeni korištenjem softvera OpenFOAM®, a ogroman broj objavljenih radova dostupan je u internetskim bazama podataka u vrhunskim naučnim publikacijama [8-10]. Osim toga, redovno se na svjetskom nivou organizuju i tematske radionice (*workshops*) s ciljem razmjene iskustava korisnika ovog softvera. Ovdje se daju neki od tutorijala iz dokumentacije softvera kao primjeri upotrebe, na slikama 4 do 7.



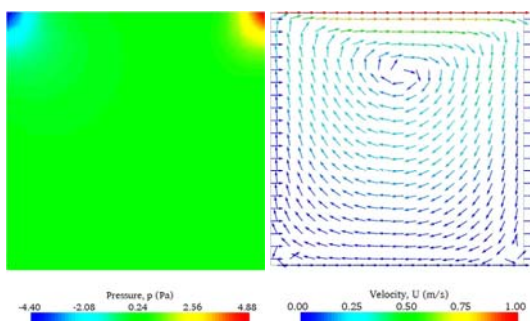
Slika 4. Turbulentno strujanje stišljivog fluida preko stepenika [4].



Slika 5. Dekompresija rezervoara pod pritiskom [4].



Slika 6. Simulacija dvofaznog strujanja [4].



Slika 7. Polje pritiska i brzine za strujanje u otvoru [4].

## 5. ZAKLJUČAK

U radu je opisan softver OpenFOAM® za računarsku mehaniku fluida. Softver koristi metodu konačnih volumena i tenzorsku notaciju za rješavanje transportnih fenomena. Posebno su istaknute značajne karakteristike softvera koje omogućuju modeliranje i proračun kompleksnih fizikalnih fenomena, posebno u mehanici fluida. Kao sveobuhvatan i besplatan alat koji podržava sve faze simulacije, predprocesiranje, računanje i postprocesiranje, snažno se preporučuje za primjenu u stručnim i istraživačkim inženjerskim proračunima i analizama.

## 6. LITERATURA

- [1] Moukalled F., Mangani L., Darwish M.: The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics – An Advanced Introduction with OpenFOAM® and Matlab®, Springer International Publishing, Switzerland, 2016.
- [2] ANSYS Fluent, <http://www.ansys.com/Products/Fluids/ANSYS-Fluent>
- [3] Star-CCM+, <https://mdx.plm.automation.siemens.com/star-ccm-plus>
- [4] OpenFOAM® The open source CFD toolbox, <https://www.openfoam.com/>
- [5] CFD Direct The Architects of OpenFOAM, <https://cfdirect/openfoam/>
- [6] Wikki Consultancy and Software Development, <http://wikki.gridcore.se/wikkiweb/company>
- [7] Jasak H., Jemcov A., Tuković Ž.: OpenFOAM: A C++ Library for Complex Physics Simulations, International Workshop on Coupled Methods in Numerical Dynamics, IUC, Croatia, 2007.
- [8] Berberović E., Schremb M., Tuković Ž., Jakirlić S., Tropea C.: Computational modeling of freezing of supercooled water using phase-field front propagation with immersed points, Int. J. Multiphase Flow, 99: 329-346, 2018.
- [9] Zhou Z.F., Lu G.Y., Chen B.: Numerical study on the spray and thermal characteristics of R404A flashing spray using OpenFOAM, Int. J. Heat and Mass Transfer, 117: 1312-1321, 2018.
- [10] Maes J., Geiger S.: Direct pore-scale reactive transport modelling of dynamic wettability changes induced by surface complexation, Adv. Water Resources, 111: 6-19, 2018.