

Школа-семинар «Основы использования OpenFOAM, SALOME и ParaView»

ОБЗОР СИСТЕМНОГО ОКРУЖЕНИЯ

М.В. Крапошин (НИЦ Курчатовский институт) О.И. Самоваров (Институт системного программирования РАН) С.В. Стрижак (ГОУ ВПО МГТУ им. Баумана)



ВАЖНЫЕ ЭТАПЫ В РАБОТЕ

- OC Linux
- Linux команды
- Настройка окружения
- Структура пакета
- Формирование примера
- Редактирование файлов
- Проверка задачи
- Работа с хабом





День I, Модуль 2, Секция 1. Обзор системного окружения

OpenFOAM (Field Operation and Manipulation)











Открытое «ядро» и доступность кода

- Установка на LINUX (RHEL,SUSE,OpenSuse, Debian, Ubuntu, CentOS, CAELinux)
- Использование возможностей объектно-ориентированного программирования на С++;
- В программном коде используется базовая единица: класс.
- Основные исследуемые объекты: расчетная область, преобразования в тензорной и линейной алгебре, решатели, математические операции для УРЧП (дискретизация, дифференцирование, интегрирование, интерполяция);
- Представление уравнений МСС с помощью естественного языка программирования;
- Решение уравнений эллиптического, параболического, гиперболического типа;
- Разбиение кода на небольшие самостоятельные единицы;
- Совместимость с доступными открытыми кодами и компиляторами (gcc,python);
- Возможность разработки собственных модулей (граничные условия, библиотеки модели среды, решатели, утилиты).
- Около 1 миллиона строк исходного кода





Файловая система в Linux. Основные принципы иерархии файлов.

Важные директории:

- Домашние каталоги: /root,/home/username
- Пользовательские программы: /bin, /usr/bin, /usr/local/bin
- Системные программы: /sbin, /usr/sbin, /usr/local/sbin
- Точки монтирования: /media, /mnt
- Конфигурационные файлы: /etc
- Временные файлы: /tmp
- Ядро и загрузчик: /boot
- Серверные данные: /var, /srv
- Системная информация: /proc, /sys
- Разделяемые библиотеки: /lib, /usr/lib, /usr/local/lib





Команды интерпретатора в Linux (I)

БАЗОВЫЕ КОМАНДЫ ДЛЯ РАБОТЫ С ФАЙЛАМИ

```
Is – просмотр директории
Is -al – formatted listing with hidden fles
cd dir - change directory to dir
cd – change to home
pwd – show current directory
mkdir dir – создание директории dir
rm file - удаление файла file
rm -r dir – delete directory dir
rm -f file - force remove fle
rm -rf dir – force remove directory dir *
cp file1 file2 - copy fle1 to fle2
cp -r dir1 dir2 - copy dir1 to dir2; create dir2 if it doesn't exist
mv file1 file2 – rename or move fle1 to fle2 if fle2 is an existing directory, moves fle1 into
directory fle2
In -s file link - create symbolic link link to fle
touch file - создать пустой файл
cat > file - places standard input into fle
more file - просмотр файла
head file - output the frst 10 lines of fle
tail file - вывод послединих 10 строк файла
tail -f file - output the contents of fle as it grows, starting with the last 10 lines
```





Команды интерпретатора в Linux (II)

КОМАНДЫ ДЛЯ СБОРА ИНФОРМАЦИИ О СИСТЕМЕ И СИСТЕМНОМ ОКРУЖЕНИИ

date – show the current date and time cal – show this month's calendar **uptime** – show current uptime **w** – display who is online whoami – who you are logged in as **finger** *user* – display information about *user* **uname -a** – show kernel information cat /proc/cpuinfo – cpu information **cat /proc/meminfo** – memory information man command - show the manual for command df – show disk usage du – show directory space usage free - show memory and swap usage whereis app – show possible locations of app which app - show which app will be run by default







Команды интерпретатора в Linux (III)

КОМАНДЫ УПРАВЛЕНИЯ ЗАДАЧАМИ (ПРОЦЕССАМИ)

ps – display your currently active processes

top – display all running processes

kill pid - kill process id pid

killall *proc* – kill all processes named *proc* *

bg – lists stopped or background jobs; resume a stopped job in the background

fg – brings the most recent job to foreground

fg *n* − brings job *n* to the foreground

КОМАНДЫ УПРАВЛЕНИЯ ДОСТУПА К ФАЙЛАМ

chmod *octal file* – change the permissions of *fle* to *octal*, which can be found separately for user, group, and world by adding:

- 4 read (r)
- 2 write (w)
- 1 execute (x)

Examples:

chmod 777 – read, write, execute for allchmod 755 – rwx for owner, rx for group and world







Команды интерпретатора в Linux (IV)

КОМАНДЫ ДЛЯ РАБОТЫ С СЕТЬЮ

ping host – ping host and output results
whois domain – get whois information for domain
dig domain – get DNS information for domain
dig -x host – reverse lookup host
wget file – download fle
wget -c file – continue a stopped download

УСТАНОВКА ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ

Установка из исходного кода
./configure
make
make install
Allwmake
Установка из бинарных файлов
dpkg -i pkg.deb – install a package (Debian)
rpm -Uvh pkg.rpm – install a package (RPM)







Команды интерпретатора в Linux (IV)

<u>УДАЛЕННЫЙ ДОСТУП ЧЕРЕЗ SSH</u>

ssh user@host - connect to host as user
ssh -p port user@host - connect to host on port port as user
ssh-copy-id user@host - add your key to host for user to enable a keyed or passwordless login

ПОИСК ИНФОРМАЦИИ

grep pattern files - search for pattern in fles
grep -r pattern dir - search recursively for pattern in dir
command | grep pattern - search for pattern in the output of command
locate file - fnd all instances of fle

КОРОТКИЕ КЛАВИШИ

Ctrl+C - halts the current command

Ctrl+Z – stops the current command, resume with

fg in the foreground or bg in the background

Ctrl+D - log out of current session, similar to exit

Ctrl+W - erases one word in the current line

Ctrl+U – erases the whole line

Ctrl+R – type to bring up a recent command

!! - repeats the last command

exit - log out of current session







Команды интерпретатора в Linux (V)

РАБОТА С АРХИВАМИ

tar cf file.tar files - create a tar named fle.tar containing fles

tar xf file.tar – extract the fles from fle.tar

tar czf file.tar.gz files – create a tar with Gzip compression

tar xzf file.tar.gz – extract a tar using Gzip

tar cjf file.tar.bz2 - create a tar with Bzip2 compression

tar xjf file.tar.bz2 – extract a tar using Bzip2

gzip file - compresses fle and renames it to fle.gz

gzip -d file.gz - decompresses fle.gz back to fle





\$cd OpenFOAM/

YCTAHOBKA OPENFOAM

\$tar xzf OpenFOAM-1.6.General.gtgz

```
$tar xzf OpenFOAM-1.6.linux64GccDPOpt.gtgz
 $tar xzf ThirdParty-1.6.General.gtgz
 $tar xzf ThirdParty-1.6.linux64Gcc.gtgz
 Настройка окружения:
 [user1@WorkStation ~]$ cat .bashrc
 #_bashrc
 # Source global definitions
 if [ -f /etc/bashrc ];
 then /etc/bashrcfi
 # User specific aliases and functions
 export FOAM INST DIR=/home/user1/OpenFOAM
 foamDotFile=$FOAM INST DIR/OpenFOAM-1.6/etc/bashrc
 if
 [ -f $foamDotFile ]; then
 . $foamDotFile
Мфсква, Институт Системного Программирования РАН
```



День I, Модуль 2, Секция 1. Обзор системного окружения

YCTAHOBKA OPENFOAM

```
[cfd1@master ~]$ foamInstallationTest
Executing /home/cfd1/OpenFOAM/OpenFOAM-1.6/bin/foamInstallationTest:
Checking basic setup...
Shell:
            bash
Host:
            master.bmstu.ru
OS:
            Linux version 2.6.18-92.el5xen
Checking main OpenFOAM env variables...
Environment variable Set to file or directory
                                                        Crit
$WM PROJECT INST DIR /home/cfd1/OpenFOAM
                                                         yes
                                                                yes
$WM PROJECT USER DIR /home/cfd1/OpenFOAM/cfd1-1.6
                                                             no
                                                                    no
$WM THIRD PARTY DIR /home/cfd1/OpenFOAM/ThirdParty-1.6
                                                             ves
                                                                    ves
Checking the OpenFOAM env variables set on the PATH...
Environment variable Set to file or directory
                                                Valid Path Crit
                    /home/cfd1/OpenFOAM/OpenFOAM-1.6
$WM PROJECT DIR
                                                             yes yes yes
$FOAM APPBIN
                 ...1.6/applications/bin/linux64GccDPOpt yes yes
$FOAM SITE APPBIN ...penFOAM/site/1.6/bin/linux64GccDPOpt no
                                                                  no
$FOAM USER APPBIN ...1.6/applications/bin/linux64GccDPOpt no
                                                                 no
$WM DIR
                /home/cfd1/OpenFOAM/OpenFOAM-1.6/wmake yes yes
```



ПЕРЕМЕННЫЕ ОКРУЖЕНИЯ OPENFOAM

Important Environment Variables (важные переменные окружения)

```
$WM_PROJECT_DIR - path to the OpenFOAM installation
$WM_PROJECT_USER_DIR - OpenFOAM user directory
$FOAM_TUTORIALS - OpenFOAM tutorials
$FOAM_SRC - source-tree of OpenFOAM libraries
$FOAM_APP - source-tree of OpenFOAM applications
$FOAM_APPBIN - directory with the applications
$FOAM_USER_APPBIN - directory with the applications created by the user
$FOAM_LIBBIN - directory with the libraries provided by OpenFOAM
$FOAM_USER_LIBBIN - directory with the libraries created by the user
$FOAM_RUN - directory where the user can put his/her cases
```

Important Shell-Aliases (важные команды)

```
run – cd to $FOAM_RUN

src – cd to $FOAM_SRC

app – cd to $FOAM_APP

util – cd to $FOAM_APP/utilities

sol – cd to $FOAM_APP/solvers
```

Москва, Институт Системного Программирования РАН



День I, Модуль 2, Секция 1. Обзор системного окружения

СТРУКТУРА OPENFOAM (I)

- applications: исходные и исполняемые файлы
 - Solvers
 - Utilities



- * bin: базовые исполняемые скрипты
- * doc: pdf и Doxygen файлы
 - Doxygen
 - Guides-a4
- * lib откомпилированные библиотеки
- * etc служебные скрипты
- * src исходные файлы
- * test тестовые файлы
- * tutorials примеры
- * Wmakes утилиты для компиляции





СТРУКТУРА OPENFOAM (II)

sergei.strijhak@frontend.unicluster.ru:/lustre/unicluster/opt/OpenFOAM/1.6/Open FOAM/OpenFOAM-1.6\$ II total 140 -rwxr-xr-x 1 root root 366 Apr 7 19:36 Allwmake drwxr-xr-x 6 root root 4096 Apr 7 19:27 applications drwxr-xr-x 4 root root 4096 Apr 7 19:27 bin -rw-r-xr-x 1 root root 17994 Apr 7 19:36 COPYING drwxr-xr-x 5 root root 4096 Apr 7 19:36 doc drwxr-xr-x 4 root root 4096 Apr 7 19:36 etc drwxr-xr-x 3 root root 4096 Apr 7 19:36 lib drwxr-xr-x 3 root root 4096 Apr 7 19:37 openfoam-1.6 -rw-r-xr-x 1 root root 8813 Apr 7 19:36 README -rw-r-xr-x 1 root root 15311 Apr 7 19:36 README.html -rw-r-xr-x 1 root root 18461 Apr 7 19:36 ReleaseNotes-1.6 -rw-r-xr-x 1 root root 32656 Apr 7 19:37 ReleaseNotes-1.6.html drwxr-xr-x 28 root root 4096 Apr 7 19:37 src drwxr-xr-x 15 root root 4096 Apr 7 19:38 tutorials drwxr-xr-x 6 root root 4096 Apr 7 19:38 wmake





СТРУКТУРА OPENFOAM (III)

```
sergei.strijhak@frontend.unicluster.ru:/lustre/unicluster/opt/OpenFOAM/1.7/
OpenFOAM-1.7.1$ II
total 92
-rwxr-x--- 1 1002 1001 721 Jun 21 2010 Allwmake
drwxr-xr-x 6 root root 4096 Apr 12 18:56 applications
drwxr-xr-x 4 root root 4096 Apr 12 15:39 bin
-rw-r---- 1 1002 1001 35627 Jun 16 2010 COPYING
drwxr-xr-x 6 root root 4096 Apr 12 15:38 doc
drwxr-xr-x 4 root root 4096 Apr 12 21:40 etc
drwxr-xr-x 3 root root 4096 Apr 12 16:33 lib
-rw-r---- 1 1002 1001 5820 Aug 24 2010 README.html
-rw-r---- 1 1002 1001 1871 Aug 25 2010 ReleaseNotes-1.7.1
-rw-r---- 1 1002 1001 5829 Aug 25 2010 ReleaseNotes-1.7.1.html
drwxr-xr-x 30 root root 4096 Apr 12 15:38 src
drwxr-xr-x 15 root root 4096 Apr 12 15:39 tutorials
drwxr-xr-x 6 root root 4096 Apr 12 16:33 wmake
```





СТРУКТУРА OPENFOAM (IV)

```
sergei.strijhak@frontend.unicluster.ru:/lustre/unicluster/opt/OpenFOAM/1.6/OpenF
OAM/OpenFOAM-1.6/applications/solvers$ II
total 48
drwxr-xr-x 5 root root 4096 Apr 7 19:27 basic
drwxr-xr-x 10 root root 4096 Apr 7 19:27 combustion
drwxr-xr-x 12 root root 4096 Apr 7 19:27 compressible
drwxr-xr-x 4 root root 4096 Apr 7 19:27 discreteMethods
drwxr-xr-x 3 root root 4096 Apr 7 19:27 DNS
drwxr-xr-x 4 root root 4096 Apr 7 19:27 electromagnetics
drwxr-xr-x 3 root root 4096 Apr 7 19:27 financial
drwxr-xr-x 8 root root 4096 Apr 7 19:27 heatTransfer
drwxr-xr-x 11 root root 4096 Apr 7 19:27 incompressible
drwxr-xr-x 6 root root 4096 Apr 7 19:27 lagrangian
drwxr-xr-x 13 root root 4096 Apr 7 19:27 multiphase
drwxr-xr-x 4 root root 4096 Apr 7 19:27 stressAnalysis
```



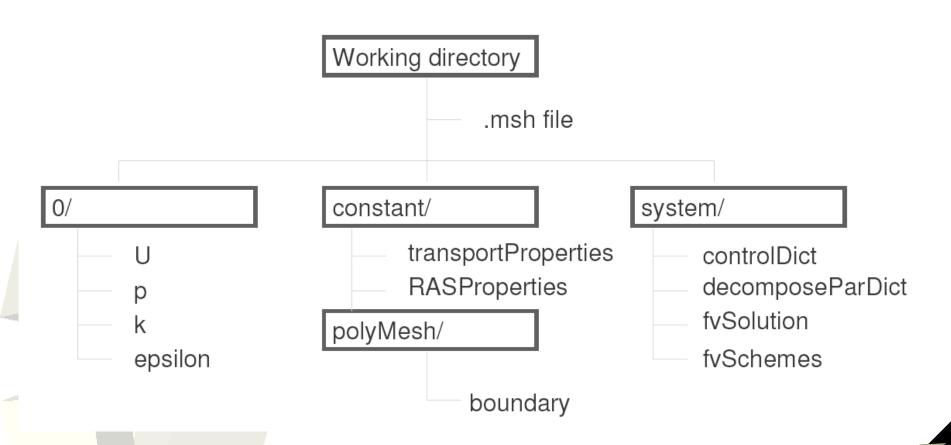
СТРУКТУРА OPENFOAM (V)

sergei.strijhak@frontend.unicluster.ru:/lustre/unicluster/opt/OpenFOAM/1.6/OpenFOAM/0penFOAM-1.6/applications/utilities\$ II total 32 drwxr-xr-x 6 root root 4096 Apr 7 19:27 errorEstimation drwxr-xr-x 6 root root 4096 Apr 7 19:27 mesh drwxr-xr-x 7 root root 4096 Apr 7 19:27 miscellaneous drwxr-xr-x 6 root root 4096 Apr 7 19:27 parallelProcessing drwxr-xr-x 14 root root 4096 Apr 7 19:27 postProcessing drwxr-xr-x 12 root root 4096 Apr 7 19:27 preProcessing drwxr-xr-x 26 root root 4096 Apr 7 19:27 surface drwxr-xr-x 7 root root 4096 Apr 7 19:27 thermophysical



СТРУКТУРА КАТАЛОГА ЗАДАЧИ OPENFOAM

Work Structure, simpleFoam





День I, Модуль 2, Секция 1. Обзор системного окружения

case - relative or absolute path to the case

Basic Case Structure (Базовая структура примера)

НЕКОТОРЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ

casel – the case directory

- + 0/ содержит начальные и граничные условия
- **+ constant/** constant data (данные и константы)
- + polyMesh/ содержит данные сетки
- + transportProperties вязкость
- + system/ run-time control / numerics
- + controlDict run-time control (параметры для контроля задачи)
- + fvSchemes numerical schemes (расчетные схемы)
- + fvSolution решатели для СЛАУ

case/0/ – contains for each variable a fle defining the initial and boundary conditions. May also contain initial and boundary conditions for a moving grid.

case/constant/polyMesh/ – contains the grid data for a non-moving grid. The fles are: boundary, faces, neighbour, owner, points.

case/constant/transportProperties – defnes the viscosity (also for non-Newtonian fuids)

case/system/controlDict – sets start-/endtime, time-step size, output control etc. Also allows to load general "plugins" and apply "function-objects" to compute forces acting on a surface.
 case/system/fvSchemes – defines the numerical schemes to be used for each differential operator

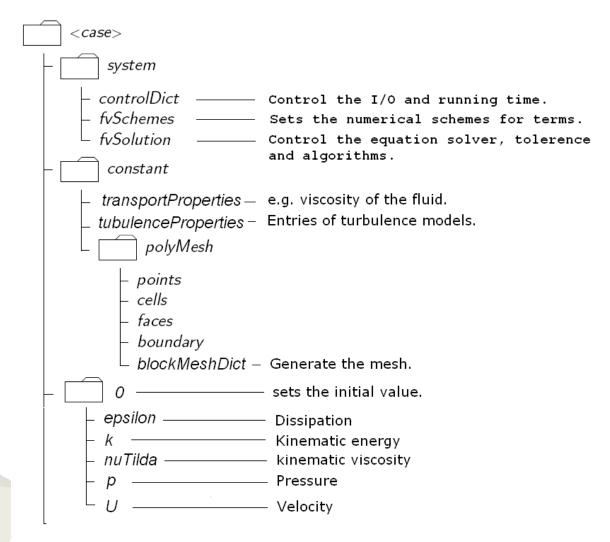
case/system/fvSolution – selects the solvers to be used for the linear equation systems for each variable which is solved for using an implicit scheme.

Москва, Институт Системного Программирования РАН



ПРИМЕР СТРУКТУРЫ КАТАЛОГА ЗАДАЧИ

OPENFOAM







ПОДГОТОВКА ЗАДАЧИ

```
FoamFile
  version
            2.0;
  format
            ascii;
           dictionary;
  class
  location
            "system";
  object
           controlDict;
application
             icoFoam;
startFrom
             startTime;
startTime
             0;
stopAt
            endTime;
endTime
              5;
deltaT
            0.005;
writeControl timeStep;
writeInterval 100;
purgeWrite
              0:
writeFormat
              ascii:
writePrecision 6:
writeCompression uncompressed;
timeFormat
              general;
timePrecision 6;
runTimeModifiable yes;
```





День I, Модуль 2, Секция 1. Обзор системного окружения

CXEMЫ ДИСКРЕТИЗАЦИИ — system/fvSchemes

```
ddtSchemes
  default
              steadyState; }
gradSchemes
              Gauss linear; grad(p)
                                        Gauss linear; grad(U)
                                                                   Gauss linear;}
  default
divSchemes
  default
              Gauss upwind; div((nuEff*dev(grad(U).T()))) Gauss linear;}
laplacianSchemes
  default
              Gauss linear corrected; laplacian(DnuTildaEff,nuTilda) Gauss linear corrected;}
interpolationSchemes
  default
              linear; interpolate(U) upwind phi;}
snGradSchemes { default
                               corrected;}
fluxRequired
               { default
                              no; p
                                             ;}
```



METOДЫ РЕШЕНИЯ СЛАУ — system/fvSolutions

```
solvers
       PCG;
 solver
 preconditioner DIC;
 tolerance 1e-06;
 relTol 0.01;
            PBiCG;
 solver
 preconditioner DILU;
 tolerance 1e-05;
 relTol
           0.1;
```





ПРЕДСТАВЛЕНИЕ РАСЧЕТНОЙ СЕТКИ В OPENFOAM

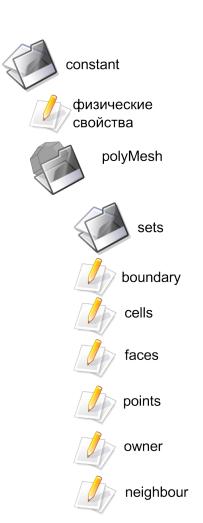
Расчетная сетка в Ореп F О А М представлена следующими файлами (содержатся в каталоге соп s tan t/p o ly M e s h):

- 1. points список координат узлов образующих сетку
- faces список граней, образующих контрольные объёмы расчетной сетки
- 3. owners список гране принадлежащих контрольным объёмам
- neighbours список граней, являющихся соседними по отношению кконтрольным объёмам
- boundary описание физических типов граничных условий

Типы сеток, передаваемых в ОрепFОAN следует разделить на два класса:

- 1. Блочные сетки, определяемые внутренним форматом Ореп FOAM (файл **b lock Mesh Dict**)
- 2. Неструктурированные сетки, сгенерированные средствам и сторонних продуктов

Перед тем, как осуществить инициализацию расчетной области, необходимо, чтобы каталоги 0, constant, constant/poly Mesh и system (с файлам fv Soluion, fv Schemes и control Dict) уже существовали — эти каталоги с их первоначальным содержимым можновзять из любой тестовой задачи Ореп FOAM.







СТРУКТУРА ФАЙЛОВ ИСХОДНОГО КОДА РЕШАТЕЛЯ OPENFOAM

appName/ – the directory with the source code

- + appName.C the main program
- + createFields.H declarations and initializations of all felds
- + Make/ compilation instructions
- + files list of source/output fles
- + options compilation options

appName/appName.C – the actual solver code **appName/createFields.H** – declares all the feld variables and initializes the by (usually) reading the initial conditions from a fle.

appName/Make/files - names all the source (.C)
fles, one fle per line. The last line should read
EXE=\$(FOAM_USER_APPBIN)/appName to specify
the name and location of the output fle.

appName/Make/options – specifes directories to search for include fles and libraries to link the solver against. The former are specifed in the variable EXE_INCS, the latter in EXE_LIBS. Lines have to be continued using the \ character



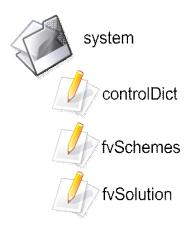
ПОДГОТОВКА К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧИ В OPENFOAM

Создание директории для расчетов

```
[cfd 1 @ m a ster ~ ] $ m k d ir -p /h o m e/cfd 1 / O pen F O A M / $ {U S E R } - $ {W M _ P R O J E C T _ V E R S IO N } / r u n [cfd 1 @ m a ster O pen F O A M ] $ II to ta I 1 2 d rw x r - x r - x 3 cfd 1 s m 3 4 0 9 6 D e c 1 8 1 2 : 2 8 cfd 1 - 1 . 6 d rw x r - x r - x 1 0 cfd 1 s m 3 4 0 9 6 D e c 1 7 1 7 : 4 6 O pen F O A M - 1 . 6 d rw x r - x r - x 1 3 cfd 1 s m 3 4 0 9 6 D e c 1 7 1 7 : 4 7 T h ird P a r ty - 1 . 6
```

Общий порядок для лю бого кейса:

```
$ blockMesh - подготовка сетки
$ checkMesh - проверка сетки
$ icoFoam (pisoFoam, sonicFoam) - запуск реш ателя
$ foam ToVTK - трансляция результатов в формат VTK
$ ./paraview - запуск пост-процессора Paraview
```





ЛИТЕРАТУРА

- 1) Марк.Г. Сабел Практическое руководство по Red Hat Linux. Изд. дом 'Вильямс', 2005. 1072 с.
 - 2) Немет Э., Снайдер Г.,Хейн Т. Руководство администратора Linux, 2 издание. ООО 'И.Д. Вильямс', 2009. 1072 с
 - 3) Гергель В.П. Теория и практика параллельных вычислений. ИНТУИТ, Бином. Лаборатория знаний, 2007.
 - 4) К.Ю.Богачев Основы параллельного программирования. Бином.2010. 342 с.
 - 5) Лупин С.А., Посыпкин М.А. Технология параллельного программирования. М.: ИД Форум. 2008. 208 с.
 - 6) Страуструп Б. Язык программирования С++. 2008
 - 7) Язык программирования СИ++. Курс лекций. Учебное пособие. / Фридман А.Л. / 2009. 264 с.
 - 8) Шилдт Г. С++ для начинающих. Пер с англ. М.: Эком Паблишерз. 2007.- 640 с.