

Sesión 5. Cálculo paralelo y postprocesado

E. Martín¹, M. Meis^{1,2} y F. Varas¹

¹Univ. de Vigo, ²Vicus Desarrollos Tecnológicos

Dinámica de fluidos computacional con OpenFOAM
17–20 de Junio de 2014



Unión Europea
FEDER



Invertimos en su futuro

Proyecto CloudPYME

El proyecto CloudPYME (ID 0682_CLOUDPYME2_1_E) está cofinanciado por la Comisión Europea a través del Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER), dentro de la tercera convocatoria de proyectos del Programa Operativo de Cooperación Transfronteriza España–Portugal 2007–2013 (POCTEP).



Unión Europea
FEDER



Invertimos en su futuro

Plan

1 Cálculo paralelo

2 Postprocesado

Plan

1 Cálculo paralelo

2 Postprocesado

Cálculo paralelo

Paralelización en OF 2.3.0

- Introducción
- Utilidades y diccionarios para el Preproceso
- Ejecución
- Utilidades para el Postproceso

Referencias

- <http://www.openfoam.org/docs/user/running-applications-parallel.php>
- OpenFOAM User Guide (sección 3.4)

Introducción

Características

- La implementación del cálculo paralelo está oculta para el usuario
- La creación de un nuevo *solver* debería funcionar el paralelo
- La mayor parte de las aplicaciones y utilidades funcionan en paralelo
- Paralelización mediante descomposición de dominios
- Uso del diccionario *decomposeParDict*
- Implementación de la paralelización mediante openMPI
- Creación de tantas carpetas como número de particiones (\$) con el nombre *processor.\$*

Procesos de cálculo paralelo

Utilidades y diccionarios para el Preproceso

decomposePar

Automaticamente descompone una malla y las variables de un caso para la ejecución paralela en OF

```
[FOAM-2.3.0]marcos@laptop:~$ decomposePar -help
Usage: decomposePar [OPTIONS]
options:
  -allRegions      operate on all regions in regionProperties
  -case <dir>     specify alternate case directory, default is the cwd
  -cellDist        write cell distribution as a labelList - for use with
                  'manual' decomposition method or as a volScalarField for
                  post-processing.
  -constant        include the 'constant/' dir in the times list
  -copyUniform     copy any uniform/ directories too
  -fields          use existing geometry decomposition and convert fields only
  -force           remove existing processor*/ subdirs before decomposing the
                  geometry
  -ifRequired      only decompose geometry if the number of domains has changed
  -latestTime      select the latest time
  -noFunctionObjects
                  do not execute functionObjects
  -noSets          skip decomposing cellSets, faceSets, pointSets
  -noZero         exclude the '0/' dir from the times list, has precedence
                  over the -zeroTime option
  -region <name>  specify alternative mesh region
  -time <ranges>  comma-separated time ranges - eg, ':10,20,40:70,1000:'
  -srcDoc         display source code in browser
  -doc            display application documentation in browser
  -help          print the usage
```

Utilidades y diccionarios para el Preproceso

redistributePar

Redistribuye la malla particionada y los campos existentes de acuerdo con opciones actuales en el diccionario decomposeParDict

```
[FOAM-2.3.0]marcos@laptop:~$ redistributePar -help
Usage: redistributePar [OPTIONS]
options:
  -case <dir>          specify alternate case directory, default is the cwd
  -mergeTol <scalar>  specify the merge distance relative to the bounding box size
                       (default 1e-6)
  -noFunctionObjects  do not execute functionObjects
  -overwrite          overwrite existing mesh/results files
  -parallel           run in parallel
  -region <name>     specify alternative mesh region
  -roots <(dir1 .. dirN)>
                       slave root directories for distributed running
  -srcDoc             display source code in browser
  -doc               display application documentation in browser
  -help              print the usage
```

NO FUNCIONA EN PARALELO

decomposeParDict

Opciones

```
//- Keep owner and neighbour on same processor for faces in zones:  
preserveFaceZones (heater solid1 solid3);  
  
//- Keep owner and neighbour on same processor for faces in patches:  
// (makes sense only for cyclic patches)  
preservePatches (cyclic_half0 cyclic_half1);  
  
//- Keep all of faceSet on a single processor. This puts all cells  
// connected with a point, edge or face on the same processor.  
// (just having face connected cells might not guarantee a balanced  
// decomposition)  
// The processor can be -1 (the decompositionMethod chooses the processor  
// for a good load balance) or explicitly provided (upsets balance).  
singleProcessorFaceSets ((f0 -1));  
  
//- Keep owner and neighbour of baffles on same processor (i.e. keep it  
// detectable as a baffle). Baffles are two boundary face sharing the  
// same points.  
preserveBaffles true;  
  
//- Use the volScalarField named here as a weight for each cell in the  
// decomposition. For example, use a particle population field to decompose  
// for a balanced number of particles in a lagrangian simulation.  
weightField dsmcRhoNMean;
```

decomposeParDict

Entradas obligatorias

- numberOfSubdomains** Indica el número de dominios en los que se descompone el caso
- method** Indica el método de descomposición a utilizar. Cada método lleva asociados unos coeficientes de entrada
- distributed** Entrada lógica para la indicación de la distribución de datos
- root** Indica la ruta de la carpeta del caso en cada nodo

decomposeParDict

Métodos de descomposición

- simple** Descomposición geométrica simple en función del orden de los ejes coordenados (X, Y, Z)
- hierarchical** Igual que el métodos *simple* pero el usuario especifica el orden de los ejes (ej: Z, X, Y)
- manual** Descomposición manual, donde el ususario especifica la localización de cada celda a un determinado procesador
- multiLevel** Similar a textithierarchical pero se pueden utilizar todos los métodos en una manera anidada
- structured** Descomposición 2D para mallas estructuradas (caso especial)

decomposeParDict

Métodos de descomposición

scotch/ptscotch Descomposición automática que intenta minimizar el número de comunicaciones entre procesadores y equilibrar la carga entre procesadores. No requiere información geométrica por parte del usuario. Se distribuye con el código. Licencia CeCILL-C

metis Funcionamiento similar al algoritmo scotch (minimizar el número de comunicaciones entre procesadores y equilibrar la carga entre procesadores). No requiere información geométrica por parte del usuario. **No** se distribuye con el código. Licencia Apache License Version 2.0.

Ejecución

Solvers

```
$ mpirun -hostfile <machinefile> -np <nProcs> <foamExec>  
<case> <otherArgu> -parallel
```

- *machinefile*: archivo que contiene los nombres de las máquinas
- *nProcs*: número de procesadores
- ...

Utilidades

```
$ mpirun -np <nProcs> <foamUtil> -parallel
```

- *nProcs*: número de procesadores
- *foamUtil*; Utilidad de OF

reconstructPar

Aplicación para reconstruir la malla particionada en una única

Opciones

```
[FOAM-2.3.0]marcos@laptop:~$ reconstructPar -help

Usage: reconstructPar [OPTIONS]
options:
  -allRegions          operate on all regions in regionProperties
  -case <dir>         specify alternate case directory, default is the cwd
  -constant            include the 'constant/' dir in the times list
  -fields <list>      specify a list of fields to be reconstructed. Eg, '(U T p)'
                    - regular expressions not currently supported
  -lagrangianFields <list>
                    specify a list of lagrangian fields to be reconstructed. Eg,
                    '(U d)' -regular expressions not currently supported,
                    positions always included.
  -latestTime          select the latest time
  -newTimes            only reconstruct new times (i.e. that do not exist already)
  -noFunctionObjects  do not execute functionObjects
  -noLagrangian        skip reconstructing lagrangian positions and fields
  -noSets              skip reconstructing cellSets, faceSets, pointSets
  -noZero              exclude the '0/' dir from the times list, has precedence
                    over the -zeroTime option
  -region <name>      specify alternative mesh region
  -time <ranges>      comma-separated time ranges - eg, ':10,20,40:70,1000:'
  -zeroTime            include the '0/' dir in the times list
  -srcDoc              display source code in browser
  -doc                 display application documentation in browser
  -help               print the usage
```

reconstructPar

Aplicación para reconstruir la malla particionada en una única

Opciones

```
[FOAM-2.3.0]marcos@laptop:~$ reconstructPar -help

Usage: reconstructPar [OPTIONS]
options:
  -allRegions          operate on all regions in regionProperties
  -case <dir>         specify alternate case directory, default is the cwd
  -constant            include the 'constant/' dir in the times list
  -fields <list>      specify a list of fields to be reconstructed. Eg, '(U T p)'
                    - regular expressions not currently supported
  -lagrangianFields <list>
                    specify a list of lagrangian fields to be reconstructed. Eg,
                    '(U d)' -regular expressions not currently supported,
                    positions always included.
  -latestTime          select the latest time
  -newTimes            only reconstruct new times (i.e. that do not exist already)
  -noFunctionObjects  do not execute functionObjects
  -noLagrangian        skip reconstructing lagrangian positions and fields
  -noSets              skip reconstructing cellSets, faceSets, pointSets
  -noZero              exclude the '0/' dir from the times list, has precedence
                    over the -zeroTime option
  -region <name>      specify alternative mesh region
  -time <ranges>      comma-separated time ranges - eg, ':10,20,40:70,1000:'
  -zeroTime            include the '0/' dir in the times list
  -srcDoc              display source code in browser
  -doc                 display application documentation in browser
  -help               print the usage
```

Plan

1 Cálculo paralelo

2 Postprocesado

Visualización de resultados

Conversión

- foamDataToFluent: convierte datos de OpenFOAM a formato de Fluent
- foamToEnSight: convierte datos de OpenFOAM a formato de EnSight
- foamToVTK: convierte datos de OpenFOAM a formato de VTK
- foamToTecplot360: convierte datos de OpenFOAM a formato de tecplot

Aplicaciones

Utilidades¹



mesh



miscellaneous



parallelProcessing



postProcessing



preProcessing



surface



thermophysical

```
$ cd /opt/openFOAM-2.3.0/applications/utilities
```

Aplicaciones

Utilidades. Postprocesado



mesh



miscellaneous



parallelProcessing



postProcessing



preProcessing



surface



thermophysical

Entrar en cada una de las carpetas para ver una descripción completa de cada una de ellas.

Utilidades de preprocesado

Utilidades

setFields selecciona un conjunto de celdas y modifica sus valores

mapFields Proyecta los campos de una malla a otra, leyendo e interpolando todos los campos existentes. Casos paralelos y no paralelos son manejados sin necesidad de reconstruir

Utilidades de postprocesado

PostProceso sobre fronteras

patchAverage Calcula el promedio de un campo ponderado con el área

patchIntegrate Calcula la integral de un campo ponderado con el área

Utilidades de postprocesado (cont)

PostProceso de muestreo (sampling)

`probeLocations` Muestras puntuales discretas

`sample` Muestras sobre nube de puntos, líneas y superficies.

Utilidades de postprocesado (cont)

sample

- Permite evaluar cualquier campo mediante líneas o superficies
- *sampleDict* es el diccionario para controlar la evaluación
- Permite una amplia variedad de formatos de escritura: gnuplot, jPlot, grace/xmgr
- Se debe ejecutar una vez finalizada la simulación

Utilidades de postprocesado (cont)

sampleDict

Diccionario que contiene la descripción de la evaluación a realizar. Puede contener lo siguiente

- Elección del esquema de interpolación
- La descripción de la línea
- La descripción de la superficie
- Los campos a evaluar

Utilidades de postprocesado (cont)

probesLocation

- Permite evaluar cualquier campo mediante puntos discretos
- *probesDict* es el diccionario para controlar la evaluación
- Los valores se almacenan en una nueva carpeta *postProcessing/probes*
- Los valores se almacenan en archivos de tipo ascii con el nombre del campo
- Se debe ejecutar una vez finalizada la simulación

probesDict

Diccionario que contiene la descripción de la evaluación a realizar. Puede contener lo siguiente

Utilidades de postprocesado en tiempo de ejecución

Function Objects

- Bibliotecas de herramientas de postprocesado en tiempo de ejecución
- Pueden ser usadas en cualquier solver sin necesidad de compilación
- Se añaden en el diccionario controlDict

Más información

- Código fuente: `/opt/openFOAM-2.3.0/src/postProcessing/functionObjects`
- <http://www.openfoam.com/features/runtime-postprocessing.php>
- http://openfoamwiki.net/index.php/Contrib_simpleFunctionObjects

Utilidades de postprocesado en tiempo de ejecución (cont)

- `fieldAverage` - temporal averaging of fields.
- `fieldMinMax` - writes min/max values of fields.
- `fieldValue` - averaging/integration across sets of faces/cells, e.g. for flux across a plane.
- `readFields` - loads fields to the database for post-processing.
- `surfaceInterpolateFields` - generates surfaceFields from volFields for further postprocessing.
- `forces` - calculates pressure/viscous forces and moments.
- `forceCoeffs` - calculates lift, drag and moment coefficients.
- `sampledSet` - data sampling along lines, e.g. for graph plotting.
- `probes` - data probing at point locations.
- `isoSurface` - generation of an isosurface of given fields in one of the standard sample formats, e.g. VTK.
- `cuttingPlane` - generation of a cuttingPlane with field data in one of the sample formats.
- `sampledPatch` - generation of a surface of a patch with field data in one of the sample formats.
- `systemCall` - execute any system call, e.g. email you to tell you your job is finished.
- `abortCalculation` - Watches for presence of the named file in the case directory and aborts the calculation if it is present.
- `partialWrite` - allows registered objects, e.g. fields, to be written at different times (frequencies).
- `nearWallFields` - generates a volField with boundary values from interpolated internal field.
- `streamLine` - generates streamlines in one of the sample formats.
- `timeActivatedFileUpdate` - modifies case settings at specified times in a simulation.
- `writeRegisteredObject` - writes registered objects, e.g. fields that are not scheduled to be written in the application, i.e. created with `NO_WRITE`.

Más utilidades

Info

`patchSummary` Muestra la información de las condiciones de contorno y de la variable para cada frontera y en cada tiempo

`checkMesh` Comprueba y muestra información de la malla

Varias

`writeCellCenters` Guarda las tres componentes de las celdas como un campo escalar

`ptot` Calcula la presión total a cada paso de tiempo

PyFoam

Descripción

Biblioteca que permite controlar ejecuciones y manipular datos de OF. Puede ser usada para:

- Analizar los *logs* de salida de cualquier solver
- Ejecuta y manipula los *solvers* y las aplicaciones y analiza su salida simultaneamente
- Manipula los parámetros de los archivos de condiciones iniciales
- Visualiza los residuales de cualquier *solver*

Más información

`http://openfoamwiki.net/index.php/Contrib/PyFoam`