

1. seminář VŠCHT k OpenFOAM

Představení OpenFOAM



Martin Isoz

VŠCHT Praha,
Ústav matematiky

9. února 2016





Úvod





Open FOAM

The Open Source CFD Toolbox

Cíle

- Stručně představit OpenFOAM z uživatelského pohledu
 - Co to je? Co s tím je možné dělat?
- Představit standardní pracovní proces s OpenFOAM.

Obsah

- Co je to OpenFOAM?
- Hlavní klady a zápory
- Jak ho nainstalovat?
- Jak se s tím pracuje?



Co to je OpenFOAM





Prohlášení: OpenFOAM je distribuován společností OpenFOAM Foundation a vyvíjen společností OpenCFD Ltd. Tato prezentace není nijak vázána na ani podporována žádnou z výše uvedených organizací.

OpenFOAM v pár bodech

- Zdarma – Open-source – software na numerické simulace specializovaný zejména na CFD
 - Zdarma – licence není omezená velikostí domény ani počtem jader (1000+)
 - Open-source – vhodný k úpravám kódu přesně dle potřeb uživatele
- Založený na metodě konečných objemů (FVM)
- Dostupný
 - Plně podporován na linuxu (kompilace + předkompilované balíky pro nejrozšířenější distribuce)
 - Předinstalovaný na školním clusteru (Altix, 192 jader), na počítačích českého superpočítačového centra (Salomon, Anselm)
- Aktivně vyvíjený (OpenCFD Ltd. + komunita)



Equation Mimicking

- Většinu problémů mechaniky kontinua lze formulovat jako parciální diferenciální rovnice
- Příklad: Navier-Stokesovy rovnice, isotermní případ, jedna fáze, nestlačitelná tekutina, žádné vnější síly

$$u_t + \nabla \cdot (u \otimes u) - \nabla \cdot (\nu \nabla u) = -\nabla p$$

- Implementace v OpenFOAM

```
solve
(
    fvm::ddt(U) +
    fvm::div(phi,U) - fvm::laplacian(nu,U)
    ==
    -fvc::grad(p);
);
```



Struktura OpenFOAM

- Základní knihovny (diskretizace, síťování, FVM, . . .)
- Knihovny s fyzikálními modely (termodynamika, viskozita, turbulence, . . .)
- Utility (import/export, paralelizace, postprocessing, . . .)
- Řešiče
- Rozhraní pro uživatelská rozšíření a analýzu dat

Ideální případ

- Pro každou skupinu problémů mechaniky kontinua existuje speciální řešič (pár set řádků kódu)
- Kód je strukturovaný, komentovaný, snadný na pochopení
- Existující kód lze přímo využít jako základ pro vlastní problém
- Všechny nízkoúrovňové funkce (mesh, základní numerické metody, . . .) mám k dispozici ve formě referencovatelných objektů



Běžné nářky

- Velmi malá oficiální podpora programu – software je zdarma, ale školení a podpora rozhodně ne
- Neexistuje (obecně) ucelený soubor studijních materiálů – při práci je obvykle nutné procházet velké množství prezentací, zpráv, absolventských prací a uživatelských fór
- Uživatel může změnit *cokoliv*, od parametrů fyzikálního modelu, přes parametry simulace jako takové až po zdrojové kódy elementárních součástí OpenFOAM
- Nic nejde naklikat

Další bolístky

- Kód je sice přehledný a strukturovaný, ale často nepřiliš komentovaný a ne zcela jednoduchý na pochopení
- Vše je objekt, všechny vlastnosti se dědí a nikde není co je co



Jak začít pracovat s OpenFOAM





Základy práce v OS GNU/Linux

- Umět instalovat programy (přidávání a spravování repozitářů)
- Znat základy správy práv v unixových systémech (`chmod`, `chown`)
- Zbytek se v praxi nijak neliší od práce v MS Windows

Základy práce v příkazové řádce Unix-like systémů

- Příkazy pro navigování v systému (`ls`, `cd`, `pwd`, ...)
- Příkazy pro manipulaci se soubory (`cp`, `mv`, `rm`, ...)
- Základy správy vzdálených serverů (`ssh`, `scp`, ...)

Základy programování, zejména v C++

- Základy algoritmizace a objektového programování
- Struktura C++ programů (zdrojové a hlavičkové soubory, deklarace a definice proměnných, ukazatele a reference)
- Základy kompilování (`make`, `gcc`, ...)



Fyzika v pozadí

- Garbage in – garbage out

Algoritmy CFD

- Algoritmy řešení Navier-Stokesových rovnic, PISO, SIMPLE, PIMPLE
- Další třídy algoritmů a metod pro specializované problémy

Matematické metody

- Metoda konečných objemů (FVM), metoda konečných ploch (FAM)
- Metody linearizace nelineárních diferenciálních rovnic
- Metody řešení soustav lineárních algebraických rovnic (Předpodmiňování, metody založené na krylovových podprostorech, multigrid metody)



Kompilace ze zdrojových kódů

- Lze nastavit přímo na míru daným potřebám
- Kompletní zdrojové kódy jsou k dispozici na [GitHub](#)
- Návod ke kompilaci je možné nalézt na [stránkách výrobce](#)
- Časově náročné

Předkompilovaný balík

- Snadná instalace včetně doprovodných programů
- Pouze pro Ubuntu

V rámci jiného softwarového řešení

- Existují komerční i open source software založené na OpenFOAM a snažíci se poskytnout „přívětivější uživatelské prostředí“
- Příkladem například open source program HELYX OS společnosti Engsys
- Pouze omezená funkcionality

HELYX OS – GUI pro OpenFOAM

Omezená podpora funkcionality OpenFOAM, ale obecně dobrý pro začátky



The screenshot displays the HELYX OS interface, powered by Engys. The main window shows a 3D visualization of a blue rectangular plate with a cyan-colored edge, positioned in a 3D coordinate system (X, Y, Z). The plate is oriented diagonally. The interface includes a menu bar (File, Edit, Help) and a toolbar with options like New, Open, Save, Save As..., Terminal, Browse, and Support. A left sidebar contains a tree view for Mesh, Base Mesh, Lines, Material Point, Mesh (with sub-items like Patches, inlet, outlet, plate, sides, atmosphere, Cell Zones), and Custom (with sub-items like constant, system). The central panel shows the Mesh Actions (Create, Edit Script, Check, Edit Script, Delete) and Properties (Name: #_Ra55_0_60_0_H2OCK_GR, Path: /media/martin/Data_2/05_TestPlate/10_noTexture, Created: Feb 7, 2016). Below the properties is a Statistics section (Number of Cells: 0, Number of Faces: 0, Number of Points: 0, Cells per Refinement Level: [input field]) and a Bounds section (X Range: [0, 0.06] (Delta 0.06), Y Range: [0, 0.05] (Delta 0.05), Z Range: [0, 0.007] (Delta 0.007)). A bottom-left terminal window shows the following output:

```
HELIX-CAD7-Pucter
root : /
FOAM : 2706
Case : /media/martin/Data_2/05_TestPlate/10_noTexture/01_Ra55_0_60_0_H2OCK_GR
# of Cells : 1
# of Faces : 1
# of Points : 1
HELIX: - Double floating point exception trapping (FOAM_SIGFPE).
[1] Mesh::face::checkMesh: Monitoring non-zero mesh/face/Cell using time() on master
[0] Mesh::face::checkMesh: Allowing user-specified system call: none
// .....
Create time
Create polyMesh for time = 0
foo: /media/martin/Data_2/05_TestPlate/10_noTexture/01_Ra55_0_60_0_H2OCK_GR/Log/checkMesh.log No such file or directory
time = 0
Mesh stats
points 1170864
faces 3420324
internal faces 250252
```

The terminal window title is "Check Mesh [11:37:50]". The bottom status bar shows "HELIX-OS v2.3.1 [2016-01-22] /media/martin/Data_2/05_TestPlate/10_noTexture/01_Ra55_0_60_0_H2OCK_GR Serial" and "113 / 989 MB". The Engys logo is visible in the bottom right corner of the 3D view area.

HELYX OS – GUI pro OpenFOAM

Omezená podpora funkcionality OpenFOAM, ale obecně dobrý pro začátky



The screenshot displays the HELYX OS interface, which is a GUI for OpenFOAM. The main window is titled "HELIX-OS - powered by Engys". It features a menu bar (File, Edit, Help) and a toolbar with options like New, Open, Save, Save As..., Terminal, Browse, and Support. Below the toolbar are tabs for Mesh, Case Setup, and Solver. The left sidebar contains several panels: Decompose, Solution Modelling, Materials (with material1 and material2), Phases (with inlet, swirlInlet, outlet, plate, sides, and atmosphere), Cell Zones, Numerical Schemes, Solver Settings, Runtime Controls, and Fields Initialisation (with Custom, 0, constant, and system). The central area shows a 3D visualization of a plate with various boundary conditions applied, including a cyan plate, a green plate, and a blue plate. The bottom left corner has a terminal window titled "Check Mesh [11:37:50]" showing the following output:

```
root@143-C487-Pucker:~/OpenFOAM
FOAM
Case: /media/martin/Data_2/05_TestPlate/10_noTexture/F_Ra55_0_60_0_H2OCK_OR
solver
solver: Double floating point exception trapping (FOAM_SIGFPE).
[1] Press Ctrl+C to abort the calculation. Monitoring non-zero mod/sum files using timeMonitor.
[2] Press Ctrl+Z to abort the calculation. Allowing user-supplied system call overrides.
// .....
Create time
Create polyMesh for time = 0
tee: /media/martin/Data_2/05_TestPlate/10_noTexture/F_Ra55_0_60_0_H2OCK_OR/log/checkMesh.log: No such file or directory
time = 0
Mesh:
  cells: 1170884
  faces: 3420324
  internal faces: 2520252
```

The bottom right corner of the 3D view shows the Engys logo and the coordinates $X [0.0, 6.00E-2] \ \& \ 6.00E-2 \ Y [0.0, 5.00E-2] \ \& \ 5.00E-2 \ Z [0.0, 7.00E-3] \ \& \ 7.00E-3$. The bottom status bar shows "HELIX-OS v2.3.1 [2016-01-22] /media/martin/Data_2/05_TestPlate/10_noTexture/F_Ra55_0_60_0_H2OCK_OR Serial" and "61 / 989 MB".

HELYX OS – GUI pro OpenFOAM

Omezená podpora funkcionality OpenFOAM, ale obecně dobrý pro začátky



The screenshot displays the HELYX OS interface, which is a GUI for OpenFOAM. The main window is titled "HELYX OS - powered by Engys®". The interface is divided into several panels:

- Mesh**: Contains "Decompose" and "Solver" buttons.
- Solution Modelling**: Includes "Materials" (material1 [phase1], material2 [phase2]), "Phases", and "Boundary Conditions" (inlet, outlet, plate, sides, atmosphere).
- Runtime Controls**: Contains "Time Settings" (Start From: Latest Time, End Time: 1.01, Δt(s): 0.0000001, Adjustable Time Step: checked, Max Courant Number: 0.9, Max Courant Alpha: 0.5, Max Time Step: 0.01), "Data Writing" (Write Control: Run Time, Purga Write: 0, Write Format: ASCII, Write Precision: 10, Write Compression: Uncompressed, Time Format: General, Time Precision: 6, Graph Format:), "Numerical Schemes", "Solver Settings", "Runtime Controls", and "Fields Initialisation" (Custom: 0 [processor0 .. 3], constant, system).
- 3D Model**: A large 3D view of a grey wing-like object. A red line is drawn across the top surface. A coordinate system (X, Y, Z) is visible at the bottom left. The Engys logo is at the bottom right. The status bar at the bottom shows "X [0.0, 6.00E-2] & 6.00E-2 Y [0.0, 5.00E-2] & 5.00E-2 Z [0.0, 7.00E-3] & 7.00E-3".
- Terminal**: A window at the bottom left showing the output of the "Decompose" command. The output includes:

```
Number of processor patches = 3
Number of processor faces = 3036
Number of boundary faces = 19632
Number of processor faces = 1078
Max number of cells = 26200 (1.43248240k above average 30204)
Max number of processor patches = 3 (2% above average 2.5)
Max number of faces between processors = 836 (4.43059617k above average 826.5)
Time = 1
Selected additional non-decomposed files in "/media/martin/Data_1/HELIXOS/testCase1/function"
Processor 0: field transfer
Processor 1: field transfer
Processor 2: field transfer
Processor 3: field transfer
End
```



- !! Pro OpenFOAM neexistuje jednotný materiál !!
!! popisující všechny jeho součásti !!

Uživatelský manuál, Programátorský manuál

- Vydávány přímo společností OpenCFD, Ltd., vždy aktuální
- Základní materiály do začátku, dále nekompletní

CFD online

- Největší internetové fórum zaměřené na CFD
- Přes 70000 příspěvků zaměřených na OpenFOAM
- Velké množství informací, ale nepřehledné, často zastaralé

Zprávy a absolventské práce

- V daném tématu obvykle velmi podrobné
- Úzce zaměřené, často zastaralé
- Chalmers university – online dostupné, popsané tutoriály



!! Pro OpenFOAM neexistuje jednotný materiál !!
!! popisující všechny jeho součásti !!

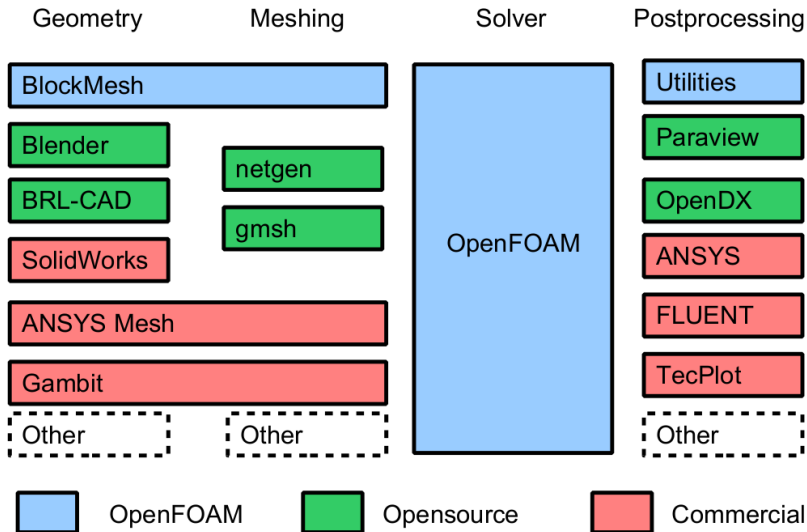
Tutoriály

- Jsou součástí základní instalace OpenFOAM
- Řešené příklady z velkého množství oborů
- K dispozici pro většinu základních součástí OpenFOAM
- Přehledně roztríděné podle témat
- Ozkoušené, většinou poskytují uvěřitelné výsledky
- Některé jsou podrobně popsány v Uživatelském manuálu
- Jejich součástí není popis a odvození modelu
- Jednotlivé úkony nejsou vysvětleny a použití daných nastavení simulace není nijak komentováno



Způsob práce s OpenFOAM





[Andrew King, Fluid dynamics research group, Curtin University of Technology]



CTRL-C

- OpenFOAM obsahuje velké množství předřešených problémů z různých odvětví výpočetní mechaniky tekutin
 - Potenciální proudění, přenos (hmoty/tepla...)
 - Proudění nestlačitelných i stlačitelných tekutin
 - Vícefázové proudění
 - Laminární/turbulentní proudění (DNS, LES)
 - Spalování
 - ...

ale i z jiných oblastí

- 1. krok při sestavování vlastního modelu - najít již řešený podobný případ

```
=====  
./tutorials/  
=====
```



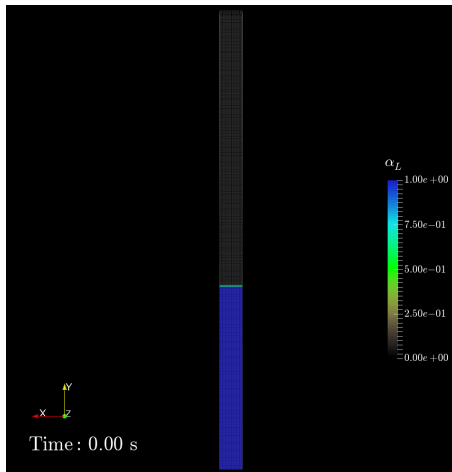
```
=====  
./tutorials/multiphase/interFoam/laminar/ ...  
... /capillaryRise  
=====
```

Příklad

Vytvoření simulace roztékající se kapky, CTRL-C fáze



```
=====  
./tutorials/multiphase/interFoam/laminar/ ...  
... /capillaryRise  
=====
```

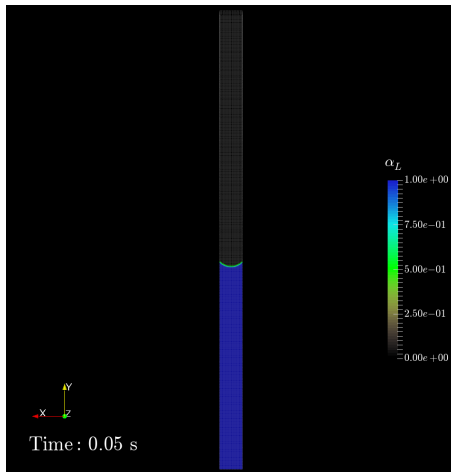


Příklad

Vytvoření simulace roztékající se kapky, CTRL-C fáze



```
=====  
./tutorials/multiphase/interFoam/laminar/ ...  
... /capillaryRise  
=====
```

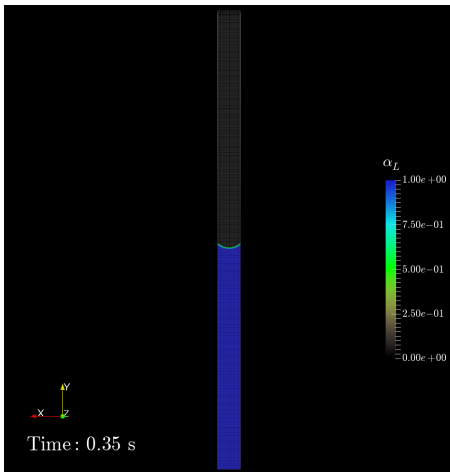


Příklad

Vytvoření simulace roztékající se kapky, CTRL-C fáze

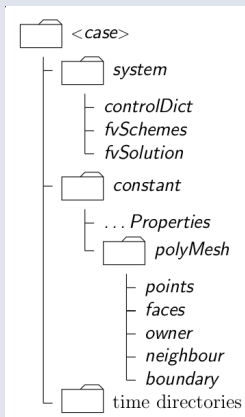


```
=====  
./tutorials/multiphase/interFoam/laminar/ ...  
... /capillaryRise  
=====
```





Struktura pracovní složky



- Uživatel komunikuje s OpenFOAM primárně přes **slovníky** (... Dict)
- Složka `system`, nastavení řešiče a kontrola simulace
- Složka `constant`, parametry modelů a síť
- `time directories`, obsahují počáteční a okrajové podmínky a řešení

[OpenFOAM Foundation, OpenFOAM User Guide, version 2.3.1, 2014]

Geometrie → Diskretizace → Řešič (modely) → Postprocessing



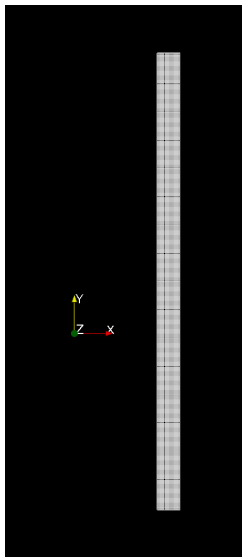
Uživatel komunikuje s OpenFOAM primárně přes **slovníky** (. . . Dict)

Co je třeba změnit

- Geometrie (chci roztékání na rovině) → `system/blockMeshDict`
- Počáteční podmínka (potřebuji kapku) → `system/setFieldsDict`

Co je třeba zkontrolovat

- Okrajové podmínky → `0/*`
- Způsob řešení → `system/fvSolution`
- Kontrola běhu simulace → `system/controlDict`



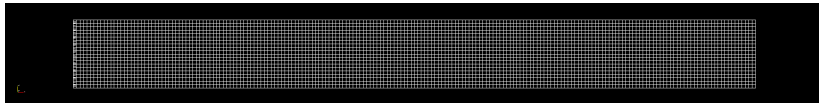
```
convertToMeters 1e-3;
```

```
vertices //2D kapilara, 1 x 20 mm
```

```
(  
    (0 0 0)  
    (1 0 0)  
    (1 20 0)  
    (0 20 0)  
    (0 0 1)  
    (1 0 1)  
    (1 20 1)  
    (0 20 1)  
);
```

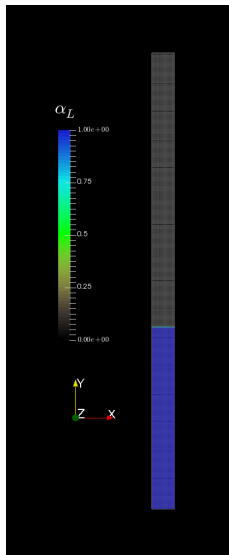
```
blocks //8000 sestistennych bunek
```

```
(  
    hex (0 1 2 3 4 5 6 7)  
        (20 400 1) simpleGrading (1 1 1)  
);
```



```
convertToMeters 1e-3;

vertices //obdelnik, 10 x 1 mm
(
    ( 0 0 0)
    (10 0 0) //zmenseni na polovinu
    (10 1 0) // a otoceni o 90 stupnu
    ( 0 1 0)
    ( 0 0 1)
    (10 0 1)
    (10 1 1)
    ( 0 1 1)
);
blocks //4000 sestistennych bunek
(
    hex (0 1 2 3 4 5 6 7) (200 20 1) simpleGrading (1 1 1)
);
```



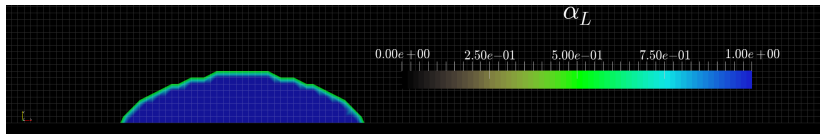
```
defaultFieldValues
(
  //zakladni hodnoty - vsude faze 0
  volScalarFieldValue alpha.water 0
);

regions
(
  boxToCell
  {
    //v danem kvadru nastavi fazi 1
    box (0 0 -1) (1 8e-3 1);

    fieldValues
    (
      volScalarFieldValue
      alpha.water 1
    );
  }
);
```

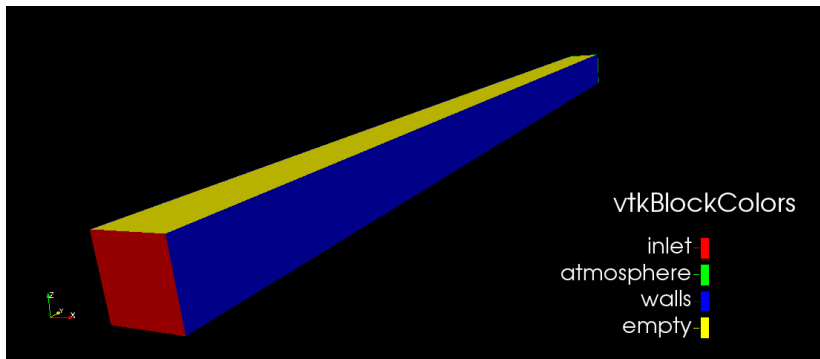
Změna počáteční podmínky

Úpravy slovníku `system/setFieldsDict` – Po úpravě



```
regions
(
  cylinderToCell
    { //potrebuji nastavit pritomnost kapky
      //kruhova usec o h = 0.4 mm, s = 1.6 mm
      p1 (0.00500 -0.00105 -0.1);
      p2 (0.00500 -0.00105 0.1);
      radius 0.00145;

      fieldValues
      (
        volScalarFieldValue alpha.water 1
      );
    }
);
```



- V nové simulaci nepotřebuji inlet
- Jediná stěna bude substrát (původně inlet)
- Zbytek bude atmosféra

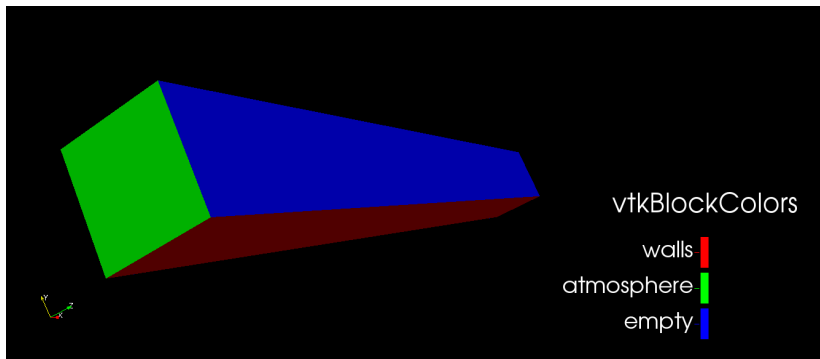


Původní verze

```
boundary
(
    inlet
    {
        type patch;
        faces ( (1 5 4 0) );
    }
    atmosphere
    {
        type patch;
        faces ( (3 7 6 2) );
    }
    walls
    {
        type wall;
        faces
        (
            (0 4 7 3)
            (2 6 5 1)
        );
    }
    ...
);
```

Upravené

```
boundary
(
    walls
    { //inlet -> walls
        type wall;
        faces ( (1 5 4 0) );
    }
    atmosphere
    { //zbytek -> atmosphere
        type patch;
        faces
        (
            (3 7 6 2)
            (0 4 7 3)
            (2 6 5 1)
        );
    }
    ...
);
```

- Inlet odstraněn
- Stěna je pouze substrát
- Vše ostatní je atmosféra



Shodné pro oba případy

- Kapalina – voda, plyn – vzduch
- Hlavní hnací síla – kapilární jevy

Odlíšné

- Směr působení gravitace, proti povrchovým silám v případě vzlínání kapilárou, ne zcela jasné případě roztékání
- Geometrie – odstranili jsme vstup kapaliny

Závěry

- **Odstranit vše týkající se vstupu kapaliny** → 0 / *

Zamyšlení před spuštěním simulace

Hodně jsme toho přeskočili a vynechali – oprávněně?



- Jaká jsou časová/rychlostní/tlaková měřítka obou dějů? Můžeme založit simulování námi studovaného děje na simulaci vzlínání kapaliny kapilárou?

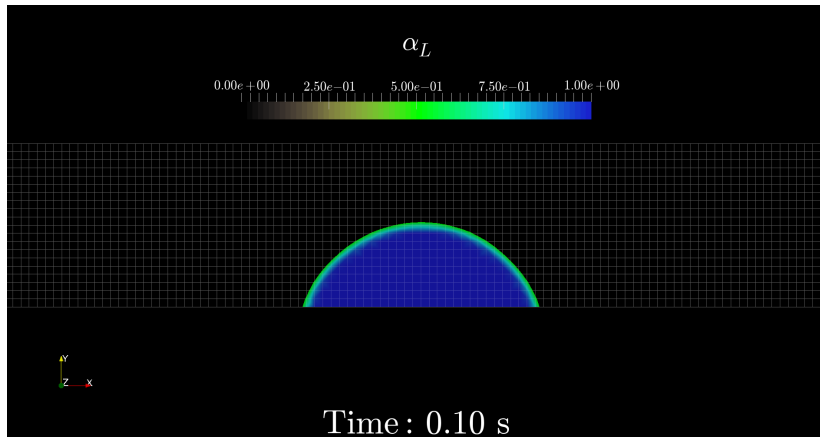
- Zcela jsme přeskočili matematický aparát v pozadí simulace. Můžeme si to dovolit?

Očekávaný výsledek

Hrubá síť → oscilace, Voda + malý počáteční kontaktní úhel → zmenšení kapky



Získaný výsledek:

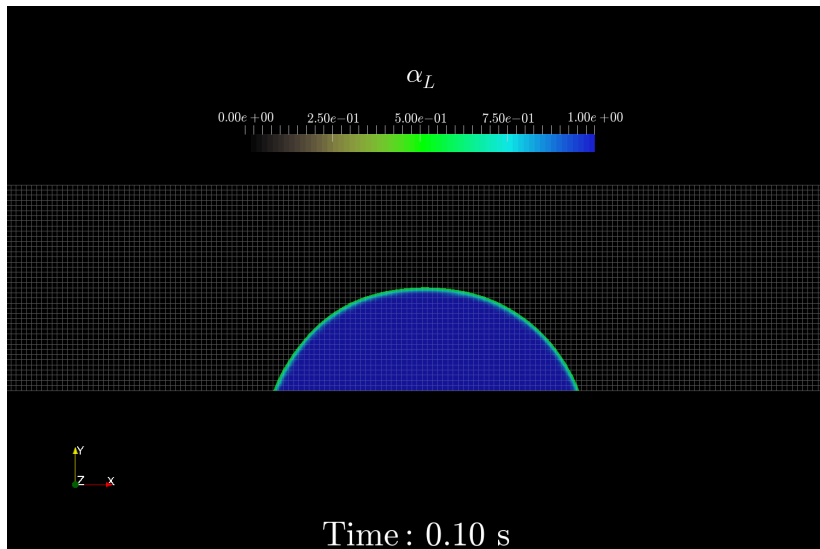


Očekávaný výsledek

Hrubá síť → oscilace, Voda + malý počáteční kontaktní úhel → zmenšení kapky



Jak jej zlepšit? Zmenšit doménu, zjemnit síť





Shrnutí





Open FOAM

The Open Source CFD Toolbox

Klady

- Produkován pod svobodnou licencí, open source
- Výsledky srovnatelné s komerčními balíky
- Řešitel vidí do řešiče

Zápory

- Nepříjemný na učení
- Neexistuje jednotný manuál
- Občas „neprůhledný“.



Děkuji za pozornost

