

Universidade Federal de Uberlândia  
Laboratório de Mecânica dos fluidos  
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica

**MFSIM:  
MANUAL DE INSTALAÇÃO**

Uberlândia  
June 13, 2023

# Contents

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>2</b>
1.1	Obtendo o MFSim	2
1.1.1	Windows	2
1.1.2	Linux	3
1.2	Softwares em cada stack	3
1.3	Macros	4
<b>2</b>	<b>Configurando os ambientes</b>	<b>6</b>
2.1	Windows	6
2.1.1	Docker	6
2.2	Linux	7
2.2.1	Singularity	7
2.2.1.1	Instalando o singularity via instalador	7
2.2.1.2	Imagens e versões da stack	7
2.2.1.3	Testando a instalação	8
2.2.2	Lmod	8
2.2.2.1	Instalando a lmod	8
2.2.2.2	Atualizando a lmod	9
2.3	Gmsh	9
<b>3</b>	<b>Filosofia de uso</b>	<b>10</b>
3.1	Pastas de compilação e Instalação	10
3.2	Escolhendo o local de instalação	11
3.2.1	Lmod e Singularity	11
3.2.2	Docker	12
3.3	Modos de Instalação	12
3.4	Instalação de testes	12
<b>4</b>	<b>Compilando e Instalando</b>	<b>13</b>
4.1	Lmod	13
4.1.1	Módulos versão 10	13
4.1.2	Módulos versão 12	13
4.1.3	Compilando e instalando	13
4.2	Singularity	13
4.3	Docker	14
<b>5</b>	<b>Ferramentas de Apoio</b>	<b>15</b>
5.1	Ferramenta de Limpeza	15
5.2	Ferramenta de Teste de Casos	15
<b>6</b>	<b>Homologação</b>	<b>17</b>
6.1	Windows	17
6.1.1	Docker	17
6.1.1.1	Instalação das bibliotecas e dependências	17
6.1.1.2	Obtendo o MFSim e configurando o Docker para uso	17
6.1.1.3	Compilando o MFSim	17
6.1.1.4	Validando	18
6.2	Linux	18
6.2.1	Singularity	18
6.2.1.1	Instalação das bibliotecas e dependências	18
6.2.1.2	Obtendo o MFSim e configurando-o para uso	18
6.2.1.3	Compilando o MFSim	18
6.2.1.4	Validando	18
6.2.2	Lmod	19
6.2.2.1	Instalação das bibliotecas e dependências	19
6.2.2.2	Obtendo o MFSim e configurando-o para uso	19
6.2.2.3	Compilando o MFSim	19
6.2.2.4	Validando	19

# 1 Introdução

Antes de utilizar o MFSim é necessário instalar e configurar os softwares que o mesmo depende para funcionar. O conjunto desses softwares é o que chamamos de *stack*. Há 3 *stacks* suportadas pelo MFSim atualmente: 2 para o sistema operacional (SO) GNU/Linux e 1 para o Microsoft Windows. As *stacks* também possuem versões que são nomeadas de acordo com a versão do compilador usado em cada uma delas.

Nesse manual apresentaremos todas as 3 *stacks*, nas duas versões que existem para cada uma. Cabe ao usuário escolher qual a *stack* melhor lhe atende. A seguir está um resumo de cada *stack*, em qual sistema operacional (SO) elas executam, os pontos fortes e fracos de cada uma.

Table 1: Stacks do MFSim

Stack	Versões	SO	Prós	Contras
Docker	10 e 12	Windows	instalação mais fácil softwares via imagem pronta	requisitos do Docker
Singularity	10 e 12	Linux	instalação mais fácil softwares via imagem pronta	requisitos do Singularity
Lmod	10 e 12	Linux	maior flexibilidade mesmo ambiente dos clusters	instalação mais complexa

Agora que você sabe os pontos fortes e fracos de cada *stack*, pode então decidir qual delas melhor lhe atende. Evidentemente, algumas *stacks* são melhor indicadas para alguns ambientes do que outros. Ex: se você pretende utilizar o MFSim no Microsoft Windows, a opção para você é a *stack* Docker.

Na seção 2, mostraremos como instalar e configurar cada uma dessas *stacks*. As subseções estão organizadas por sistema operacional para facilitar, então você pode ir diretamente para a subseção que apresenta a *stack* que você escolheu, sem precisar ler as seções com as demais *stacks*, sem qualquer prejuízo.

Na seção 3 apresentaremos a filosofia de uso do MFSim. Essa seção é **vital**, então é altamente recomendado que você a leia e procure compreendê-la bem, pois precisará dos conhecimentos nela listados posteriormente.

A seção 4 apresenta a compilação e instalação do MFSim. As subseções estão organizadas por *stack*, então, novamente, você pode ir diretamente para a subseção que apresenta como compilar e instalar o MFSim na sua *stack*.

Em seguida, a seção 5 apresenta as ferramentas de apoio do MFSim e por último, a seção 6 mostra como homologar a instalação da *stack*. Novamente, você pode ir diretamente para a subseção que descreve como homologar a *stack* que você está usando.

## 1.1 Obtendo o MFSim

Para utilizar o MFSim, evidentemente você precisará do código fonte do mesmo.

Atualmente o código fonte é mantido em um servidor privado (gitea) do MFLab. Logo, se ainda não tem acesso ao servidor, precisa providenciar. Você conseguirá obter acesso com o seu professor orientador (se aluno) ou diretamente com a coordenação do MFLab (se externo) pelo e-mail [secmflab@mecanica.ufu.br](mailto:secmflab@mecanica.ufu.br).

Para os próximos passos assumirei que já possui acesso ao gitea. A primeira coisa que precisa fazer é instalar o git, caso já não tenha instalado.

### 1.1.1 Windows

Se você está utilizando Windows você pode fazer o download do git diretamente do site do desenvolvedor: <https://git-scm.com/downloads>.

Baixe e instale o git.

O MFSim é um programa em modo texto (vulgo, linha de comando), então é necessário que você acostume a usar terminais para executar tarefas. O Windows possui um terminal mais sofisticado que o cmd que vem por padrão em toda versão do Windows. Esse terminal é o *PowerShell*. Você pode fazer o download do PowerShell pelo site: <https://docs.microsoft.com/pt-br/powershell/scripting/install/installing-powershell-core-on-windows?view=powershell-7>.

Baixe e instale o powershell.

Feito isso crie um pasta no seu sistema de arquivos. Você pode usar qualquer nome que desejar, porém como utilizará a pasta em linha de comando, é uma boa prática evitar utilizar espaços e acentuação no nome da pasta.

**Para fins de exemplificação** vou considerar que a pasta está em `C:\Users\mflab\Desktop\MFSim`.

Abra o PowerShell e execute:

```
[PowerShell] > cd C:\Users\mflab\Desktop\MFSim
```

Agora que está dentro da pasta, você deve clonar o repositório com o código fonte do MFSim e o repositório com os casos.

```
[PowerShell] > git clone https://www.mflab.mecanica.ufu.br/gitea/root/MFSim-cmake.git
[PowerShell] > git clone https://www.mflab.mecanica.ufu.br/gitea/root/MFSim-cases.git
```

Ao final terá duas novas pastas dentro da que criou originalmente:

```
C:/Users/mflab/Desktop/MFSim
  /MFSim-cmake <- pasta com o código fonte
  /MFSim-cases <- pasta com os casos
```

Pronto, agora você já tem o que precisa para instalar a *stack*.

### 1.1.2 Linux

A maioria das distribuições Linux possui o git disponível para instalação em seus repositórios. Se estiver utilizando Ubuntu ou Mint, você pode instalar o git com o comando:

```
$ sudo apt install git
```

Caso esteja utilizando outra distribuição, adapte o comando conforme o necessário.

Agora que tem o git, crie uma pasta para o MFSim dentro do seu *home*. Para isso abra o terminal e execute:

```
$ cd ~
$ mkdir nome_da_pasta
```

Eu vou utilizar como nome da pasta, *MFSim*, então o comando ficará como:

```
$ cd ~
$ mkdir MFSim
```

Vá para a pasta recém criada

```
$ cd MFSim
```

E clone o repositório com o código fonte do MFSim e o repositório com os casos.

```
$ git clone https://www.mflab.mecanica.ufu.br/gitea/root/MFSim-cmake.git
$ git clone https://www.mflab.mecanica.ufu.br/gitea/root/MFSim-cases.git
```

Ao final terá duas novas pastas dentro da que criou originalmente:

```
$HOME/MFSim
  /MFSim-cmake <- pasta com o código fonte
  /MFSim-cases <- pasta com os casos
```

Pronto, agora você já tem o que precisa para instalar a *stack*.

## 1.2 Softwares em cada stack

A seguir há uma lista dos softwares e versões dos mesmos disponíveis em cada *stack*. A lista é muito mais para fins de informação, visto que não interferem no uso do MFSim.

Table 2: Softwares - Stacks versão 10

Software	Docker	Singularity	Lmod
OS	Ubuntu 20.04 [imagem]; Windows [hospedeiro]	CentOS 7 [imagem]; Linux [hospedeiro]	Ubuntu 20.04; Mint 20.4
compilador	gnu 10.2	gnu 10.2	gnu 10.2
python	2.7.18	2.7.18	2.7.18; 3.9.0
valgrind	3.16.1	3.16.1	3.16.1
cmake	3.19.4	3.19.4	3.24.1
lapack	3.9.0	3.9.0	3.9.0
swig	3.0.12	3.0.12	3.0.12
boost	1.76.0	1.76.0	1.74.0
eigen3	3.3.8	3.3.8	3.3.8
fmt	7.1.2	7.1.2	7.1.2
scons	3.1.2	3.1.2	3.0.1
googletest	1.10.0	1.10.0	1.10.0
openmpi	4.0.5	4.0.5	4.0.5
gsl	2.7	2.7	2.7
hdf5	1.12.0	1.12.0	1.10.5
trilinos/zoltan	13.0.1	13.0.1	13.0.1
scalapack	2.1.0	2.1.0	2.1.0
petsc	3.14.1	3.14.1	3.14.1
slepc	3.14.0	3.14.0	3.14.0
sundials	3.1.2	3.1.2	3.1.2
cantera	2.4.0	2.4.0	2.4.0

Table 3: Softwares - Stacks versão 12

Software	Docker	Singularity	Lmod
OS	Ubuntu 22.04 [imagem]; Windows [hospedeiro]	Ubuntu 22.04 [imagem]; Linux [hospedeiro]	Ubuntu 20.04, 22.04; Mint 21.1
compilador	gnu 12.2	gnu 12.2	gnu 12.2
python	3.11.2	3.11.2	3.11.2
valgrind	3.20.0	3.20.0	3.20.0
cmake	3.25.2	3.25.2	3.25.2
lapack	3.11	3.11	3.11
swig	4.1.1	4.1.1	4.1.1
boost	1.81.0	1.81.0	1.81.0
eigen3	3.4.0	3.4.0	3.4.0
fmt	9.1.0	9.1.0	9.1.0
scons	4.5.2	4.5.2	4.5.2
googletest	1.13.0	1.13.0	1.13.0
coolprop	6.5.0	6.5.0	6.5.0
suitesparse	7.0.1	7.0.1	7.0.1
openmpi	4.1.5	4.1.5	4.1.5
gsl	2.7.1	2.7.1	2.7.1
hdf5	1.14.0	1.14.0	1.14.0
trilinos/zoltan	14.0.0	14.0.0	14.0.0
scalapack	2.2.0	2.2.0	2.2.0
petsc	3.19.0	3.19.0	3.19.0
slepc	3.19.0	3.19.0	3.19.0
sundials	6.5.0	6.5.0	6.5.0
cantera	2.6.0	2.6.0	2.6.0

### 1.3 Macros

Algumas macros **de exemplificação** são utilizadas nesse manual. A seguir, apresentamos quais e o que significam. Quando estiver lendo as próximas seções, se tiver alguma dúvida, volte nesse tópico aqui para consultar o que a macro significa.

- **PATH\_DO\_FONTE\_MFSIM**: local no seu sistema de arquivos onde o código fonte está;
- **PATH\_DO\_MFSIM\_INSTALADO**: local no seu sistema de arquivos onde o MFSim foi instalado;

## 2 Configurando os ambientes

A configuração do ambiente é a instalação e configuração da *stack* sob a qual o MFSim executa e depende para funcionar. A *stack* varia de acordo com o sistema operacional e as ferramentas utilizadas. Algumas, como a lmod, são mais próximas das *stacks* configuradas nos clusters do MFLab (e outros clusters também). Outras, como o singularity e docker, estão mais próximas das *stacks* utilizadas em ambientes fora do MFLab. Como falado na seção anterior, escolha a *stack* que considerar mais viável para o seu uso.

### 2.1 Windows

#### 2.1.1 Docker

O *docker* é uma plataforma que facilita o deployment de aplicações, permitindo através de seu sistema de imagens e containers, uma miríade de configurações de ambiente rodarem numa mesma máquina. Em termos simples, é uma forma de virtualização bem leve. Você pode aprender mais sobre como o docker funciona pelo site de seu desenvolvedor, <https://docs.docker.com/get-started/overview/>.

Com essa ferramenta é possível rodar no Windows o MFSim, um software feito para executar em ambiente GNU/Linux. Entretanto, alguns pré-requisitos precisam ser observados **antes de tentar rodar o MFSim no Windows**.

**Primeiro** o docker precisa estar devidamente instalado e configurado na sua máquina. A instalação e os pré-requisitos do docker no Windows podem ser encontrados em <https://docs.docker.com/docker-for-windows/install/>

**Segundo** a ferramenta PowerShell, na versão 6 ou superior, deve estar instalada, configurada e habilitada para o usuário. Mais detalhes sobre isso, podem ser encontrados em <https://docs.microsoft.com/pt-br/powershell/scripting/install/installing-powershell-core-on-windows?view=powershell-7>

**Terceiro** o Docker cria um repositório local na máquina. O local varia, então será necessário privilégio de administrador na instalação do Docker, mesmo que temporariamente. Após a instalação, o local do repositório deve ter permissão de escrita para o usuário e o docker.

**Quarto** é necessário criar dois pontos no sistema de arquivos, com os quais o Docker será integrado. O usuário **deve** ter permissão de escrita nesses pontos. O primeiro ponto é para o código do MFSim e o segundo para o MFSim compilado. A sugestão é criar uma pasta na Área de Trabalho do usuário, para conter os dois pontos.

**Quinto** você precisará do código fonte do MFSim. Caso ainda não tenha, verifique a seção 1.1 para mais detalhes.

**Sexto**, acesso à internet, com o docker hub registry e o domínio mflab.mecanica.ufu.br (ambos HTTP/HTTPS), **sem quaisquer formas de bloqueios ou impedimento de acesso**.

**Sétimo** e último requisito é pelo menos 35 GB de espaço disponível em disco.

Uma vez satisfeitos **todos os requisitos**, você pode proceder com a instalação da imagem do mflab do Docker no Windows.

Para **fins de exemplificação**, vou considerar que o código fonte do MFSim está em C:\Users\mflab\Desktop\MFSim\MFSim-cmake

Abra o powershell e vá para a pasta *stacks/install\_docker*, dentro do código fonte do MFSim e construa a imagem docker:

```
[PowerShell] > cd C:\Users\mflab\Desktop\MFSim\MFSim-cmake\stacks\install_docker\  
C:\Users\mflab\Desktop\MFSim\stacks\install_docker\> docker build -t mflab_image .
```

O nome da imagem será *mflab\_image* e será armazenada no repositório local do *docker*. Durante a construção da imagem será **necessário acesso à internet, em especial ao docker hub registry**.

Pode acontecer de um *warning* ser emitido ao final da construção da imagem, com uma mensagem parecida com a seguinte:

```
SECURITY WARNING: You are building a Docker image from Windows against a non-Windows Docker host.  
All files and directories added to build context will have '-rwxr-xr-x' permissions.  
It is recommended to double check and reset permissions for sensitive files and directories.
```

Esse aviso decorre do fato do Windows não suportar permissão de execução, como nos sistemas unix-like (Linux, FreeBSD, etc). Essa situação não influencia no uso do *docker* e nem do MFSim, então pode ignorar.

Se nenhum outro erro ou aviso foi emitido, é porque a instalação da imagem deu certo e ela já está pronta para ser usada.

## 2.2 Linux

### 2.2.1 Singularity

O *singularity* é outra plataforma, que como o *docker*, facilita o *deploy* de aplicações. A diferença dele com o *docker* está no ambiente.

Enquanto o *docker* é de uso genérico, sendo muito utilizado para fazer deployment de aplicações web, o *singularity* é mais voltado a ambientes de alta performance como os encontrados em cluster.

A forma de uso, entretanto, é bem parecida. Você cria uma imagem com o seu ambiente/stack configurado e usa essa imagem para rodar o seu código em um *container*. Porém, existe uma diferença crucial. Enquanto o *docker* simula uma máquina virtual (muito leve), com ambiente e sistema de arquivos próprios dentro de um container praticamente isolado da máquina local, o *singularity* usa o ambiente e o sistema de arquivos da máquina local no *container*, funcionando como uma camada entre o seu código e o sistema local. Dessa maneira, você consegue efetivamente interferir e controlar, de forma simples, o que está acontecendo dentro do container.

Isso é particularmente útil em clusters, pois permite o uso do *container* com softwares de execução em lotes, como o *pbs*, *torque* ou *slurm*, que requerem controle direto sobre o que a aplicação dentro do container está fazendo, como por exemplo, quantos processos filhos ela abre, quanto de RAM ela consome, entre outras coisas.

Por conta disso, se você for rodar o MFSim em um cluster fora do MFLab, é altamente provável que o rodará via *singularity*.

Uma última observação é que não precisa criar ponto específico no seu sistema de arquivos para o *singularity*. Como ele se integra com o sistema hospedeiro, podendo dentro do *container* navegar a vontade pelo sistema de arquivos local, não há necessidade de criar um ponto específico onde o *singularity* irá se conectar, como acontece com o *docker*.

Agora vamos à instalação dessa *stack*.

Assim como no *docker*,  **você precisa primeiro instalar o *singularity* na sua máquina, antes de fazer qualquer outra coisa proposta nesse tutorial.**

Neste sentido você pode tanto baixar e instalar o *singularity* diretamente do site do fabricante (<https://sylabs.io/guides/3.7/admin-guide/installation.html>) ou pode utilizar o instalador do *singularity*, fornecido junto ao código do MFSim, na pasta *stacks*. Aqui, vamos demonstrar como instalar via instalador já que para o caso de instalação manual, as instruções estão no site do fabricante.

#### 2.2.1.1 Instalando o singularity via instalador

Abra o terminal e execute:

```
$ cd PATH_DO_FONTE_MFSIM/stacks/install_singularity
$ sudo ./install.sh home=$HOME
```

Isso fará a instalação do go, singularity e das imagens na sua máquina. Após a instalação, pode ser necessário abrir outro terminal ou até mesmo realizar um novo login no sistema a fim de atualizar as variáveis de ambiente. Feito isso, abra um terminal e verifique se o *singularity* está de fato instalado:

```
$ singularity
Usage:
singularity [global options...] <command>
```

Se o resultado for parecido com o mostrado acima, então o *singularity* está instalado corretamente.

O instalador já baixa e configura as imagens, então se a instalação foi bem sucedida, você já tem todo o necessário para usar o *singularity* na sua máquina.

#### 2.2.1.2 Imagens e versões da stack

Há 3 imagens disponíveis, 1 para a stack singularity na versão 10 e 2 para a versão 12. O instalador criará macros para cada uma, que são

Table 4: Macros das imagens Singularity

Versão	Macro
10	MFLAB_IMAGE_GCC10
12	MFLAB_IMAGE_GCC12_DEBUG
	MFLAB_IMAGE_GCC12_ALEX

Há duas versões para stack singularity versão 12. Uma, contendo o cantera 2.6.0 original, a `MFLAB_IMAGE_GCC12_DEBUG` e outra, contendo o cantera 2.6.0 modificado pelo Alex, a `MFLAB_IMAGE_GCC12_ALEX`. Ao usar a versão 12, exceto se você for precisar do cantera modificado pelo Alex, você deve usar a imagem `MFLAB_IMAGE_GCC12_DEBUG`.

### 2.2.1.3 Testando a instalação

Por fim você pode testar a instalação tentando executar a imagem via *singularity*:

```
$ singularity shell $MFLAB_IMAGE_GCC12_DEBUG  
Singularity>
```

Se o seu resultado for parecido com o acima, então o *singularity* está pronto para ser usado com o MFSim.

### 2.2.2 Lmod

Todo sistema operacional utiliza de certas variáveis para saber quais softwares estão instalados nele, onde estão os arquivos de desenvolvimento, onde estão as bibliotecas, entre outras coisas. A essas variáveis chamamos de **variáveis de ambiente**. Isso vale para **praticamente todos os sistemas operacionais**, ou seja, Windows, Linux, Mac OS X, Android, iOS, Solaris, todos tem em comum o uso de variáveis de ambiente (embora o nome deles varie de acordo com o sistema operacional).

O Lmod é um software que gerencia variáveis de ambiente, utilizando um sistema de módulos. Com ele você pode instalar um conjunto de softwares, onde desejar, da forma que desejar e integrado com quem desejar, e adicionar as configurações desses softwares às variáveis de ambiente do sistema operacional, de forma que ele identifique os softwares que você instalou como parte do sistema.

Isso é extremamente útil quando você precisa ter vários tipos de softwares e bibliotecas instalados ao mesmo tempo em seu computador, incluindo quando esses softwares não são compatíveis entre si. Ex: você não pode ter dois compiladores GCC ao mesmo tempo na máquina. Um deles precisará ter um nome diferente para não conflitar com o outro. O lmod resolve esse problema.

Por este motivo o lmod provê a *stack* mais sofisticada, visto que permite grande flexibilidade ao usuário, porém é também a mais trabalhosa de instalar. Os clusters do MFLab utilizam essa *stack*, então usar lmod na sua máquina pode facilitar e muito na hora de utilizar os clusters depois.

Além disso, o lmod, devido a sua proposta de funcionamento, termina por não “amarrar” as bibliotecas e softwares instalados nele ao sistema operacional, ficando o usuário livre para atualizar os pacotes como precisar, assim como instalar múltiplas versões das bibliotecas, da mesma forma que acontece nos clusters.

O único cuidado que precisará ter é com a versão do compilador. Como tudo é construído com base nela, se mudar a versão do compilador, especialmente uma versão major (mudança de gcc 9 para gcc 10 por exemplo), precisará então recompilar a stack inteira.

Fora isso, poderá mudar o que quiser, da forma que quiser.

Uma última observação a se fazer é que essa sequência de instalação foi **testada no Ubuntu 20.04 e Mint 21.4**. Se está utilizando outra distribuição, pode ser que será necessário adaptar alguns comandos, como os pacotes a serem instalados do repositório da distribuição ou alguns paths de inclusão e linkagem nos módulos.

Exemplificando o caso acima, em sistemas Debian based (Debian, Ubuntu, Mint, etc), é comum os arquivos de biblioteca (os **.a** e **.so**) serem instaladas num diretório chamado **lib** a partir do path de instalação da biblioteca. Já em sistemas Red-Hat based (Red Hat, CentOS, SuSE, OpenSuSE, Fedora, etc), os mesmos arquivos são comumente instalados no diretório **lib64**. Logo, se estiver usando um sistema Red-Hat based, precisará alterar as variáveis LD\_LIBRARY\_PATH e LIBRARY\_PATH dos módulos de **\$prefix/lib** para **\$prefix/lib64**.

#### 2.2.2.1 Instalando a lmod

O MFLab provê um instalador para a *stack* lmod, dentro da pasta *stacks* do MFSim, desenvolvido em python 3. Por conseguinte, você precisará do python 3 instalado na sua máquina **previamente** a instalação da lmod. Também precisará de acesso à internet, especialmente ao site do MFLab, <https://www.mflab.mecanica.ufu.br>, pois o instalador fará o download de arquivos de configuração do site do MFLab durante a instalação.

Também verifique se possui permissão de sudo:

```
$ sudo ls /
```

Ao executar o comando acima será pedido uma senha, que é a mesma que usa para o logar o seu usuário na máquina. Se você não setou senha para o seu usuário (faz autologin), sete, pois precisará dela para continuar a instalação. Também, se ao fornecer sua senha de usuário o comando acima falhar, é porque você não tem permissões de sudo. Precisarás ajustar isso **antes** de prosseguir.

Uma vez que possua todos os requisitos, você pode instalar a *stack* lmod na sua máquina digitando no terminal:

```
$ cd PATH_DO_FONTE_MFSIM/stacks/install_lmod  
$ ./install.py install_path=/opt/ohpc install_lmod=true sudo_pwd="MINHA SENHA DE SUDO"
```

O instalador é bem versátil e pode ser utilizado para além de instalar a *stack* lmod, a atualizar com novas versões de bibliotecas. Você pode conferir quais são as opções digitando no terminal:

```
$ ./install.py
```

Assim que a instalação terminar, **será necessário abrir um novo terminal ou até mesmo fazer um novo login**, a fim de atualizar as variáveis de ambiente.

Para testar a instalação, acesse o terminal e digite:

```
$ ml
No modules loaded
```

Se o seu resultado for parecido com o mostrado acima, então a *stack* lmod está funcionando e já pode ser utilizada com o MFSim.

### 2.2.2.2 Atualizando a lmod

Caso você já possua a *stack* lmod instalada e deseja apenas atualizá-la, instalando uma *stack* nova configurada após já ter a lmod instalada na sua máquina, você pode se utilizar do instalador da seguinte forma:

```
$ cd PATH_DO_FONTE_MFSIM/stacks/install_lmod
$ ./install.py install_path=/opt/ohpc sudo_pwd="MINHA SENHA DE SUDO"
```

## 2.3 Gmsh

Dos programas utilizados para montar as simulações no MFSim, o único não contemplado em qualquer *stack* é o gerador de malhas *gmsh*. Porém, a instalação do mesmo bem é simples e pode ser realizada através do terminal, **APÓS A INSTALAÇÃO DA STACK** escolhida. Para versões do Linux baseadas em pacotes *.deb* (Linux Ubuntu, Linux Debian, Linux Mint e seus derivados), a instalação pode ser realizada utilizando o comando:

```
sudo apt install gmsh
```

Após a instalação o *gmsh* pode ser inicializado via terminal com o comando

```
gmsh &
```

onde o *&* coloca a execução do programa em background, liberando a janela do terminal utilizada para outras operações.

Para usuário Windows, você pode baixar o *gmsh* para Windows diretamente do site do seu desenvolvedor, <https://gmsh.info/>.

## 3 Filosofia de uso

Agora que instalou o ambiente para utilizar o MFSim, vamos entender a filosofia de uso do mesmo.

**Atenção!** A ideia dessa seção é explicar alguns detalhes sobre como se usa o MFSim. Logo, os **comandos nessa seção são apenas para mostrar a sequência de uso e não para exemplificar comandos reais em qualquer situação.**

Ao final dessa seção está uma subseção com detalhes de como aplicar os comandos para cada uma das *stacks* já descritas nesse manual. Entretanto, recomendamos que não tente simplesmente copiar e colar os comandos. Entenda a sequência apresentada e como eles se relacionam com cada *stack*. O “Manual de Usuário” apresenta de forma mais detalhada como aplicar os comandos, configurar o MFSim, entre outras informações pertinentes ao uso diretamente.

### 3.1 Pastas de compilação e Instalação

O MFSim é fornecido via código fonte, o que implica que precisará compilar, gerar o programa executável do MFSim, a partir do seu código fonte. Isso é feito através das ferramentas de compilação e bibliotecas embutidas na *stack* que instalou na seção anterior. Após compilar o MFSim, você irá executá-lo.

A primeira etapa é a de **compilação**. Nela utilizaremos o **cmake** para gerar as instruções de compilação e em seguida executar a compilação propriamente dita. O **cmake** requer o uso de uma pasta de compilação **separada** da pasta do código fonte. Então, após ter realizado o download do MFSim, precisará criar uma pasta para o **cmake**. Para fins de exemplificação, chamaremos ela de **build** e a criaremos dentro da pasta com o código fonte do MFSim.

```
PATH_DO_FONTE_MFSIM
/bin
/build <- crie esta pasta aqui!
/cmake
/CMakeLists.txt
/config.h.in
/docs
/geo
/input
/libs
/parser
/README.md
/src_amr
/src_check
/src_dl
/src_lag
/src_log
/src_mat
/src_par
/src_term
/src_turb
/src_vof
/stacks
/tests
/tmp
/tools
```

Uma vez dentro da pasta **build**, executaremos o **cmake**. Há alguns detalhes nessa parte dependendo da *stack* que está utilizando. Por isso, as sequências de comandos mostradas a seguir são explicativas, ou seja, **não tente executar os comandos imediatamente**. A ideia aqui é entender o que eles fazem. Detalhes da execução, conforme a *stack* estão nas próximas seções desse manual. Entendido esse ponto, vamos aos comandos.

```
$ cd PATH_DO_FONTE_MFSIM/build
$ cmake .. -Wno-dev
```

Se nenhum erro ocorrer, o **cmake** terá gerado a receita de compilação, o arquivo **Makefile** que utilizaremos para compilar o MFSim. Isto faremos executando o comando **make**, dando da pasta **build**.

```
$ make
```

Novamente, se tudo ocorreu sem erros, a próxima etapa é **instalar** o MFSim. Faremos isso utilizando o comando:

```
$ make install
```

Após esse comando, teremos o MFSim instalado e pronto para uso.

Antes de irmos para as próximas seções que mostram como aplicar os comandos mostrados aqui para cada uma das *stacks*, vamos revisar a ideia desse bloco aqui, que mostra a **filosofia de uso do MFSim**.

- 1 - O MFSim é fornecido via código fonte, então precisa gerar a versão executável e instalar no seu sistema;
- 2 - A etapa de gerar o executável chamamos de compilação;
- 3 - A compilação segue a sequência: cria a pasta `build` -> executa o `cmake` -> executa o `make`
- 4 - A instalação é feita executando o `make install` **após** a compilação terminar
- 5 - O MFSim é utilizado onde foi instalado

## 3.2 Escolhendo o local de instalação

É possível definir um local no seu sistema onde você quer instalar o MFSim. Por padrão, o `cmake` tentará instalar em um local pré-definido, dependendo da *stack* utilizada.

### 3.2.1 Lmod e Singularity

Nas *stacks* `lmod` e `Singularity` o `cmake` tenta instalar o MFSim na pasta `install`, dentro do código fonte do MFSim.

```
PATH_DO_FONTE_MFSIM
/bin
/build
/cmake
/CMakeLists.txt
/config.h.in
/docs
/geo
/input
/install <- cmake cria e tenta instalar o MFSim aqui
/libs
/parser
/README.md
/src_amr
/src_check
/src_dl
/src_lag
/src_log
/src_mat
/src_par
/src_term
/src_turb
/src_vof
/stacks
/tests
/tmp
/tools
```

Esse é o comportamento padrão, porém você pode especificar um outro local para a instalação. Para isso, ao executar o `cmake` na etapa de compilação, utilize o opção `-Dprefix` para indicar o local. Ex:

```
$ cd PATH_DO_FONTE_MFSIM/build
$ cmake .. -Dprefix=/tmp/mfsim -Wno-dev
```

A sequência acima configurará o `cmake` para instalar o MFSim, **após** a compilação, na pasta `/tmp/mfsim`.

Em geral, você pode especificar qualquer local para a instalação do MFSim, **desde que possua permissões de escrita nesse local**.

### 3.2.2 Docker

O Docker já traz o local de instalação do MFSim configurado por padrão e você **não precisa e nem deve alterar isso**. Nessa *stack* o MFSim sempre é instalado na pasta `/mfsim`

## 3.3 Modos de Instalação

O modo padrão de instalação do MFSim é o *debug*, que habilita funções de debugging como tabela de símbolos úteis ao `gdb` e `valgrind`. Entretanto, é possível utilizar a versão *release*, que desabilita as funções de debug e otimiza o código, tornando a execução mais rápida.

Qual das duas versões instalar dependerá do seu uso do MFSim. Se está utilizando o MFSim em ambiente de desenvolvimento é **fortemente recomendado** utilizar o modo padrão, o *debug*.

Já se estiver utilizando o MFSim em ambiente de produção, então é recomendado utilizar a versão otimizada, a *release*.

Para ativar o modo *release* simplesmente fornece o parâmetro de modo ao `cmake`:

```
$ cd PATH_DO_FONTE_MFSIM/build
$ cmake .. -Drelease=1
```

## 3.4 Instalação de testes

O MFSim também provê testes de verificação do mesmo, porém eles não são instalados por padrão. Para habilitar a instalação dos testes use:

```
$ cd PATH_DO_FONTE_MFSIM/build
$ cmake .. -Dinstall_tests=1
```

Mais detalhes de como utilizar os testes estão na seção 6

## 4 Compilando e Instalando

Essa seção mostra como compilar e instalar o MFSim, por *stack*. Você não precisa ler toda essa seção e pode ir direto para a subseção da *stack* que estiver utilizando.

### 4.1 Lmod

Conforme explicado na seção 2.2.2, o lmod é um software de gestão de variáveis de ambiente configurado via módulos. Então, se está utilizando lmod, precisará carregar os módulos com as bibliotecas que o MFSim precisa.

Basicamente o MFSim precisa de:

1. compilador C/C++ e fortran, também necessário para definir a versão usada;
2. cmake (apenas para compilação);
3. uma biblioteca MPI;
4. HDF5;
5. Cantera, GSL, zoltan, slepc e outras libs;

Então, carregaremos os módulos que proveem esses requisitos, teremos **algo como**:

```
$ ml gnu/VERSÃO cmake openmpi hdf5 cantera gsl slepc zoltan
```

#### 4.1.1 Módulos versão 10

Aplicando o comando de exemplo anterior a versão 10 da *stack* lmod teremos:

```
$ ml gnu/10.2.0 cmake openmpi hdf5 cantera gsl slepc zoltan
```

#### 4.1.2 Módulos versão 12

Aplicando o comando de exemplo anterior a versão 12 da *stack* lmod teremos:

```
$ ml gnu/12.2.0 cmake openmpi hdf5 cantera gsl slepc zoltan coolprop
```

#### 4.1.3 Compilando e instalando

Agora que temos os módulos carregados, podemos continuar com a compilação e instalação:

```
$ cd PATH_DO_FONTE_MFSIM/build
$ cmake .. -Wno-dev
$ make
$ make install
```

Se nenhum erro for acusado até aqui, o MFSim foi compilado e instalado com sucesso.

Detalhes de como usar o MFSim estão no manual do usuário no site oficial do MFSim: <https://www.mflab.mecanica.ufu.br/mfsim/>.

Por fim, recomendo que termine a leitura do manual, especialmente a seção 6 que contém toda uma sequência de passos para verificar se a instalação do MFSim está de fato correta.

## 4.2 Singularity

Assumindo que seguiu as instruções de instalação e configuração do Singularity conforme descritas na seção 2.2.1, para compilar e instalar o MFSim, precisará então instanciar o singularity e seguir a sequência de compilação e instalação, **dentro do singularity**.

Rememorando, para instanciar o singularity você utiliza algo como:

```
$ singularity shell $MFLAB_IMAGE_GCC12_DEBUG
Singularity>
```

Sendo que esse Singularity> indica que você está dentro do singularity. Continuando,

```
Singularity> PATH_DO_FONTE_MFSIM/build
Singularity> cmake .. -Wno-dev
Singularity> make
Singularity> make install
```

Se nenhum erro for acusado até aqui, o MFSim foi compilado e instalado com sucesso.

Detalhes de como usar o MFSim estão no manual do usuário no site oficial do MFSim: <https://www.mflab.mecanica.ufu.br/mfsim/>.

Por fim, recomendo que termine a leitura do manual, especialmente a seção 6 que contém toda uma sequência de passos para verificar se a instalação do MFSim está de fato correta.

### 4.3 Docker

Por fim, temos a *stack* Docker apresentada na seção 2.1.1. O docker utiliza volumes virtuais para conectar o *container* ao sistema de arquivos da máquina hospedeira. Nesse sentido, dois volumes estão configurados na imagem: um para a compilação e outro para a execução do MFSim.

Logo, ao instanciar o docker, precisaremos configurar esses dois volumes. O comando a seguir apresenta um **exemplo** disso:

```
docker run -it -v PATH_DO_FONTE_MFSIM:/mflab -v PATH_DO_MFSIM_INSTALADO:/mfsim mflab_image /bin/bash
```

Como pode ver, dentro do *container* docker o `/mflab` conterà o código fonte do MFSim, onde você fará a compilação, enquanto que o `/mfsim` conterà o MFSim instalado, de onde você executará suas simulações.

Uma vez que tenha instanciado o docker, poderá então seguir com a sequência de compilação e execução:

```
[bash] # cd /mflab/build
[bash] # cmake .. -Wno-dev
[bash] # make
[bash] # make install
```

Se nenhum erro for acusado até aqui, o MFSim foi compilado e instalado com sucesso.

Detalhes de como usar o MFSim estão no manual do usuário no site oficial do MFSim: <https://www.mflab.mecanica.ufu.br/mfsim/>.

Por fim, recomendo que termine a leitura do manual, especialmente a seção 6 que contém toda uma sequência de passos para verificar se a instalação do MFSim está de fato correta.

## 5 Ferramentas de Apoio

Junto ao MFSim estão algumas ferramentas que fornecem funções adicionais. Essa seção descreve estas ferramentas.

### 5.1 Ferramenta de Limpeza

Durante a compilação do MFSim é comum o compilador gerar arquivos de módulos fortran, os arquivos com a extensão `.mod` dentro dos diretórios onde está o código fonte e depois os mover para o diretório de compilação. Se por algum motivo houver uma falha de compilação, pode acontecer desses arquivos `.mod` ficarem “soltos” nas pastas de código fonte e atrapalharem uma compilação posterior.

Pra evitar essa situação, temos uma ferramenta que acessa todas as pastas e subpastas onde há código fonte e remove os arquivos `.mod` “soltos”.

Para usar essa ferramenta, vá para a pasta onde instalou o MFSim:

```
$ cd PATH_DO_MFSIM_INSTALADO/bin
$ ./clear_mod
```

### 5.2 Ferramenta de Teste de Casos

O MFSim é um software CFD o que implica que sua função primária é simular o comportamento de fluídos dinâmicos utilizando técnicas computacionais. Logo, para saber se o MFSim está funcionando corretamente é necessário executar alguma simulação nele.

Nesse sentido esta ferramenta verifica se o código fonte está correto, diante de algumas simulações de teste do sistema.

Isso serve a dois propósitos: permitir ao desenvolvedor verificar se suas alterações no código fonte não danificaram o fluxo de execução do sistema e permitir ao usuário verificar se o sistema está ou não correto.

Atualmente os seguintes casos de teste estão implementados no sistema:

- Solução manufaturada: o procedimento básico deste caso envolve a definição de uma solução manufaturada para cada variável do problema, de forma que cada variável está presente nas equações diferenciais do escoamento;
- Escoamento sobre uma esfera estacionária: esse caso é um escoamento monofásico sobre uma esfera estacionária;

A ferramenta configura o MFSim da forma necessária para cada caso, executa a simulação e a valida os resultados. É possível executar cada teste separadamente ou executar todos os testes disponíveis. Caso a execução ocorra sem problemas, ao final a ferramenta informa isso ao usuário. Já caso algum erro seja encontrado, a ferramenta aponta onde tal erro aconteceu.

Dito isso, vejamos como usar a ferramenta.

```
$ cd PATH_DO_MFSIM_INSTALADO/bin
$ ./run_tests [-path PATH_PARA_EXECUÇÃO_DO_TESTE] [-test NOME_DO_TESTE]
```

É possível especificar um local específico no seu sistema de arquivos onde os testes serão executados. **Isso não é obrigatório** e caso esteja utilizando a *stack* Docker não é recomendado. Caso esteja utilizando *lmod* ou *singularity* e deseje especificar o local, utilize a opção `-path`.

Da mesma maneira, é possível especificar qual teste deseja rodar. O comportamento padrão é rodar todos os testes, porém você pode rodar apenas um. Se esse for o caso, utilize a opção `-test` fornecendo o nome do teste que deseja executar. Essa opção pode ser utilizada em qualquer uma das stacks.

Os testes disponíveis para `NOME_DO_TESTE` são:

- **manuf**: para a solução manufaturada;
- **sphere**: para o escoamento sobre uma esfera estacionária;

Sendo assim, caso deseje rodar o teste da solução manufaturada:

```
$ cd PATH_DO_MFSIM_INSTALADO/bin
$ ./run_tests -test manuf
```

E da esfera:

```
$ cd PATH_DO_MFSIM_INSTALADO/bin
$ ./run_tests -test sphere
```

É possível ainda não informar qualquer parâmetro e executar todos os testes disponíveis, **sequencialmente**:

```
$ cd PATH_DO_MFSIM_INSTALADO/bin
$ ./run_tests
```

## 6 Homologação

Esta seção trata sobre a homologação do MFSim. Como é possível executar o mesmo em vários sistemas operacionais e configurações de ambiente, a seção está organizada por sistema operacional e ambiente, ou *stack* utilizada.

Por este motivo, você só precisa seguir os passos de homologação da *stack* que estiver utilizando, podendo ignorar as demais.

O processo de homologação é razoavelmente simples e consiste na *checklist*:

- 1 - Escolher um sistema operacional e ambiente no qual deseja rodar o MFSim;
- 2 - Instalar e configurar as bibliotecas e dependências do MFSim;
- 3 - Baixar e compilar o código do MFSim
- 4 - Validar o MFSim

Nas próximas seções, estão as *checklists* por sistema operacional e *stack*

### 6.1 Windows

Nesse sistema operacional temos apenas 1 *stack*, para a qual veremos a seguir como homologar.

#### 6.1.1 Docker

##### 6.1.1.1 Instalação das bibliotecas e dependências

Instale e configure o Docker conforme mostrado na seção 2.1.1

##### 6.1.1.2 Obtendo o MFSim e configurando o Docker para uso

Faça o download do código fonte do MFSim caso já não o tenha feito. Descompacte o arquivo baixado em algum local do seu sistema de arquivos, o que gerará uma pasta, que será a nossa pasta de código fonte. Dentro dessa pasta, crie outra para ser a nossa pasta de compilação. Por convenção, vamos chamá-la de **build**. Crie uma outra pasta no seu sistema de arquivos para ser a nossa pasta de execução.

**Para fins de exemplificação**, vou considerar que as pastas são

```
C:\Users\mflab\Desktop\MFSIM\src    <- a pasta com o código fonte
C:\Users\mflab\Desktop\MFSIM\install <- a pasta que usaremos para execução
```

Agora vamos instanciar o Docker em modo interativo, via PowerShell, apontando o volume virtual /mflab para a pasta gerada durante a descompactação do código fonte e o volume virtual /mfsim para a pasta de execução:

```
[PowerShell] > docker run -it -v C:\Users\mflab\Desktop\MFSIM\src:/mflab -v
↪ C:\Users\mflab\Desktop\MFSIM\install:/mfsim mflab_image /bin/bash
```

##### 6.1.1.3 Compilando o MFSim

Uma vez instanciado o container Docker, vamos compilar e instalar o MFSim.

```
[bash] # cd /mflab/build
[bash] # cmake .. -Dinstall_tests=1 -Wno-dev
[bash] # make
[bash] # make install
```

Se nenhum erro aconteceu durante a compilação, então pode proceder para a próximo ponto. Caso contrário, você pode reportar o problema que encontrou para [suportemflab@mecanica.ufu.br](mailto:suportemflab@mecanica.ufu.br) a fim de obter uma solução para o mesmo.

#### 6.1.1.4 Validando

Para finalizar a homologação, vamos validar o MFSim. Para isso faremos uso da ferramenta de testes, já compilada na etapa anterior que realiza a validação automática:

```
[bash] # cd /mfsim/bin
[bash] # ./run_tests
```

A validação poderá rodar por algumas horas, dependendo da configuração e hardware da sua máquina. Se ao final da execução da ferramenta aparecer a mensagem

```
***** MFSim seems to be correct! *****
```

Então o código do MFSim está válido e homologado.

## 6.2 Linux

Nesse sistema operacional temos 3 *stacks* diferentes, conforme escrito na seção 1. A seguir, veremos como homologar cada uma dessas *stacks*.

### 6.2.1 Singularity

#### 6.2.1.1 Instalação das bibliotecas e dependências

Instale e configure o Singularity conforme mostrado na seção 2.2.1

#### 6.2.1.2 Obtendo o MFSim e configurando-o para uso

Faça o download do código fonte do MFSim caso já não o tenha feito. Descompacte o arquivo baixado em algum local do seu sistema de arquivos. A esse local, para fins de exemplificação e demonstração de comandos, chamaremos de `PATH_DO_FONTE_MFSIM`.

Dentro do `PATH_DO_FONTE_MFSIM` crie uma subpasta de compilação, que para fins de exemplificação, chamaremos aqui essa subpasta de `build`

Por fim, instancie o Singularity em modo interativo dentro da pasta de compilação:

```
$ cd PATH_DO_FONTE_MFSIM/build
$ singularity shell $MFLAB_IMAGE
```

#### 6.2.1.3 Compilando o MFSim

Uma vez instanciado o Singularity, vamos compilar e instalar o MFSim.

```
Singularity> cmake .. -Dinstall_tests=1 -Wno-dev
Singularity> make
Singularity> make install
```

Ao final dessa sequência, o MFSim estará instalado na pasta `PATH_DO_FONTE_MFSIM/install`, que chamaremos de `PATH_DO_MFSIM_INSTALADO`.

Se nenhum erro aconteceu durante a compilação, então pode proceder para a próximo ponto. Caso contrário, você pode reportar o problema que encontrou para [suportemflab@mecanica.ufu.br](mailto:suportemflab@mecanica.ufu.br) a fim de obter uma solução para o mesmo.

**Ajuda:** Caso não esteja se lembrando o que são as macros `PATH_DO_FONTE_MFSIM` e `PATH_DO_MFSIM_INSTALADO`, dê uma olhada nas seções 1.3 e 4.2.

#### 6.2.1.4 Validando

Para finalizar a homologação, vamos validar o MFSim. Para isso faremos uso de outra ferramenta, já compilada na etapa anterior que realiza a validação automática:

```
Singularity> cd PATH_DO_MFSIM_INSTALADO/bin
Singularity> ./run_tests
```

A validação poderá rodar por algumas horas, dependendo da configuração e hardware da sua máquina. Se ao final da execução da ferramenta aparecer a mensagem

```
***** MFSim seems to be correct! *****
```

Então o código do MFSim está válido e homologado.

## 6.2.2 Lmod

### 6.2.2.1 Instalação das bibliotecas e dependências

Instale e configure o Lmod conforme mostrado na seção 2.2.2

### 6.2.2.2 Obtendo o MFSim e configurando-o para uso

Faça o download do código fonte do MFSim caso já não o tenha feito. Descompacte o arquivo baixado em algum local do seu sistema de arquivos. A esse local, para fins de exemplificação e demonstração de comandos, chamaremos de `PATH_DO_FONTE_MFSIM`.

Dentro do `PATH_DO_FONTE_MFSIM` crie uma subpasta de compilação, que para fins de exemplificação, chamaremos aqui essa subpasta de `build`

### 6.2.2.3 Compilando o MFSim

Instancie os módulos lmod necessários ao MFSim, **conforme a versão da lmod que estiver utilizando**: compilador, MPI e HDF5 e outras libs MPI.

Versão 10:

```
$ cd PATH_DO_FONTE_MFSIM/build
$ ml gnu/10.2.0 cmake openmpi hdf5 cantera gsl slepc zoltan
```

Versão 12:

```
$ cd PATH_DO_FONTE_MFSIM/build
$ ml gnu/12.2.0 cmake openmpi hdf5 cantera gsl slepc zoltan coolprop
```

Uma vez que os módulos estiverem instanciados, compile e instale:

```
$ cmake .. -Dinstall_tests=1 -Wno-dev
$ make
$ make install
```

Ao final dessa sequência, o MFSim estará instalado na pasta `PATH_DO_FONTE_MFSIM/install`, que chamaremos de `PATH_DO_MFSIM_INSTALADO`.

Se nenhum erro aconteceu durante a compilação, então pode proceder para a próximo ponto. Caso contrário, você pode reportar o problema que encontrou para [suportemflab@mecanica.ufu.br](mailto:suportemflab@mecanica.ufu.br) a fim de obter uma solução para o mesmo.

**Ajuda:** Caso não esteja se lembrando o que são as macros `PATH_DO_FONTE_MFSIM` e `PATH_DO_MFSIM_INSTALADO`, dê uma olhada nas seções 1.3 e 4.1.

### 6.2.2.4 Validando

Para finalizar a homologação, vamos validar o MFSim. Para isso faremos uso da ferramenta de testes, já compilada na etapa anterior que realiza a validação automática:

```
$ cd PATH_DO_MFSIM_INSTALADO/bin
$ ./run_tests
```

A validação poderá rodar por algumas horas, dependendo da configuração e hardware da sua máquina. Se ao final da execução da ferramenta aparecer a mensagem

```
***** MFSim seems to be correct! *****
```

Então o código do MFSim está válido e homologado.