

В прошлый раз речь шла о сомнительном российском пакете для конечноэлементного моделирования. С ограниченными возможностями моделирования и, тем не менее, в стоящем денег. Поэтому сегодня я вам расскажу о свободных (т.е. бесплатных и с открытым кодом) программах для численного моделирования.

Существует множество программ, предназначенных для узкоспециализированных математических расчетов. Больше всего известны и широко распространены универсальные пакеты-комбайны, пригодные для занятий самой разной математической деятельностью. По функциональности они делятся в целом на две категории: пакеты, предназначенные в основном для численных расчетов (например, MatLab) и системы компьютерной алгебры (Computer Algebra System), к которым относятся Mathematica, Maple и (отчасти) MathCAD - они также называются системами символьных или аналитических вычислений (Symbolic Manipulation Program). Это наиболее универсальные математические программы, способные решать самые разные задачи, причем как численно, так и точно - аналитически.

Возможностей у подобного софта - множество, и есть только одна проблема: все эти программы довольно дороги. А как же свободное программное обеспечение, спросите вы? Оказывается, и здесь дело обстоит неплохо. Существуют альтернативы как для MatLab (системы Octave и Scilab), так и свободные системы аналитических вычислений - Maxima и Axiom.

И отдельную нишу в инженерных расчетах занимают пакеты для решения уравнений в частных производных методом КЭ. Здесь тоже существуют свободные аналоги таким известным продуктам, как ANSYS, Comsol Multiphysics, CFD-ACE и др..

Пакет Scilab является свободно распространяемой (вместе с исходными кодами) системой компьютерной математики. До недавнего времени он разрабатывался исследовательскими институтами INRIA и ENPC (оба находятся во Франции), а с мая 2003 г. поддержку продукта взял на себя специально созданный для этой цели Scilab Consortium, с Web-узла которого можно загрузить последнюю версию программы и полный комплект документации. Scilab выпускается для операционных систем Windows (любая 32-разрядная версия), наиболее популярных Unix/Linux и не нуждается в больших системных ресурсах: инсталляционный модуль имеет размер до 20 MB, а для установки требуется немногим более 40 MB.

Пакет не случайно имеет название, созвучное с Matlab -- одной из наиболее мощных коммерческих СКМ. У обоих приложений немало общего -- от интерфейса (на рис. 1 показан типичный вид рабочей области Scilab) и принципа взаимодействия с пользователем через командную строку до синтаксиса языка. Таким образом, Scilab можно рассматривать как облегченный вариант Matlab, который, впрочем, сохраняет основные возможности последнего.

Функции системы, относящиеся к некоторым прикладным областям математики и техники, собраны в дополнительные пакеты расширений (так называемые toolboxes). Одни из них применяются достаточно широко (как, скажем, методы численного решения краевых задач для систем дифференциальных уравнений, линейное и квадратичное программирование), другие имеют узкую специфическую направленность. Из последних назовем пакеты для цифровой обработки сигналов, анализа динамических систем, оптимизации со специальными ограничениями.

Есть аналог simulink для построения моделей из блочных диаграмм. При чем именно аналог симулинк (сигналы, циклы и прочее), без SimPowerSystem и других расширений...

Octave позиционируется как open-source альтернатива матлабу. Синтаксис полностью идентичен матлабовскому. Реализованы все функции ядра Матлаба и многие тулбоксы. Программа хорошо документирована. Программа чисто консольная, но для нее имеется несколько графических интерфейсов. Один из самых удобных -- QtOctave.

FreeMat -- еще одна альтернатива матлабу. Имеет такой же синтаксис и удобный графический интерфейс. К сожалению, реализованы лишь основные функции ядра матлаба и нет дополнительных тулбоксов.

На пакетах символьных вычислений Maxima и Axiom подробно останавливаться не буду. Документацию о них можно найти на официальных сайтах, разных форумах и статьях...

Все вышеперечисленные программы имеются в основных репозиториях Линукса. В частности, в Дебиане, где и были мной протестированы.

Кроме того, все они имеют версию и под другие платформы. В частности, под Винду.

-----  
А теперь перейдем к самому интересному -- к пакетам для конечно-элементного моделирования. Здесь существует большое количество узкоспециализированных программ, и еще большее количество свободных библиотек. Но это скорее интересно для программистов. Кроме того, так исторически сложилось, что имеется большое количество свободных решателей для конечно-элементных расчетов. Некоторые из них включены в состав COMSOL Multiphysics, ANSYS и CFD-ACE. А вот комплексных пакетов, включающих препроцессор для построения геометрии и сетки, решатели и постпроцессор для вывода результатов, не так уж и много.

-----  
У существующих коммерческих программ, есть два главных недостатка:

- 1) высокая стоимость и строгие ограничения лицензии
- 2) закрытый исходный код

=====

OpenFEM представляет собой пакет расширения (toolbox) для MatLab и SciLab. OpenFEM предоставляет большое количество возможностей, но, к сожалению, не имеет графического интерфейса.

=====

Impact – программный комплекс для нелинейного динамического анализа методом конечных элементов. Программа разработана с использованием языка Java и может быть использована в различных операционных системах (Windows, Linux, Solaris, Unix и др.).

Программный комплекс Impact относится к классу программ для выполнения нелинейного динамического анализа который всегда можно свести к статике (частный случай динамики). Также удобство работы состоит в том, что любую конечно-элементную модель в Impact можно решить в динамической постановке, задав только закон изменения действующих нагрузок, граничных условий. Комплекс позволяет находить решение для моделей из упругих и неупругих тел с линейными и нелинейными характеристиками. Задание свойств упругих и неупругих тел производится очень просто и легко. Процесс моделирования тоже довольно простой и состоит из описания геометрической формы с указаниями свойств тела и задания закона изменения действующих нагрузок, граничных условий. После решения пользователь получает изменения во времени ускорения, скорости, перемещений, деформаций напряжений в любой точке созданной модели.

Impact - построен на модульном принципе и может работать как полностью в автономном режиме так и интегрироваться с другими системами. Для этого он разделен на модули:

- >> Pre Processor - используется для создания геометрической модели и подготовки входного файла для расчета;
- >> Processor - используется для корректировки и расчет модели;
- >> Post Processor - используется для визуализации результатов расчета;
- >> Graph - используется для отображения числовых данных и графических зависимостей.

Для удобства организации обмена между модулями все выходные и входные данные представляются в текстовом виде. Они полностью открыты для пользователя и подробно описаны в документации. Получение геометрических данных из других систем осуществляется через STL формат. Модели задач могут импортироваться из NASTRAN, GMSH. Программный комплекс Impact позволяет решать следующие задачи:

- >> контактные пространственные задачи;
- >> задачи разрушения;
- >> задачи формования;
- >> частотный анализ;
- >> задачи с большими перемещениями;
- >> расчет динамических моделей из упругих, неупругих и твердых.

Поддерживает работу на кластерах (Windows и Linux).

Имеется документация на Русском.

Интерфейс написан на ява, но это еще пол беды... Встроенный решатель тоже написан на ява, и как следствие медленно решает.

В целом -- впечатление от программы негативное.

=====

SALOME – открытая интегрируемая платформа для численного моделирования, разработанная на основе технологии OpenCascade (используется во многих коммерческих продуктах).

Продукты марки SALOME распространяются на условиях GNU Lesser General Public License. Платформа SALOME используется как база для проекта NURESIM (European Platform for Nuclear REactor SIMulations), который предназначен для полномасштабного моделирования ядерных реакторов. SALOME представляет собой набор модулей, которые позволяют выполнять такие задачи как: подготовка расчетной сетки, мониторинг расчёта, визуализация и анализ результатов.

Важной особенностью является возможность использования макро-языка Python для получения доступа ко всем операциям платформы – таким образом, любой набор инструкция может быть записан в файл выполнен надлежащее число раз с различными исходными параметрами без вмешательства оператора, либо, наоборот, любая последовательность действий пользователя может быть сохранена в файл.

Программа не имеет встроенного решателя, но может быть использована, например, совместно с такими решателями как: Code-Aster, Code-Saturne, OpenFOAM и др.

=====

OpenFOAM (англ. Open Source Field Operation And Manipulation CFD ToolBox – «свободно распространяемый инструментальный вычислительный гидродинамики для операций с полями», скалярными и векторными). На сегодняшний день является одним из «законченных» и известных приложений, предназначенных для гидродинамических вычислений.

Код OpenFOAM, разработан в Великобритании в компании "OpenCFD, Limited", и используется многими промышленными предприятиями более 12 лет. Свое название и идеологию построения код берет от предшественника FOAM (Field Operation And Manipulation), который является закрытым и продолжает развиваться параллельно с OpenFOAM. Первоначально, программа предназначалась для прочностных расчетов и в результате многолетнего академического и промышленного развития на сегодняшний момент позволяет решать следующие задачи:

- >> Прочностные расчеты;
- >> Гидродинамика ньютоновских и неньютоновских вязких жидкостей как в несжимаемом, так и сжимаемом приближении с учётом конвективного теплообмена и действием сил гравитации. Для моделирования турбулентных течений возможно использование RANS-моделей, LES и DNS методов. Возможно решение дозвуковых, околозвуковых и сверхзвуковых задач;
- >> Задачи теплопроводности в твёрдом теле;
- >> Многофазные задачи, в том числе с описанием химических реакций компонент потока;
- >> Задачи, связанные с деформацией расчётной сетки;
- >> Сопряжённые задачи;
- >> Некоторые другие задачи, при математической постановке которых требуется решение ДУ в ЧП в условиях сложной геометрии среды;

Возможно распараллеливание расчёта как в кластерных, так и многопроцессорных системах.

В основе кода лежит набор библиотек, предоставляющих инструменты для решения систем дифференциальных уравнений в частных производных как в пространстве, так и во времени. Рабочим языком кода является ООЯП ООП C++. В терминах данного языка большинство математических дифференциальных и тензорных операторов в программном коде (до трансляции в исполняемый файл) уравнений может быть представлено в удобочитаемой форме, а метод дискретизации и решения для каждого оператора может быть выбран уже пользователем в процессе расчёта. Таким образом, в коде полностью инкапсулируются и разделяются понятия расчетной сетки (метод дискретизации), дискретизации основных уравнений и методов решения алгебраических уравнений.

Короче: можно вручную задавать систему решаемых диффур...

=====

Elmer -- это еще один пакет для решения уравнений в частных производных методом конечных элементов. Elmer умеет решать большое количество дифференциальных уравнений, которые могут быть объединены для мультифизического моделирования. Как openсорсная программа Elmer

позволяет изменять существующие процедуры в решателях и создавать новые решатели, интересующие пользователей.

Разработка Elmer'a началась в 1995 году как часть национальной (CFD technology) программы, финансируемой Финнским Фондом по Технологиям и Инновациям. В оригинальной разработке участвовали партнеры из: SCS The Finnish IT Center for Science, Helsinki University of Technology TKK, VTT Technical Research Centre of Finland и другие. После пяти лет разработки исходный проект был окончен и сейчас постепенно дорабатывается.

Пакет Elmer содержит в себе набор программ:

- >> Построитель геометрии и генератор 2D и 3D сеток.
- >> Решатель с возможностью распараллеливания на многопроцессорных и кластерных системах
- >> Постпроцессор

Сетка может быть сгенерирована встроенными средствами или импортирована из файлов сторонних приложений:

- 1) .ansys : Ansys input format
- 2) .inp : Abaqus input format by Ideas
- 3) .fil : Abaqus output format
- 4) .FDNEUT : Gambit (Fidap) neutral file
- 5) .unv : Universal mesh file format
- 6) .mphtxt : Comsol Multiphysics mesh format
- 7) .dat : Fieldview format
- 8) .node,.ele: Triangle 2D mesh format
- 9) .mesh : Medit mesh format
- 10) .msh : GID mesh format
- 11) .msh : Gmsh mesh format

Физические модели в Elmer:

- >> Теплоперенос: уравнение теплопроводности, модели для электропроводности, излучения, конвекции и фазовых переходов (газ, жидкость, кристалл)
- >> Гидродинамика: уравнения Навье-Стокса, Стокса и Рейнольдса,  $k-\epsilon$  и другие приближения турбулентности
- >> Многофазные жидкости (смеси): общее конвекционно-диффузионное уравнение
- >> Свободная поверхность: метод Лангранджана, многоуровневый метод
- >> Структурная механика: общие уравнения упругости (анизотропические, линейные и нелинейные модели), пространственно-приведенные модели для плит и оболочек
- >> Акустика: уравнения Гельмгольца, линеаризованное время-гармоническое приближение
- >> Электромагнетизм: электростатика, магнитостатика, индукция
- >> Электрокинетика: условия скольжения, уравнение Пуассона-Больцмана, уравнение Пуассона-Нернста-Планка
- >> Квантовая механика: теория функционалов плотности (DFT, Kohn-Sham)
- >> Перемещение сетки: вытягивание и сдвиг в совместных задачах, ALE формулировка

Документация просто превосходная. Большое количество примеров. На официальном сайте много презентаций и справочной литературы.

=====

CAElinux - дистрибутив операционной системы Линукс, включающий в себя ряд свободных CAE-программ, в том числе и вышеперечисленные. Все программы уже интегрированы и настроены. Весит два с половиной гигабайта. Достаточно скачать, записать на болванку, загрузиться с диска и можно работать...

-----

Обзор свободных программ для численных расчетов

В этой статье рассматриваются существующие свободные библиотеки для численных расчетов. Информация больше полезна для программистов, чем для инженеров, т.к. про КЭ пакеты сказано очень мало.

-----

Обзор современных программ конечно-элементного анализа

В статье рассматриваются основные коммерческие пакеты для КЭ моделирования (ANSYS и NASTRAN) и несколько свободных и их роль на российском рынке. Приведены несколько задач, решение которых во всех (и коммерческих, и свободных пакетах) с почти 100% вероятностью будет

неправильным. Правильное решение первых двух из них может быть получено лишь случайно, при удачных НУ и большом количестве подшагов итераций на каждом из шагов приращения нагрузки.

-----  
Пингвин на физмате

Короткая статья про свободные программы для численных расчетов и программы для электроинженерных расчетов.

-----  
Расчеты пространственной гидродинамики Реакторной Установки

Интересная статья. Помимо основной темы, подробно описывается использование связки SALOME и OpenFOAM. В списке литературы есть несколько ссылок на другие работы (отечественные и зарубежные) с использованием этих пакетов.

-----  
Компьютеры, математика и свобода

Статья про системы символьных вычислений Maxima и Axiom.

=====

CAE - "инженерный анализ" (англ. Computer-Aided Engineering) - это разнообразные программные продукты, позволяющие при помощи расчетных методов (метод конечных элементов, метод конечных разностей, метод конечных объемов) оценить, как поведет себя компьютерная модель изделия в реальных условиях эксплуатации.