

# Обзор свободных программ для численных расчетов

Пек Борис

# Введение

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.

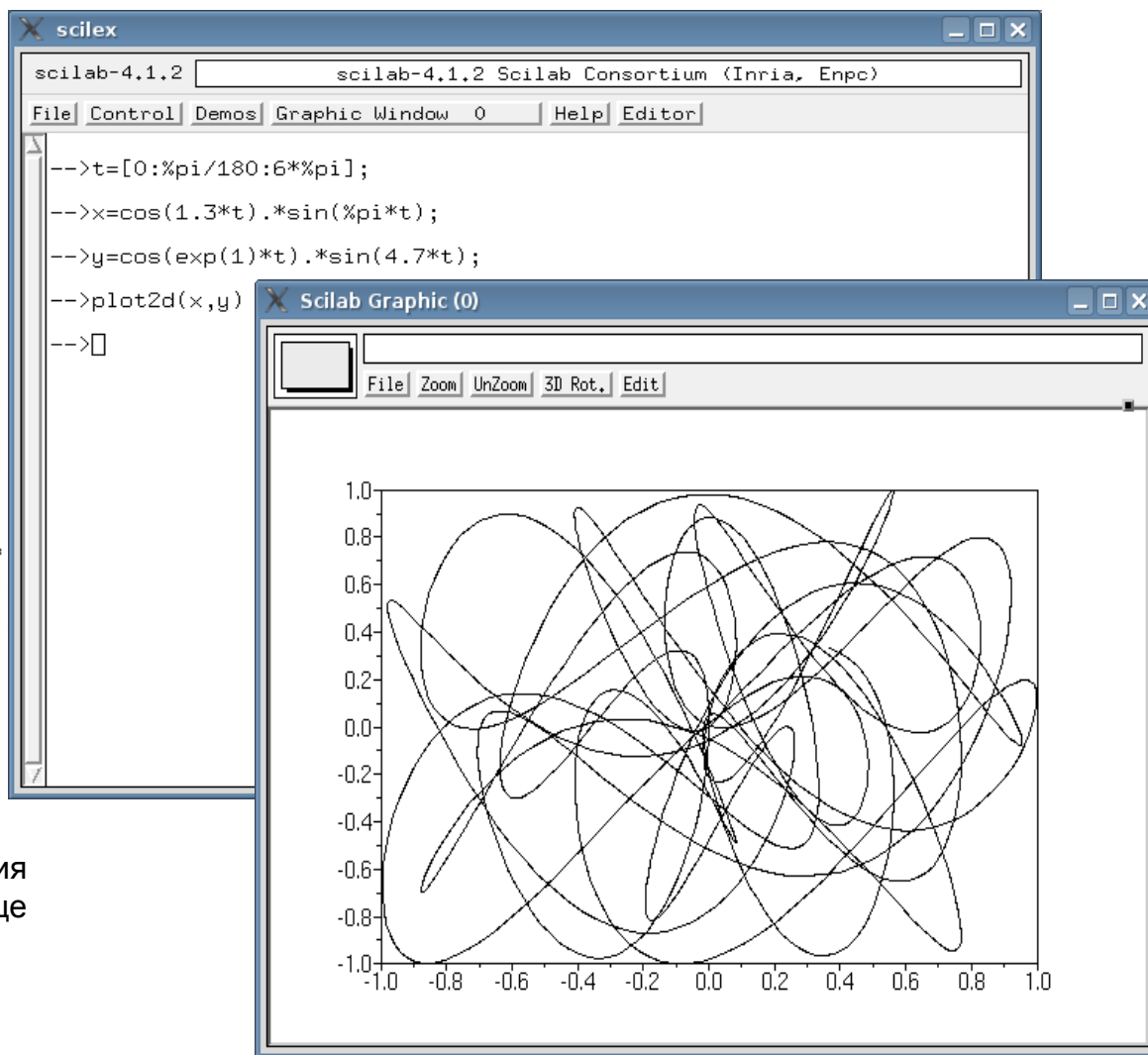
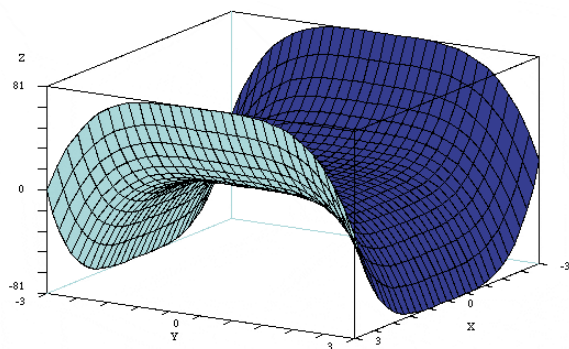
И отдельную нишу в инженерных расчетах занимают пакеты для решения уравнений в частных производных методом КЭ. Здесь тоже существуют свободные аналоги таким известным продуктам, как ANSYS, Comsol Multiphysics, CFD-ACE и др..

## Содержание

- Пакеты для численных расчетов
- Пакеты для символьных вычислений
- Пакеты для решения уравнений в частных производных (МКЭ)

# Пакеты для численных расчетов

## Scilab



Есть аналог simulink для построения моделей из блочных диаграмм и еще несколько toolbox'ов.

Платформы:

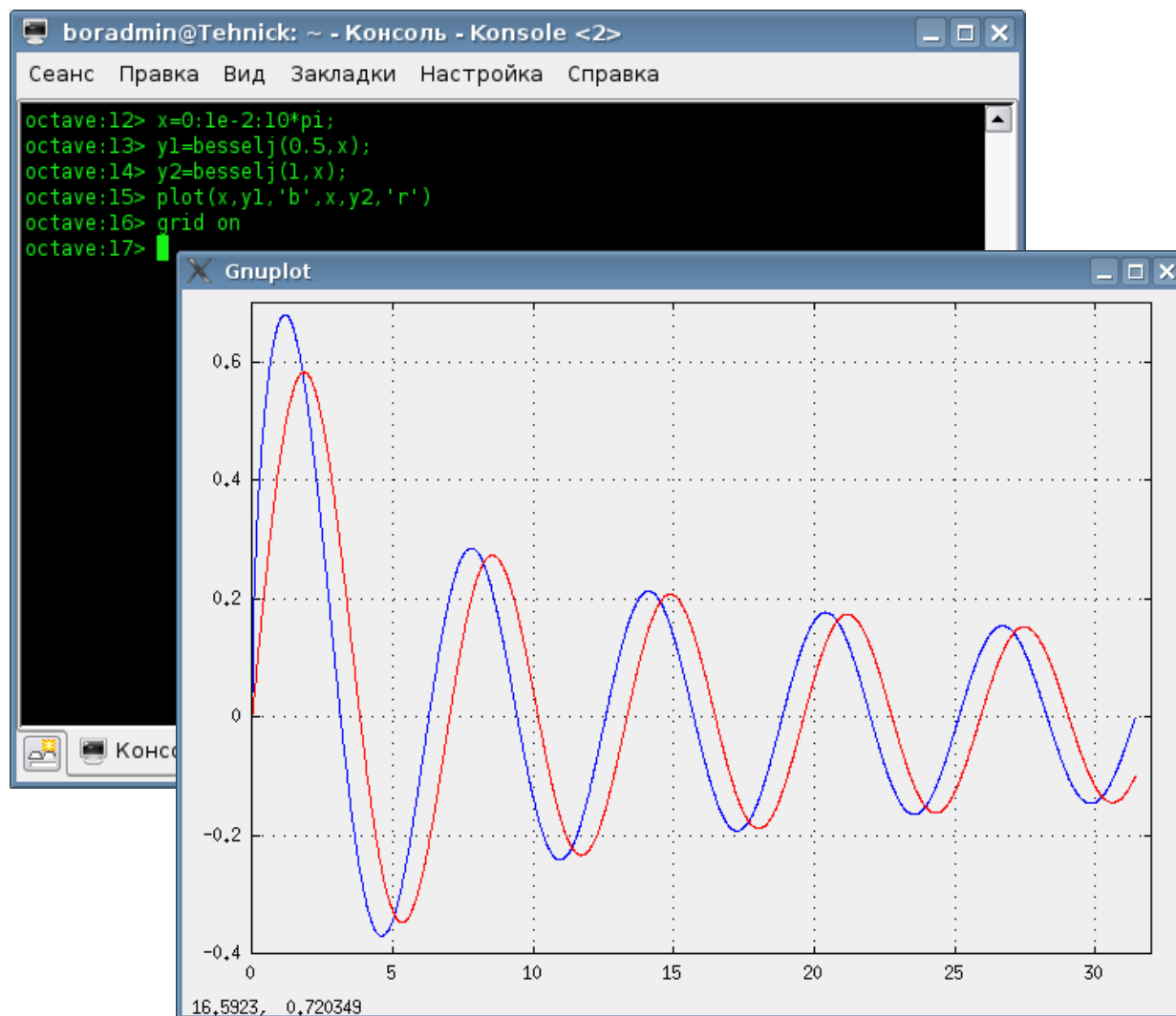
Linux, Windows, Mac OS X

<http://www.scilab.org>

# Пакеты для численных расчетов

## Octave

Консольная программа.



Имеется большое количество  
toolbox'ов.

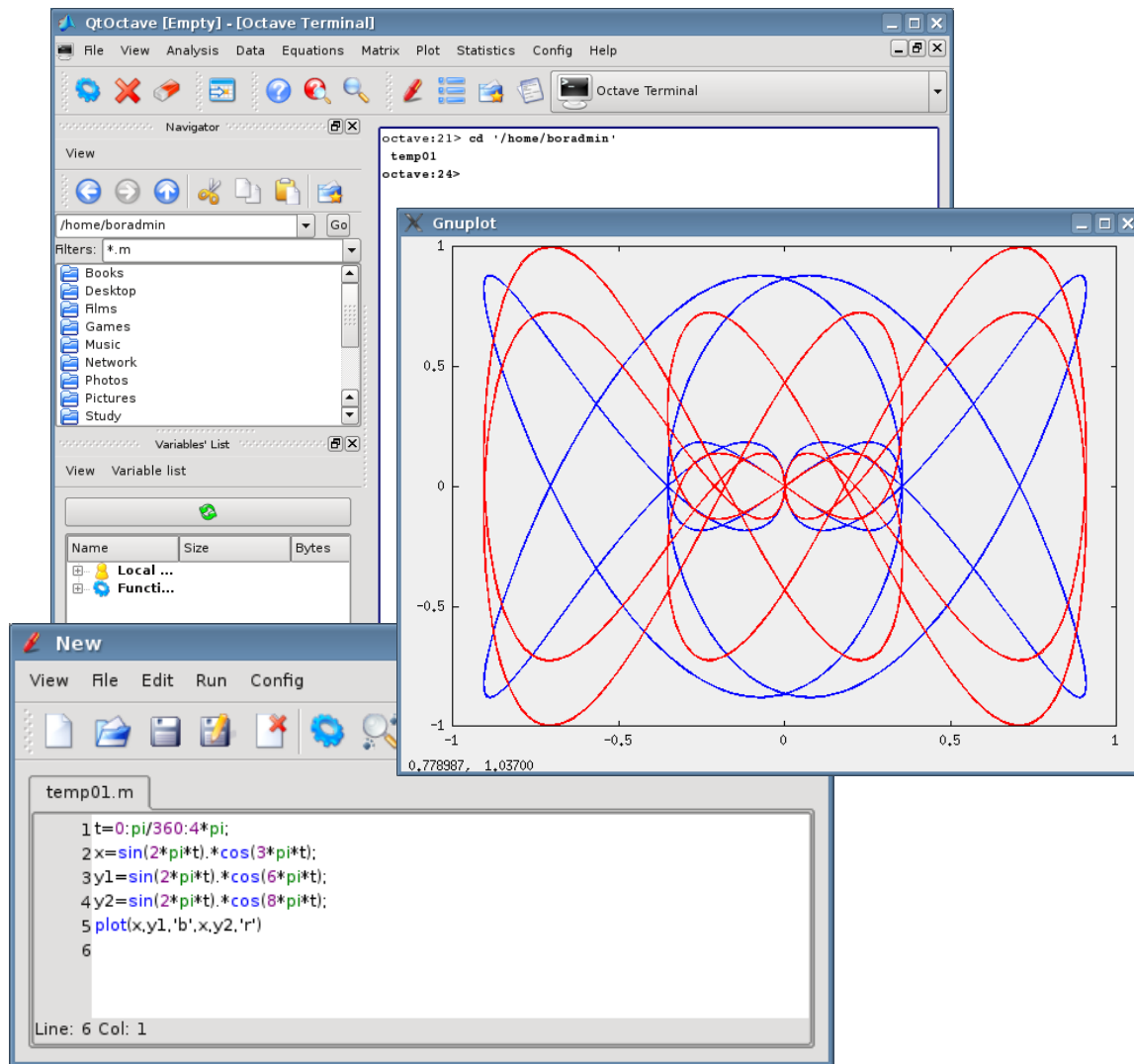
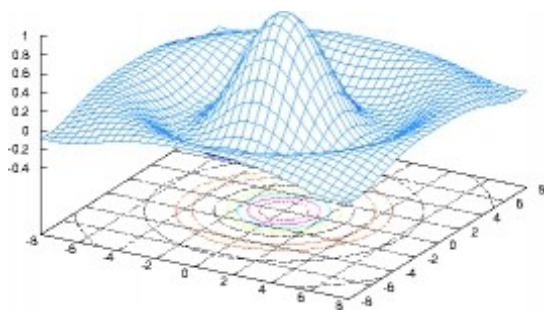
Платформы:  
Linux, Windows, Mac OS X

<http://www.octave.org>

# Пакеты для численных расчетов

## QtOctave

Один из наиболее удобных графических интерфейсов для Octave.

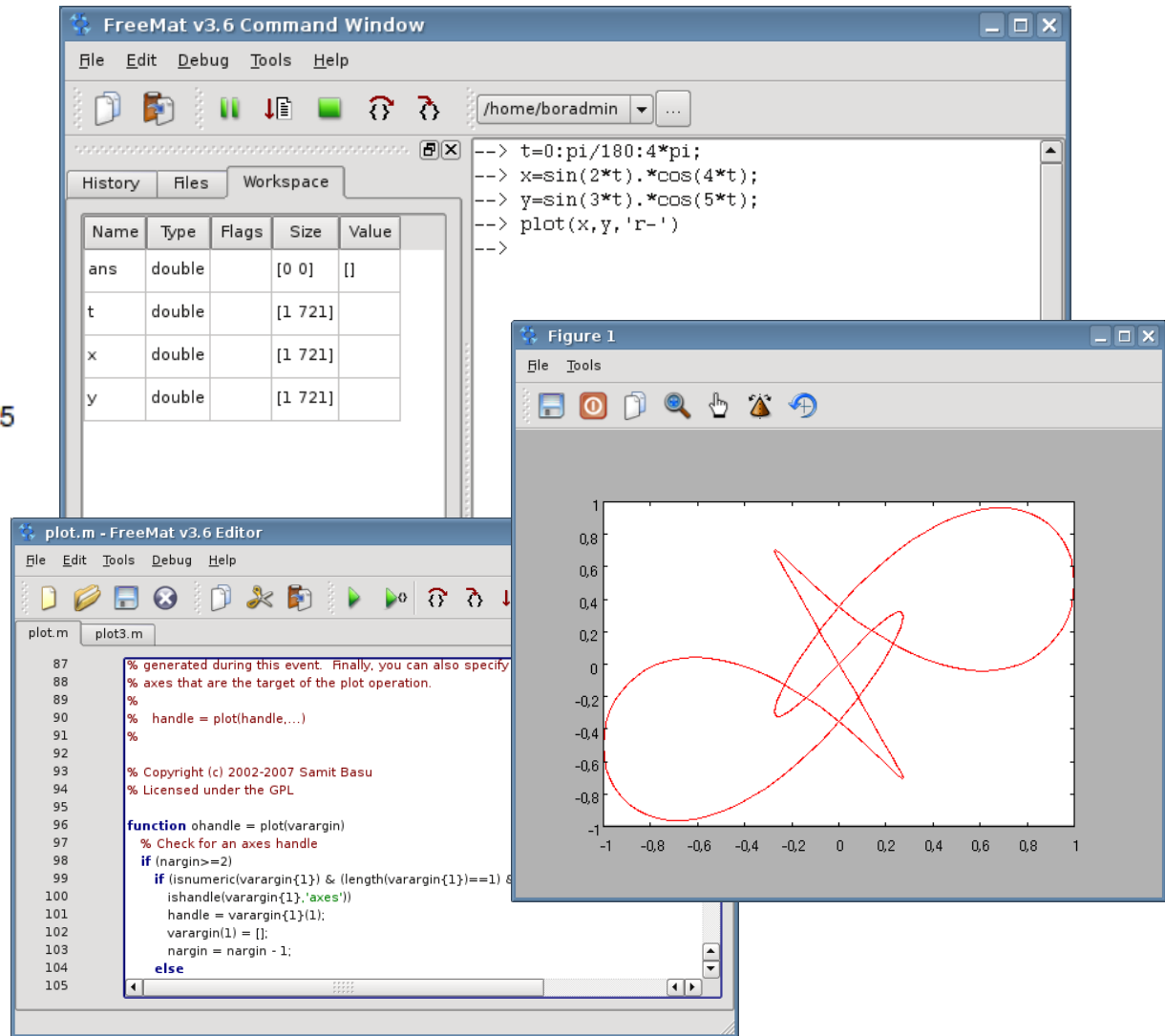
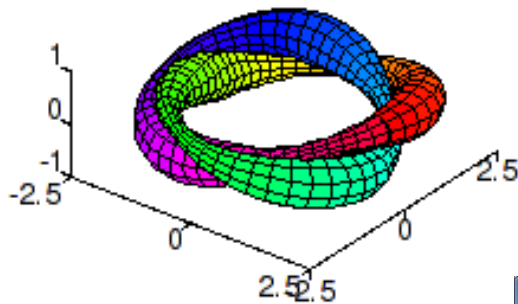


Платформы:  
Linux, Windows, Mac OS X

<http://qtoctave.wordpress.com>

# Пакеты для численных расчетов

## FreeMat



Платформы:  
Linux, Windows, Mac OS X

<http://freemat.sf.net>

# Пакеты для символьных вычислений

## Maxima

Консольная программа.

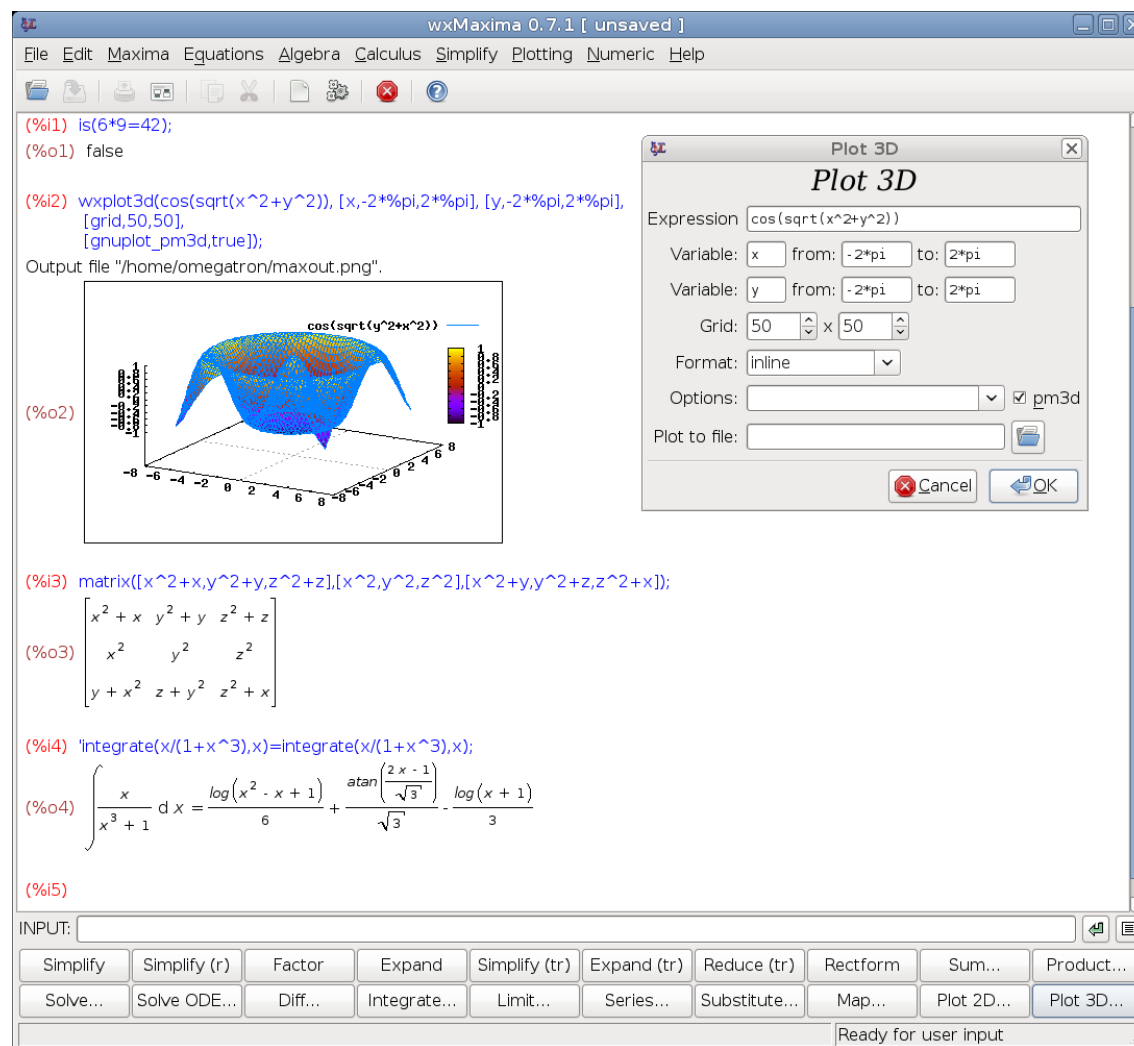
Графические интерфейсы:

xMaxima

wxMaxima

Платформы:

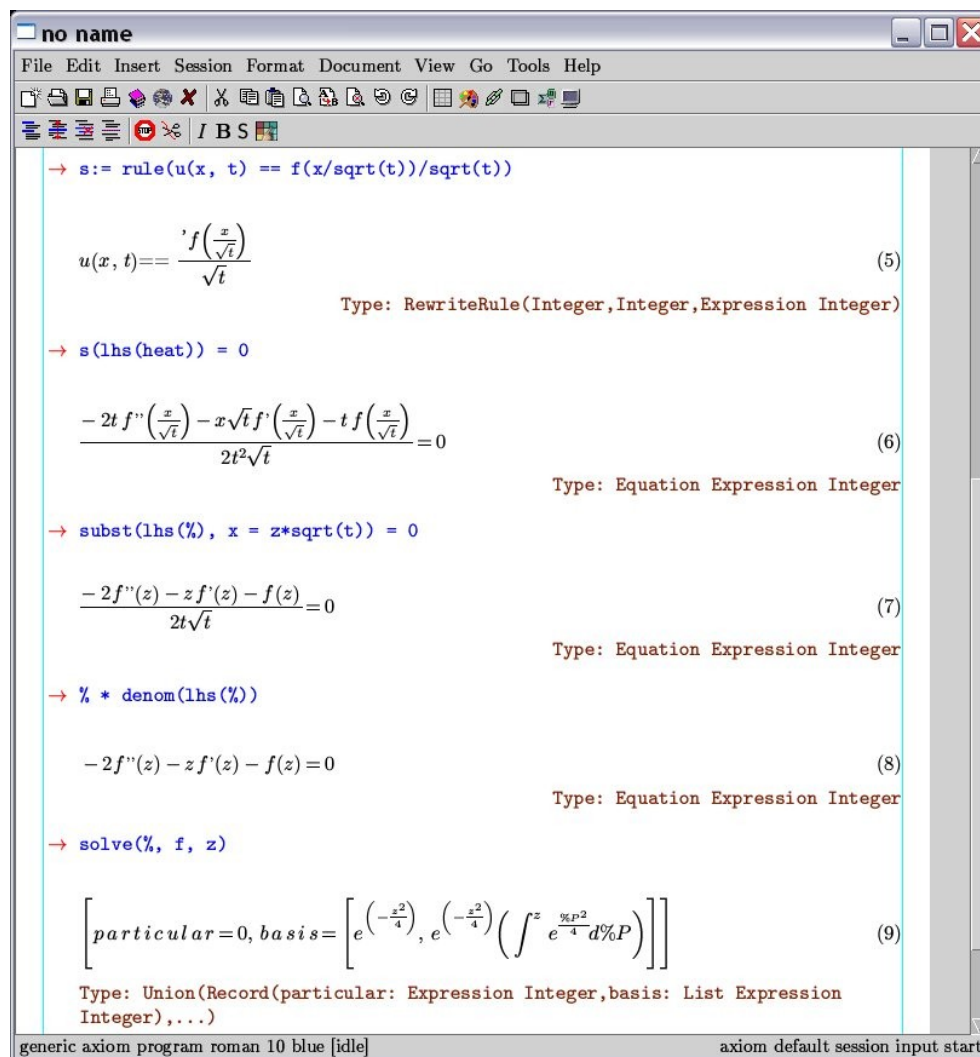
Linux, Windows, Mac OS X



<http://maxima.sourceforge.net>

# Пакеты для символьных вычислений

## Axiom



```
no name
File Edit Insert Session Format Document View Go Tools Help
[Icons]
[Icons] I B S [Icons]

→ s:= rule(u(x, t) == f(x/sqrt(t))/sqrt(t))


$$u(x, t) == \frac{f\left(\frac{x}{\sqrt{t}}\right)}{\sqrt{t}} \quad (5)$$

Type: RewriteRule(Integer,Integer,Expression Integer)

→ s(lhs(heat)) = 0


$$\frac{-2t f''\left(\frac{x}{\sqrt{t}}\right) - x\sqrt{t} f'\left(\frac{x}{\sqrt{t}}\right) - t f\left(\frac{x}{\sqrt{t}}\right)}{2t^2\sqrt{t}} = 0 \quad (6)$$

Type: Equation Expression Integer

→ subst(lhs(%), x = z*sqrt(t)) = 0


$$\frac{-2f''(z) - zf'(z) - f(z)}{2t\sqrt{t}} = 0 \quad (7)$$

Type: Equation Expression Integer

→ % * denom(lhs(%))


$$-2f''(z) - zf'(z) - f(z) = 0 \quad (8)$$

Type: Equation Expression Integer

→ solve(%, f, z)


$$\left[ \text{particular}=0, \text{basis} = \left[ e^{\left(-\frac{z^2}{4}\right)}, e^{\left(-\frac{z^2}{4}\right)} \left( \int^z e^{\frac{P^2}{4}} dP \right) \right] \right] \quad (9)$$

Type: Union(Record(particular: Expression Integer,basis: List Expression Integer),...)

generic axiom program roman 10 blue [idle]
axiom default session input start
```

Платформы:  
Linux, Windows, Mac OS X



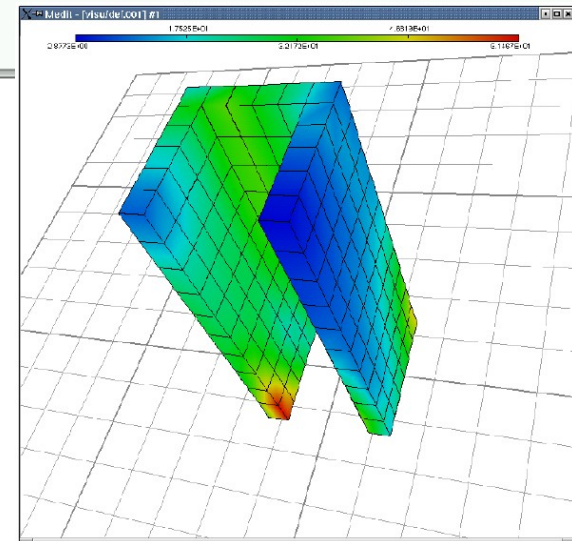
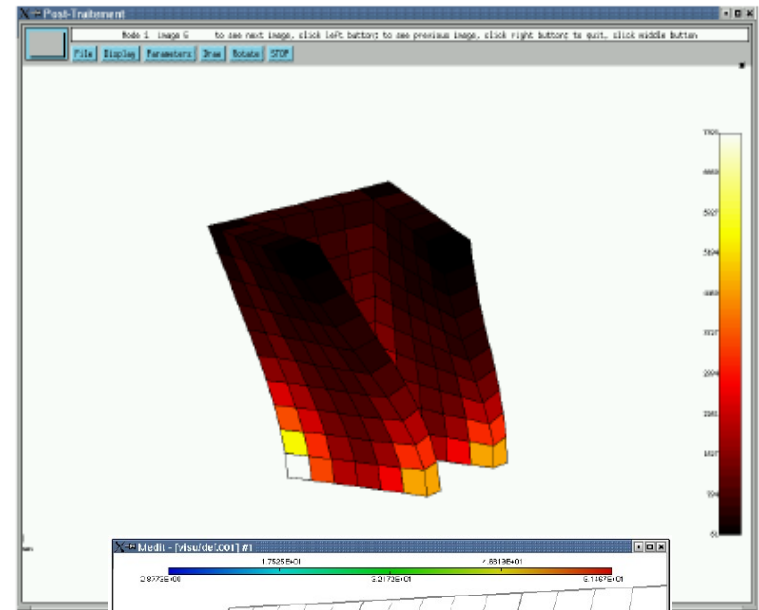
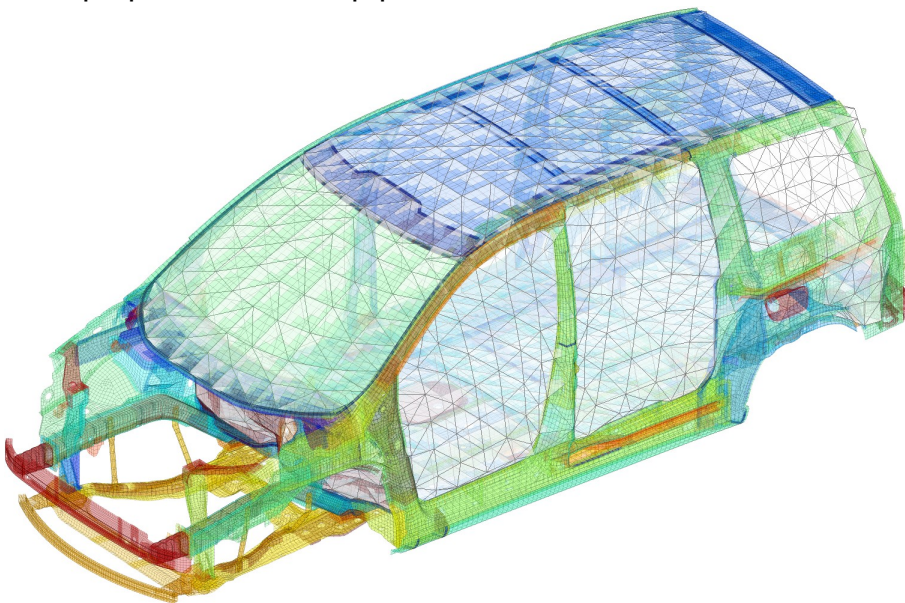
# Пакеты для решения уравнений в частных производных (МКЭ)

## OpenFEM

Есть 2 варианта:

- toolbox для MatLab
- toolbox для SciLab

Без графического интерфейса.



Платформы:  
Linux, Windows, Mac OS X

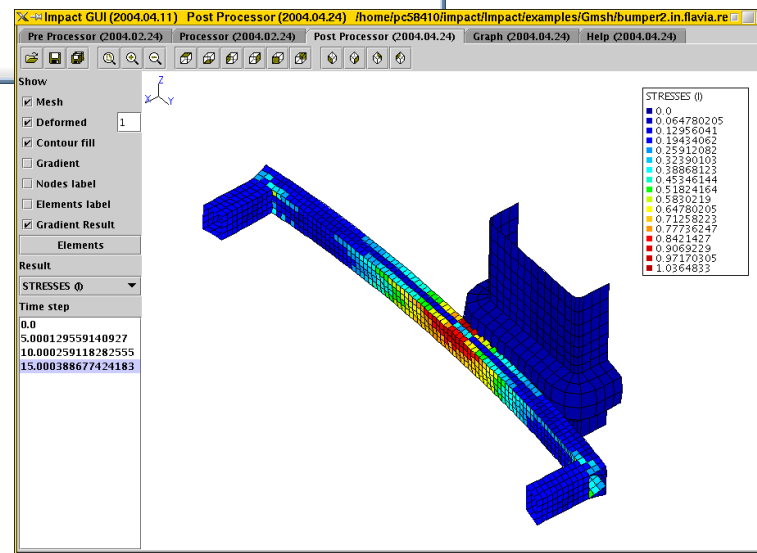
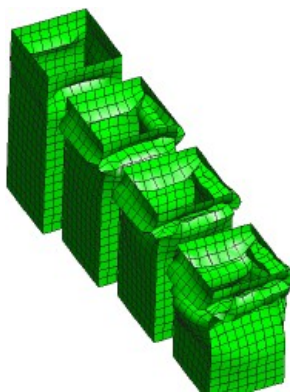
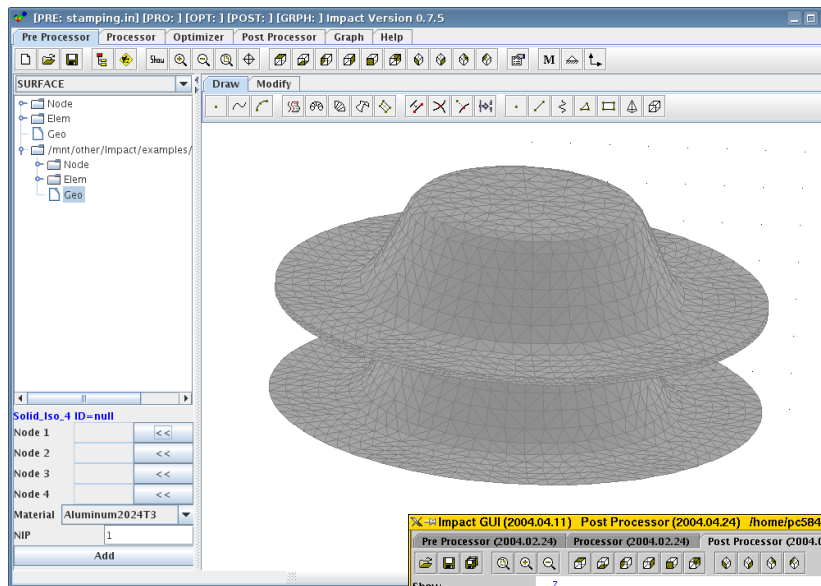
<http://www-rocq.inria.fr/OpenFEM>

# Пакеты для решения уравнений в частных производных (МКЭ)

## Impact

Задачи:

- Контактные пространственные задачи
- Задачи разрушения
- Задачи формования
- Частотный анализ
- Задачи с большими перемещениями
- Расчет динамических моделей из упругих, неупругих и твердых



Платформы:  
Linux, Windows, Mac OS X

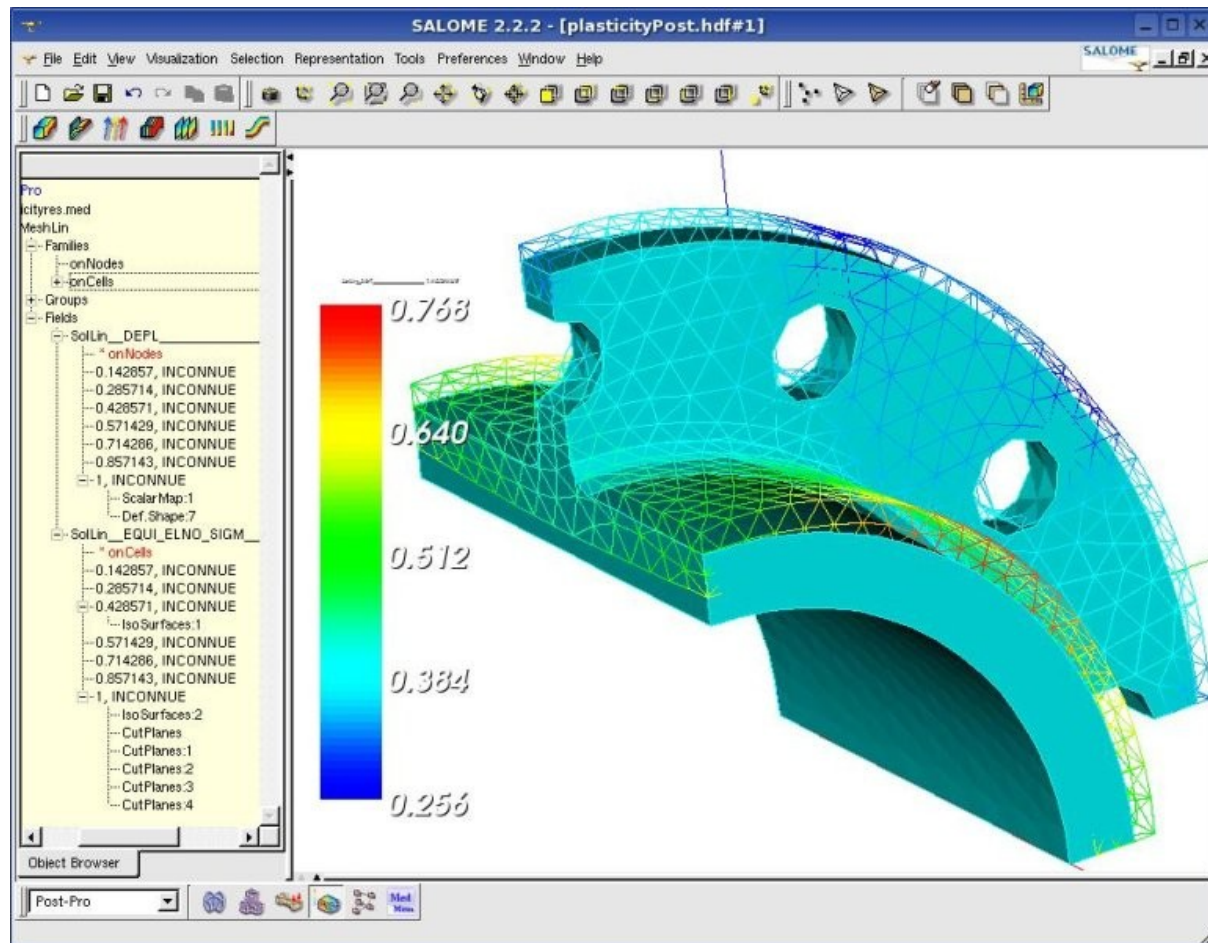
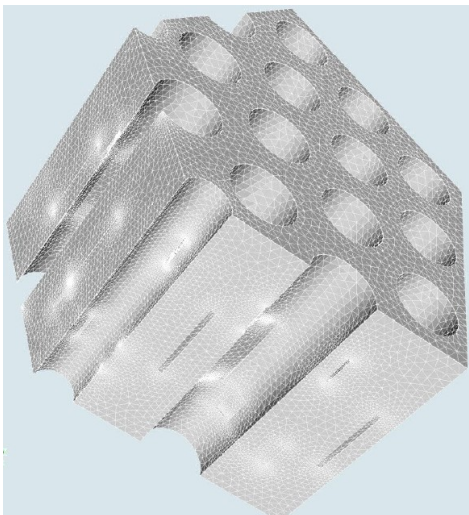
<http://impact.sourceforge.net>

# Пакеты для решения уравнений в частных производных (МКЭ)

## SALOME

Открытая интегрируемая платформа для численного моделирования.

Это пре- и постпроцессор. Без решателя.



Платформы:  
Linux

Screenshots

<http://www.salome-platform.org>

# Пакеты для решения уравнений в частных производных (МКЭ)

## OpenFOAM

Открытая интегрируемая платформа для численного моделирования задач механики сплошных сред

Это решатель. Без пре- и постпроцессора. Может использоваться совместно с SALOME.

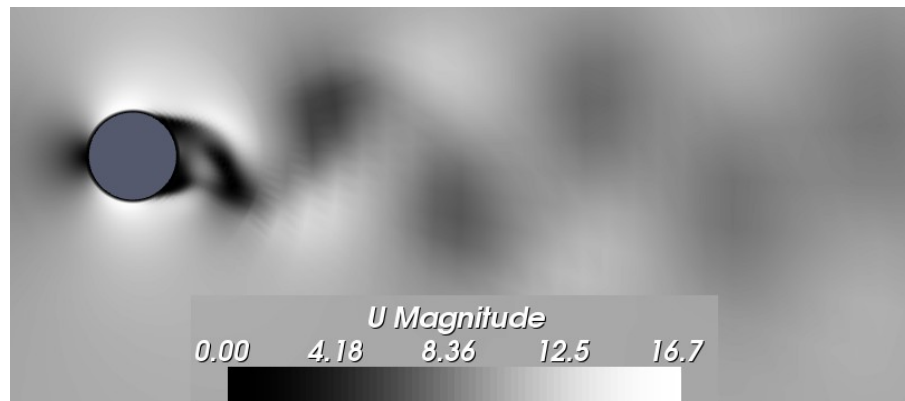
Задачи:

- Прочностные расчеты
- Гидродинамика ньютоновских и неньютоновских вязких жидкостей как в несжимаемом, так и сжимаемом приближении с учётом конвективного теплообмена и действием сил гравитации. 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

Распараллеливание расчета как в кластерных, так и многопроцессорных системах.

Платформы:

Linux, Windows, Mac OS X





# Пакеты для решения уравнений в частных производных (МКЭ)

## Elmer

Пакет Elmer содержит в себе набор программ:

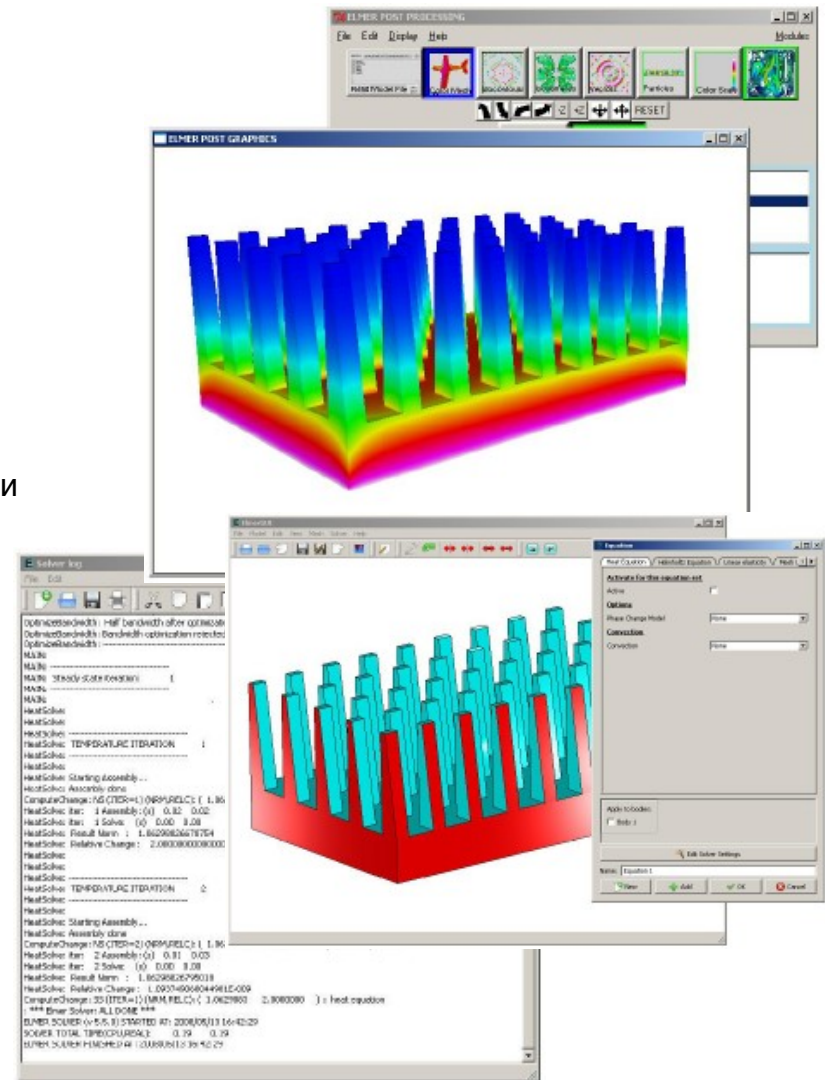
- Построитель геометрии и генератор 2D и 3D сеток.
- Решатель с возможностью распараллеливания на многопроцессорных и кластерных системах
- Постпроцессор

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) .mptxt : 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

Платформы:

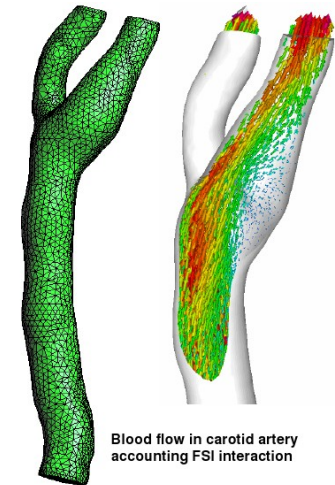
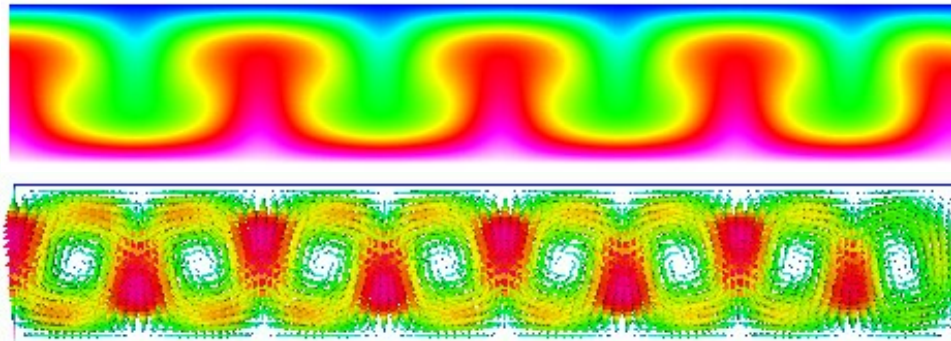
Linux, Windows, Mac OS X



# Пакеты для решения уравнений в частных производных (МКЭ)

## Elmer

Rayleigh-Benard convection  
Temperature and velocity fields at 400 s.



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 плат 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 (DTF, Kohn-Sham)
- Перемещение сетки: вытягивание и сдвиг в совместных задачах, ALE формулировка

Платформы:

Linux, Windows, Mac OS X

<http://www.csc.fi/english/pages/elmer>

---

## Ссылки:

### CAELinux LiveDVD

(Дистрибутив на базе PCLinuxOS с уже установленными программами для численных расчетов)

<http://caelinux.com/CMS>

## Статьи:

Обзор свободных программ для численных расчетов

<http://sovety.blogspot.com/2008/03/free-software-for-solving-pdes.html>

Обзор современных программ конечно-элементного анализа

<http://www.sapr.ru/article.aspx?id=6797>

Пингвин на физмате

<http://www.mycomp.com.ua/text/7142>

Расчеты пространственной гидродинамики Реакторной Установки

(Пример использования SALOME и OpenFOAM)

<http://www.os-cfd.narod.ru/articleXP.pdf>

Компьютеры, математика и свобода

<http://www.computerra.ru/gid/266002>