



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 145 за 2019 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Поляков С.В., Чурбанов А.Г.

Свободное программное
обеспечение для
математического
моделирования

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Поляков С.В., Чурбанов А.Г. Свободное программное обеспечение для математического моделирования // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 145. 32 с. <http://doi.org/10.20948/prepr-2019-145>
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-145>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

С.В. Поляков, А.Г. Чурбанов

**Свободное программное обеспечение
для математического моделирования**

Москва — 2019

Поляков С.В., Чурбанов А.Г.

Свободное программное обеспечение для математического моделирования

В работе представлен краткий обзор свободного ПО, используемого для математического моделирования сложных процессов, описываемых уравнениями механики сплошных сред. Рассмотрены все компоненты, входящие в интегрированное окружение для проведения расчетов: сеточные генераторы, системы обработки и визуализации результатов и особенно пакеты для решения дифференциальных уравнений, входящих в базовые математические модели механики. Также рассмотрены концепция свободного ПО и основные типы используемых для него лицензий.

Ключевые слова: свободное ПО, лицензия, пакет программ, математическое моделирование

Polyakov S.V., Churbanov A.G.

Free and open source software for mathematical modeling

The paper provides a brief overview of free and open source software used for mathematical modeling of complex phenomena governed by equations of continuum mechanics. All components including in the integrated environment for predictions are considered: grid generators, systems for processing and visualizing the results with emphasis on packages for solving differential equations involving in the basic mathematical models of mechanics. There are also considered the concept of free software and the basic types of licenses.

Key words: FOSS, license, program package, mathematical modeling

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты 18-07-01292-а, 18-07-00841-а, 18-51-18004-болг-а.

Оглавление

Введение	3
1. Свободное ПО: концепция и основные типы лицензий	5
2. Генераторы сеток	7
3. СПО для визуализации/обработки результатов расчета.....	9
4. Пакеты для решения уравнений математической физики.....	10
4.1 Библиотека программ или язык программирования?	10
4.2 Методы аппроксимации уравнений	11
4.3 Популярное СПО для расчетов	12
Заключение	29
Список литературы	30

Введение

Свободное Программное Обеспечение (СПО) [1] — это свободное и открытое (с исходным кодом) ПО, пользователи которого имеют право на свободное его использование, изучение, модификацию и дальнейшее распространение. По сути, термин СПО есть урезанный перевод английского термина Free and Open Source Software (FOSS). Разумеется, есть и несколько отличающиеся трактовки приведенной выше терминологии, но в данной работе они не обсуждаются и не используются.

В сравнении с проприетарным ПО, свободное ПО демонстрирует целый ряд существенных преимуществ при наличии вполне преодолимых недостатков. А именно, СПО распространяется бесплатно, оно отличается высоким качеством (поскольку является результатом многолетней работы коллектива разработчиков, как правило, из различных организаций и поэтому имеющих опыт в различных областях), позволяет настраивать ПО под свои специфические нужды и задачи и даже совершенствовать и расширять его функциональные возможности, имеет необходимое сопровождение, обладает высокой степенью интероперабельности и масштабируемости и т.д. Вот почему наблюдается неуклонный рост числа пользователей СПО, особенно пользователей математического СПО для моделирования различных физических процессов в технике и технологии [2], а также ассортимента самого СПО для проведения прикладных расчетов [3].

В работе [4] обсуждаются общие принципы математического моделирования и приводятся конкретные математические модели, основанные на обыкновенных дифференциальных уравнениях и уравнениях в частных производных, а также анализируются основные численные методы

их решения. Далее проводится сравнительный анализ возможностей свободного и коммерческого ПО, приведены конкретные примеры термомеханических и гидродинамических расчетов, выполненных в СПО Salome-Meca, Code_Aster и Code_Saturne с использованием Live-DVD-платформы CAELinux.

Подробный обзор и классификация СПО для различных областей применения дан в работе [5]. В этом обзоре охвачены свободные операционные системы и языки программирования, текстовые процессоры и издательские системы, компиляторы и библиотеки к ним, инструментарий для параллельного программирования и т.д. Рассмотрены основные свободные математические библиотеки и средства визуализации, в том числе CFD пакет OpenFOAM, пакеты для вычислительной молекулярной динамики и геоинформационные системы.

Примеры конечно-элементных расчетов в СПО Salome-Meca и Code_Aster с использованием Live-DVD-платформы CAELinux подробно анализируются в [6]. Рассматриваются задачи теплопроводности и конвекции, приводятся все этапы работы с ПО, включая этапы создания геометрии и построения сеток, задания свойств материалов и выбора параметров расчета и т.д.

Свободное ПО для математического моделирования активно используется в Институте математики и информатики Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова [7]. Используя в качестве компонентов вычислительную платформу FEniCS, сеточные генераторы Gmsh и Netgen, систему визуализации ParaView, здесь на протяжении многих лет реализуют различные специализированные математические модели и на их основе успешно проводят прикладные расчеты задач конвективного тепло- и массопереноса, фильтрации, термоупругости, плавления/затвердевания, нейтроники (см. список публикаций на сайте). Работы [8, 9], обобщающие разработанные здесь вычислительные технологии, лишь частично отражают полученные результаты по созданию интегрированного открытого окружения для математического моделирования различных процессов механики сплошной среды на параллельных вычислительных системах.

Подробный обзор возможностей СПО для моделирования в области Integrated Computational Materials Engineering (ICME), включающей в себя различные задачи механики сплошных сред, содержится в работе [10]. Здесь обсуждаются как общие подходы к интеграции различных компонентов в единую интегрированную платформу, так и особенности, возникающие при использовании параллельных вычислительных систем различной архитектуры. Кроме того, здесь проанализирован внушительный список коммерческого и свободного ПО для математического моделирования с точки зрения используемых в них численных методов, сеток и структур данных, систем распараллеливания и решателей линейной алгебры, включая сеточные генераторы.

Хорошим примером эффективного использования СПО OpenFOAM в сложных расчетах задач гидродинамики и аэроакустики является деятельность веб-лаборатории UniCFD [11], созданной на базе технологической платформы UniHUB в Институте системного программирования РАН в 2011 г. Помимо самих расчетов задач механики сплошных сред, лаборатория проводит обучение и консультирование по использованию этого СПО, а созданные в ней специализированные расчетные коды представлены в открытом доступе.

Для того чтобы познакомиться с широким спектром свободного ПО (не только для математических вычислений), не устанавливая при этом все на свой компьютер, удобно воспользоваться платформой CAELinux, способной работать в Live-режиме. Последняя ее версия 2018 г. доступна на сайте [12].

В данной работе дан краткий обзор свободного ПО, используемого для математического моделирования, в котором сознательно опущены САД-системы и GIS-системы. Разумеется, такой обзор не может быть исчерпывающим из-за большого и быстро растущего количества математического СПО, он всего лишь отражает личный взгляд и опыт авторов на данную проблематику.

1. Свободное ПО: концепция и основные типы лицензий

Концепция СПО сформулирована Фондом свободного программного обеспечения [13] в виде следующего согласованного определения. ПО является свободным, если оно позволяет обеспечивать следующие четыре степени свободы и предоставляет возможность свободно:

- использовать программу для достижения любой цели;
- изучать принципы работы программы и модифицировать ее в соответствии со своими потребностями. Непременным условием для этого является доступ к исходному коду;
- передавать копии программы другим пользователям с целью оказания им посильной помощи;
- передавать другим пользователям ее усовершенствованные версии, чтобы все общество могло извлекать выгоду от произведенных модификаций. При этом также неременным условием является доступ к исходному коду.

Юридически свобода ПО обеспечивается передачей с каждым экземпляром программы соответствующей лицензии (лицензионного соглашения), содержащей базовый набор имущественных прав на программу.

Наиболее последовательно концепция свободы ПО реализована в разработанных Фондом свободного программного обеспечения [13] copyleft-лицензиях. Они предоставляют свободу использования, модификации и распространения программы, но при этом запрещают сублицензирование, т.е.

предоставление следующим пользователям распространяемой программы меньших прав в сравнении с исходной лицензией. Основными типами таких лицензий являются следующие [13].

GNU GPL — стандартная открытая лицензия (General Public License) GNU, версия v.3 (с 2007 г.).

Она гарантирует свободу пользователю в использовании, распространении и модификации программы, и эти права в рамках этой лицензии защищены навсегда.

Основные условия использования и распространения ПО с такой лицензией следующие [13, 14]:

- дистрибьютер программы обязан сделать доступным для конечного пользователя исходный код;
- любые произведенные дистрибьютором модификации программы также должны лицензироваться как GPL;
- дистрибьютеры ПО с лицензией GPL при его распространении не могут накладывать никаких ограничений, выходящих за рамки данной лицензии;
- пользователи ПО с лицензией GPL обладают такими же правами в его копировании, модификации и распространении, как первоначальные дистрибьютеры;
- лицензия GPL является наследуемой, т.е. она требует, чтобы производное ПО, полученное с использованием данного ПО, в случае его дальнейшего распространения также было лицензировано по GPL.

Свободное ПО с лицензией GPL составляет большую часть существующего СПО с GNU-лицензиями, поскольку полностью отражает концепцию СПО. Главное его ограничение заключается в том, что оно не может использоваться для создания ПО с применением других несвободных библиотек.

GNU LGPL — ограниченно открытая лицензия (Lesser General Public License) GNU, версия v.3 (с 2007 г.).

Данная лицензия предоставляет более широкие возможности пользователям [13, 14]. Она позволяет использовать и внедрять ПО, лицензированное на условиях LGPL, в собственном (даже коммерческом) ПО. При этом отсутствует обязательное требование предоставления исходного кода собственных компонентов под copyleft-лицензией. Необходимым условием такой лицензии является только обеспечение конечным пользователям возможности модифицировать ПО с лицензией LGPL, предоставляя им для этого исходный код. В проприетарном программном обеспечении код под лицензией LGPL обычно используется в виде разделяемой библиотеки, что обеспечивает четкое разделение между проприетарными компонентами и LGPL-компонентами. Таким образом, LGPL является компромиссом между строгой GPL и более разрешительными лицензиями.

Главное отличие LGPL от GPL состоит в том, что LGPL позволяет линковаться с ПО, не имеющим GPL или LGPL, и более того, не только со свободным, но и с проприетарным ПО. В дальнейшем такое составное ПО, включающее в себя как свободные, так и несвободные компоненты, может распространяться под любыми условиями, если не является производной работой вышеупомянутого ПО.

Существуют лицензии и менее строгие в сравнении с copyleft-лицензиями. Они оставляют право выбора лицензии для модифицированной программы ее создателю, что наиболее явно сформулировано в следующих широко распространенных лицензиях СПО.

BSD-style — лицензии типа BSD (Berkeley System Distribution) (с 1990 г.).

Лицензии типа BSD [15] получили свое название потому, что они близки первоначальной лицензии, выпущенной Калифорнийским университетом в Беркли.

Они предельно просты и имеют максимально возможный разрешительный характер при минимуме ограничений. Самое главное, они позволяют включать программу с BSD-style лицензией в собственные, в том числе и коммерческие, разработки. Более ранние версии требовали подтверждения от Калифорнийского университета, но это ограничение в большинстве последних версий отсутствует.

MIT — лицензия, разработанная Массачусетским технологическим институтом (Massachusetts Institute of Technology (MIT)) (с 1988 г.).

Лицензия MIT [16] является разрешительной лицензией и позволяет пользователям использовать лицензируемый код в закрытом ПО при условии, что текст лицензии предоставляется вместе с самим ПО. Ее принято рассматривать как академическую лицензию, пригодную для научных разработок.

2. Генераторы сеток

Генераторы сеток являются существенной компонентой в системах математического моделирования, поскольку качество создаваемых ими сеток существенно влияет на качество получаемых с их использованием численных результатов. Ниже очень кратко рассмотрено наиболее популярное СПО для построения сеток.

Gmsh — разрабатывается с 1997 г., лицензия GNU GPL v.2 и выше (с 2003 г.), библиотека программ на C++, платформы Linux/Windows/MacOS.

Gmsh [17] – это автоматический генератор 1D/2D/3D сеток. Он имеет понятный и удобный пользовательский GUI-интерфейс и обладает следующими ключевыми особенностями:

- работать с данными можно как в интерактивном, так и пакетном режиме;
- имеет встроенный генератор геометрии с использованием BRep (Boundary Representation) представления геометрии и средства ее

визуализации, хотя, конечно, его нельзя считать полноценной САД-системой;

- поддерживает параметрическое описание геометрии на своем скриптовом языке с использованием ограниченного набора встроенных геометрических примитивов (точка, линии, поверхности, объем);
- позволяет быстро строить простые геометрии и геометрии с повторяющимися элементами, используя для этого пользовательские функции, циклы, условные операторы и вставки;
- поддерживает экструзию и трансформацию (вращение, перенос, симметрия, увеличение) при создании геометрических объектов, что бывает очень удобным способом их конструирования;
- позволяет точно задавать целевые размеры элементов сетки;
- имеет различные алгоритмы построения сеток (Делоне, фронтальный и собственный алгоритм Gmsh – MeshAdapt+Delaunay);
- содержит модули оптимизации сетки и ее иерархического дробления;
- может сохранять построенную сетку в форматах различных пакетов;
- поддерживает САД-форматы геометрии IGES и STEP;
- импортирует сеточные форматы I-DEAS, MED, VTK и поверхностные сетки STL, VRML;
- имеет интерфейс к солверу GetDP.

Netgen — разрабатывается с 1994 г., лицензия GNU LGPL v.2 (с 2003 г.), библиотека программ на C++, платформы Linux/Windows/MacOS, поддерживает параллельность вычислений.

Netgen [18] – это автоматический генератор 2D/3D сеток, состоящих из треугольников и четырехугольников в 2D случае и тетраэдров в случае 3D. Он используется во многих проектах с GUI и имеет следующие ключевые особенности:

- позволяет работать с данными как в интерактивном, так и пакетном режиме;
- воспринимает входные файлы как твердотельной геометрии (CSG), так и поверхностное представление в форматах IGES и STEP и поверхностную сетку STL;
- имеет широкий набор геометрических примитивов и операций над ними;
- выполняет автоматический локальный контроль размера элемента сетки;
- качество получаемой сетки регулируется заданием нужной опции или в интерактивном режиме;
- имеет два алгоритма построения сеток – Делоне и фронтальный;

- имеет набор алгоритмов сгущения сетки (бисекции, hp-сгущение и др.);
- может сохранять построенную сетку в форматах различных пакетов;
- имеет интерфейс к солверу NGSolve.

Более подробно познакомиться с работой Gmsh и Netgen можно, например, в [9].

3. СПО для визуализации/обработки результатов расчета

Другой существенной частью технологической цепочки математического моделирования являются системы научной визуализации и анализа данных. Среди многих надежных кроссплатформенных открытых пакетов, позволяющих выполнять параллельную обработку больших массивов данных, выделяются следующие.

ParaView — разрабатывается с 2000 г., лицензия BSD-style (с 2002 г.), библиотека программ на C++ с использованием OpenGL, платформы Linux/Windows/MacOS, поддерживает MPI.

ParaView [19] – это кроссплатформенный пакет для интерактивной визуализации и обработки больших наборов данных с использованием параллельных вычислений. Он разрабатывается Сандийскими и Лосаламоской национальными лабораториями США совместно с компаниями Kitware и CSimSoft и имеет следующие особенности:

- работать с данными можно как в интерактивном, так и пакетном режиме;
- поддерживает работу с данными на всех типах сеток (равномерных/неравномерных, структурированных/неструктурированных, многоблочных);
- поддерживает возможность импорта данных из широкого набора форматов данных (CAS, STL, TEC);
- поддерживает широкий набор готовых фильтров для анализа результатов с возможностью создания своих собственных;
- позволяет визуализировать скалярные и векторные поля, с помощью фильтров отображать контуры и изоповерхности, строить сечения плоскостью или линии тока и т.д.;
- позволяет сохранять в файл скриншоты или анимацию для нестационарных полей;
- позволяет использовать скрипты на Python;
- работает как на простейших ПК, так и на суперкомпьютерах;
- имеет клиент-серверную архитектуру и базируется на библиотеке VTK.

VisIt — разрабатывается с 2000 г., лицензия BSD-style, библиотека программ на C/C++, платформы Linux/Windows/MacOS, поддерживает MPI.

VisIt [20] разрабатывается Департаментом энергетики США для интерактивной параллельной обработки и визуализации научных данных на различных платформах и по своим функциональным возможностям очень близок к ParaView. Он также базируется на библиотеке VTK и позволяет обрабатывать скалярные, векторные и тензорные данные. Имеет удобные интерфейсы к языкам C++, Python и Java и поддерживает сетки различного типа.

VTK — разрабатывается с 1993 г., лицензия BSD-style, библиотека программ на C++ с несколькими дополнительными интерфейсами к Tcl/Tk, Java и Python, платформы Linux/Windows/MacOS, поддерживает MPI.

VTK (Visualization Toolkit) [21] представляет собой одно из самых популярных ПО для 3D визуализации. Библиотека VTK работает с различными наборами данных, включая структурированные и неструктурированные сетки, и поддерживает огромное количество алгоритмов для работы со скалярами, векторами, текстурой и т.д. Ее профессиональную поддержку осуществляет Kitware с бесплатной документацией. На основе VTK построены не только упомянутые выше ParaView и VisIt, но и многие другие системы визуализации.

Более подробно познакомиться с работой ParaView можно в [9], а общий обзор открытых систем визуализации содержится в [22].

4. Пакеты для решения уравнений математической физики

В настоящее время существует очень широкий набор пакетов для решения уравнений математической физики, используемых для моделирования процессов механики сплошных сред. Чтобы выбрать наиболее подходящий из них для нужд конкретного пользователя, необходимо учитывать целый ряд существенных факторов: уровень и удобство программирования (близость используемого языка к математической записи решаемых уравнений), методы аппроксимации уравнений (возможности работы на неструктурированных сетках в сложных областях) и, наконец, тип лицензии (возможность отчуждения собственных разработок, созданных на основе СПО).

4.1 Библиотека программ или язык программирования?

В настоящее время существует два альтернативных подхода к созданию пакетов для математических вычислений. Это библиотека программ или специальный язык программирования.

Библиотека программ создается на основе существующих языков программирования общего назначения с использованием технологии объектно-ориентированного программирования, позволяющей на высоком

уровне абстракции создавать дискретные модели сплошной среды и реализовывать различные методы их расчета.

Таким образом, типичная библиотека для решения уравнений математической физики включает в себя библиотеку классов для различных операций (сетки и определенные на них скаляры, векторы, тензоры и операции поля над ними, граничные условия различного типа и т.д.) и библиотеку стандартных солверов, использующих эти классы для моделирования конкретных физических процессов.

Domain-Specific Language (DSL) — проблемно-ориентированный язык для конкретной области применения [23]. Он создан в противоположность языкам программирования общего назначения (но с их использованием) для эффективной работы на высоком уровне в достаточно узкой специфической предметной области с использованием принятых в этой области обозначений и абстракций.

Причины использования DSL-языка вместо библиотеки программ могут быть самые разные. Прежде всего, это ускорение процесса создания кода и повышение уровня его читаемости, в параллельном программировании это возможность избавить пользователя от необходимости рассматривать операции низкого уровня (автоматизация распараллеливания на высоком уровне), далее, применение DSL-языка снижает высокие требования к пользователю в знании традиционных языков программирования а также позволяет значительно ускорить скорость вычислений в пакетах, основанных на интерпретируемых языках (например Python), и т.д.

4.2 Методы аппроксимации уравнений

Для дискретизации уравнений математической физики, лежащих в основе моделей механики сплошных сред, используются различные методы, из которых наиболее универсальными и поэтому наиболее популярными являются следующие подходы.

Метод контрольного объема (МКО) является, по-видимому, наиболее ранним методом построения аппроксимаций производных с помощью конечных разностей. Он достаточно просто реализуется в расчетных областях простой формы, но требует значительных усилий в сложных областях (использование согласованных с границей сеток или метод фиктивных областей/погруженных границ для создания однородного алгоритма расчета). По сравнению с методом конечных элементов, метод контрольного объема налагает более высокие требования на гладкость решения уравнений. Кроме того, в МКО возникают проблемы с созданием аппроксимаций повышенного порядка точности.

Метод конечных элементов (МКЭ) является наиболее популярным в целом ряде задач механики сплошных сред (теплопередача, упругость/пластичность и т.д.). Его эффективность никак не связана с формой расчетной области и основана на использовании слабой формы уравнений, получаемой различными вариационными методами. При этом на

одной и той же сетке можно использовать конечные элементы различного порядка и обладающие различными свойствами, существенно влияющими на точность получаемых результатов расчета. Если раньше большая часть пакетов по вычислительной гидродинамике была основана на МКО, то сейчас все больше коммерческих и открытых CFD кодов используют метод конечных элементов и охватывают более широкие проблемы гидродинамики, например, взаимодействие жидкость–твердое тело (Fluid-Structure Interactions (FSI)).

4.3 Популярное СПО для расчетов

Code_Saturne — разрабатывается с 1998 г., лицензия GNU GPL v.2 (с 2007 г.), библиотека программ на Fortran 95, C/C++ и Python, платформа Linux, поддерживает MPI, основан на МКО, использует собственные линейные решатели и поддерживает интерфейс к СПО решателей линейной алгебры PETSc.

Пакет Code_Saturne [24] предназначен для решения 2D/2D (осевая симметрия)/3D задач вычислительной гидродинамики и имеет широкий набор уже реализованных моделей. Его обширный функционал и эффективность расчетов позволяет использовать Code_Saturne для решения широкого класса промышленных задач.

Code_Saturne состоит из нескольких компонентов, наиболее важными из которых являются препроцессор (для конвертации сеток в используемый в пакете формат) и набор готовых солверов (позволяющий проводить расчеты по стандартным физическим моделям). Кроме того, имеется опциональный графический GUI-интерфейс пользователя для формирования задачи в виде файлов в XML-формате. Пакет Code_Saturne можно использовать совместно с платформой SALOME.

В пакете Code_Saturne реализованы следующие стандартные 2D/3D солверы для расчета конвективного тепло и массообмена:

- стационарные/нестационарные несжимаемые/слабосжимаемые течения ньютоновских/неньютоновских жидкостей;
- однофазные и многофазные потоки;
- RANS (k- ϵ , k- ω SST, SA, v2f, RSM), LES и DNS моделирование;
- магнитная гидродинамика;
- лагранжев подход для описания дисперсных частиц;
- произвольный лагранжев-эйлеров метод для деформируемых сеток;
- взаимодействие ротор/статор для задач турбомашиностроения и процессов перемешивания;
- модели для анализа атмосферных и грунтовых потоков;
- модели теплообмена (сопряженный/несопряженный), излучения и горения;
- различные теплофизические свойства среды, учет свойств реальных газов;

- модели электрической дуги и джоулева нагрева.

Конечно-объемные аппроксимации и алгоритмы расщепления, используемые в Code_Saturne:

- набор традиционных аппроксимаций для конвективных членов;
- метод наименьших квадратов для аппроксимаций по пространству;
- аппроксимации по времени для уравнений переноса – неявная или схема Кранка-Николсона;
- алгоритм SIMPLEC в качестве схемы расщепления.

Особенности используемых в Code_Saturne сеток и их генераторы:

- как стандартные (тетраэдр, гексаэдр, призма, пирамида), так и многогранные ячейки;
- поддержка сеток различного вида (структурированных/блочко структурированных/неструктурированных/с висячими узлами и т.д.);
- импортирует сетки, построенные в свободных (Gmsh, SALOME и др.) и коммерческих (Gambit, I-DEAS, STAR-CCM+ и др.) генераторах сеток.

Форматы файлов ввода/вывода, используемых в Code_Saturne:

- входные файлы в xml-формате;
- возможна визуализация результатов в ходе расчета с использованием ParaView Catalyst и Melissa;
- для постобработки результатов используются ParaView, EnSight, MED-файлы.

Code_Saturne легко интегрируется с кодом Code_Aster и другими кодами, разрабатываемыми компанией EDF, а также с кодами, входящими в вычислительную платформу NURESIM (нейтроника, системные коды и т.д.).

Пример расчетов.

В работе [25] код Code_Saturne использовался для расчета турбулентного потока теплоносителя в корпусе водо-водяного реактора. На рис. 1 показаны фрагмент несогласованной расчетной сетки (слева) с указанием основных структурных элементов и рассчитанные линии тока в нижней камере смещения (справа).

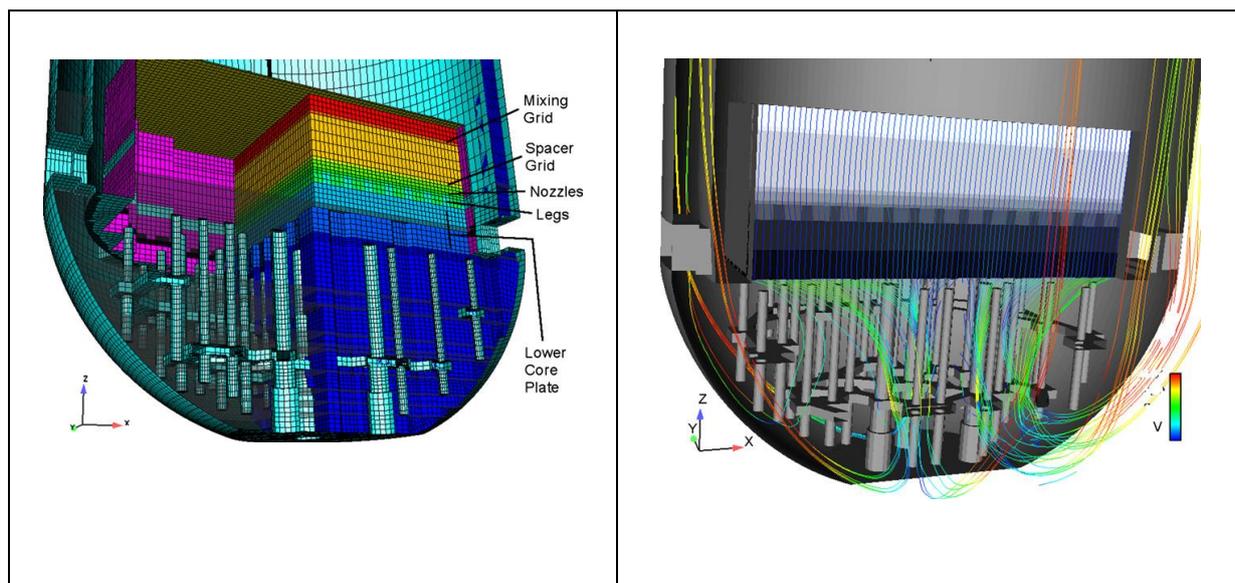


Рис. 1. Сетка (слева) и рассчитанные линии тока (справа) в нижней камере смешения ядерного реактора [25]

Очевидно, Code_Saturne можно эффективно использовать для промышленных расчетов сложных технических устройств с использованием практически реальной геометрии объектов.

Elmer — разрабатывается с 1995 г., лицензия GNU GPL v.2.1 (с 2008 г.) (за исключением основной библиотеки солверов ElmerSolver, лицензируемой под GNU LGPL v.2.0 (с 2012 г.)), библиотека программ на Fortran 90 и C/C++, платформы Linux/Windows/MacOS, поддерживает MPI, основан на МКЭ, использует собственные решатели и поддерживает интерфейсы к свободным библиотекам решателей линейной алгебры Nupre/LAPACK/MUMPS/Parpack/PETSc/Trilinos/UMFPACK.

Пакет Elmer [26] предназначен для 1D/2D/3D мультифизических вычислений и ориентирован на конечного пользователя. Elmer состоит из нескольких компонентов, наиболее важными из которых являются ElmerGUI — графический интерфейс пользователя для формирования задачи, ElmerGrid — инструмент для конвертации сеток в используемый в пакете формат, и ElmerSolver — набор солверов, позволяющий проводить расчеты с использованием очень широкого набора стандартных физических моделей.

Пакет Elmer характеризуется следующими особенностями:

- в нем реализован очень широкий набор физических моделей;
- их достаточно просто объединять для проведения мультифизических расчетов;
- так же просто добавлять новые динамически подключаемые модели, созданные пользователем;
- заложен инструмент, позволяющий реализовывать наиболее эффективные численные алгоритмы.

В пакете Elmer реализованы следующие 1D/2D/3D солверы для расчета конвективного тепло- и массообмена, структурной механики, электромагнетизма и акустики:

- стационарные/нестационарные несжимаемые/слабосжимаемые течения ньютоновских/неньютоновских жидкостей;
- (k-ε)-модель для турбулентных течений;
- LevelSet метод для моделирования течений со свободной поверхностью;
- модели теплообмена (сопряженный/несопряженный), фазового перехода, излучения;
- модели линейной/нелинейной упругости, модели пластин и оболочек;
- модели электростатики и низкочастотные модели;
- уравнение Пуассона-Больцмана (микрожидкость);
- линеаризованные уравнения Навье-Стокса и уравнение Гельмгольца (акустика);
- различные теплофизические свойства среды, учет свойств реальных газов.

Особенности конечно-элементных аппроксимаций, реализованных в пакете Elmer:

- конечные элементы различного порядка;
- различные методы стабилизации (SUPG, Discontinuous Galerkin);
- различные методы адаптации сетки.

Особенности используемых в Elmer сеток и генераторы для их построения:

- поддержка структурированных/неструктурированных сеток;
- есть внутренние генераторы сетки для достаточно простых областей;
- конвертация сетки из свободных (Gmsh, Netgen (без конвертации), SALOME) и коммерческих (Gambit, COMSOL Multiphysics, GiD и др.) сеточных генераторов.

Форматы файлов ввода/вывода, используемых в Elmer:

- разработан свой достаточно гибкий формат файлов ввода/вывода;
- для постобработки результатов рекомендуется ParaView.

В Elmer разработан специальный интерфейс для связанных расчетов совместно с OpenFOAM. Опубликованы примеры совместного использования Elmer и с другим СПО.

Очень подробный пример использования пакета Elmer (совместно с Gmsh и ParaView) для моделирования электромагнитных устройств дан в работе [27].

Fell++ — разрабатывается с 2005 г., лицензия GNU LGPL/GNU GPL v.3, библиотека программ на C++ (которую авторы классифицируют как DSL-язык, встроенный в C++), платформы Linux/Windows/MacOS, поддерживает MPI, основан на методах Галеркина (конечных и спектральных

элементах), использует собственные солверы и поддерживает интерфейсы к свободным библиотекам решателей линейной алгебры MUMPS, PETSc и UMFPACK.

Пакет Fell++ (Finite Element Embedded Language in C++) [28] предназначен для решения методом конечных или спектральных элементов 1D/2D/3D уравнений, входящих в базовые модели механики сплошных сред. Для этого используется встроенный в C++ с помощью объектно-ориентированного подхода DSL-язык высокого уровня абстракции, имеющий синтаксис и семантику, очень близкую к математической записи уравнений. Язык Fell++ позволяет оперировать сетками и определенными на них функциональными пространствами, билинейными и линейными формами, алгебраическими представлениями уравнений, а также визуализировать объекты этого языка. Имеется pyFeel++ – интерфейс для работы с математическими объектами Feel++ в Python, – позволяющий эффективно работать на языке Python 3.

В настоящее время этот пакет используется в реализации различных проектов, связанных с исследованием физиологических процессов в человеческом организме, оптической томографии, электромагнитных установок и т.д. В его разработке и развитии принимают участие большое число организаций и разработчиков из разных стран, а его высокая эффективность позволяет рассчитывать с его помощью сложные индустриальные задачи.

В пакете Fell++ реализованы следующие стандартные 1D/2D/3D солверы для решения задач механики сплошных сред:

- стационарные/нестационарные несжимаемые течения ньютоновских/неньютоновских жидкостей, включая реологию крови;
- механика твердого тела (упругость/гиперупругость и др.);
- взаимодействие жидкость/твердое тело;
- различные модели теплообмена;
- термо-электрические модели.

Конечно-элементные/спектральные аппроксимации и алгоритмы, используемые в Fell++:

- поддерживает широкий набор спектральных и конечных элементов (непрерывный/разрывный/гибридный методы Галеркина и т.д.);
- реализованы различные варианты LevelSet метода для расчета многожидкостных течений;
- реализованы различные варианты метода фиктивных областей;
- реализован произвольный лагранжев-эйлеров метод ALE;
- позволяет рассчитывать широкий класс задач оптимизации.

Особенности используемых в Fell++ сеток и генераторы для их создания:

- поддержка адаптивных неструктурированных сеток;

- позволяет выделять подсетки из родительских сеток и эффективно работать с ними;
- использует сетки из свободных (Gmsh, SALOME) и коммерческих (Altair/Hypermesh) сеточных генераторов.

Форматы файлов ввода/вывода, используемых в Fell++:

- есть встроенный визуализатор для построения графиков в ходе расчета;
- для постобработки результатов можно использовать ParaView или EnSight.

Пример формулировки задачи: уравнение Пуассона.

Найти $U \in V_h$, такое что

$$\int_{\Omega} \nabla v \cdot \nabla U \, dx = \int_{\Omega} v f \, dx, \quad \forall v \in \hat{V}_h.$$

В пакете Fell++ оно записывается в следующем виде:

```

auto mesh = Mesh<Simplex<2>>::New();
loadGMSHMesh( _mesh=mesh, _filename="mesh.msh" );

// P3 finite element space on triangular elements
auto Xh = Pch<3>(mesh);
auto v = Xh->element();
auto U = Xh->element();
auto f = expr("sin(x):x");

auto L = form1(_test=Xh);
L = integrate( elements(mesh), f*id(v) );
auto a = form2(_test=Xh,_trial=Xh);
a = integrate( _range=elements(mesh), _expr=gradt(U)*trans(grad(v)) );

```

Пример расчетов.

В работе [29] пакет Fell++ использовался для решения задач гемодинамики. На основе уравнений Навье-Стокса были промоделированы течения крови в венозной системе человека. На рис. 2 показаны линии тока, раскрашенные по значению давления, в области, представляющей собой сложную систему из вен в близкой к реальной трехмерной геометрии.

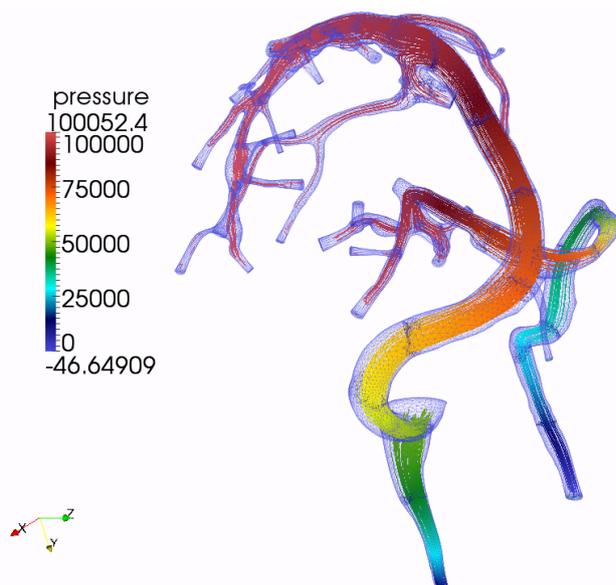


Рис. 2. Рассчитанные линии тока, раскрашенные по значению давления [29]

FEniCS — разрабатывается с 2003 г., лицензия GNU LGPL v.3 (для всех основных компонент) и GNU GPL v.3 (для несущественных компонент) (с 2003 г.), двуязычный интерфейс – библиотека программ на C++ и DSL-язык на Python, платформы Linux/Windows Subsystem for Linux/MacOS, поддерживает MPI и OpenMP, основан на МКЭ, поддерживает интерфейсы к свободным библиотекам решателей линейной алгебры HYPRE, PETSc, Trilinos/Epetra, uBLAS, UMFPACK и др.

Интегрированная вычислительная платформа FEniCS (Finite Element Computational Software) [30] представляет собой универсальную и гибкую платформу для автоматизированного решения дифференциальных уравнений с использованием МКЭ, имеющую встроенные функциональные возможности для генерации сеток для простых геометрий и визуализации графиков и изолиний. Она включает в себя следующие основные компоненты:

- UFL (Unified Form Language) – DSL-язык, встроенный в Python, позволяющий записывать конечно-элементные аппроксимации дифференциальных уравнений в терминах вариационных форм на высоком уровне абстракции;
- FFC (FEniCS Form Compiler) – компилятор, преобразующий записанные на языке UFL формы в запись UFC-кода на C++;
- Instant – динамический компилятор (just-in-time compiler), преобразующий код на Python в модуль C++ и сохраняющий таким образом эффективность кода при использовании Python;
- DOLFIN (Dynamic Object-oriented Library for FINite element computation) – основная динамическая ОО C++/Python библиотека, отвечающая за структуры данных и алгоритмы работы с адаптивными конечно-элементными сетками, автоматическую сборку матриц и их решение солверами линейной алгебры;

- Viper – встроенный минималистичный визуализатор объектов DOLFIN, позволяющий создавать в ходе расчета простые одно- и двумерные графики, созданный на основе библиотеки VTK.

Основу пакета FEniCS составляет библиотека классов, написанная на C++, – библиотека DOLFIN, образующая среду для решения задач, описываемых обыкновенными дифференциальными уравнениями и уравнениями в частных производных. DOLFIN имеет два пользовательских интерфейса. Первый реализован в виде традиционной библиотеки на C++, второй – как стандартный пакет на Python. Интерфейс к Python добавляет дополнительный уровень автоматизации благодаря использованию компиляции кода во время исполнения, поэтому он более эффективен на этапе разработки и тестирования нового проекта. А именно, язык форм UFL интегрирован в этот интерфейс с автоматической компиляцией в процессе выполнения. Финальную версию проекта можно оформлять с помощью интерфейса на C++, более удобного для интеграции с другими компонентами разрабатываемого проекта.

Подробное описание входящих в FEniCS компонентов, технологии работы с ними и примеры использования содержатся в работах [9, 31, 32].

К сожалению, на текущий момент FEniCS уступает OpenFOAM и другим пакетам в полноте реализованных моделей для прикладных CFD-расчетов инженерных задач. В нем мало готовых стандартных солверов для турбулентных потоков, но есть много примеров реализации схем расщепления для моделирования течений несжимаемой вязкой жидкости. В нем реализованы стандартные солверы для уравнений Навье-Стокса, взаимодействия жидкость/твердое тело, вычислительной геодинимики и т.д. [30]. По сути, FEniCS является универсальным “конструктором”, с помощью которого можно очень быстро реализовывать различные алгоритмы расчета уравнений математической физики, образующих базовые модели механики сплошных сред. Это делает его весьма привлекательным инструментарием для использования в образовательных или исследовательских целях.

В пакете FEniCS есть следующие функциональные возможности для решения базовых уравнений механики сплошной среды:

- позволяет в автоматическом режиме решать стационарные/нестационарные дифференциальные (обыкновенные/в частных производных) уравнения в областях сложной формы с использованием вариационных формулировок;
- использует для записи решаемых уравнений математические обозначения grad , div , rot и др., применяемые для скалярных, векторных и тензорных величин и позволяющие строить дискретные модели на высоком уровне абстракции;
- реализованы граничные условия 1-го, 2-го и 3-го рода;
- Поддерживает обширное семейство конечных элементов для 1D/2D/3D областей, используемых для построения как непрерывных, так и разрывных аппроксимаций;

- имеет интерфейсы к широкому набору решателей линейной алгебры (прямые и итерационные солверы, различные предобуславливатели и т.д.);
- предлагает различные алгоритмы решения нелинейных уравнений (простой итерации, варианты метода Ньютона и т.д.);
- поддерживает использование композитных сеток (с налеганием), т.е. оперирует с несогласованными сетками в различных подобластях;
- имеет различные алгоритмы динамической адаптации расчетной сетки;
- работает с подобластями и материалами, имеющими различные теплофизические свойства;
- наличие интерфейса к Python позволяет использовать другое полезное СПО, такое как NumPy, SciPy, Matplotlib и др.;
- имеет широкий набор документированных примеров, в которых реализованы практически все основные функциональные возможности пакета.

Особенности используемых в FEniCS сеток и их внутренние и внешние генераторы:

- на данный момент поддерживает неструктурированные сетки из треугольников и тетраэдров;
- есть внутренние генераторы сеток: функции с параметрами для построения сеток в простейших геометрических областях (интервал, прямоугольник, куб, полигон и т.д.) и `mshr` для областей, состоящих из более сложных объектов (куб, цилиндр, сфера и т.д.);
- конвертация сетки, построенной с использованием свободных (`Gmsh`, `Tetgen`, `Sandia Exodus II format` и др.) и коммерческих (`Abaqus`, `ANSYS Fluent` и др.) сеточных генераторов.

Форматы файлов ввода/вывода, используемых в FEniCS:

- файлы входных данных и результатов в DOLFIN-подмножестве формата XML;
- есть встроенный визуализатор для построения в ходе расчета простых одно- и двумерных графиков;
- результаты в VTK-формате для пост-обработки в ParaView или аналогичных ему визуализаторов;
- возможно записывать результаты в формате GNU Octave и Matlab для дальнейшей визуализации в этих системах.

Разработчики пакета FEniCS предоставили широкие возможности для его интеграции с другими кодами при решении мультифизических задач. В инструкции [33] подробно описаны технологии интеграции FEniCS с кодами на C, C++, Fortran и даже МАТАВ/Octave. Достаточно часто интегрируют FEniCS с OpenFOAM для моделирования сопряженного теплообмена, поскольку OpenFOAM имеет много стандартных солверов для расчета турбулентных течений.

Пример формулировки задачи: уравнение Пуассона.

Найти $U \in V_h$, такое что

$$\int_{\Omega} \nabla v \cdot \nabla U \, dx = \int_{\Omega} v f \, dx, \quad \forall v \in \hat{V}_h.$$

В пакете FEniCS оно записывается в следующем виде:

```
V = FunctionSpace(mesh, 'Lagrange', 1)
```

```
v = TestFunction(V)
```

```
U = TrialFunction(V)
```

```
f = Constant(-6.)
```

```
a = dot(grad(v), grad(U))*dx
```

```
L = v*f*dx
```

Пример расчетов.

В работе [34] пакет FEniCS использовался для разработки новой модели процесса окисления, примененной в 2D расчете задачи поперечного обтекания пучка труб с окислением их поверхностей. Рассчитывались стационарные ламинарные потоки в пучках труб с квадратной и треугольной упаковками. Для верификации расчета гидродинамики были использованы экспериментальные данные по стационарному обтеканию одного кругового цилиндра несжимаемым вязким потоком. На рис. 3 показаны рассчитанные линии тока в окрестности застойной зоны для $Re = 40$.

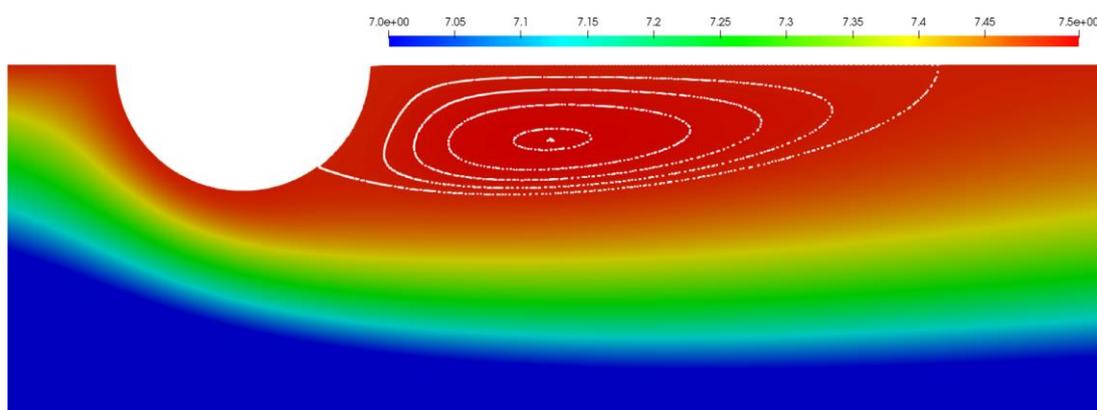


Рис. 3. Линии тока для $Re = 40$ (фрагмент) [34]

Получено хорошее совпадение результатов расчета с экспериментом по всем геометрическим параметрам застойной зоны позади цилиндра.

FreeFEM++ — разрабатывается с 1987 г. (ранее как “MacFem”, “PCFem” и “FreeFEM”), лицензия GNU LGPL v.3.0, C++-подобный DSL-язык, платформы Linux/Windows/MacOS, поддерживает MPI, основан на МКЭ, использует свои решатели и поддерживает интерфейсы к свободным

библиотекам решателей линейной алгебры HYPRE, MUMPS, PaStiX, pARMS, PETSc, ScaLAPACK, SuperLU и др.

Интегрированная платформа FreeFEM++ (Free Finite Element Method) [35] предназначена для решения 2D/3D уравнений в частных производных, входящих в базовые модели механики сплошных сред. Она обладает следующими функциональными возможностями:

- позволяет решать стационарные/нестационарные линейные/нелинейные 2D/3D краевые задачи с использованием слабых формулировок;
- использует DSL-язык (скрипт), C++-подобный и компилируемый в C++, позволяющий формулировать дискретные модели на высоком уровне абстракции в понятной и компактной форме;
- имеет свою IDE-среду разработки – FreeFEM++-cs, хотя может использоваться и без нее;
- содержит обширный набор пространств конечных элементов, включая разрывный Галеркин;
- использует метод Бубнова-Галеркина;
- обеспечивает автоматическую сборку матриц из вариационных формулировок;
- пользователь имеет возможность реализовывать собственные алгоритмы и модифицировать уже имеющиеся;
- имеет встроенный автоматический генератор адаптивных 2D сеток, основанный на алгоритме Делоне-Вороного, позволяющий строить сетки для достаточно простых геометрий;
- имеет собственный визуализатор для рисования сеток, изолиний и векторных полей.

Документация очень подробная и содержит множество примеров использования. Кроме того, доступны публикации пользователей, содержащие подробное описание решения прикладных задач из различных областей (см., например, [36]).

В пакете FreeFEM++ доступны стандартные 2D/3D солверы, в которых реализованы следующие модели:

- стационарные/нестационарные несжимаемые/сжимаемые течения ньютоновских жидкостей;
- (k-ε)-модель для турбулентных течений;
- модели теплообмена (сопряженный/несопряженный), фазовые переходы и излучение;
- линейная/нелинейная упругость;
- магнето- и электростатика;
- взаимодействие жидкость/твердое тело FSI;
- задачи, связанные с деформацией расчетной сетки.

Особенности используемых в FreeFEM++ сеток и их внутренние и внешние генераторы:

- поддерживает неструктурированные адаптивные сетки из треугольников и тетраэдров;
- есть внутренний генератор 2D сеток;
- использует сетки, построенные с помощью свободных сеточных генераторов (Gmsh, Tetgen и др.).

Форматы файлов ввода/вывода, используемых в FreeFEM++:

- использует свой формат файлов ввода, записанных на специальном входном языке FreeFEM++;
- есть встроенный визуализатор для построения в ходе расчета простых одно- и двумерных графиков;
- результаты в VTK-формате для постобработки в ParaView или аналогичных ему визуализаторах;
- есть возможность записывать результаты в формате Matlab/Octave, gnuplot и Medit для дальнейшей визуализации в этих системах.

Входной язык FreeFEM++ содержит все необходимые конструкции для реализации алгоритмов конечно-элементного расчета: объявление переменных, математические операции, операторы цикла и ветвления, объявление функций, массивы, файлы и т.д. Кроме того, в нем добавлены специальные типы данных и функций, используемые для решения дифференциальных уравнений в слабой формулировке. Такими типами являются сетки и определенные на них пространства конечных элементов, операторы для записи уравнений в слабой формулировке (интеграл, div, grad и т.д.), а также операторы для их решения.

Пример формулировки задачи: уравнение Пуассона.

Найти $U \in V_h$, такое что

$$\int_{\Omega} \nabla v \cdot \nabla U \, dx = \int_{\Omega} v f \, dx, \quad \forall v \in \hat{V}_h.$$

В пакете FreeFEM++ это 2D уравнение записывается в следующем виде:

```
fespace V(mesh, P1);
V v, U;
func f = ...;

varform a(v, U) = int2d(mesh)(dx(v)*dx(U) + dy(v)*dy(U));
varform L(v) = int2d(mesh)(v*f);
```

Пример расчетов.

В работе [37] пакет FreeFEM++ использовался для решения 2D системы уравнений Буссинеска, описывающей распространение поверхностных волн в несжимаемой невязкой жидкости под действием

гравитации. На рис. 4 показана эволюция изначально симметричного экспоненциального узкого профиля, рассчитанная на различные моменты времени.

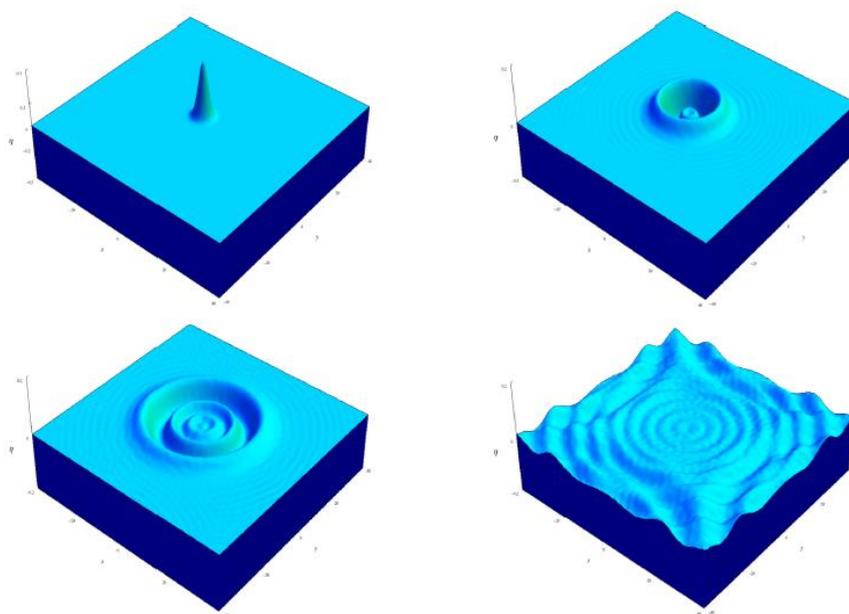


Рис. 4. Распространение волнообразного решения на различные моменты времени $t = \{0, 10, 20, 60\}$ [37]

OpenFOAM — разрабатывается с 1989 г. (ранее как “FOAM”), лицензия GNU GPL v.3 (с 2004 г.), библиотека программ на C++, платформы Linux/Windows, поддерживает OpenMPI, основан на МКО, использует собственные решатели линейной алгебры.

Открытый пакет OpenFOAM (Open-source Field Operation And Manipulation) [38] предназначен для расчета обширного класса задач механики сплошной среды. В его разработке и развитии участвует большое количество организаций и разработчиков по всему миру, а его широкая функциональность позволяет эффективно его использовать для расчета промышленных задач. Описание и все ответвления OpenFOAM подробно обсуждаются на сайте [39].

Технология работы с OpenFOAM, новые классы для операций с полями скалярных, векторных и тензорных величин, а также заложенные в нем стандартные солверы подробно изложены, например, в публикациях [40–42], а актуальные примеры практических расчетов сложных задач и специализированных солверов даны в сборнике трудов [43].

В пакете OpenFOAM реализованы следующие стандартные 2D/3D солверы для расчета конвективного тепло и массообмена:

- стационарные/нестационарные несжимаемые/слабосжимаемые течения ньютоновских/неньютоновских жидкостей;
- однофазные и многофазные потоки;

- URANS (k-e, k-w, k-w SST, SA, v2f), LES (Dynamic, Smagorinsky SGS, WALE SGS) и DNS моделирование;
- лагранжева модель для расчета движения частиц;
- модели теплообмена (сопряженный/несопряженный), испарения и горения;
- различные теплофизические свойства среды, учет свойств реальных газов;
- модель динамики разреженного газа.

Конечно-объемные аппроксимации и алгоритмы расщепления, используемые в OpenFOAM:

- набор традиционных аппроксимаций для конвективных членов;
- стандартный набор аппроксимаций по времени 1-го и 2-го порядка;
- алгоритмы PISO/SIMPLE/PIMPLE в качестве схем расщепления.

Возможности используемых в OpenFOAM сеток и их генераторы:

- многогранные ячейки с поддержкой подвижных сеток;
- поддержка структурированных/неструктурированных сеток;
- есть внутренние генераторы сетки;
- импорт сетки из свободных (Gmsh, SALOME) и коммерческих (CFX, Nastran, STAR-CD) сеточных генераторов.

Форматы файлов ввода/вывода, используемых в OpenFOAM:

- разработан свой достаточно гибкий формат файлов ввода/вывода;
- для постобработки результатов рекомендуется ParaView, но возможна конвертация в форматы VTK, EnSight и др.

Существует много примеров связанных расчетов с использованием OpenFOAM и других пакетов СПО: Code_Aster для структурного анализа, Elmer для мультифизических расчетов и др.

Пример формулировки задачи: уравнение импульса для течения жидкости:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{U} \mathbf{U} - \nabla \cdot \mu \nabla \mathbf{U} = -\nabla p.$$

В OpenFOAM оно записывается в следующем виде:

```

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

```

Пример расчетов.

В работе [44] проведена кросс-верификация СПО OpenFOAM с коммерческим пакетом ANSYS FLUENT в 3D расчетах одного их вариантов

нестационарной задачи о разрушении дамбы (см. рис. 5), где наблюдается сложная волнообразная эволюция свободной поверхности потока.

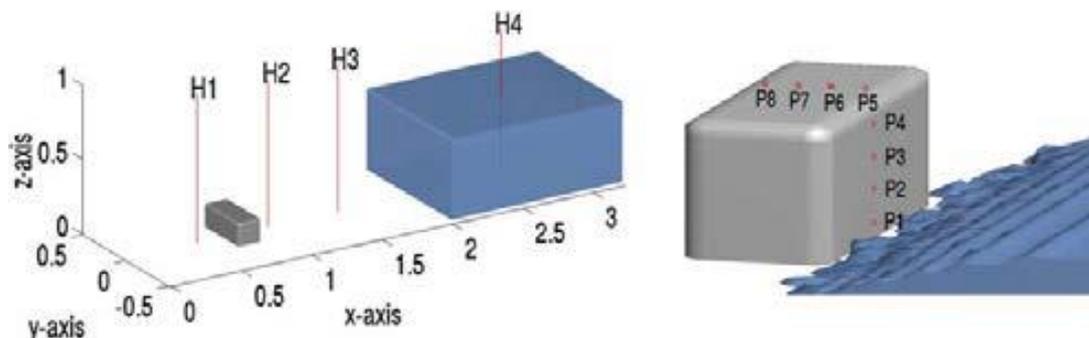
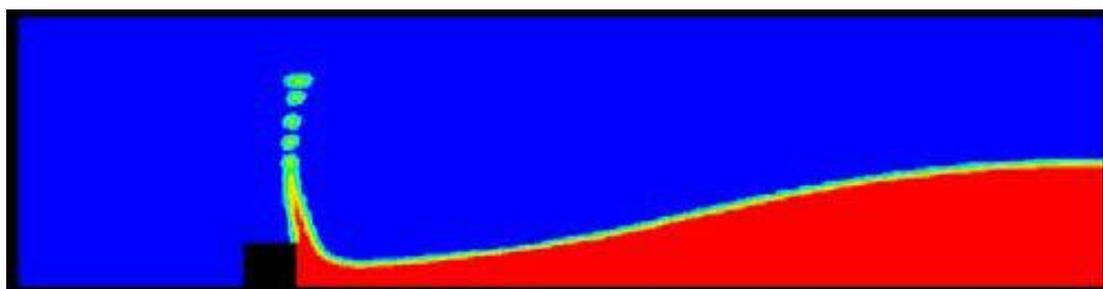
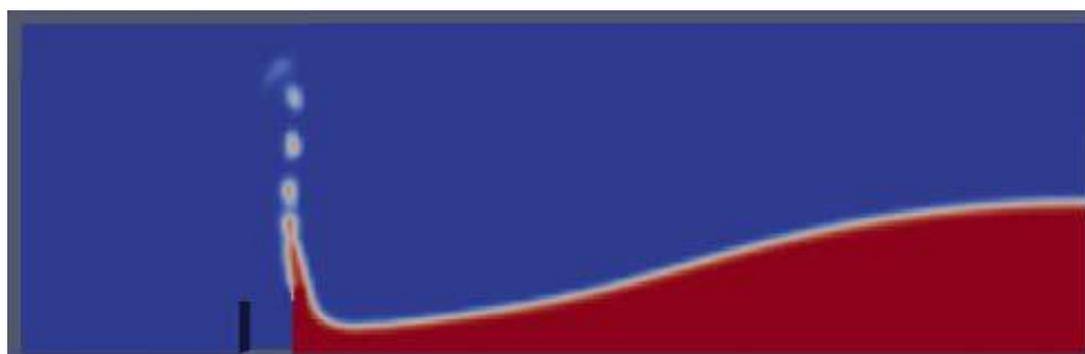


Рис. 5. Схема расчетной области в задаче о разрушении дамбы (вода – голубая, препятствие – серое) с указанием точек измерения [44]

На рис. 6 показаны для сравнения конфигурации свободной поверхности, рассчитанные двумя кодами на момент времени $t = 56$ сек после столкновения жидкости с твердым препятствием.



а) FLUENT



б) OpenFOAM

Рис. 6. Водяной объем на момент времени $t = 56$ сек.
Расчет [44] по а) FLUENT; б) OpenFOAM

Расчеты по обоим кодам дали очень близкие результаты, хорошо согласующиеся с измерениями.

SU^2 — разрабатывается с 2012 г., лицензия GNU LGPL v.2.1 (с 2012 г.), библиотека программ на C++ (использует Python для автоматизации), платформы Linux/Windows/MacOS, поддерживает MPI, основан на МКО и МКЭ, использует свои решатели и поддерживает интерфейсы к СПО решателей линейной алгебры BLAS и LAPACK.

Пакет SU^2 (Stanford University Unstructured) [45] предназначен для мультифизического анализа и оптимизационных расчетов, основанных на решении 2D/3D уравнений в частных производных. Он ориентирован на вычислительную гидродинамику и оптимизацию аэродинамических профилей, но с успехом применяется для решения задач потенциальных течений, электродинамики, химически реагирующих течений и т.д.

Пакет SU^2 состоит из набора модулей, позволяющих эффективно решать разноплановые задачи, описываемые уравнениями математической физики. Некоторые из них могут использоваться индивидуально, а другие применяются в связанных (например, в оптимизационных) расчетах или при использовании адаптивных сгущающихся сеток. Используя возможности объектно-ориентированного программирования языка C++, пакет SU^2 является идеальной платформой для быстрой реализации новых численных алгоритмов и новых систем уравнений, создания адаптивных сеток и др. Он включает в себя следующие основные компоненты:

- $SU2_CFD$ (Computational Fluid Dynamics) – решает прямые, сопряженные и линеаризованные задачи для потенциальных течений, уравнений Эйлера, Навье-Стокса и RANS с использованием аппроксимаций на ребрах;
- $SU2_DEF$ (mesh DEFormation) – вычисляет геометрические деформации поверхностей и прилегающих сеток;
- $SU2_DOT$ (gradient projection) – рассчитывает частные производные функционалов по вариациям на аэродинамических поверхностях для задач оптимизации;
- $SU2_GEO$ (GEOmetry definition) – вычисляет геометрические параметры;
- $SU2_MSH$ (MeSH adaptation) – реализует адаптацию сетки на основе полученного решения и других стратегий;
- $SU2_SOL$ (SOLution export) – формирует файлы решения в заданном формате.

В пакете SU^2 реализованы следующие стандартные 2D/3D солверы для расчета конвективного тепло и массообмена:

- стационарные/нестационарные вязкие/невязкие несжимаемые/сжимаемые течения жидкостей и газов (включая неидеальных);
- метод искусственной сжимаемости позволяет моделировать течения с малыми числами Маха;
- RANS (k-w SST, SA и др.) модели;
- реализован произвольный лагранжев-эйлеров метод ALE;

- различные модели теплообмена;
- инструменты для анализа чувствительности и неопределенности для задач оптимизации.

Набор аппроксимаций и алгоритмы расщепления, используемые в SU²:

- широкий набор аппроксимаций (схемы AUSM, Lax-Friedrich, Steger-Warming, Roe и др.);
- стандартный набор явных/неявных аппроксимаций по времени.

Особенности используемых в SU² сеток и их генераторы:

- поддержка структурированных/неструктурированных сеток;
- по входной сетке строятся контрольные объемы вокруг ее узлов (дуальная сетка для построения аппроксимаций);
- входная сетка задается в своем специальном формате;
- импорт сетки из свободных (Gmsh, CGNS формат) и коммерческих (Centaur, Pointwise) сеточных генераторов.

Форматы файлов ввода/вывода, используемых в SU²:

- используется свой формат файлов ввода;
- для постобработки результатов можно использовать ParaView, Tecplot и др.

Пример расчетов.

Пакет SU² успешно интегрируется с другими кодами для проведения связанных мультифизических расчетов. В работе [46] проведены валидационные расчеты целого ряда FSI-проблем с взаимодействием жидкость–твердое тело, в которых течения жидкости рассчитывались с помощью SU². В частности, рассчитывался тест об обтекании гибкой пластины. На рис. 7 показано рассчитанное стационарное решение этой задачи в виде линий тока, раскрашенных по величине модуля скорости.

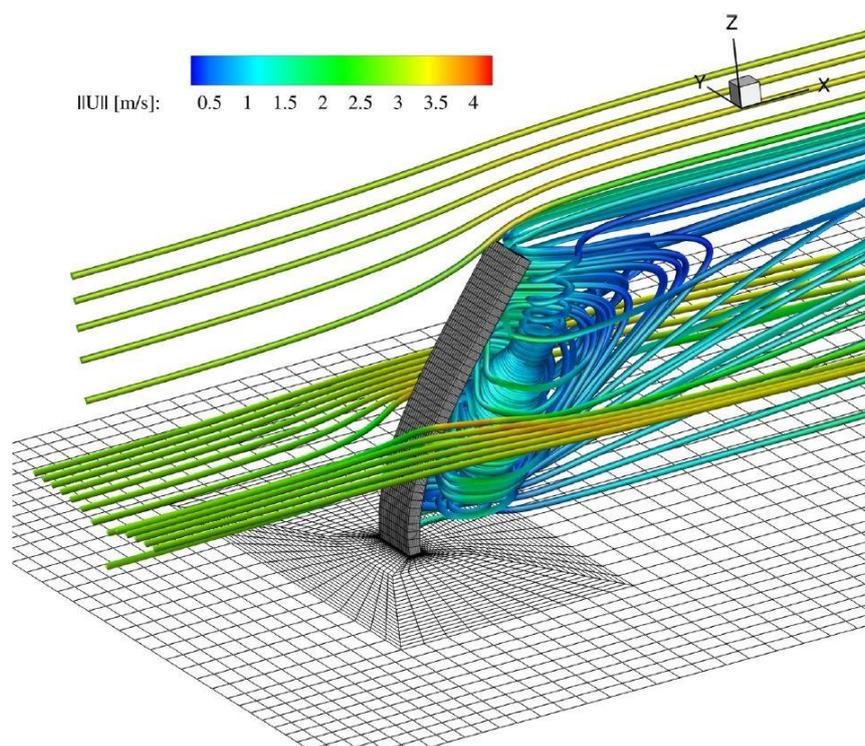


Рис. 7. Линии тока, раскрашенные по величине модуля скорости [46]

Эти расчеты показали высокую точность полученных с помощью SU² результатов даже в таких сложных мультифизических задачах.

Заключение

В работе дан краткий обзор свободного ПО для математического моделирования. Рассмотрены все компоненты для создания интегрированного окружения, необходимого для математического моделирования процессов механики сплошных сред и других расчетов прикладных инженерных задач: препроцессоры для создания геометрии и построения сеток, постпроцессоры для обработки результатов и их визуализации и, самое главное, инструментарий для решения дифференциальных уравнений, входящих в базовые модели механики сплошных сред.

Для правильного понимания правил и возможностей использования СПО дано краткое описание концепции СПО и основных типов лицензий, определяющих правила его использования.

Разумеется, приведенный в работе список СПО является неполным и, более того, содержит лишь ключевую информацию, необходимую для потенциального пользователя, иногда устаревшую или не совсем точную. Выбор всегда остается за пользователем и определяется как особенностями стоящих перед ним задач (обучение, создание специализированного ПО для своих нужд, решение сложных прикладных задач и т.д.), так и уровнем компетентности самого пользователя в области численных методов и программирования.

Список литературы

1. Haff G. How Open Source Ate Software: Understand the Open Source Movement and So Much More. Apress, CA, 2018.
2. Babur O., Verhoeff T., van den Brand M.G.J. Multiphysics and multiscale software frameworks: an annotated bibliography. Computer Science Reports, Vol. 1501. University of Technology, Eindhoven, 2015.
3. Program and Abstracts of SIAM Conference on Computational Science and Engineering, Feb. 25 – March 1, 2019, Spokane, Washington, US.
4. Velten K. Mathematical Modeling and Simulation: Introduction for Scientists and Engineers. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, Germany, 2009.
5. Koranne S. Handbook of Open Source Tools. Springer Science + Business Media, New York, NY, 2011.
6. Thakore D. Intermediate Finite Element Analysis with Open Source Software. Moonish Enterprises Pty Ltd, Brisbane, Australia, 2014.
7. ИМИ СВФУ им. М.К. Аммосова [Электронный ресурс]. URL: <https://www.s-vfu.ru/universitet/rukovodstvo-i-struktura/instituty/imi/nauchnaya-rabota/> (дата обращения: 19.12.19).
8. Computational Technologies: A First Course (Vabishchevich P.N. ed.). Walter de Gruyter, Berlin, 2015.
9. Computational Technologies: Advanced Topics (Vabishchevich P.N. ed.). Walter de Gruyter, Berlin, 2015.
10. Handbook of Software Solutions for ICME (Schmitz G.J., Prah U. eds.). WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, Germany, 2017.
11. Web-лаборатория UniCFD [Электронный ресурс]. URL: <https://unicfd.ru/> (дата обращения: 19.12.19).
12. CAELinux 2018 is released! [Электронный ресурс]. URL: <https://www.caelinux.com/CMS3/index.php/articles/70-/59-caelinux-2018-is-released> (дата обращения: 19.12.19).
13. Free Software Foundation [Электронный ресурс]. URL: <https://www.fsf.org/> (дата обращения: 19.12.19).
14. Операционная система GNU [Электронный ресурс]. URL: <http://www.gnu.org/> (дата обращения: 19.12.19).
15. Licenses by Name: 3/2/0-clause BSD licenses [Электронный ресурс]. URL: <https://opensource.org/licenses/alphabetical> (дата обращения: 19.12.19).
16. The MIT License [Электронный ресурс]. URL: <https://opensource.org/licenses/MIT> (дата обращения: 19.12.19).
17. Gmsh [Электронный ресурс]. URL: <http://gmsh.info/> (дата обращения: 19.12.19).
18. Netgen/NGSolve [Электронный ресурс]. URL: <https://ngsolve.org/> (дата обращения: 19.12.19).
19. ParaView [Электронный ресурс]. URL: <https://www.paraview.org/> (дата обращения: 19.12.19).

20. VisIt: An Organization for VisIt Software Development [Электронный ресурс]. URL: <https://github.com/visit-dav> (дата обращения: 19.12.19).
21. VTK [Электронный ресурс]. URL: <https://vtk.org/> (дата обращения: 19.12.19).
22. The Visualization Handbook (Hansen C.D., Johnson C.R. eds.). Elsevier Butterworth-Heinemann, Burlington, MA, 2005.
23. Fowler M. Domain-Specific Languages. Addison-Wesley Professional, Boston, MA, 2010.
24. Code_Saturne [Электронный ресурс]. URL: <https://www.code-saturne.org/cms/> (дата обращения: 19.12.19).
25. Fournier Y., Vurpillot C., Bechaud C. Evaluation of fluid flow in the lower core of a PWR with Code_Saturne // Nuclear Engineering and Design 237 (2007) 1729-1744.
26. Elmer FEM: open source multiphysical software [Электронный ресурс]. URL: <http://www.elmerfem.org/blog/> (дата обращения: 19.12.19).
27. Ponomarev P. Elmer FEM Induction Machine Tutorial. Research Report VTT-R-02819-17, Espoo, Finland, 2017.
28. Feel++: A powerful, scalable and expressive Finite Element Embedded Library in C++ [Электронный ресурс]. URL: <http://www.feelpp.org/> (дата обращения: 19.12.19).
29. Caldini-Queiros C., Chabannes V., Ismail M. et al. Towards large-scale three-dimensional blood flow simulations in realistic geometries // ESAIM: PROCEEDINGS 43 (2013) 195-212.
30. FEniCS Project [Электронный ресурс]. URL: <https://fenicsproject.org/> (дата обращения: 19.12.19).
31. Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method: the FEniCS Book (Logg A., Mardal K.-A., Wells G.N. eds.). Springer-Verlag, Berlin, 2012.
32. Langtangen H.P., Logg A. Solving PDEs in Python: The FEniCS Tutorial Vol. I. Springer Open, 2016.
33. Mardal K.-A., Langtangen H.P. Combining FEniCS with Your Favorite Software in C, C++, Fortran, or MATLAB. 2013.
34. Churbanov A.G., Iliev O., Strizhov V.F., Vabishchevich P.N. Numerical simulation of oxidation processes in a cross-flow around tube bundles // Applied Mathematical Modelling 59 (2018) 251-271.
35. FreeFEM++: A high level multiphysics finite element software [Электронный ресурс]. URL: <https://freefem.org/> (дата обращения: 19.12.19).
36. Жуков М.Ю., Ширяева Е.В. Использование пакета конечных элементов FreeFem++ для задач гидродинамики, электрофореза и биологии. Ростов на Дону, Изд-во ЮФУ, 2008.
37. Sadaka G. Solution of 2D Boussinesq systems with FreeFem++: the flat bottom case // Journal of Numerical Mathematics 20 (2012) 303-324.

38. OpenFOAM: The open source CFD toolbox [Электронный ресурс]. URL: <https://www.openfoam.com/> (дата обращения: 19.12.19).
39. Unofficial OpenFOAM wiki [Электронный ресурс]. URL: http://openfoamwiki.net/index.php/Main_Page (дата обращения: 19.12.19).
40. Maric T., Hopken J., Mooney K. The OpenFOAM Technology Primer. www.sourceflux.de, 2014.
41. Moukalled F., Mangani L., Darwish M. The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics: An Advanced Introduction with OpenFOAM and Matlab. Springer International Publishing Switzerland, Cham, Switzerland, 2016.
42. Holzmann T. Mathematics, Numerics, Derivations and OpenFOAM: The Basics for Numerical Simulations [Электронный ресурс]. URL: <https://holzmann-cfd.de/> (дата обращения: 19.12.19).
43. OpenFOAM: Selected Papers of the 11th Workshop (Nobrega J.M., Jasak H. eds.). Springer Nature Switzerland AG, Cham, Switzerland, 2019.
44. Churbanov A. Prediction of free surface flows relevant to PTS problems // WSEAS Transactions on Fluid Mechanics 10 (2015) 117-125.
45. SU2 code [Электронный ресурс]. URL: <https://su2code.github.io/> (дата обращения: 19.12.19).
46. Thomas D., Cerquaglia M.L., Boman R. et al. CUPyDO - An integrated Python environment for coupled fluid-structure simulations // Advances in Engineering Software 128 (2019) 69-85.