

Home Page

Title Page



Page 1 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

Linux jako platforma obliczeń naukowych

Przegląd oprogramowania

Roman Putanowicz
R.Putanowicz@L5.pk.edu.pl



Copyright (CC-BY) 2009 Roman Putanowicz

16.10.2010

Wstęp

Dlaczego taki wykład?

- Warto wiedzieć o różnych alternatywnych narzędziach i sposobach pracy.
- Najsilniejszy obecnie komputer na PK (WFiMK) pracuje pod kontrolą systemu Linux
- Można pracować naukowo korzystając jedynie z Linux'a.

Gustibus non disputandum est

Celem wykładu nie jest porównywanie czy przekonywanie o wyższości jednych narzędzi nad innymi (w szczególności Linux kontra MS Windows), lecz prezentacja wybranych elementów warsztatu naukowego.

Komputerowy warsztat naukowca

Hipotetyczny naukowiec : badania w zakresie obliczeniowej mechaniki materiałów i konstrukcji

Desktop	Pre- i post-procesing MES
Środowisko obliczeń numerycznych	Pakiety MES
Środowisko obliczeń symbolicznych	Wizualizacja informacji
Aplikacje CAD	Oprogramowanie specjalne
Generacja siatek	Narzędzia dla programistów

Home Page

Title Page



Page *4* of *128*

Go Back

Full Screen

Close

Quit

Desktop

- L^AT_EX
- Kile
- Xfig
- OpenOffice

LaTeX

- Donald Knuth o T_EX'u: "intended for the creation of beautiful books - and especially for books that contain a lot of mathematics"
- L_AT_EX a Word: <http://www.andy-roberts.net/misc/latex/latexvsword.html>
- MiKTeX dla systemów MS Windows <http://miktex.org>

Kile

Home Page

Title Page

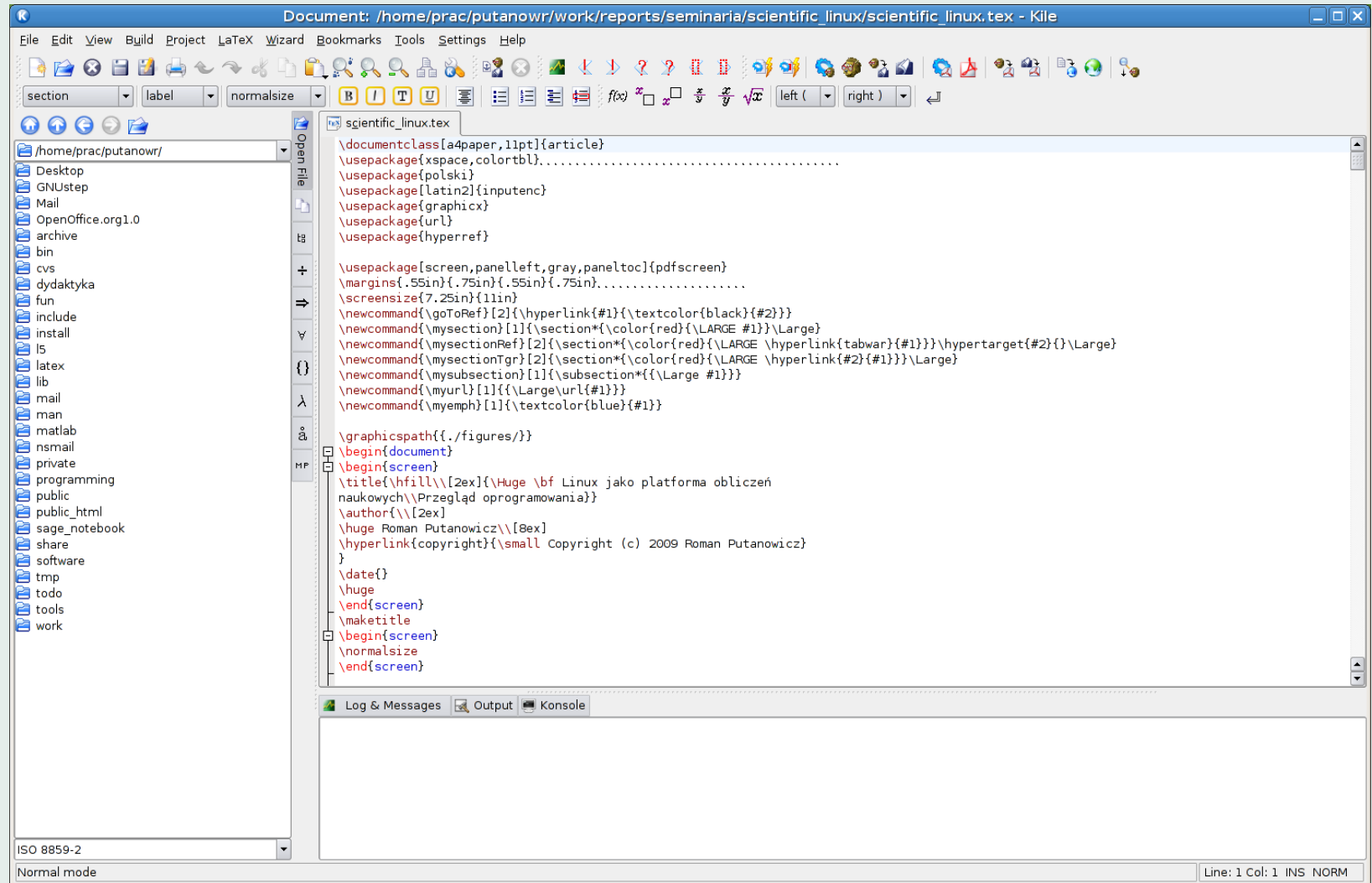
Page 6 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit



Line: 1 Col: 1 INS NORM

Xfig

Home Page

Title Page

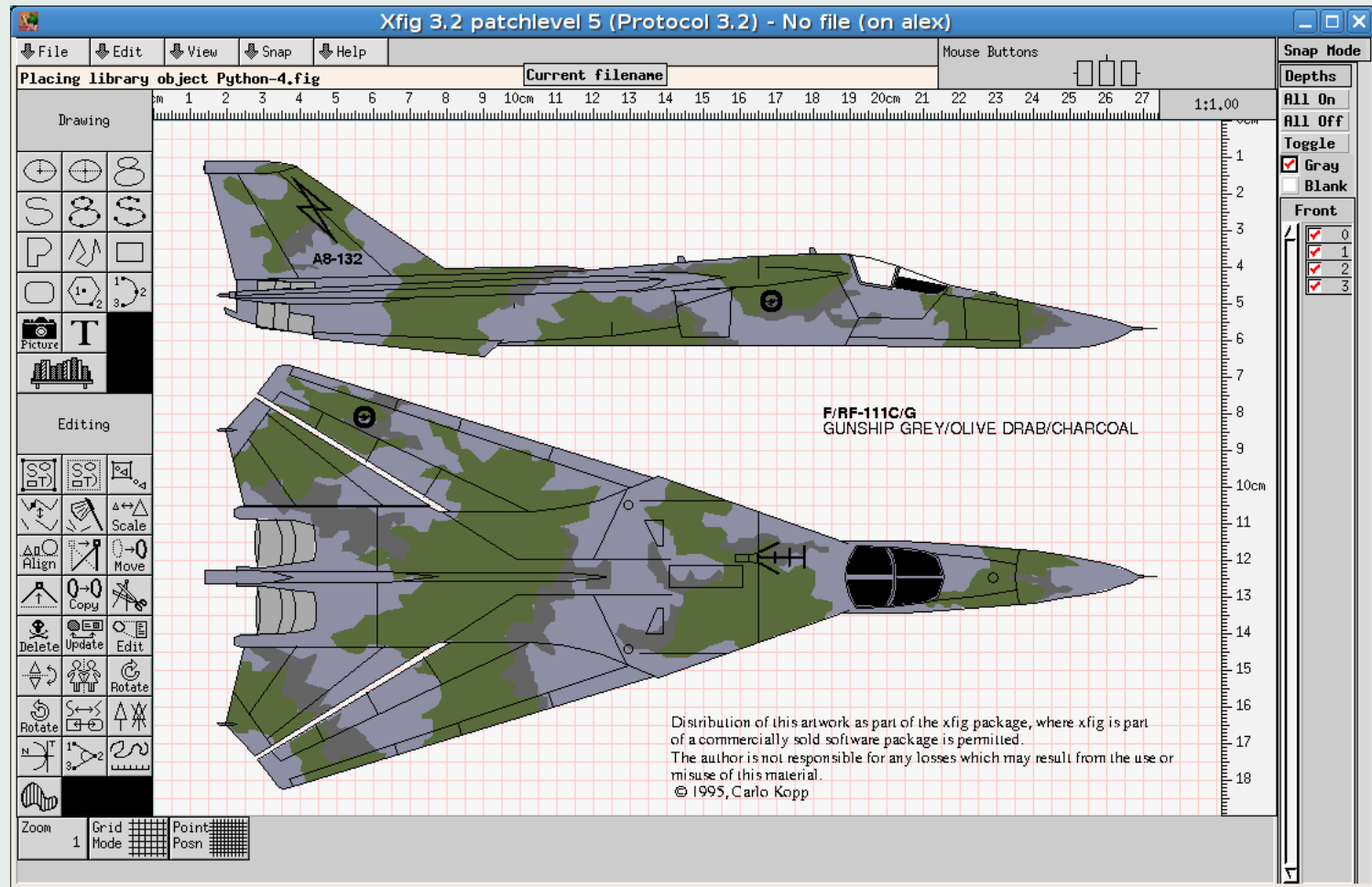
Page 7 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit



Xfig

- <http://www.xfig.org/>
- Nowe możliwości w wersji 3.2.5b2: opcje Snap: "łapanie punktów", m.in. styczna normalna, punkt środkowy, itp; narzędzie Chop – obcinanie obiektów, narzędzie Tangent – rysowanie stycznych i normalnych do krzywych, siatki sześciokątne, nowe typy strzałek
- W miarę przejrzysty kod źródłowy – język C, X Lib
- Możliwość przetwarzania dokumentów XFig'a w Pythonie : Pakiet fig.py Hansa Meine <http://kogs-www.informatik.uni-hamburg.de/~meine/software/figpy/>
- Możliwość rysowania za pomocą skryptów w Pythonie – projekt w trakcie realizacji

Home Page

Title Page

◀

▶

◀

▶

Page 9 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

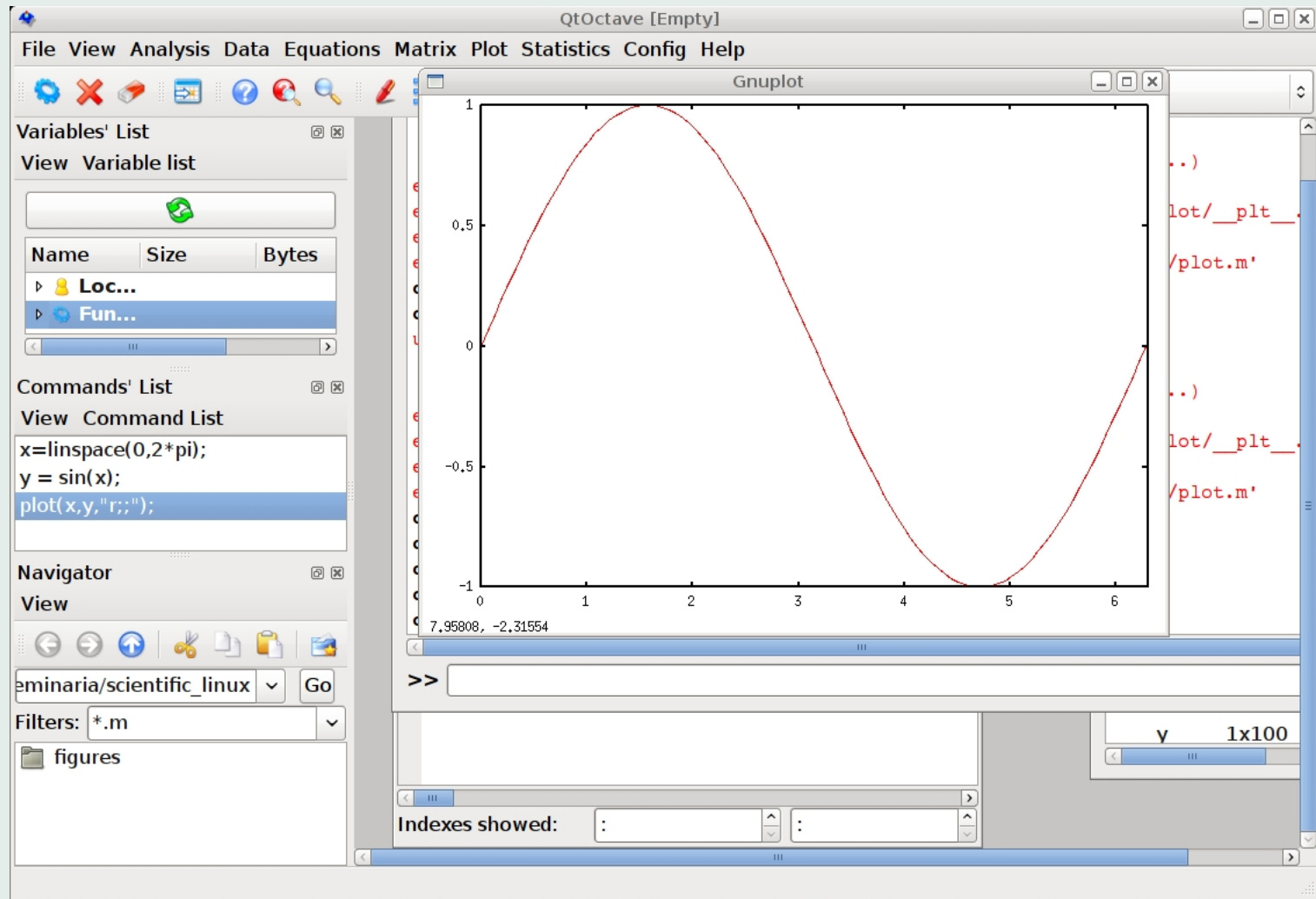
Środowisko obliczeń numerycznych

- Octave
- Sage –Mission: Creating a viable free open source alternative to Magma, Maple, Mathematica and Matlab.
- Scilab

Octave

- <http://www.gnu.org/software/octave/>
- Nowa Octave wersja 3
- Toolbox'y – Octave Forge: obliczenia symboliczne (via GiNAC), i inne
- Graficzny interfejs: qt octave
- Grafika 3D: Octaviz – interfejs do biblioteki VTK
- Kompilator SWIG dla Octave

qt octave = Qt + Octave



Scilab

Home Page

Title Page



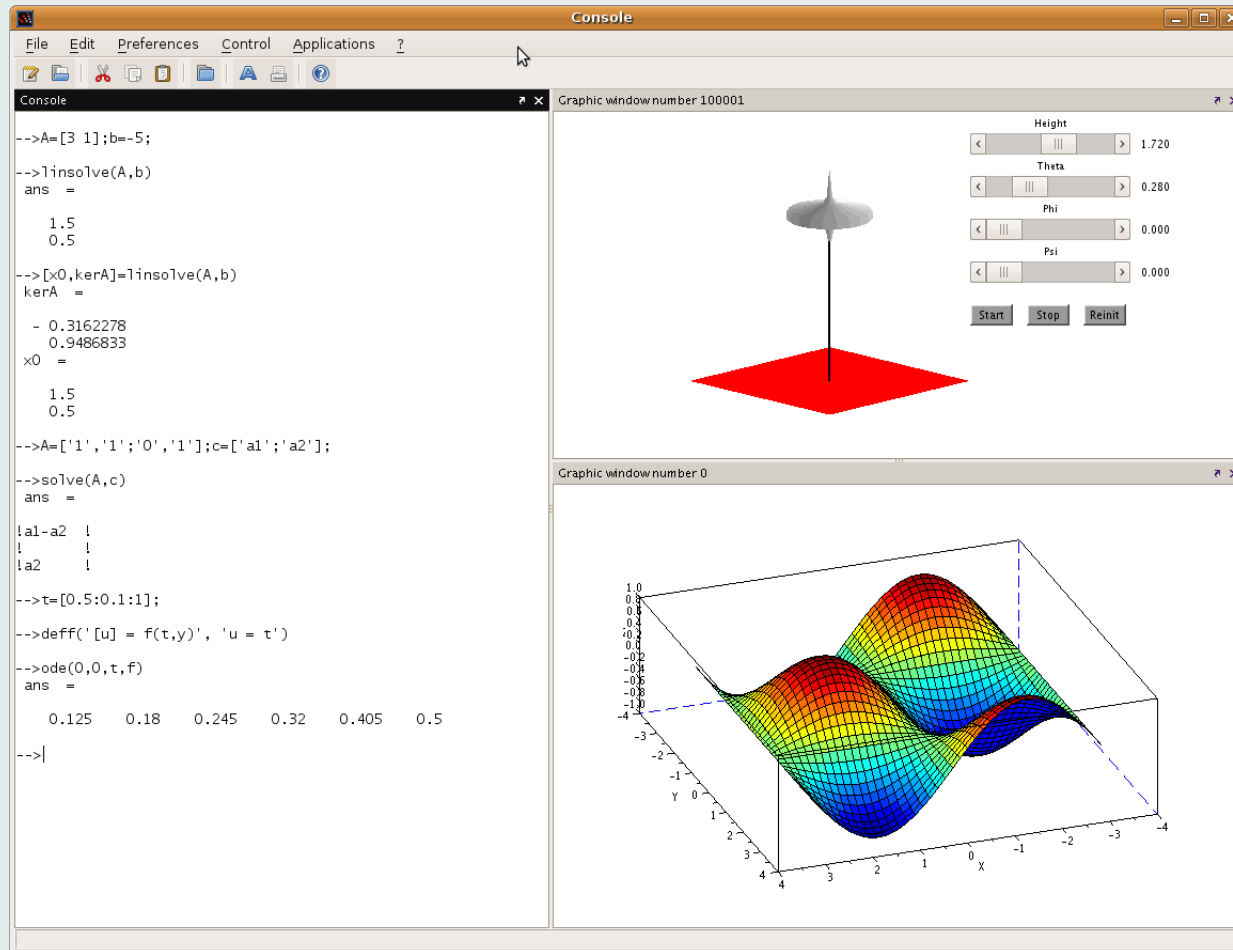
Page 12 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit



Home Page

Title Page



Page 13 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

Środowisko obliczeń symbolicznych

- Maxima
- Sage

Maxima

- różniczkowanie i całkowanie symboliczne
- symboliczne rozwiązywanie równań, w tym różniczkowych
- upraszczanie wyrażeń algebraicznych
- operacje na macierzach
- wykresy 2D i 3D (wykorzystuje Gnuplot)
- dowolna precyzja obliczeń
- definiowanie własnych funkcji przez użytkownika
- możliwość programowania w Lispie
- eksport wyników w formacie TeX

Home Page

Title Page

◀◀

▶▶

◀

▶

Page 14 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

wxMaxima = wx + Maxima

Home Page

Title Page

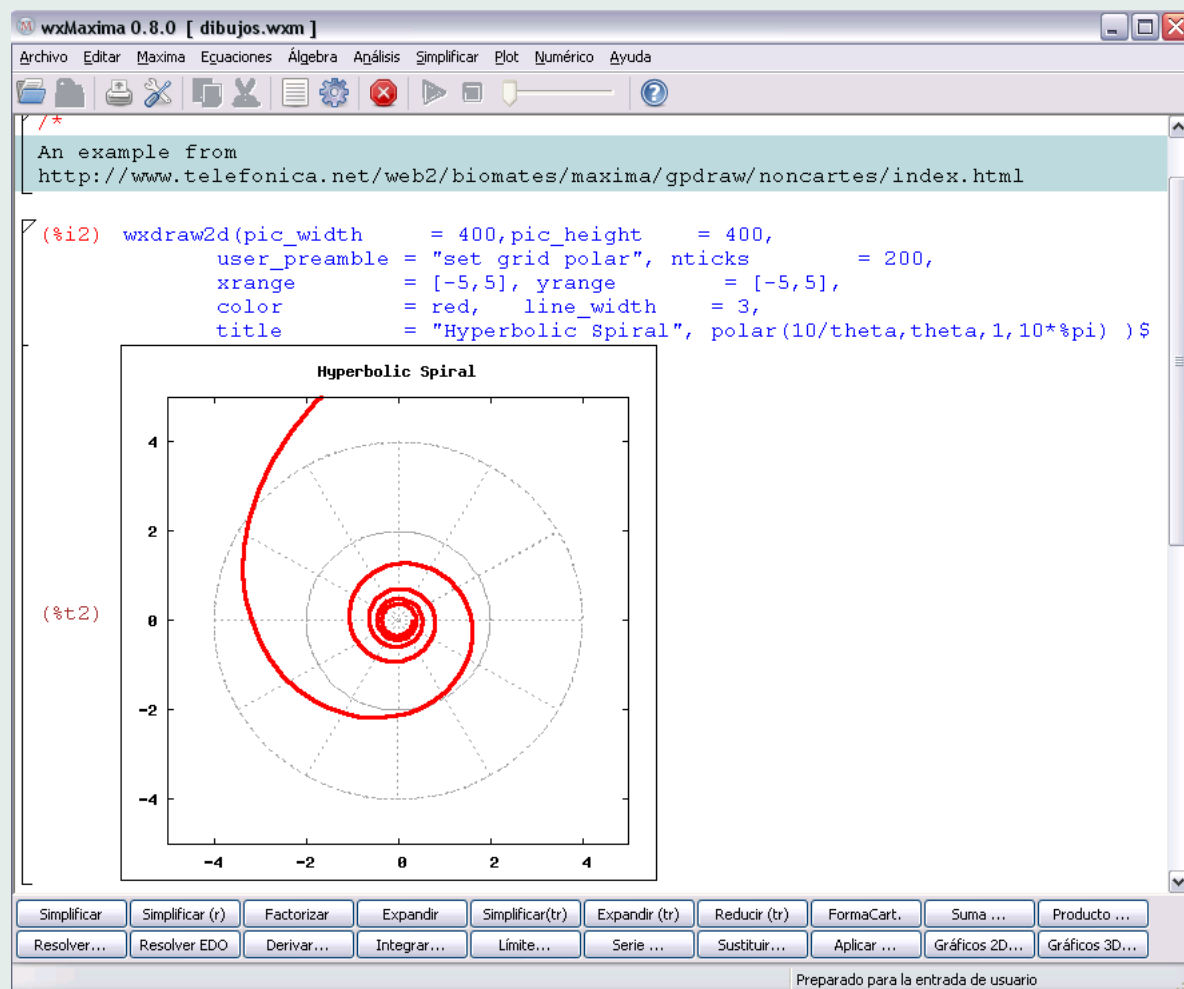
Page 15 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit



Home Page

Title Page

◀◀

▶▶

◀

▶

Page 16 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

Sage

Sage udostępnia:

- Maxima
- GAP
- Pynac: Python + GiNaC
- Sympy: obliczenia symboliczne w Pythonie

Home Page

Title Page



Page 17 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

Aplikacje CAD

- QCAD
- BRL-CAD
- Wings3D

QCAD

Home Page

Title Page

◀

▶

◀

▶

Page 18 of 128

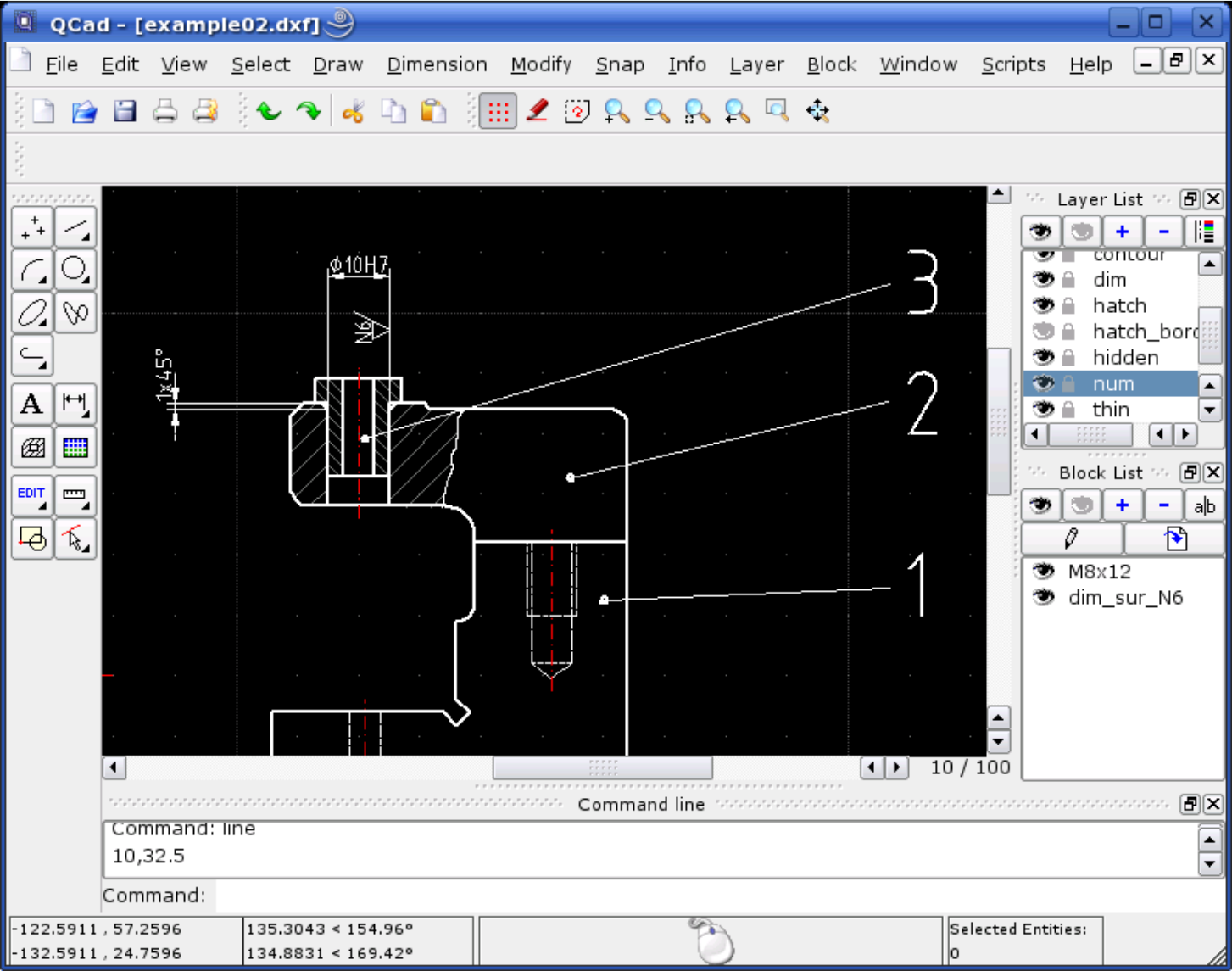
Go Back

Full Screen

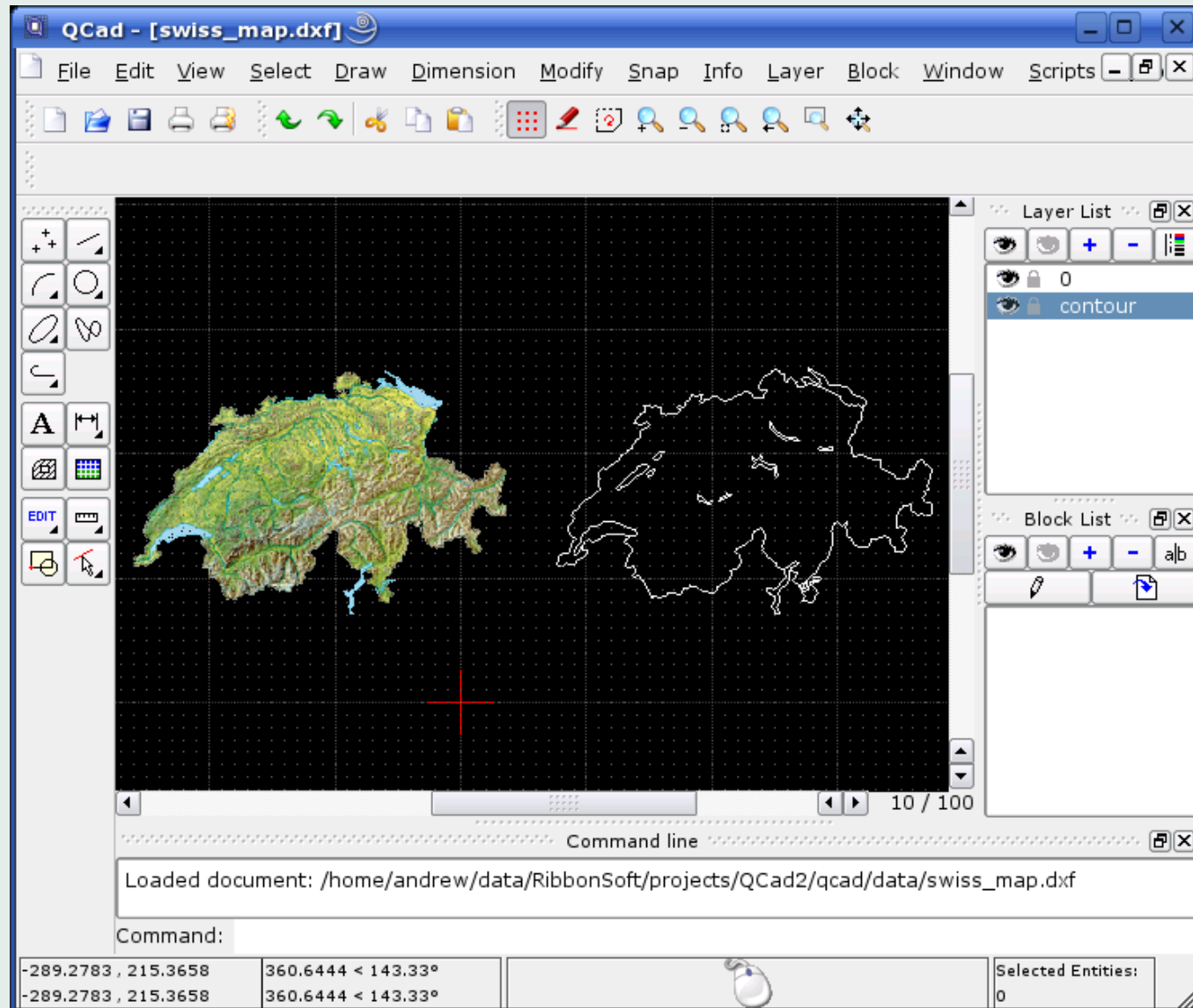
Close

Quit

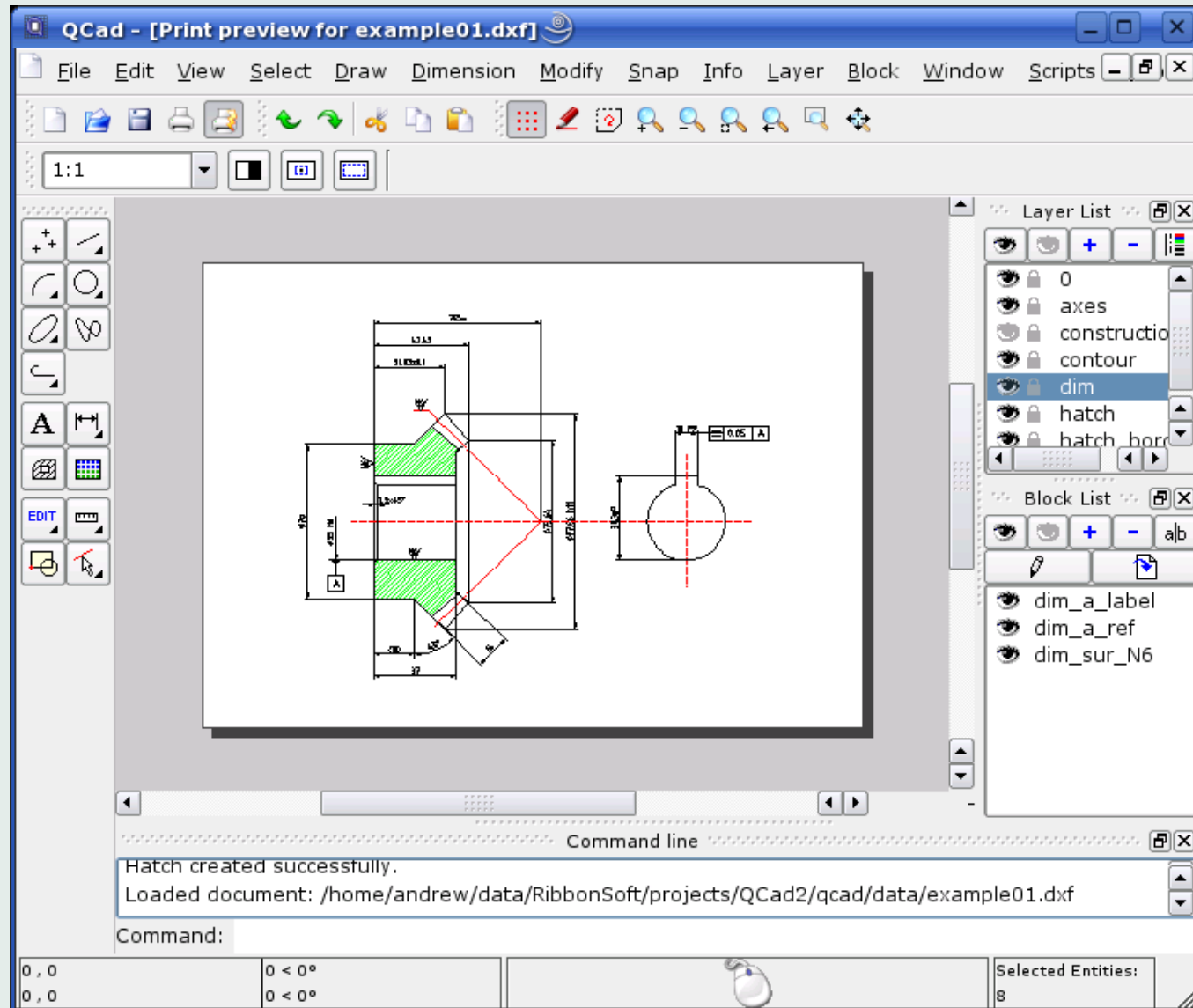
- <http://www.ribbonsoft.com/qcad.html>
- Windows, Mac OS X, różne dystrybucje Linux'a i wersje UNIX'a.
- "Community Edition" – darmowa, GPL
- "QCAD Professional" – 24 Euro (Special Offer 44 Euro - książka + CD)
- "QCAD Professional libraries" – 500 Euro
- Spolszczona wersja i wsparcie techniczne – <http://www.openoffice.com.pl/> (175 PLN).



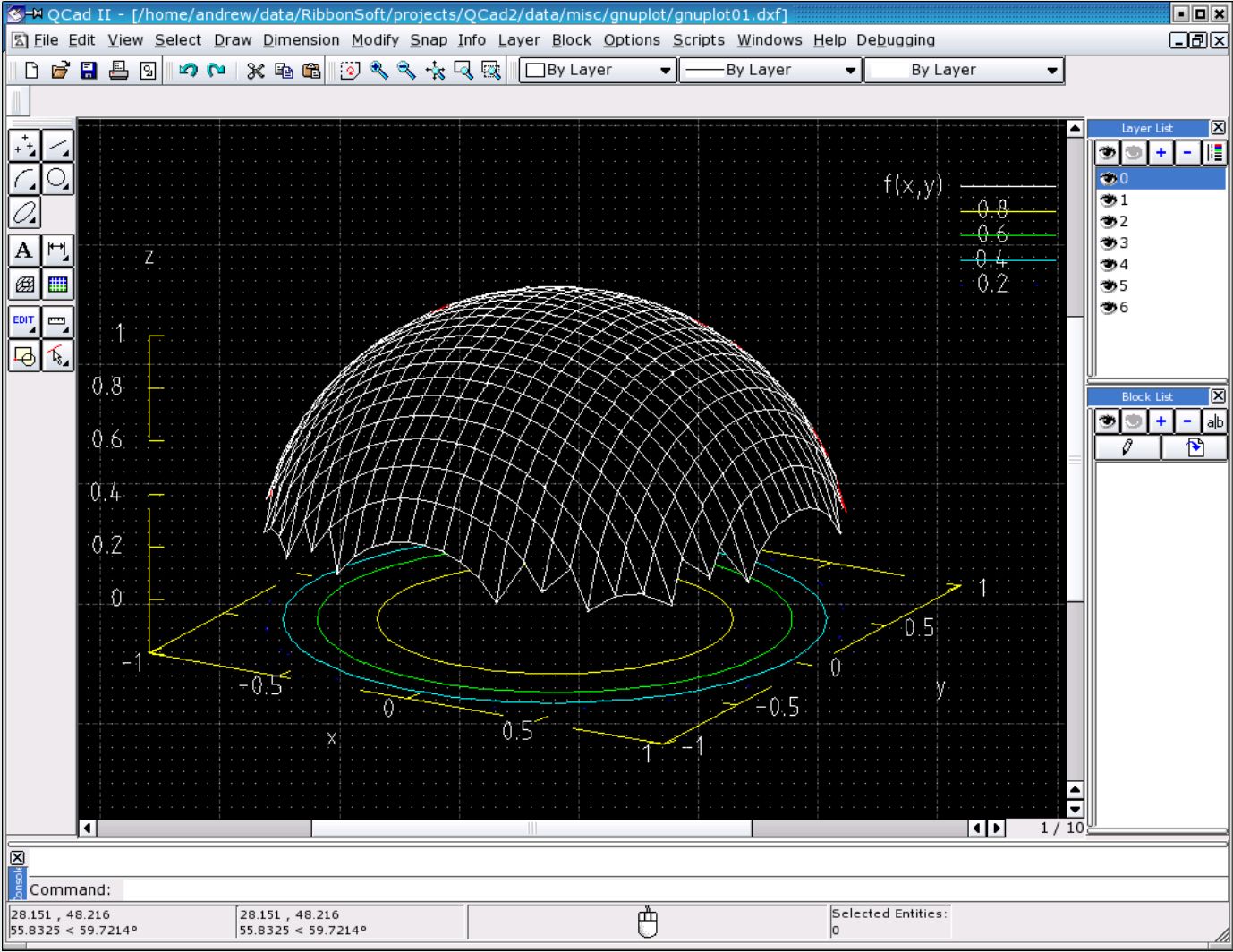
QCAD



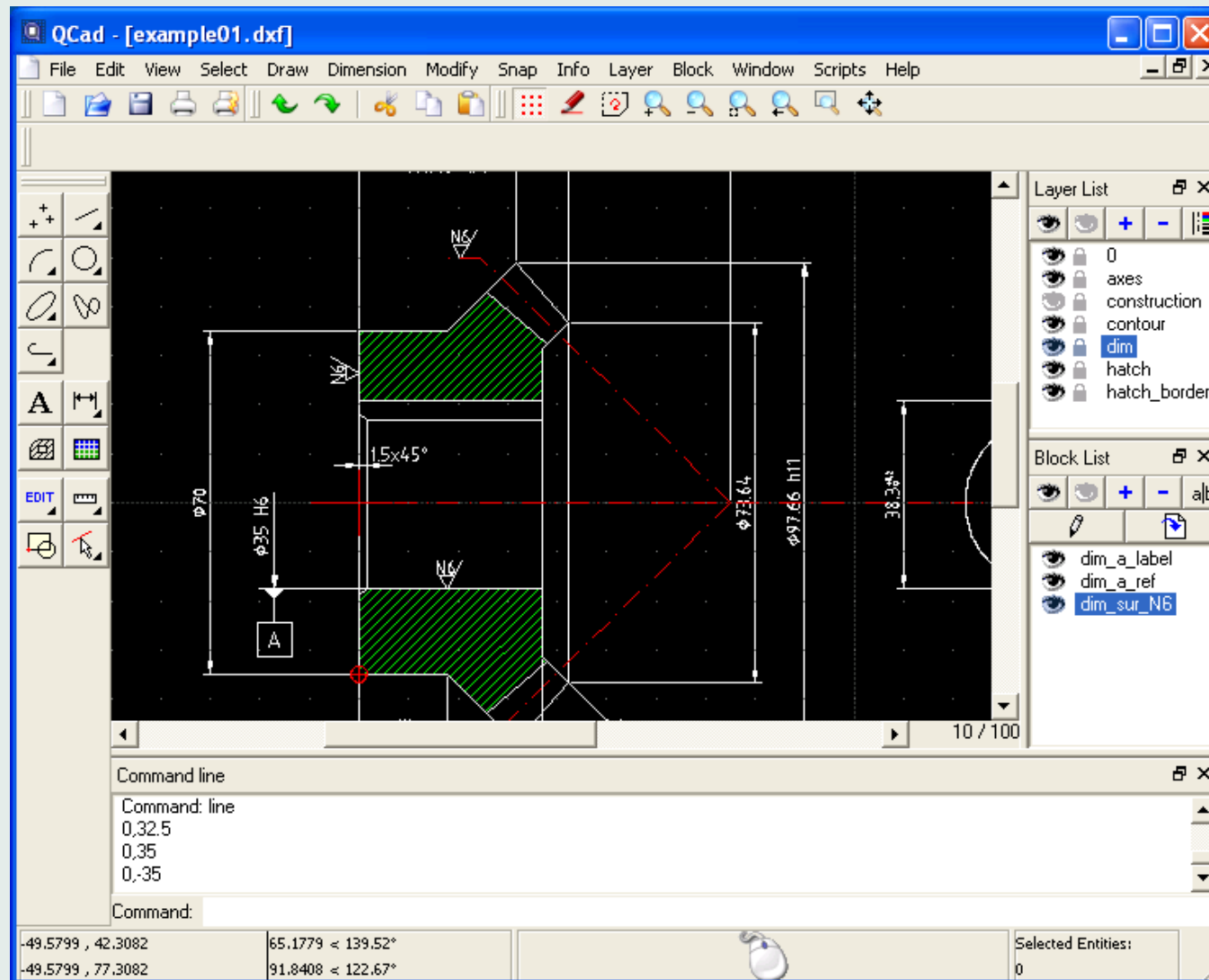
QCAD



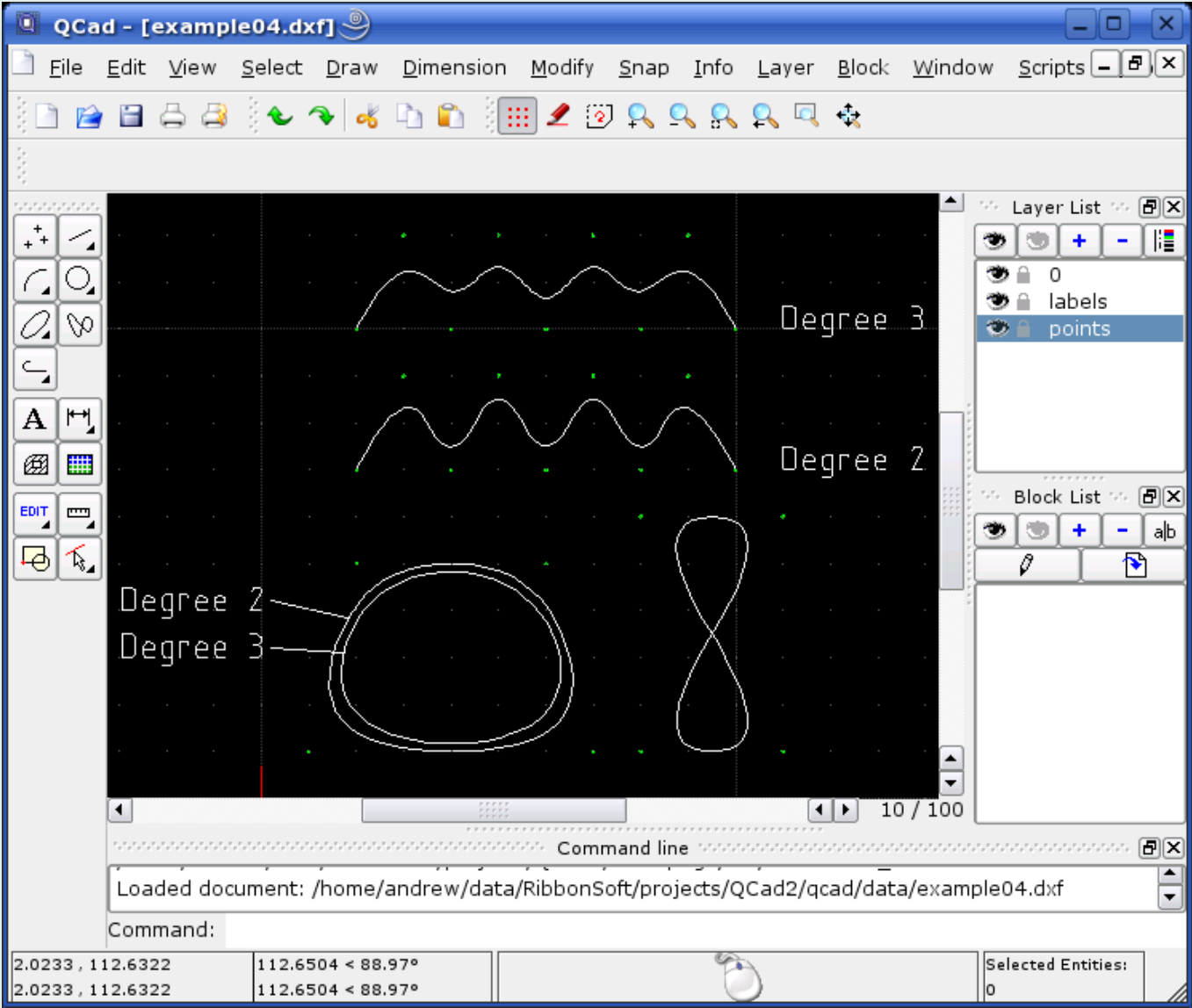
QCAD



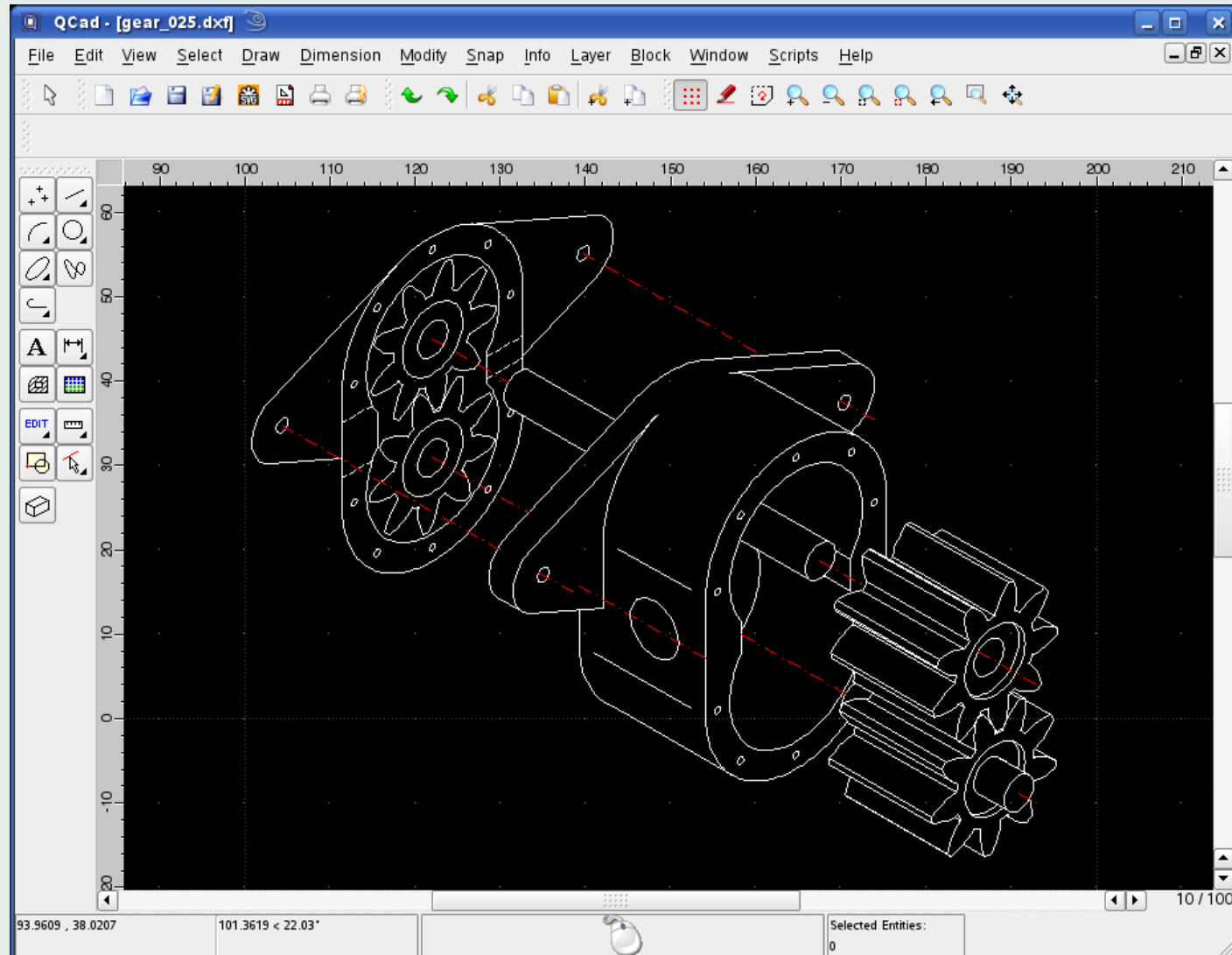
QCAD



QCAD



QCAD



Home Page

Title Page

Page 25 of 128

Go Back

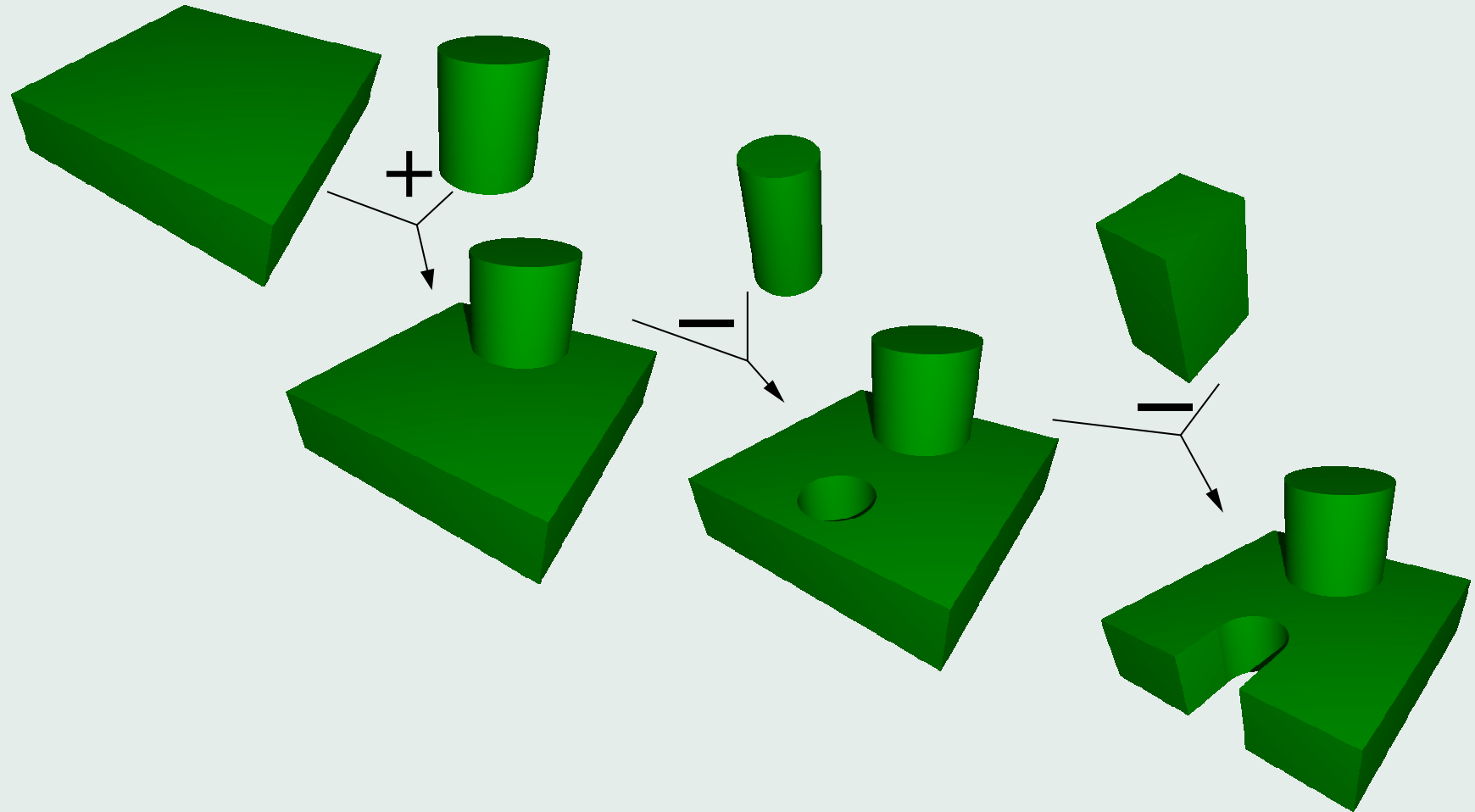
Full Screen

Close

Quit

Idea modelowania CSG

CSG – Constructive Solid Geometry



Home Page

Title Page

◀

▶

◀

▶

Page 26 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

Home Page

Title Page

◀◀

▶▶

◀

▶

Page 27 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

BRL-CAD

- <http://brlcad.org/>
- Ponad 400 narzędzi do modelowania geometrycznego. Kilka milionów linii kodu
- BRL – Ballistic Research Laboratory

BRL-CAD – mged GUI

Home Page

Title Page



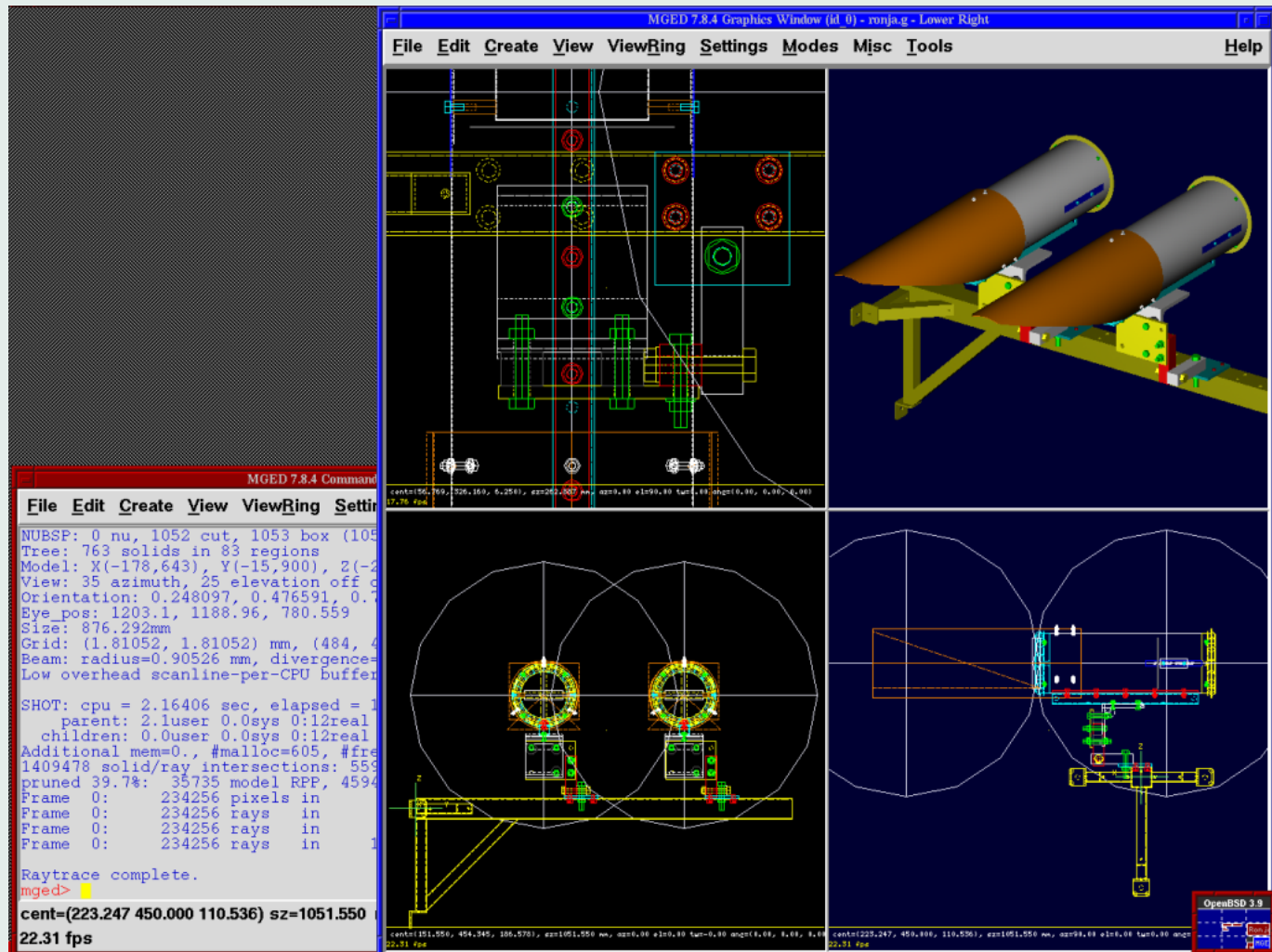
Page 28 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit



Home Page

Title Page

Page 29 of 128

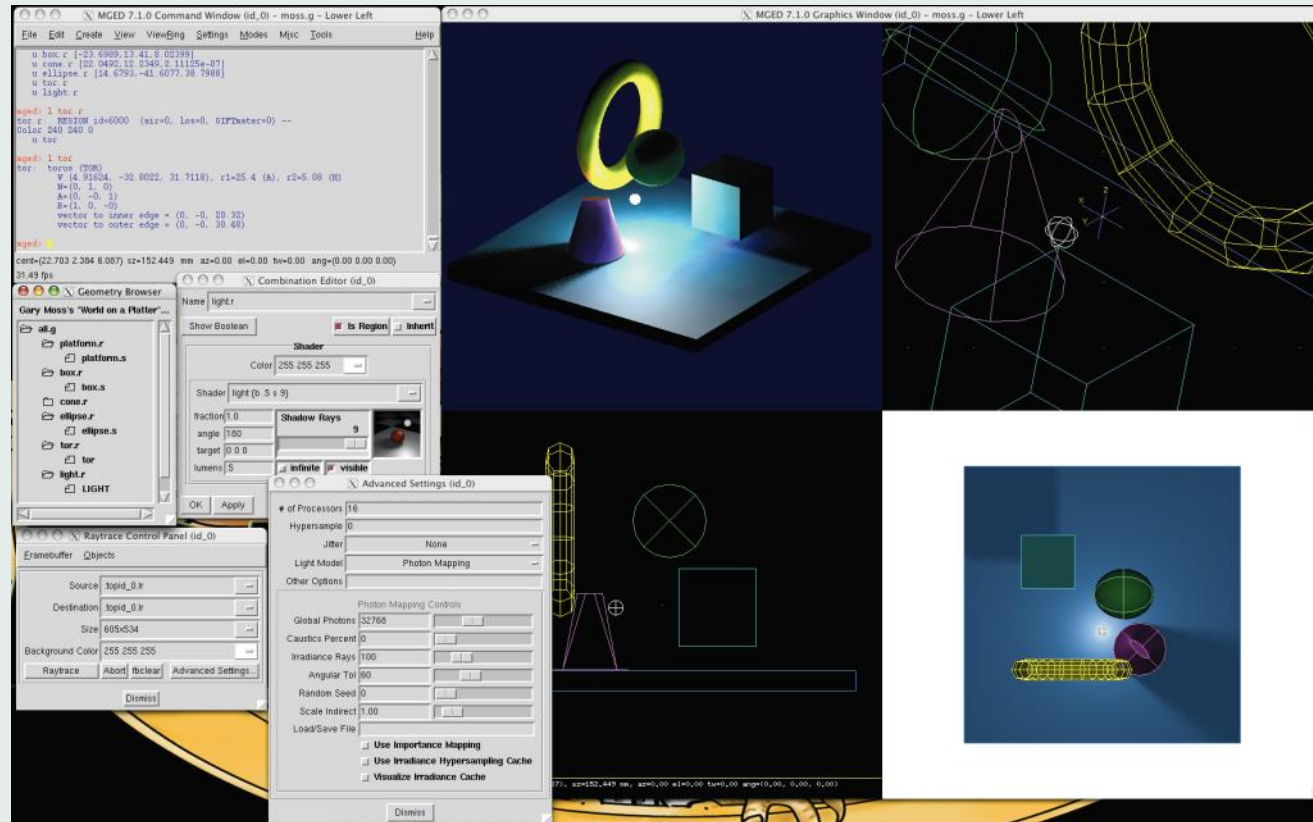
Go Back

Full Screen

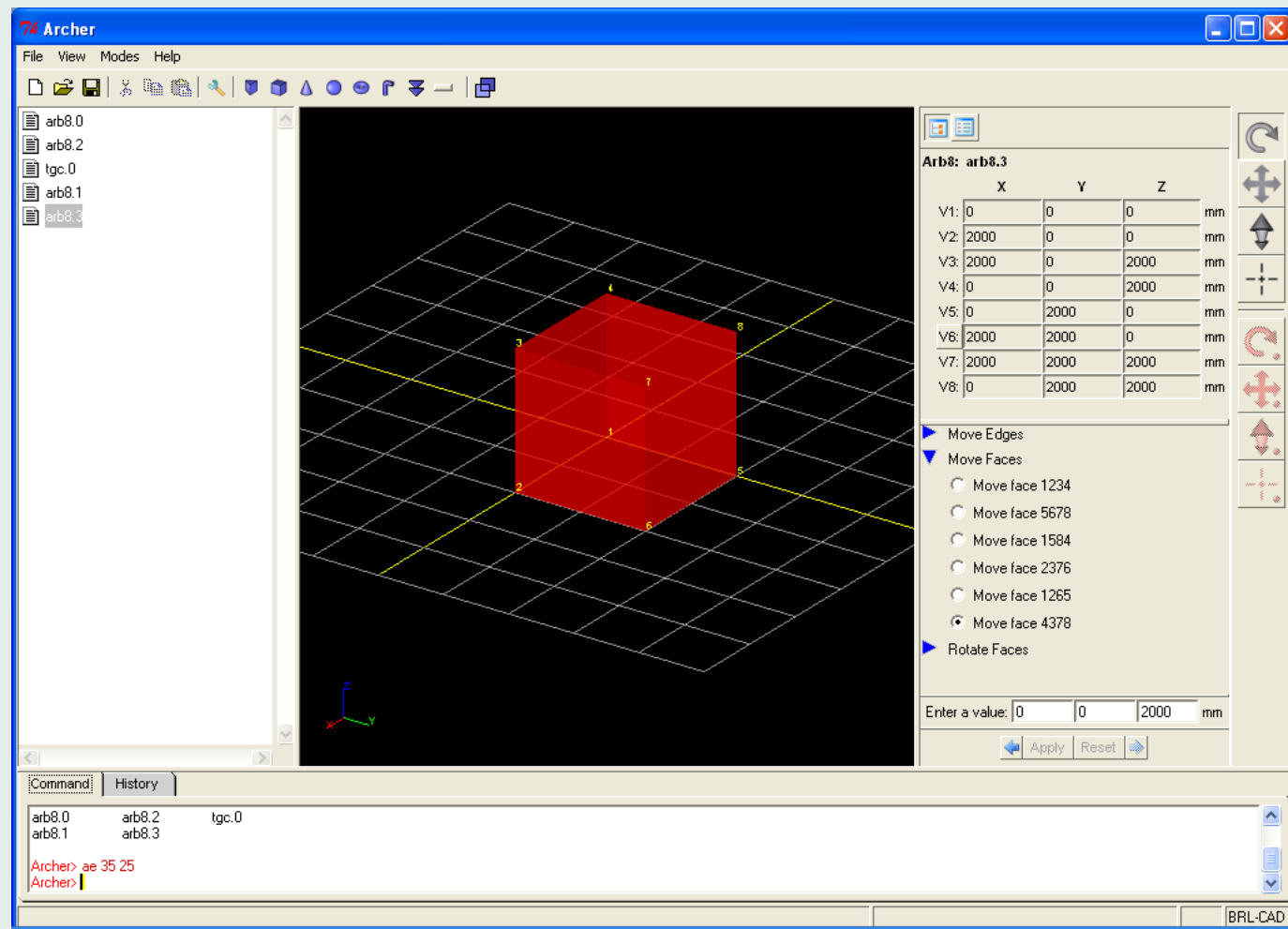
Close

Quit

BRL-CAD – mged GUI



BRL-CAD – alternatywne GUI



BRL-CAD – modele



Home Page

Title Page

◀◀

▶▶

◀

▶

Page 31 of 128

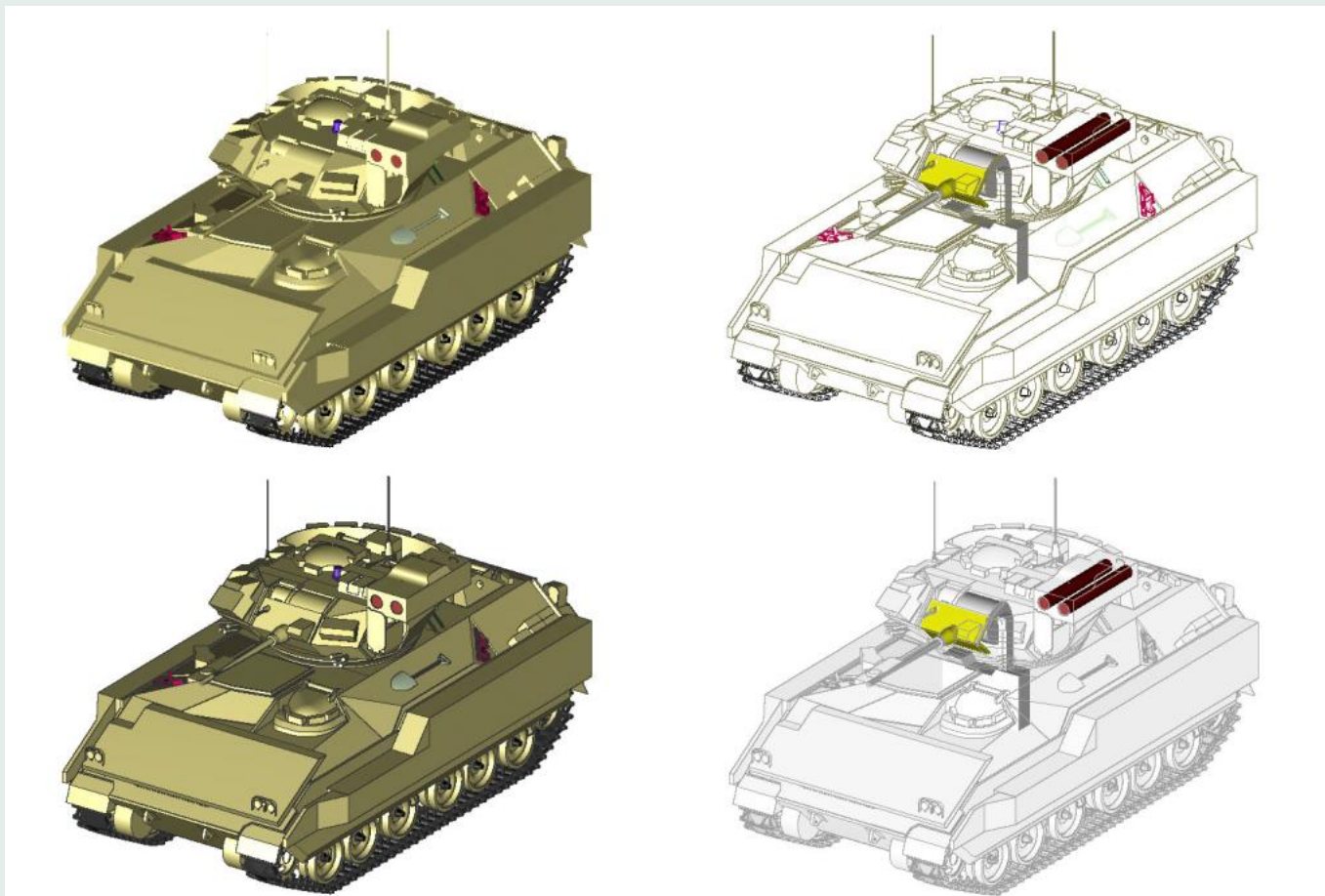
Go Back

Full Screen

Close

Quit

BRL-CAD – modele



Home Page

Title Page

◀◀

▶▶

◀

▶

Page 32 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

BRL-CAD – modele

Home Page

Title Page

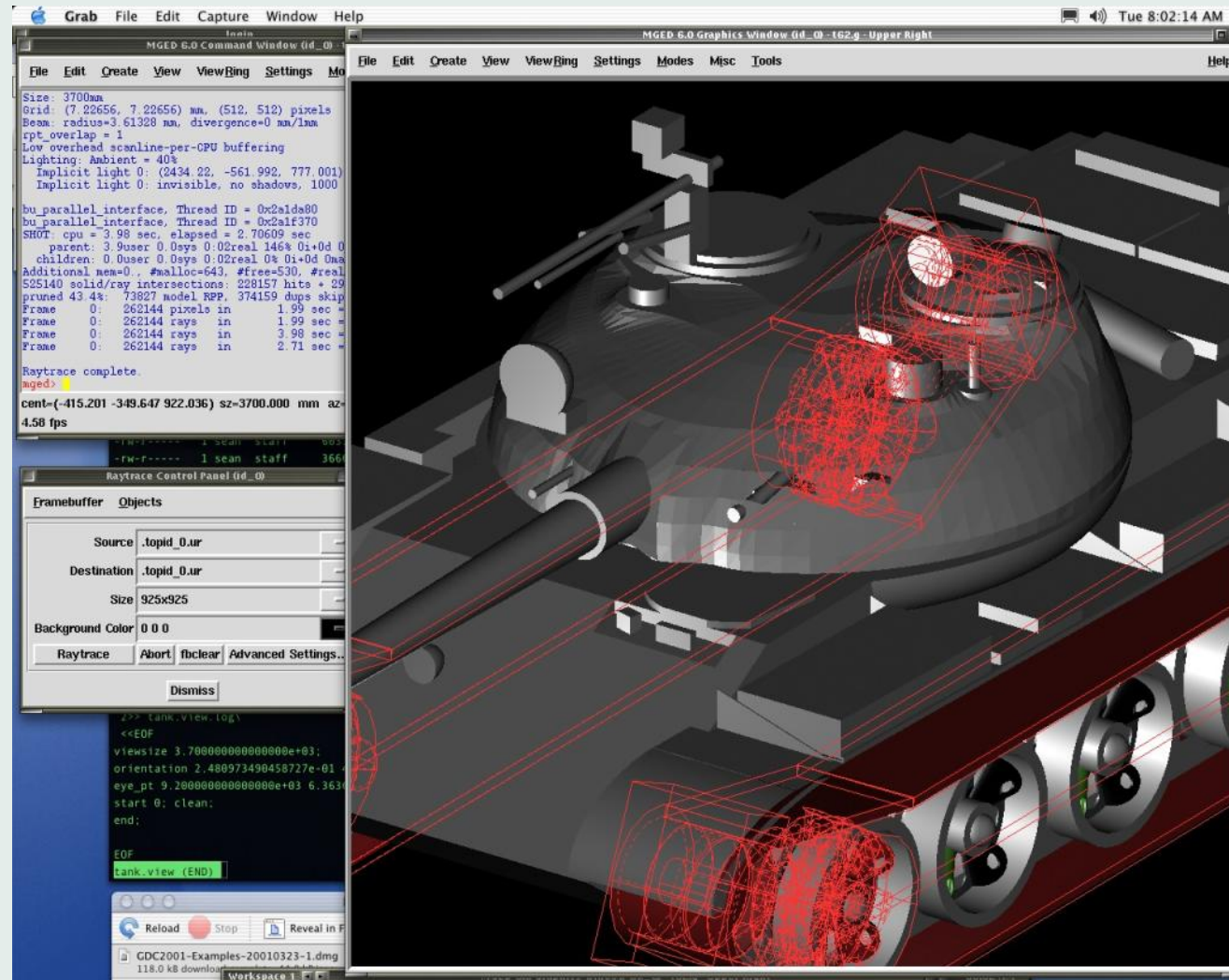
Page 33 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit



BRL-CAD – modele

Home Page

Title Page



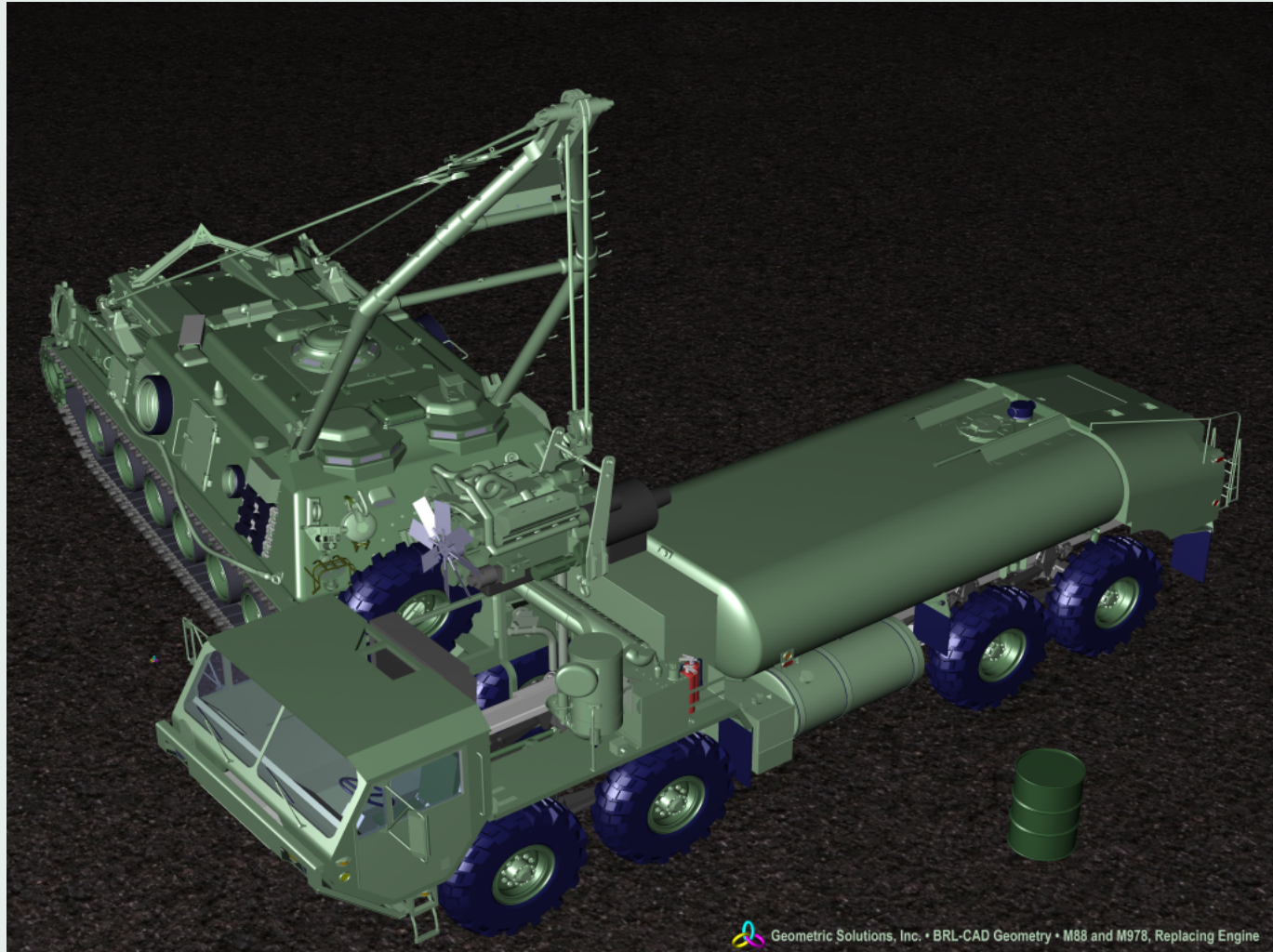
Page 34 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit



BRL-CAD – modele

[Home Page](#)

[Title Page](#)



Page 35 of 128

[Go Back](#)

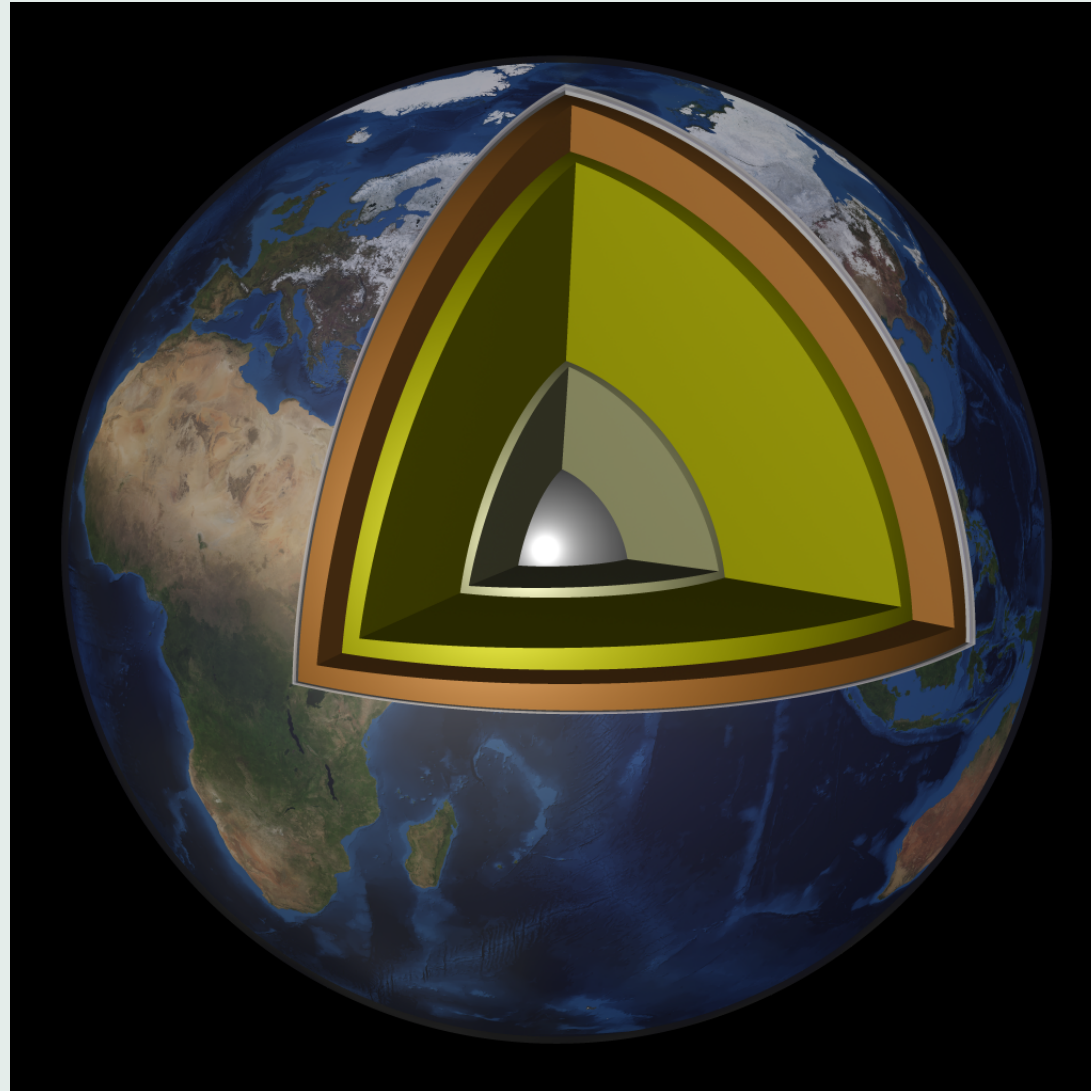
[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)



BRL-CAD – modele



[Home Page](#)

[Title Page](#)

◀◀

▶▶

◀

▶

Page 36 of 128

[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

BRL-CAD – modele

[Home Page](#)

[Title Page](#)



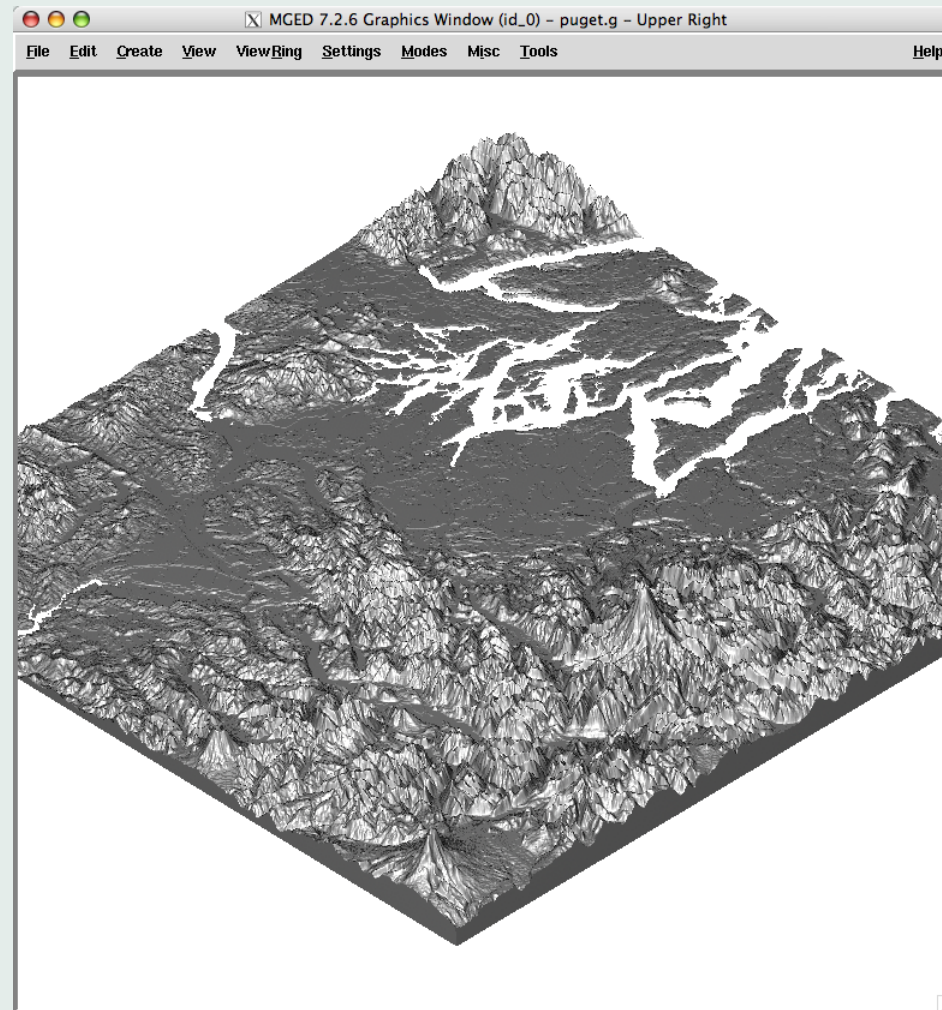
Page 37 of 128

[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)



Wings3D

Program do modelowania 3D z wykorzystaniem powierzchni podziałowych (subdivision surfaces).

- <http://www.wings3d.com>
- szczególnie dobrze nadaje się do modelowania powierzchni organicznych
- najlepsze efekty wings3d + zewnętrzny renderer
- implementacja : Erlang – język programowania aplikacji rozproszonych

Wings3D – GUI

Home Page

Title Page

◀

▶

◀

▶

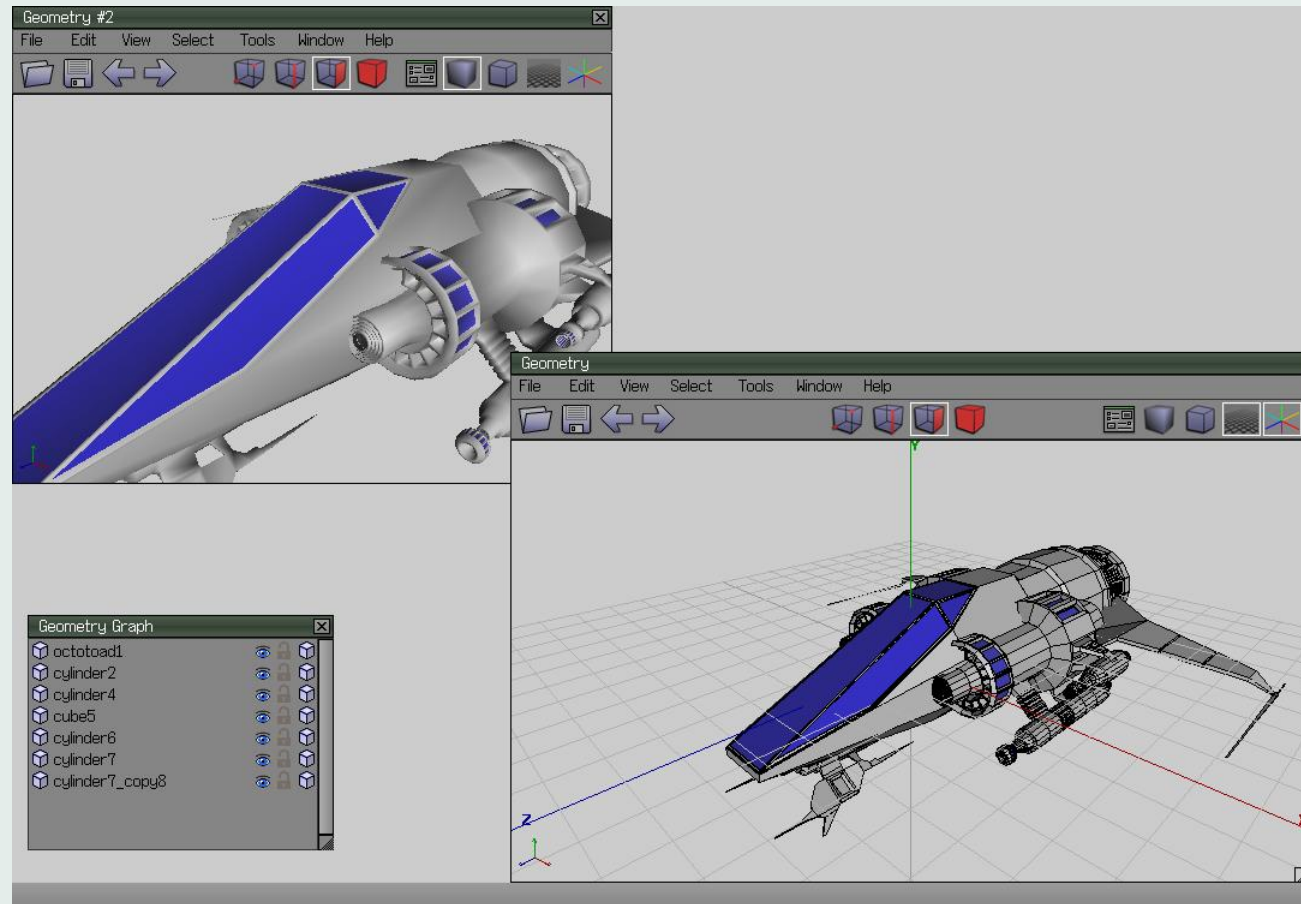
Page 39 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit



Home Page

Title Page



Page 40 of 128

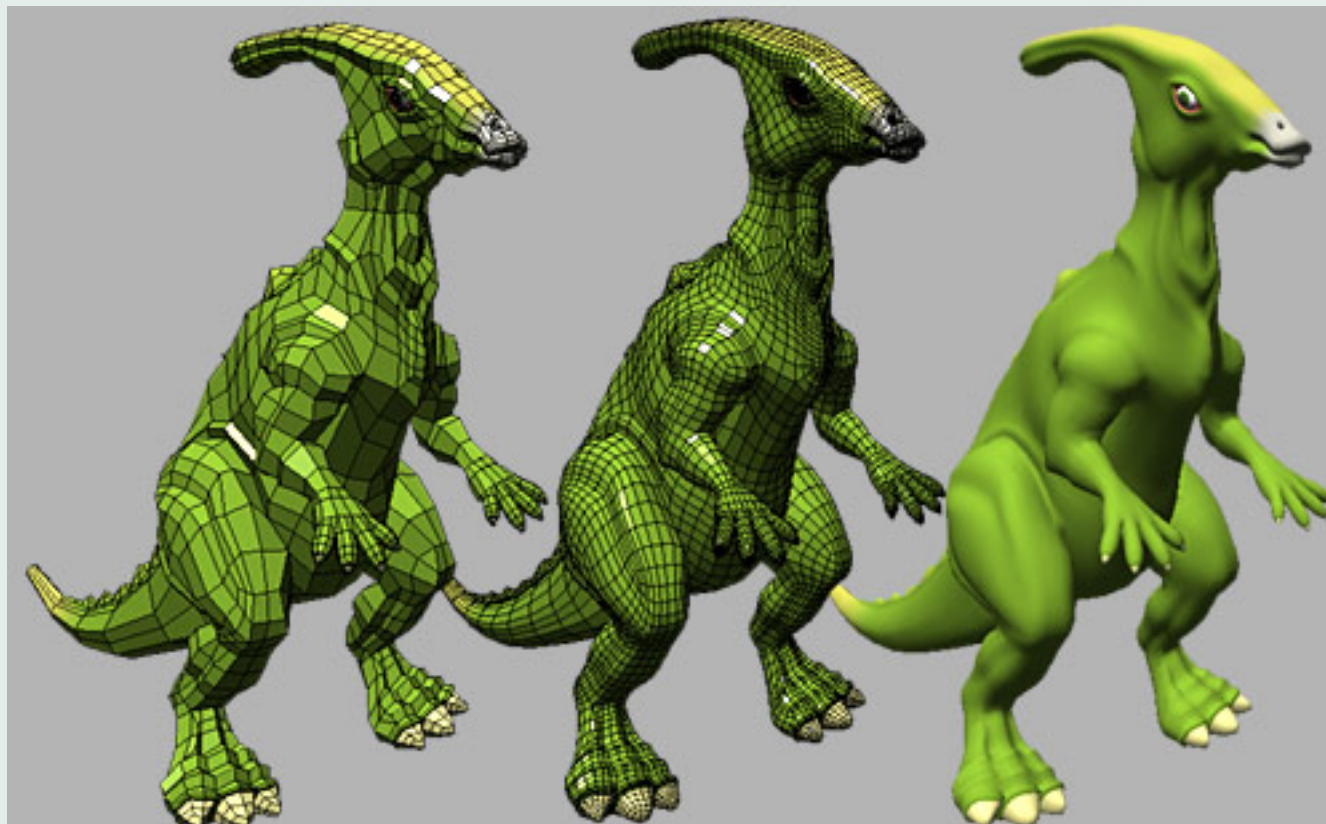
Go Back

Full Screen

Close

Quit

Wings3D – przykłady



Wings3D – przykłady



Home Page

Title Page



Page 41 of 128

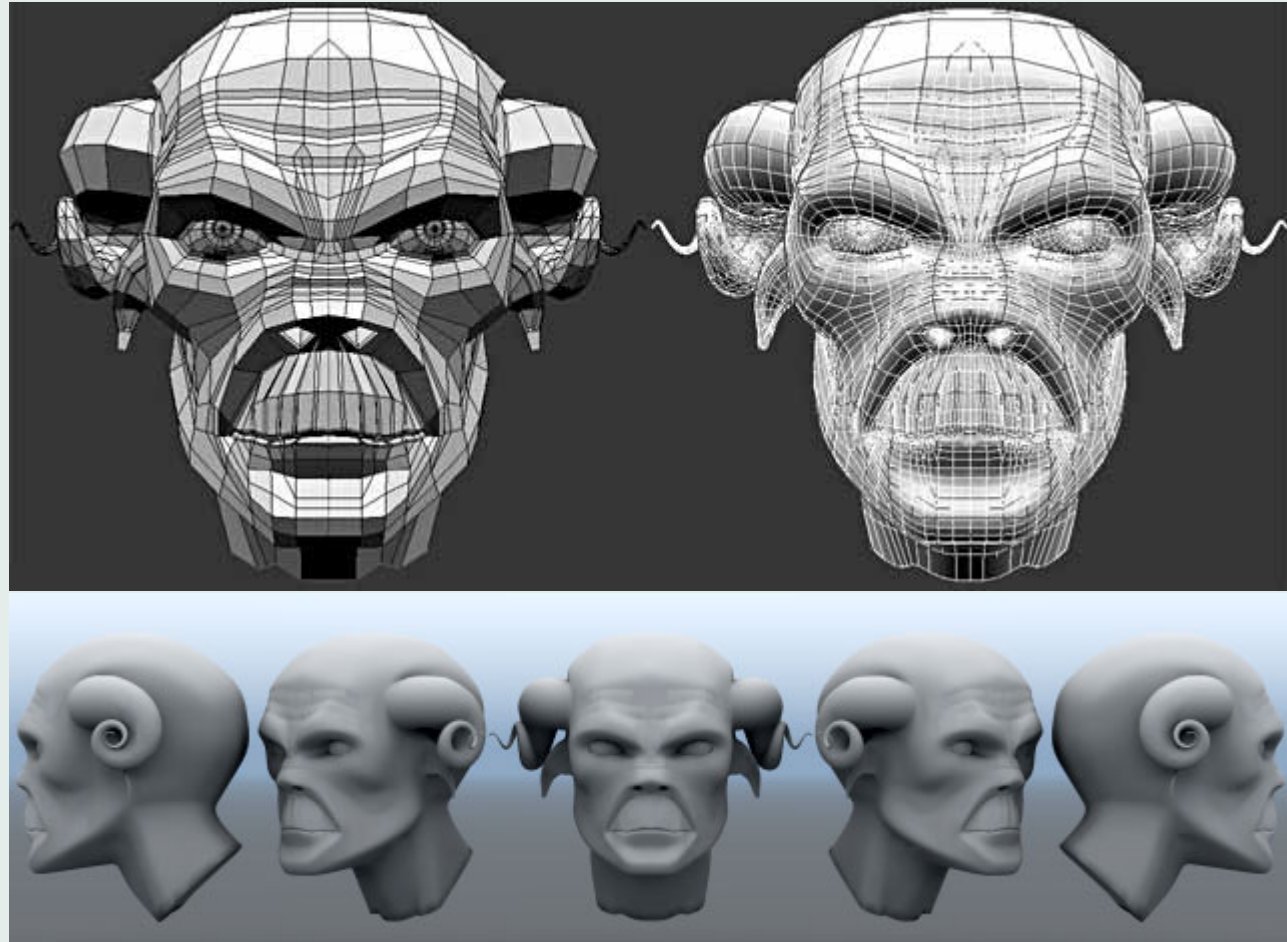
Go Back

Full Screen

Close

Quit

Wings3D – przykłady



[Home Page](#)

[Title Page](#)



Page 42 of 128

[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

Wings3D – przykłady



[Home Page](#)

[Title Page](#)



Page 43 of 128

[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

Wings3D – przykłady

Home Page

Title Page



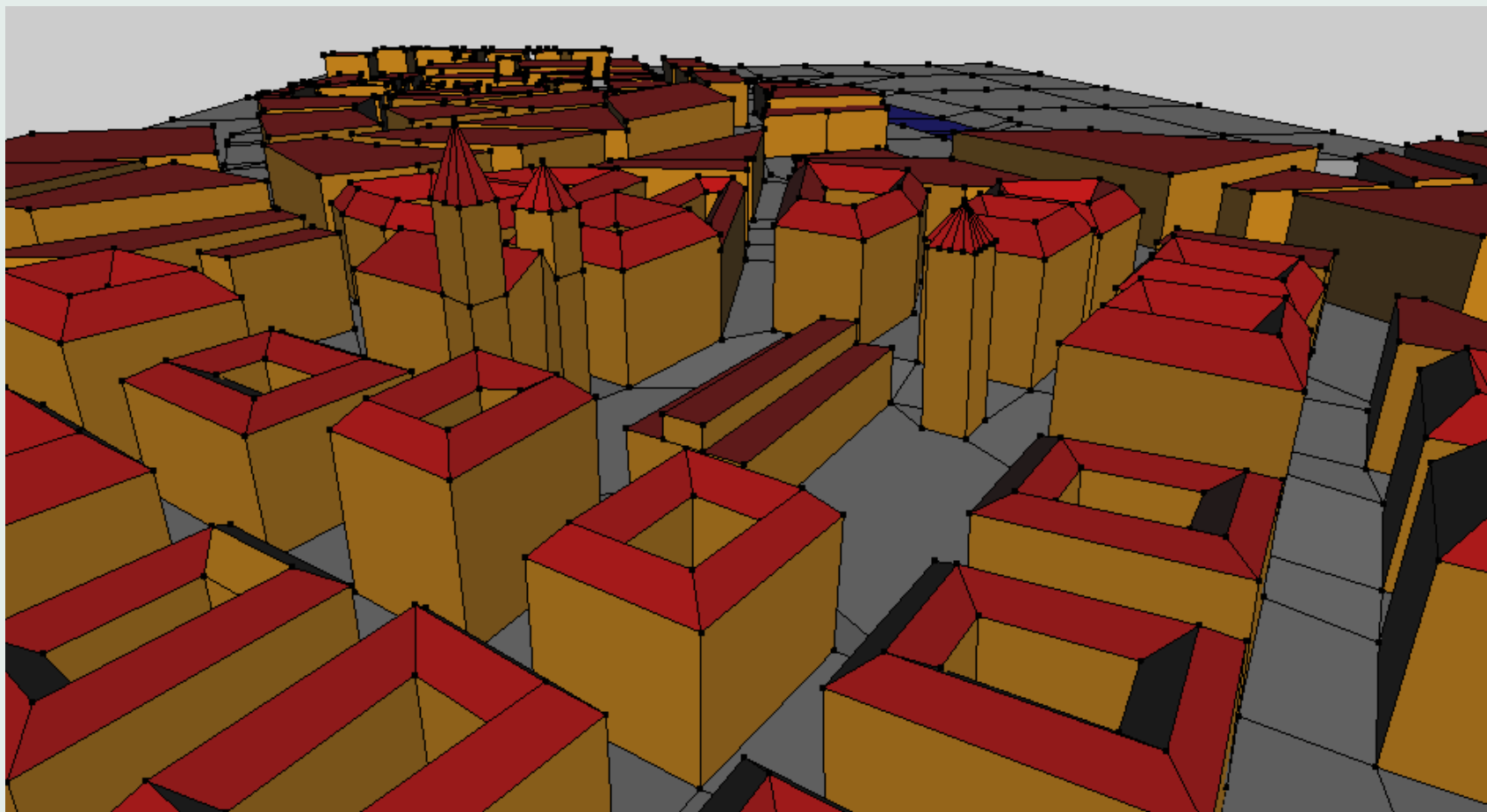
Page 44 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit



Wings3D – przykłady

[Home Page](#)

[Title Page](#)



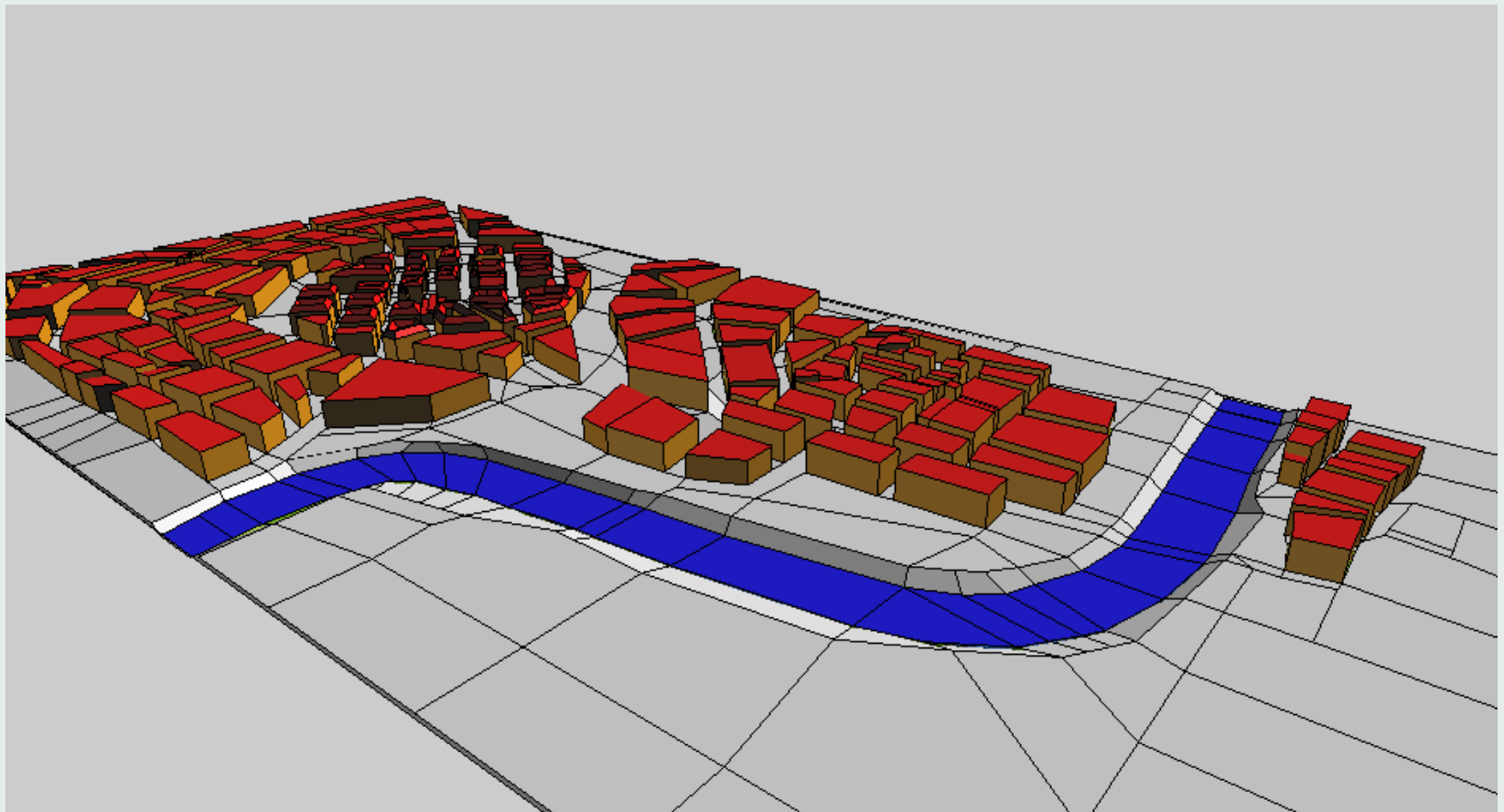
Page 45 of 128

[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)



Home Page

Title Page



Page 46 of 128

Go Back

Full Screen

Close

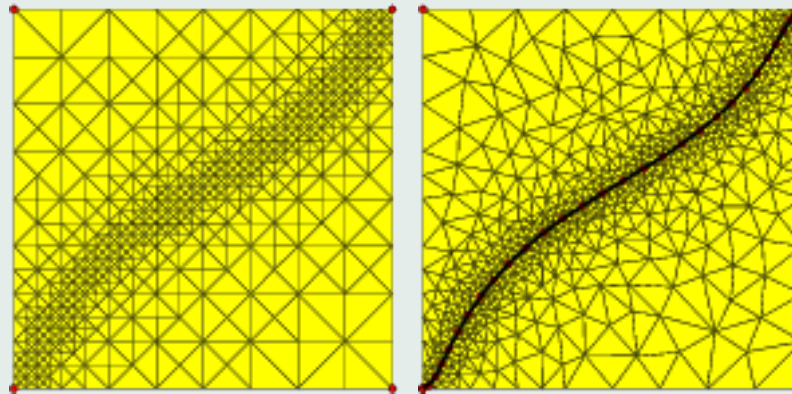
Quit

Generacja siatek

- Triangle
- GMSH
- netgen
- Geompack++

Triangle

- <http://www.cs.cmu.edu/~quake/triangle.html>
- interfejs w Pythonie: <http://mathematician.de/software/meshtpy>
- interfejs w Octave: : FEMOctave ideas.repec.org/c/cod/octave/c090801.htm



GMSH

- Własny generator + interfejs do innych: tetgen, netgen, triangle.
- Wbudowany pre i post-processor
- Możliwość integracji dowolnego solwera
- Własny prosty język skryptowy do opisu geometrii
- Graficzny interfejs na bazie FLTK i OpenGL.
- Najnowsze wersje wykorzystują biblioteki projektu Open-CASCADE do importu modeli B-Rep w formatach STEP, IGES.

GMSH

[Home Page](#)

[Title Page](#)



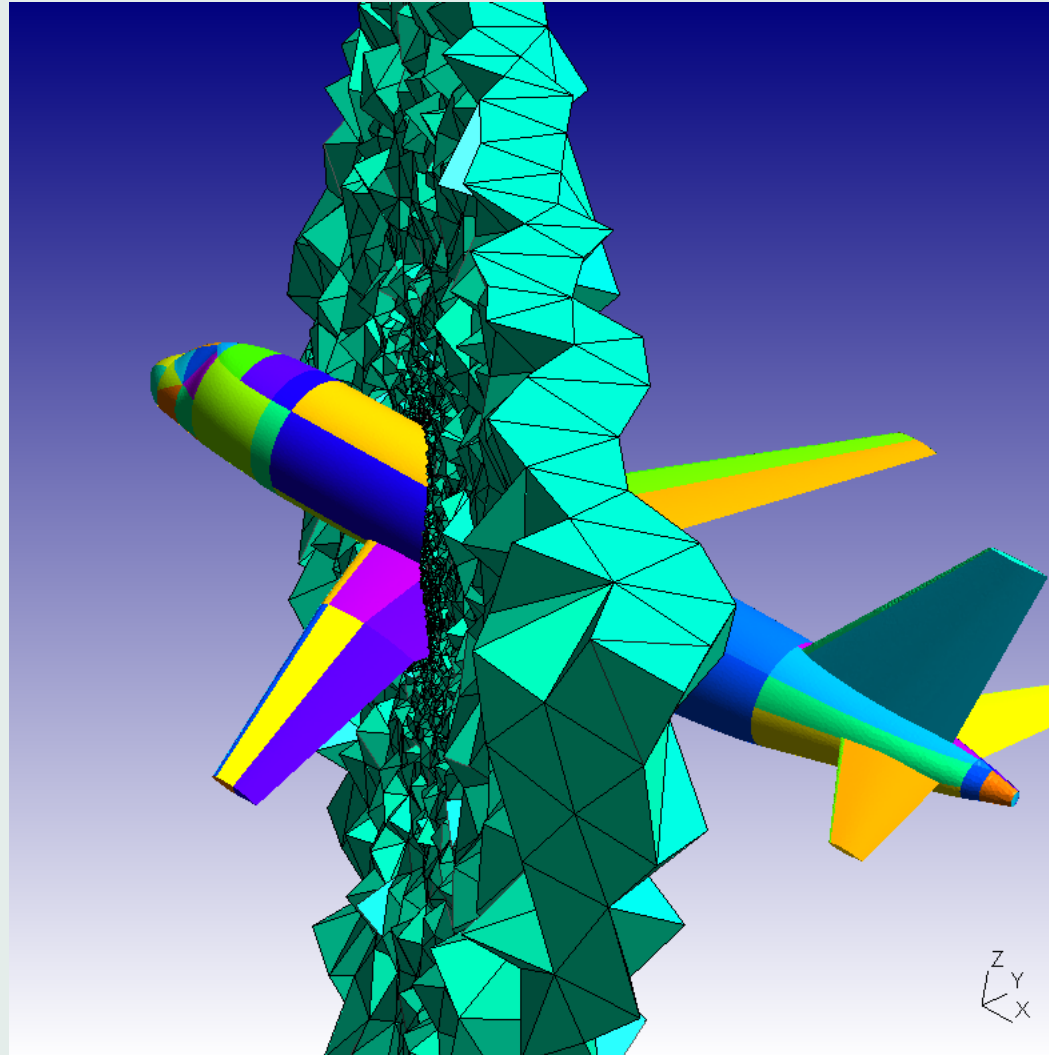
Page 49 of 128

[Go Back](#)

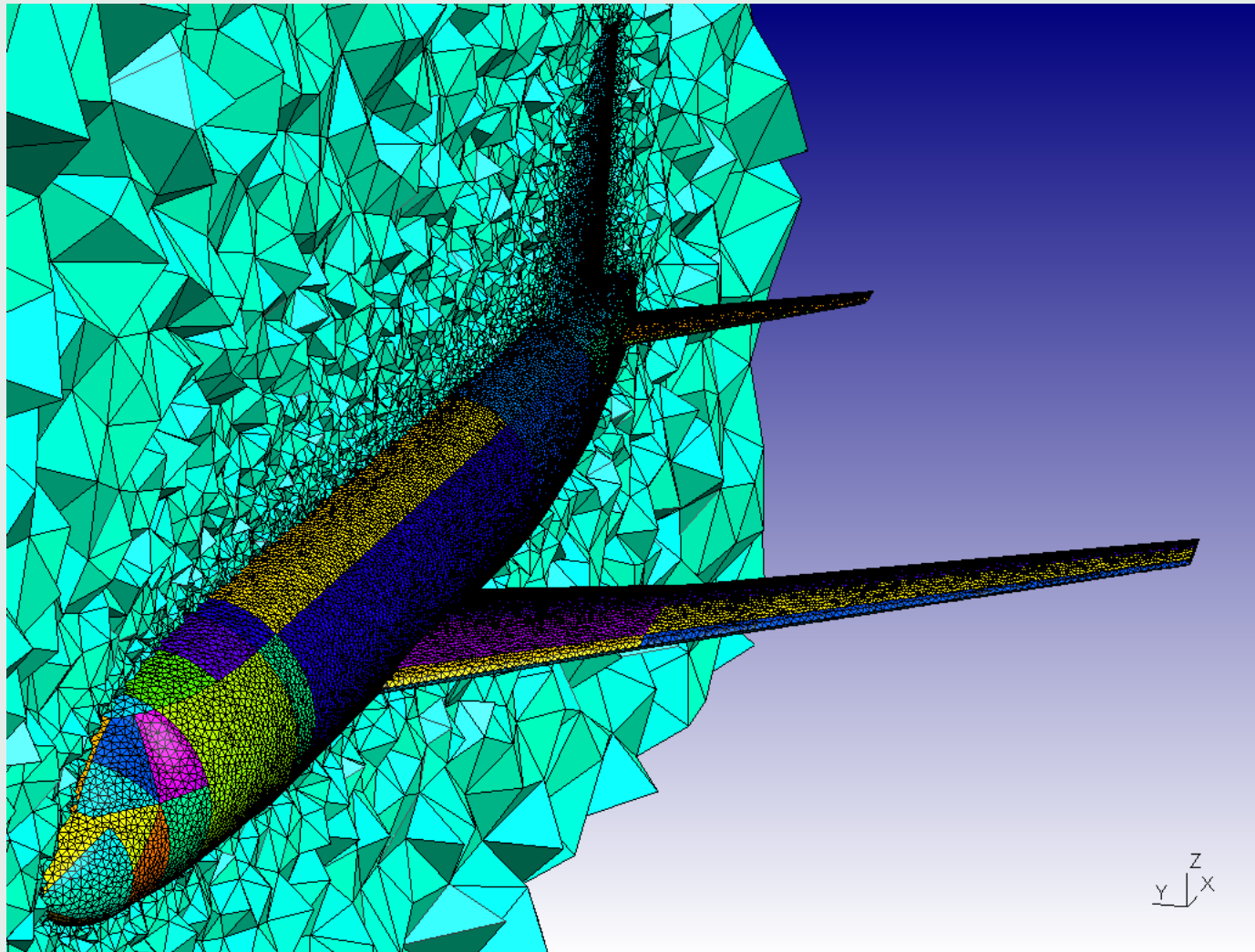
[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)



GMSH



[Home Page](#)

[Title Page](#)

◀◀

▶▶

◀

▶

Page 50 of 128

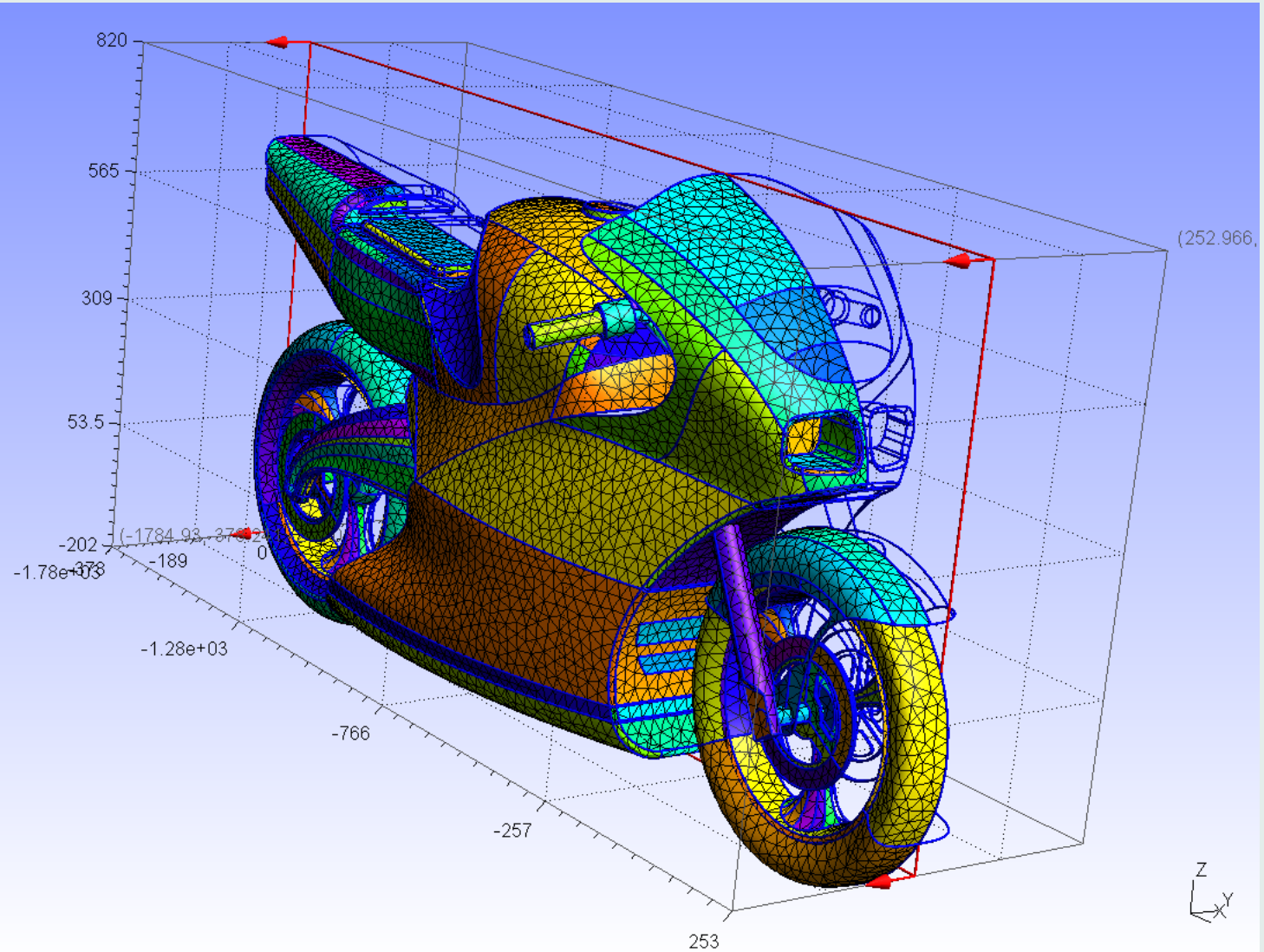
[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

GMSH



Home Page

Title Page

◀

▶

◀

▶

Page 51 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

GMSH

Home Page

Title Page



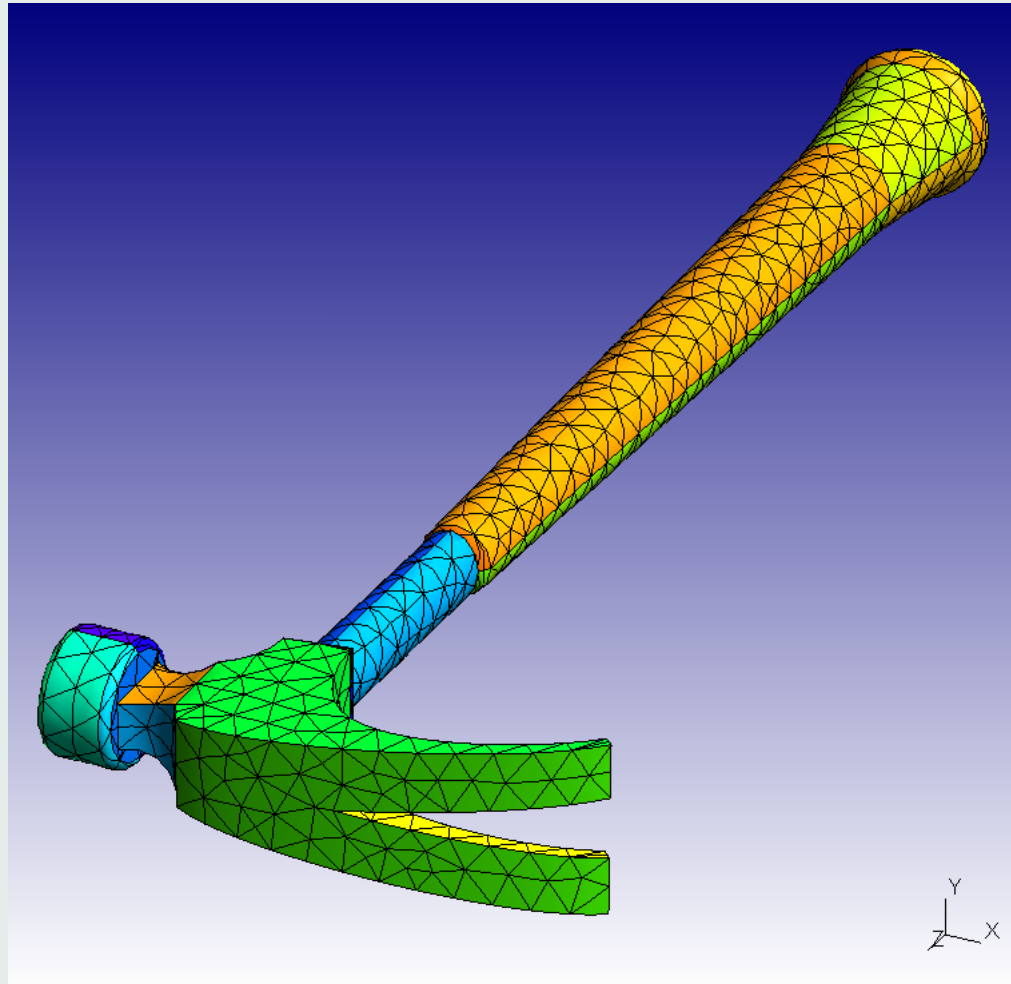
Page 52 of 128

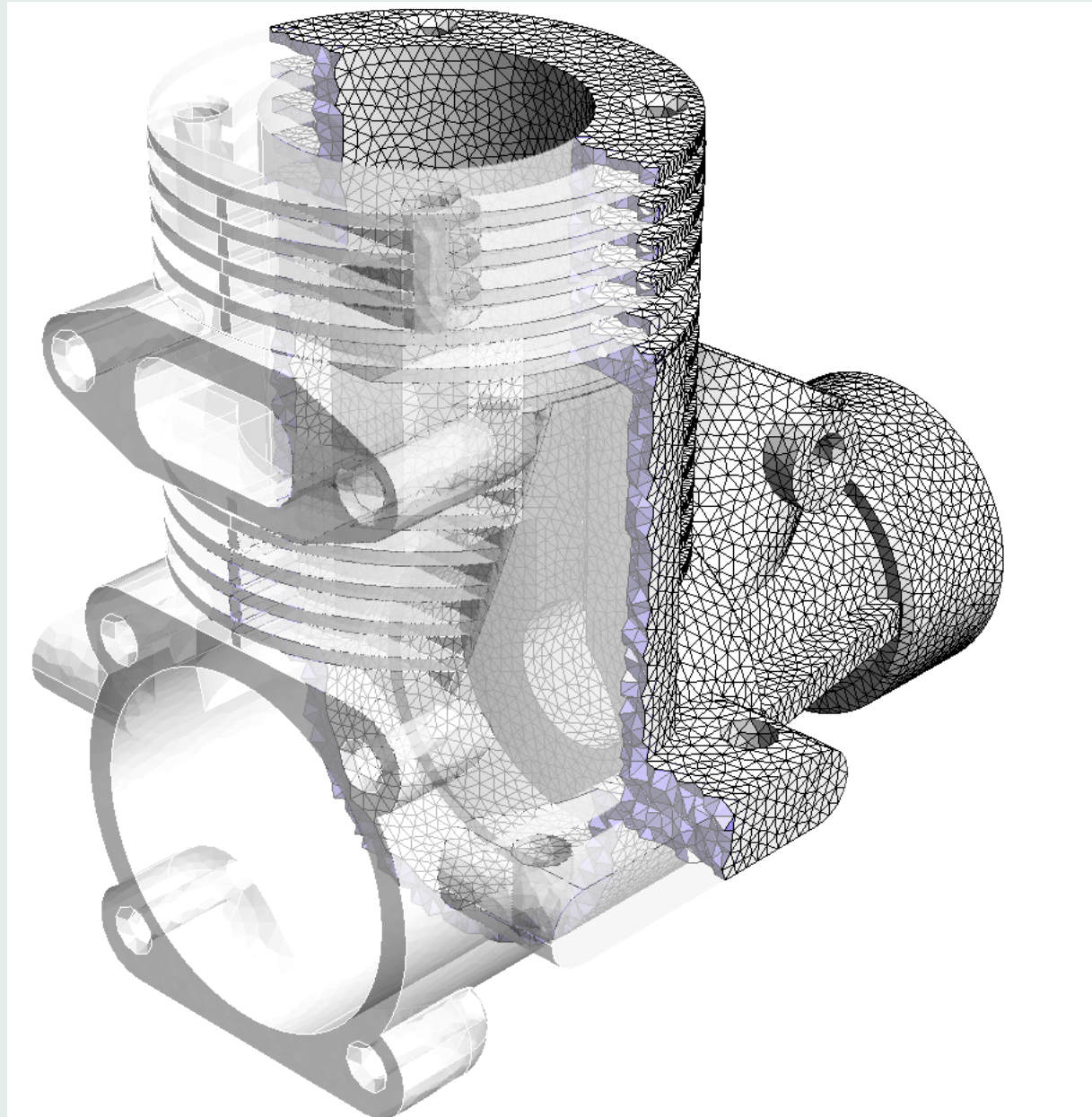
Go Back

Full Screen

Close

Quit





[Home Page](#)

[Title Page](#)

◀◀

▶▶

◀

▶

Page 53 of 128

[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

GMSH

[Home Page](#)

[Title Page](#)



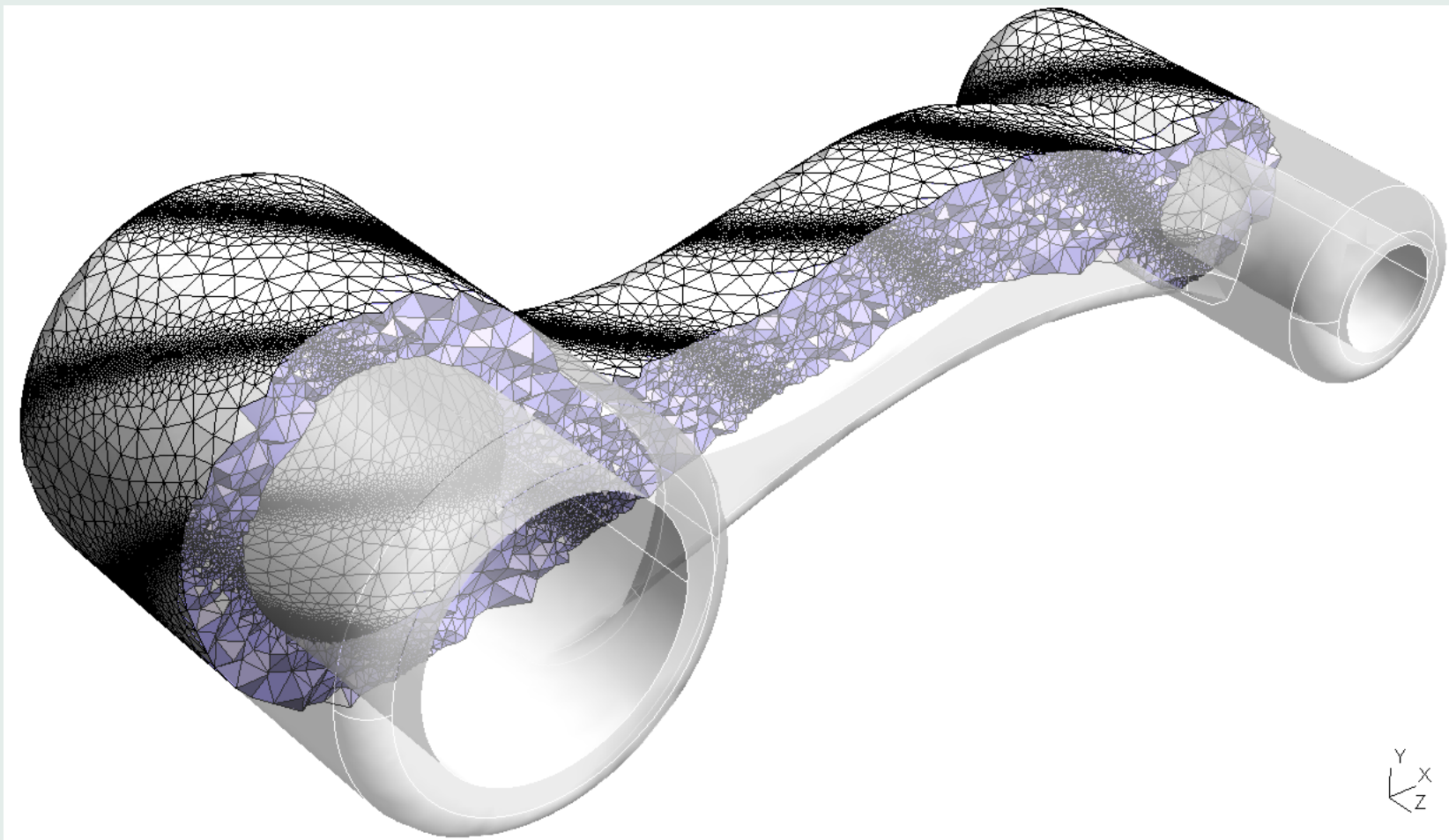
Page 54 of 128

[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)



GMSH

[Home Page](#)

[Title Page](#)



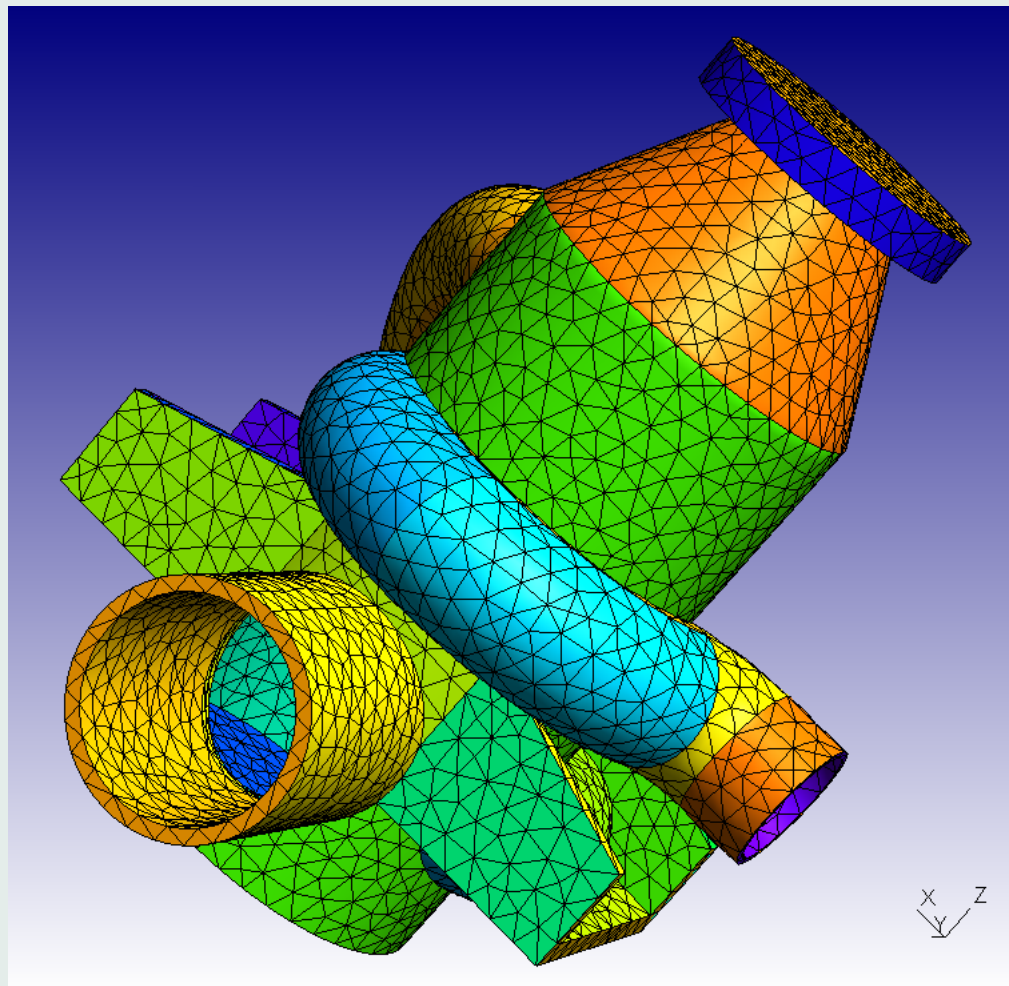
Page 55 of 128

[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)



GMSH

Home Page

Title Page



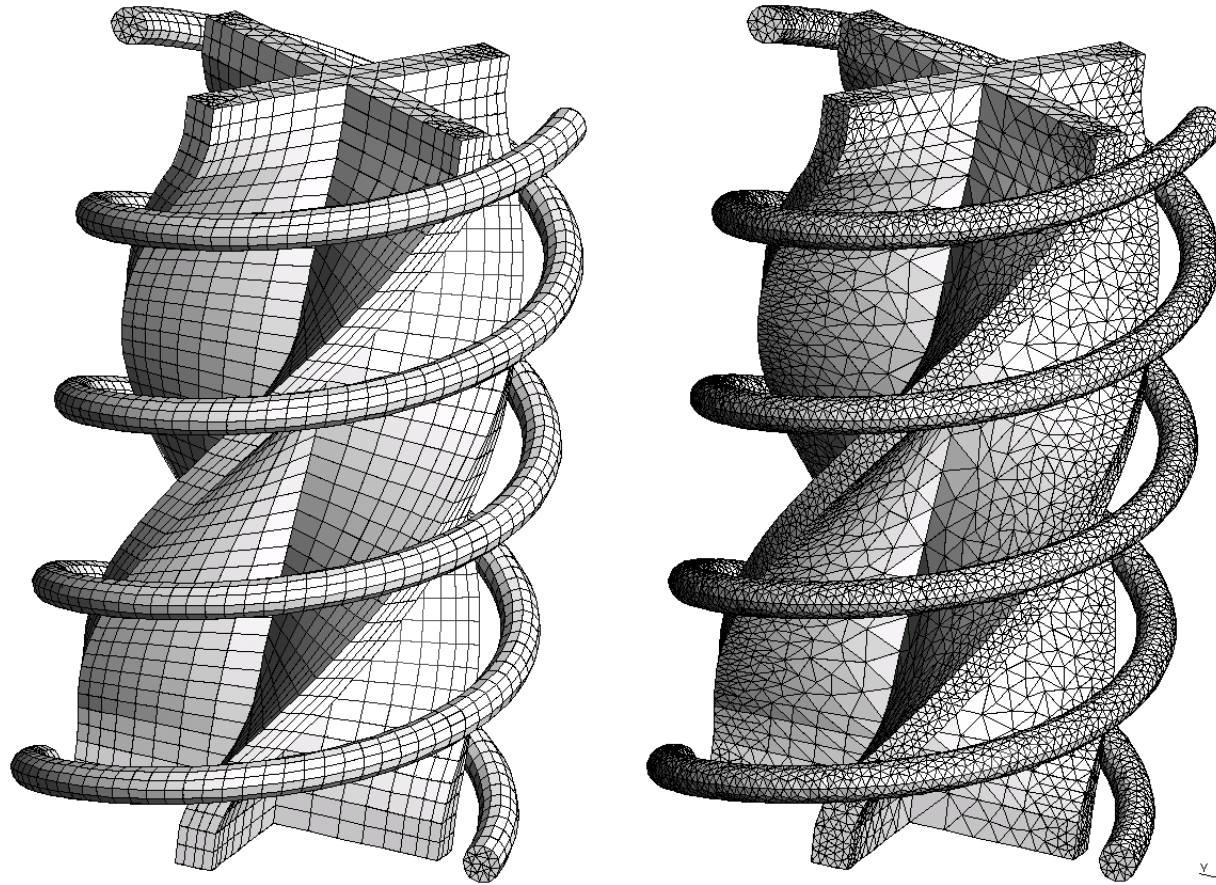
Page 56 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit



GMSH

Home Page

Title Page



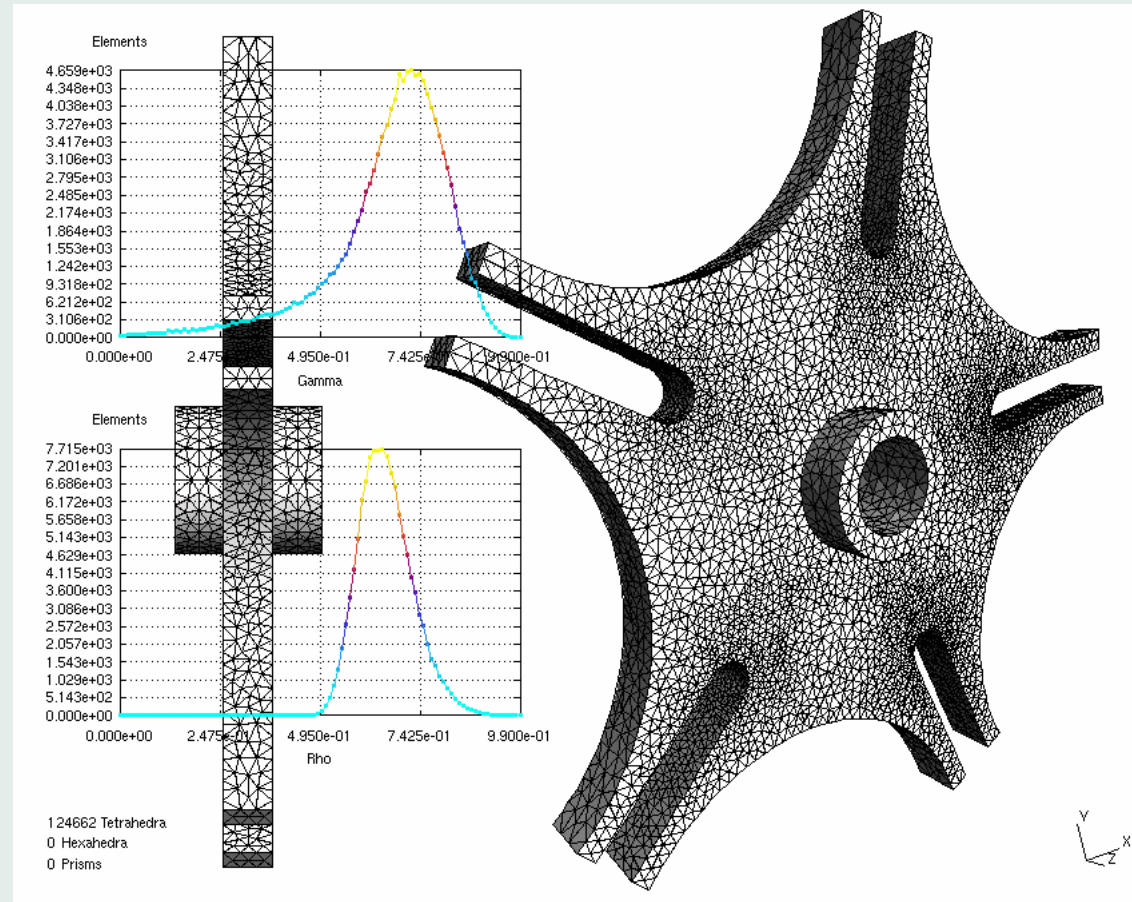
Page 57 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit



GMSH

Home Page

Title Page



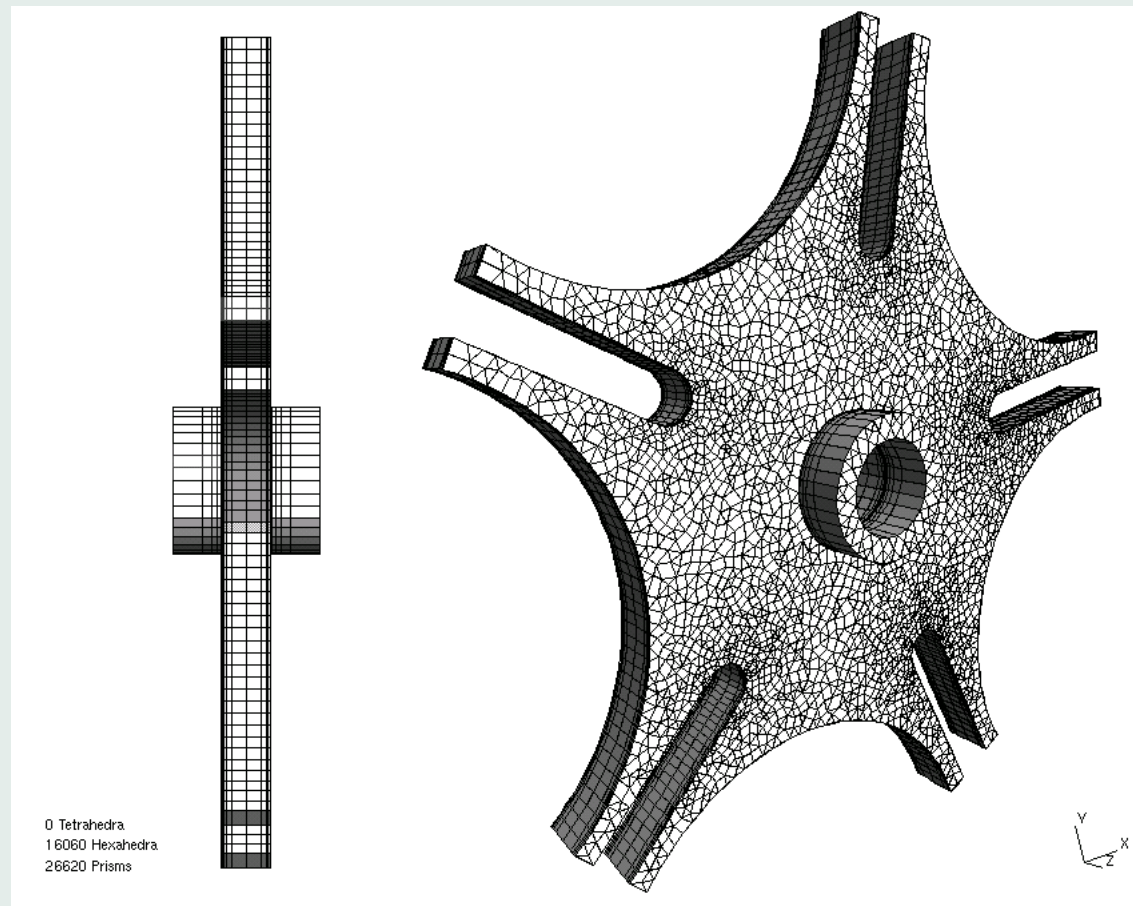
Page 58 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit



GMSH

[Home Page](#)

[Title Page](#)



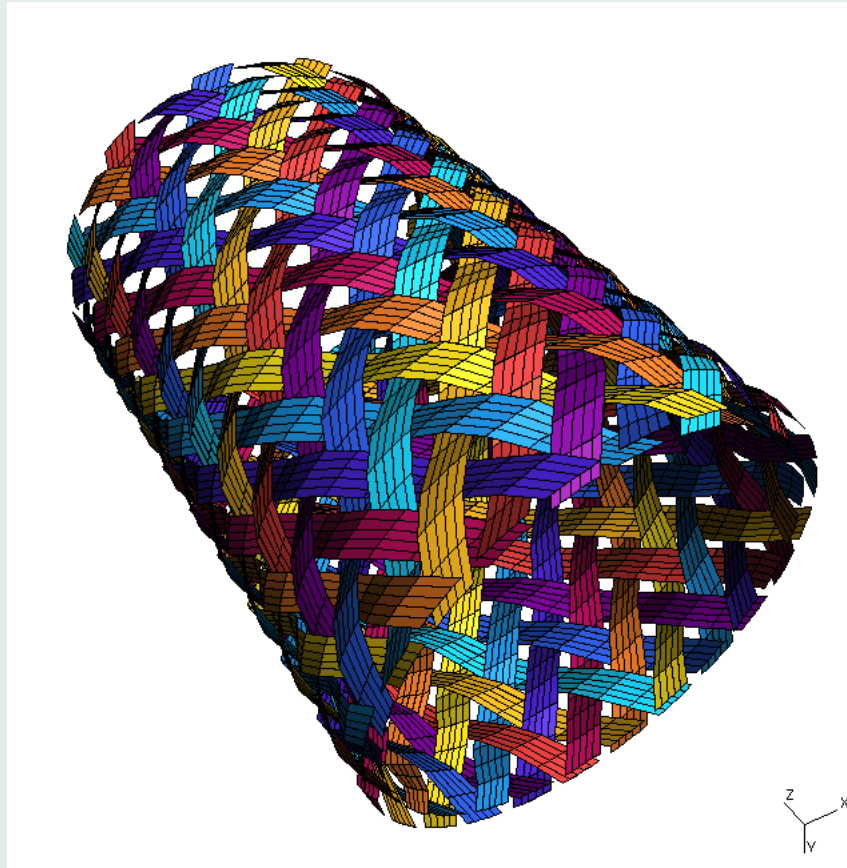
Page 59 of 128

[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

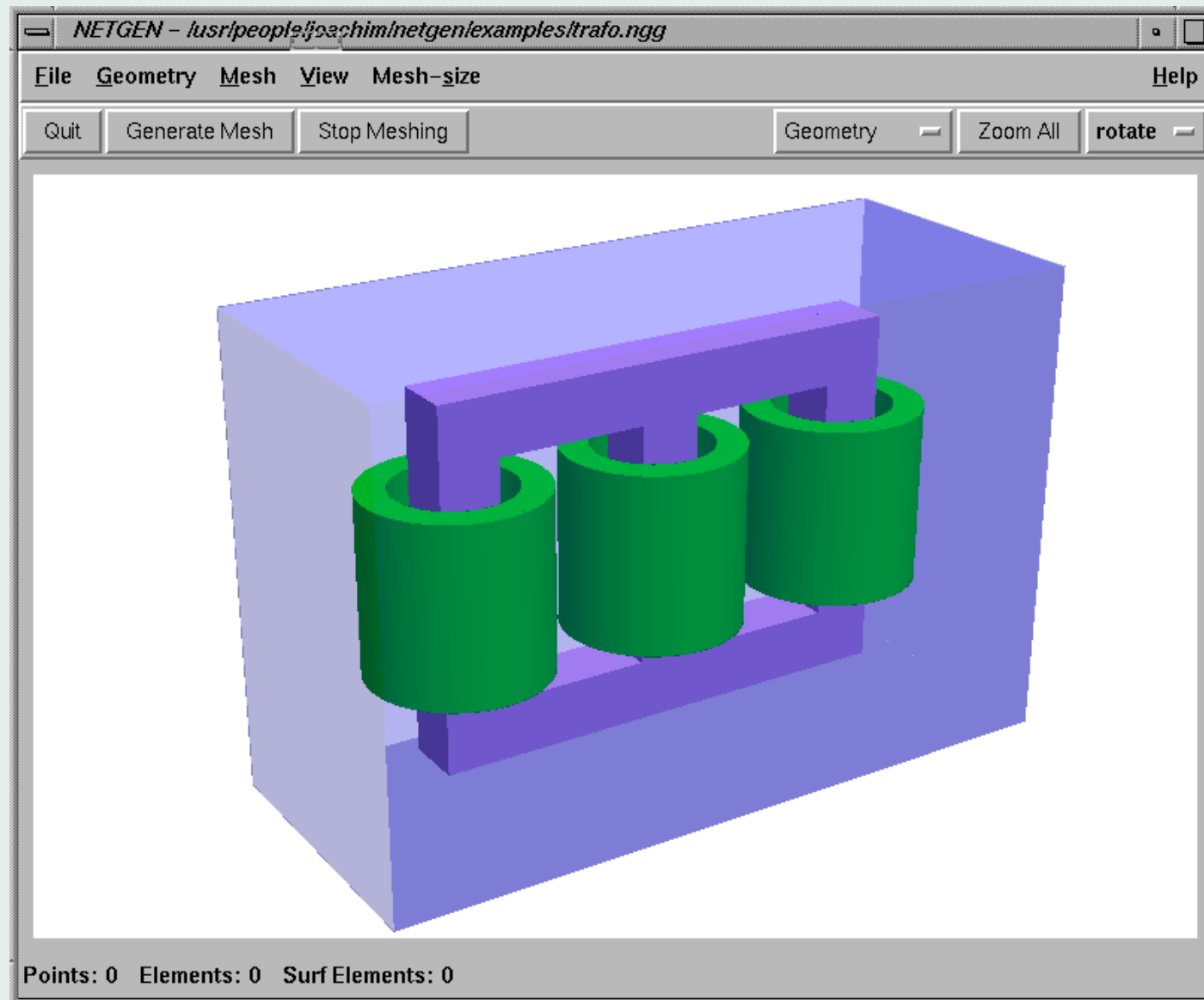
[Quit](#)



netgen

- <http://www.hpfem.jku.at/netgen/>
- Generator siatki czworościennej
- Możliwość siatkowania modeli w reprezentacji B-Rep lub CSG
- Możliwość wczytywania geometrii z plików IGES i STEP (via OpenCASCADE)
- Licencja LGPL.

netgen – przykłady



[Home Page](#)

[Title Page](#)

◀

▶

Page 61 of 128

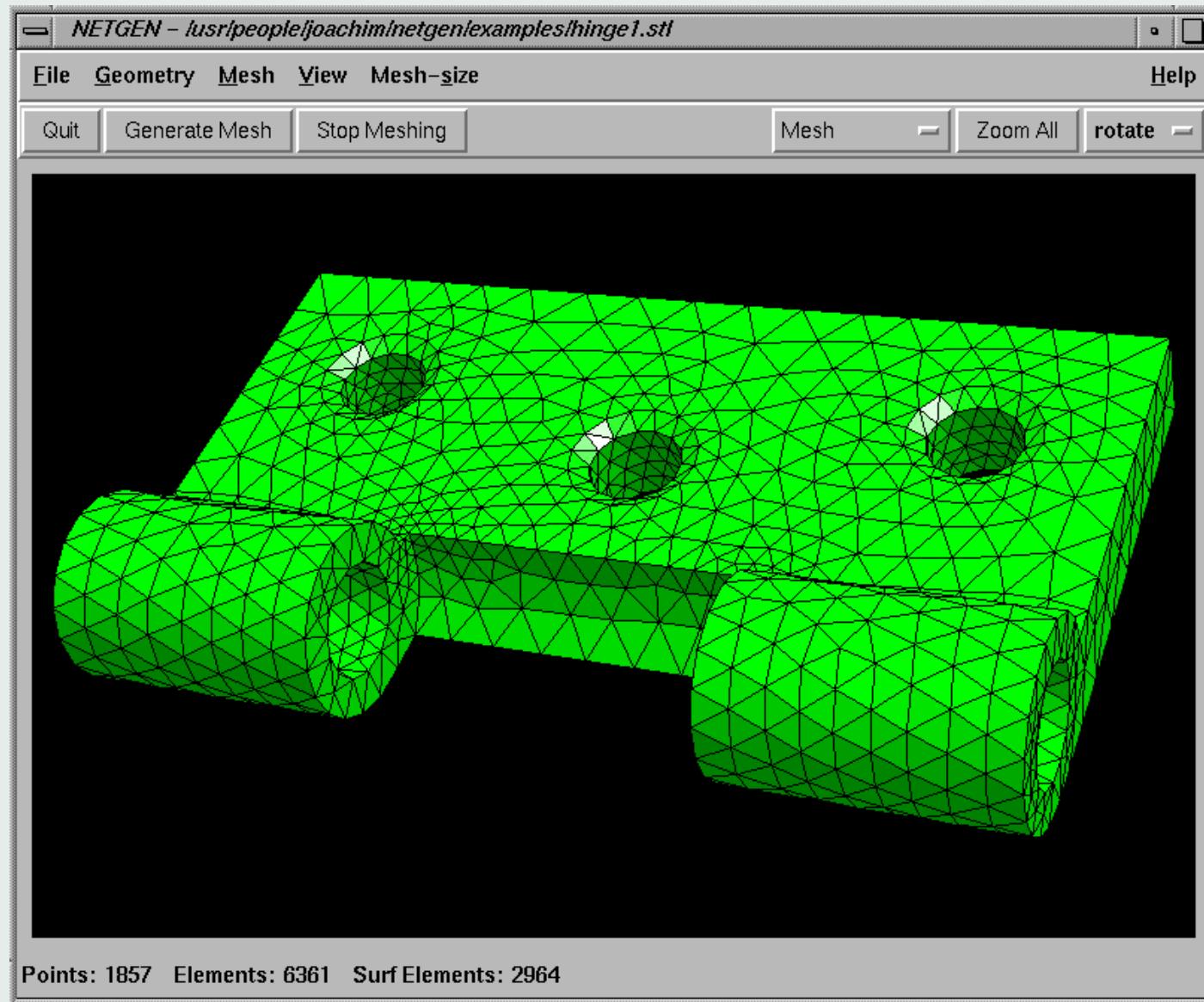
[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

netgen – przykłady



[Home Page](#)

[Title Page](#)

◀

▶

◀

▶

Page 62 of 128

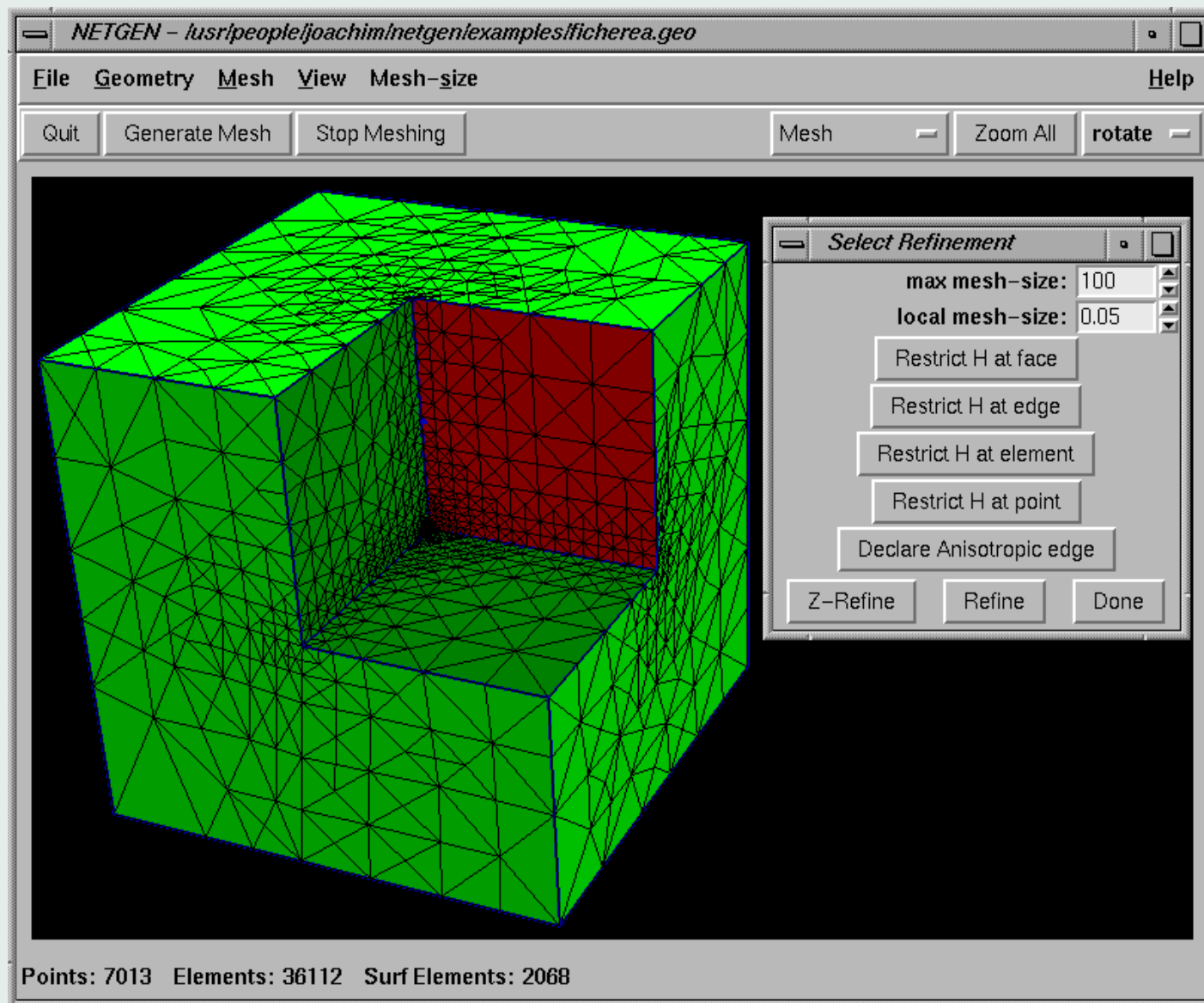
[Go Back](#)

[Full Screen](#)

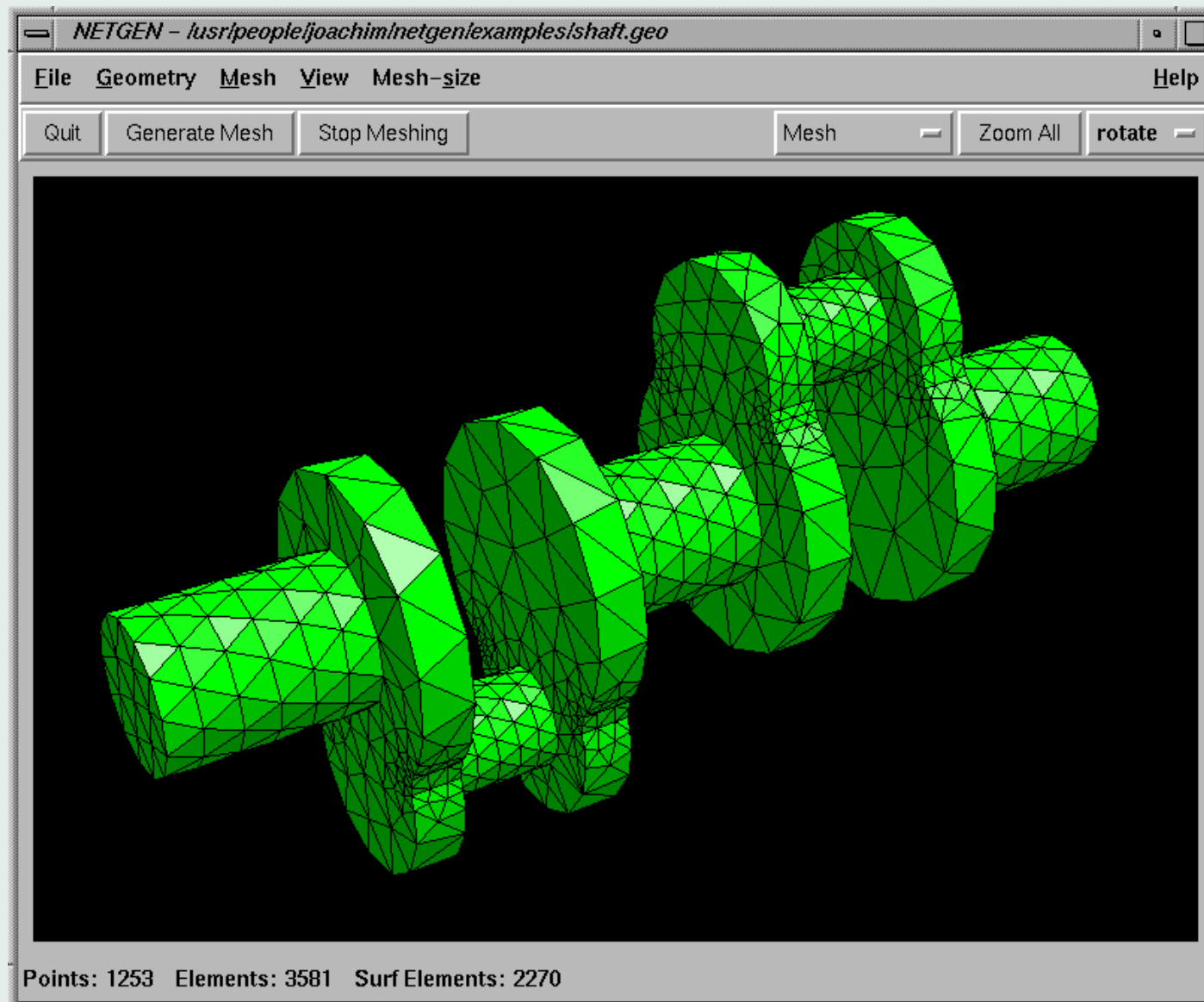
[Close](#)

[Quit](#)

netgen – przykłady



netgen – przykłady



[Home Page](#)

[Title Page](#)

◀

▶

◀

▶

Page 64 of 128

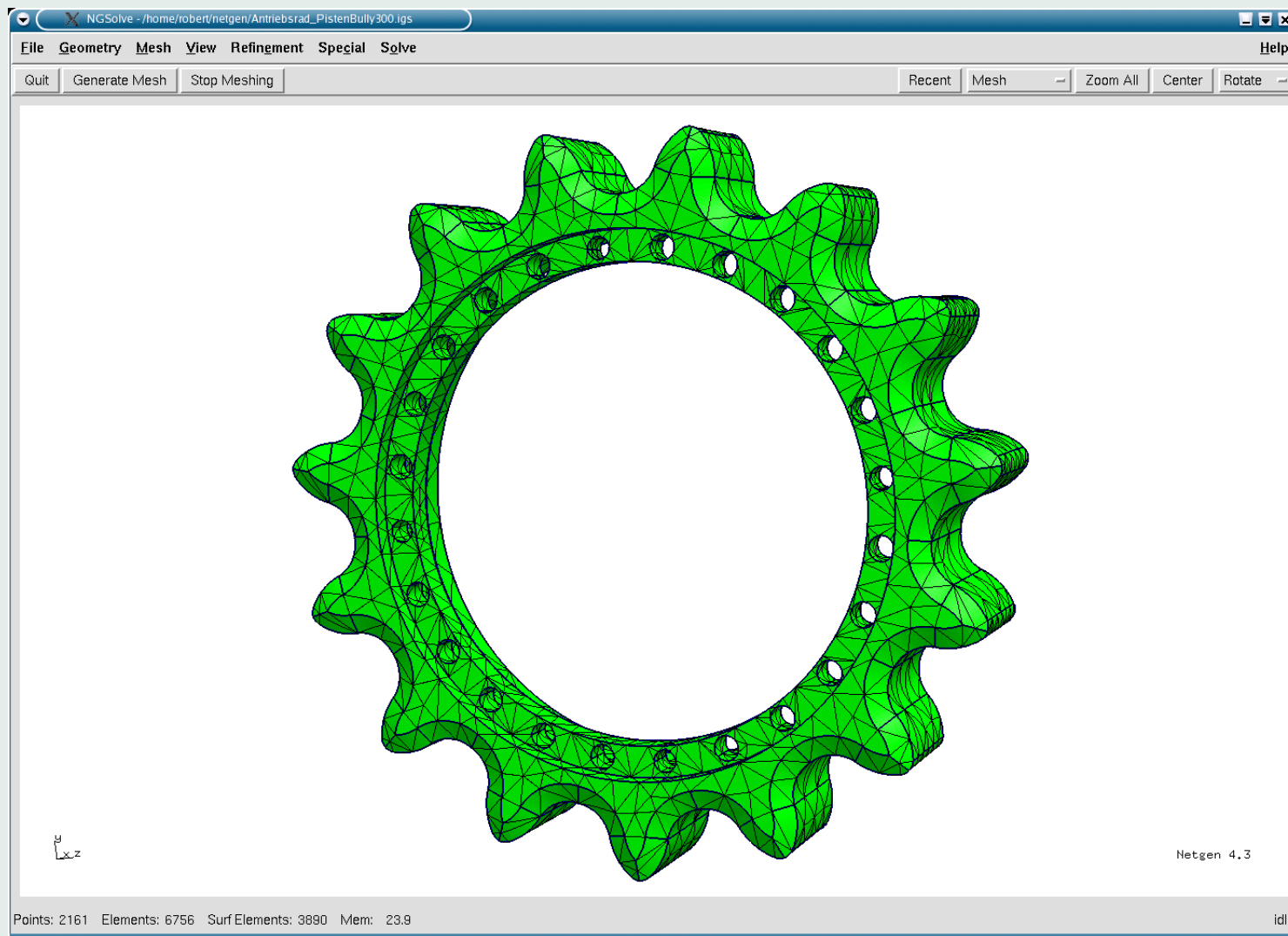
[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

netgen – przykłady



Home Page

Title Page

◀

▶

◀

▶

Page 65 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

Geompack++

- Komercyjny, ale możliwość bezpłatnego korzystania dla celów dydaktycznych i badań.
- Tylko wersje skompilowane (Linux, Windows)
- Najbardziej kompletny (?) z bezpłatnych generatorów: 2D, 2.5D, 3D, NURBS, non-manifold models, optymalizacja siatek
- ograniczeni do miliona elementów w wersji free.
- brak możliwości graficznych.

Home Page

Title Page



Page 67 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

Pre- i post-procesing MES

- GMSH
- Calculix
- Salome

GMSH

[Home Page](#)

[Title Page](#)



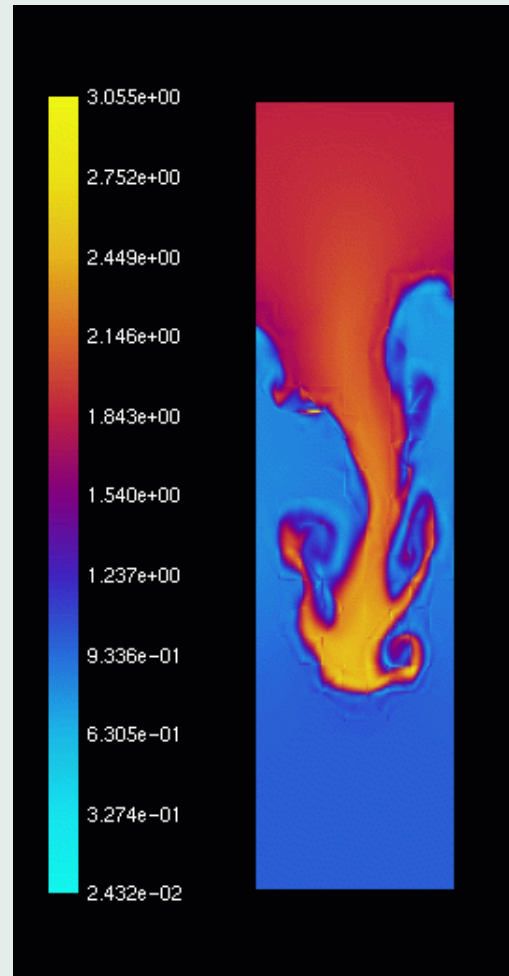
Page 68 of 128

[Go Back](#)

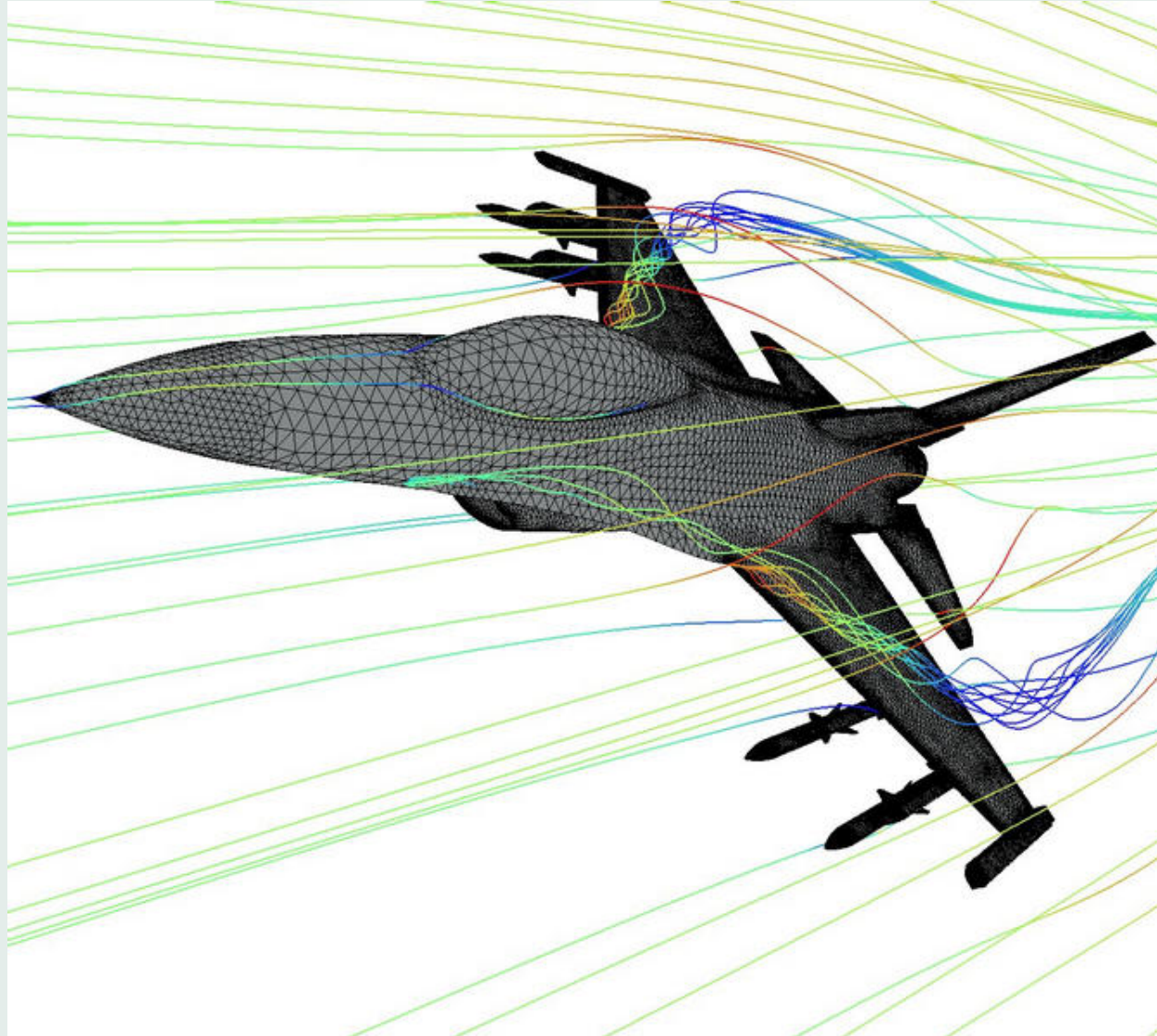
[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)



GMSH



[Home Page](#)

[Title Page](#)



Page 69 of 128

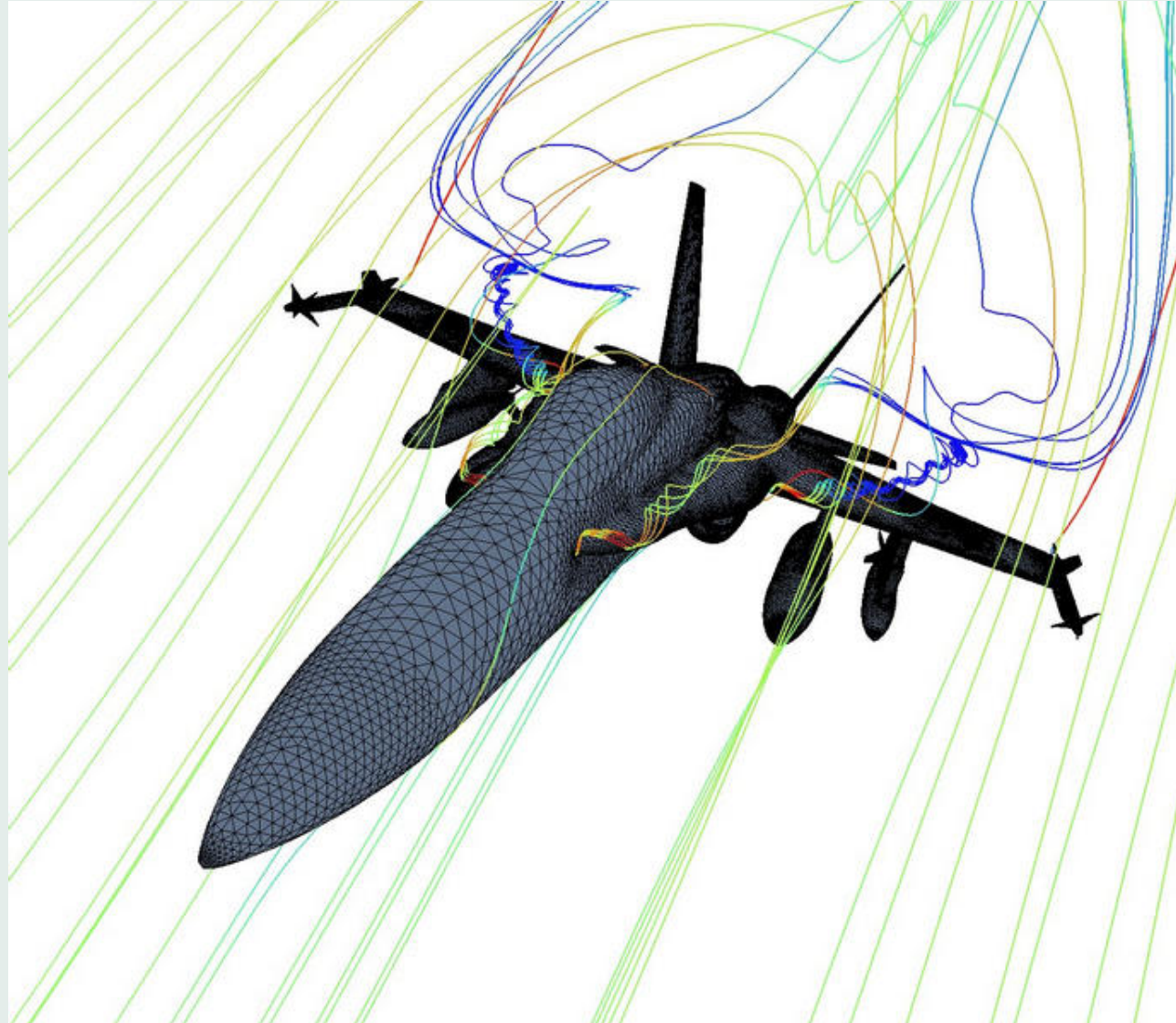
[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

GMSH



[Home Page](#)

[Title Page](#)

◀

▶

◀

▶

Page 70 of 128

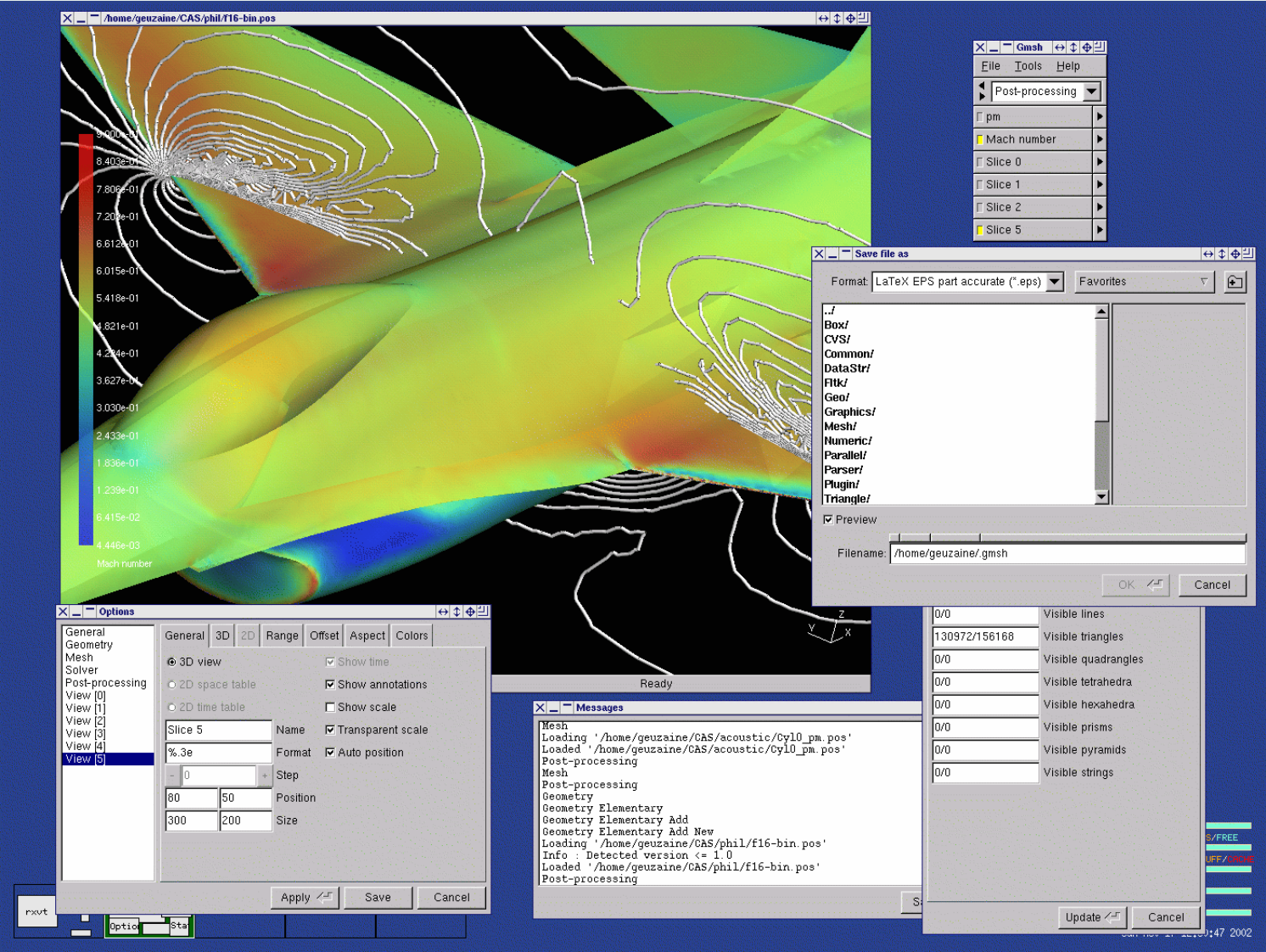
[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

GMSH



Home Page

Title Page

Page 71 of 128

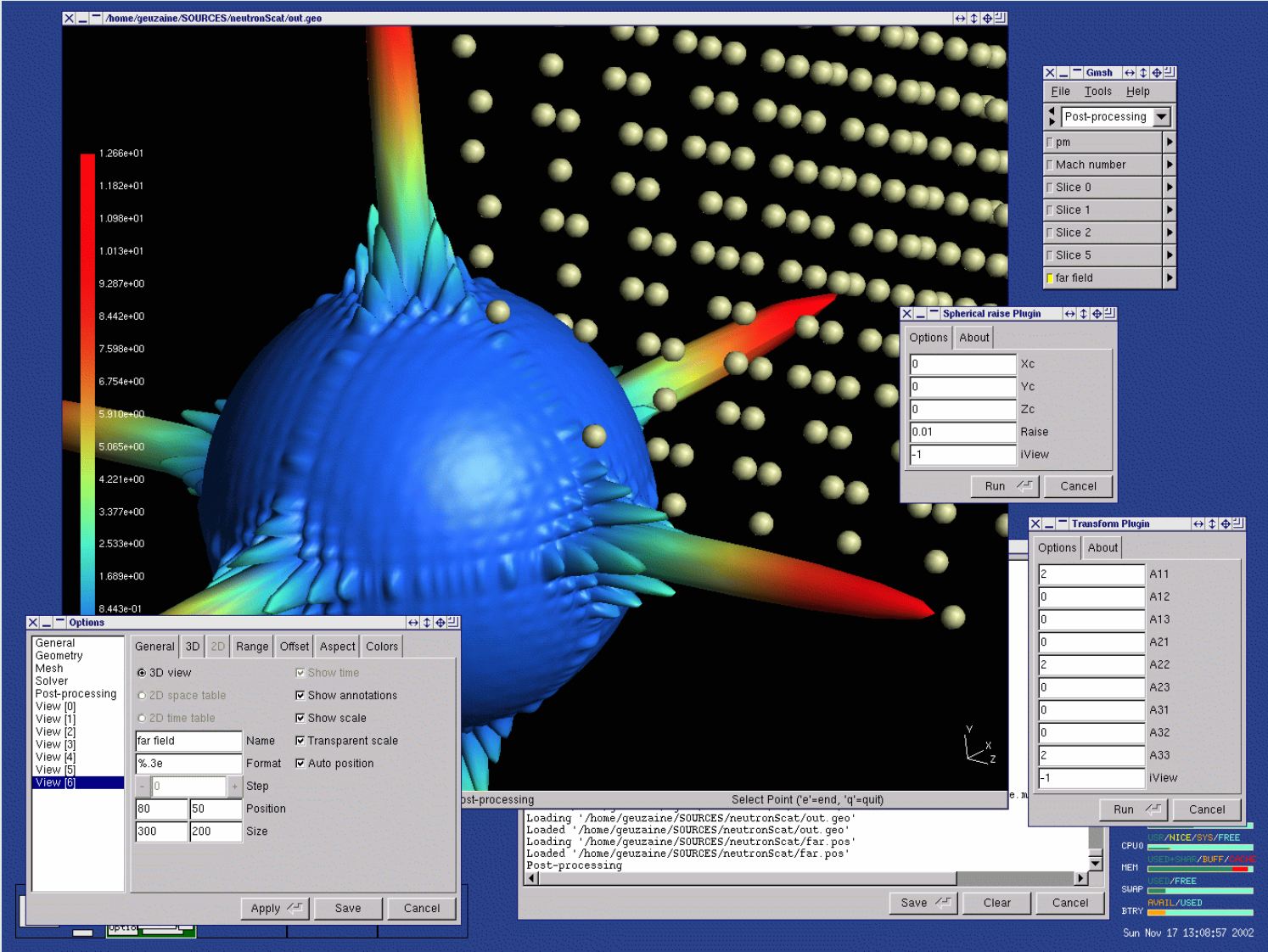
Go Back

Full Screen

Close

Quit

GMSH



Home Page

Title Page

Page 72 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

GMSH

Home Page

Title Page



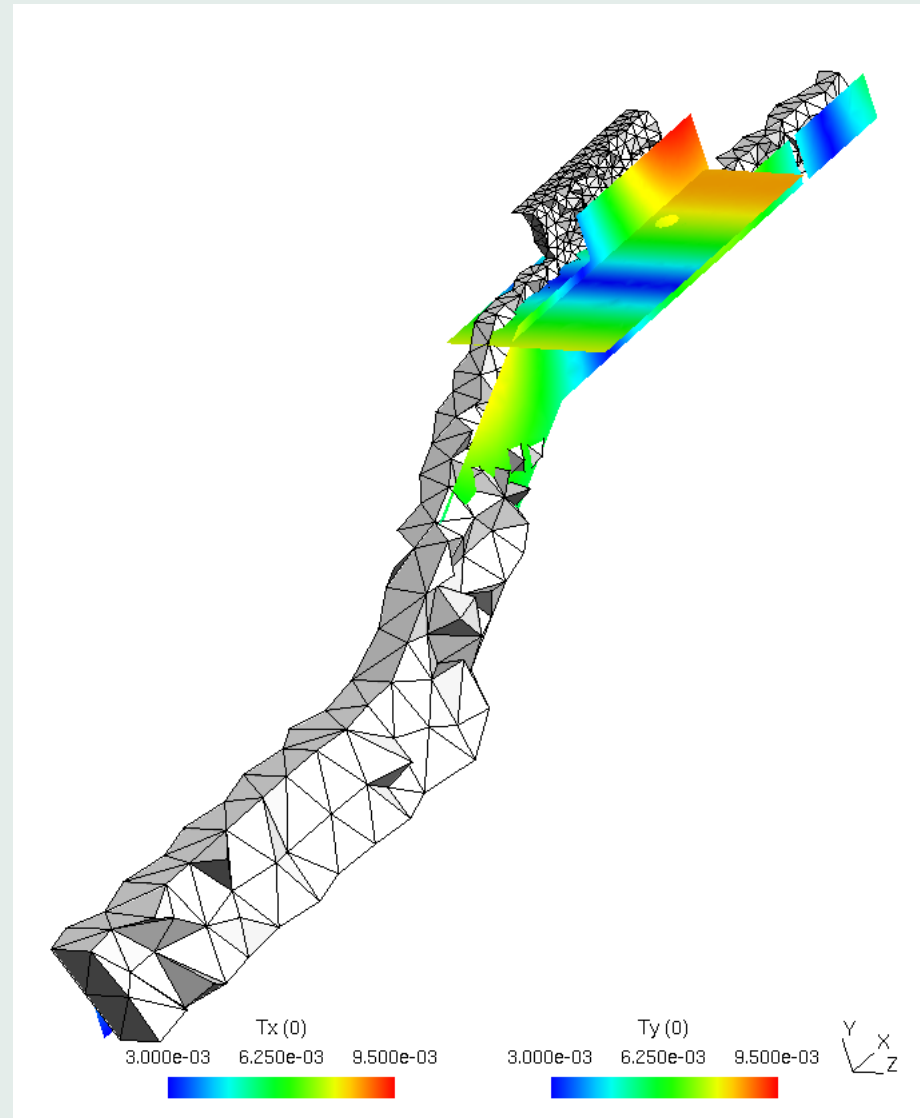
Page 73 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit



Pakiety MES

- FreeFEM++, FreeFEM3D
- Calculix
- Alberta
- GetFEM++
- Salome-MECA

Obliczenia adaptacyjne:

- Alberta
- Deal.II
- Hermes2D, Hermes3D, FEMHub

Home Page

Title Page

◀◀

▶▶

◀

▶

Page 74 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

Home Page

Title Page



Page 75 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

Wizualizacja symulacji komputerowych

- matplotlib – bazuje na Pythonie
- gnuplot
- ParaView
- OpenDX

ParaView

Home Page

Title Page

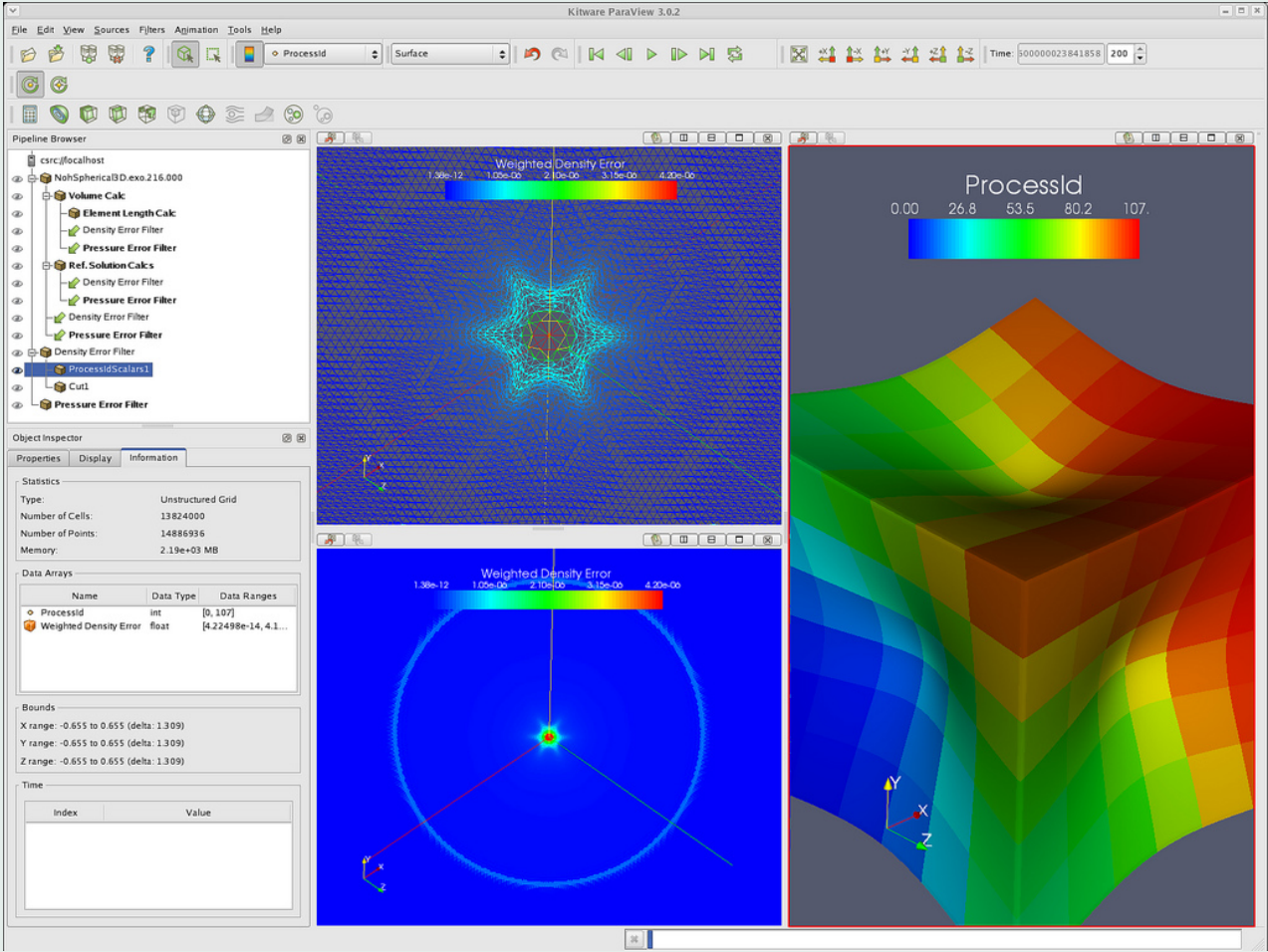
Page 76 of 128

Go Back

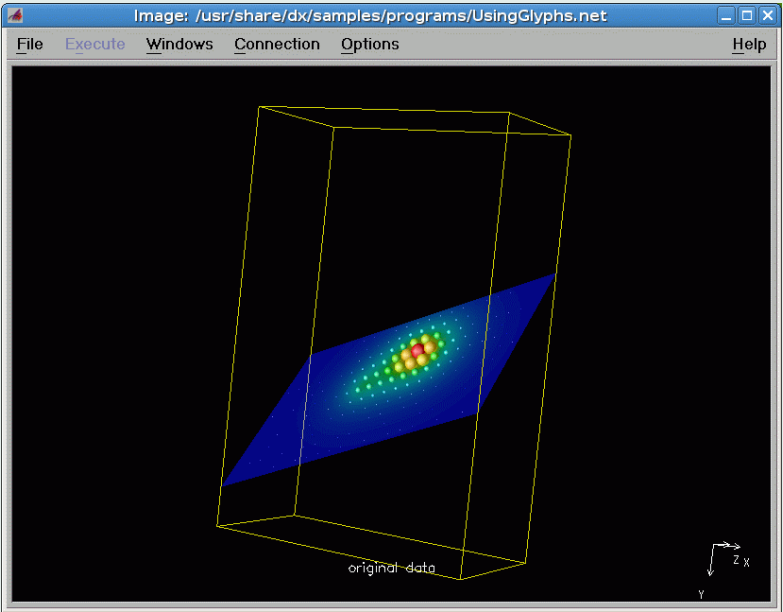
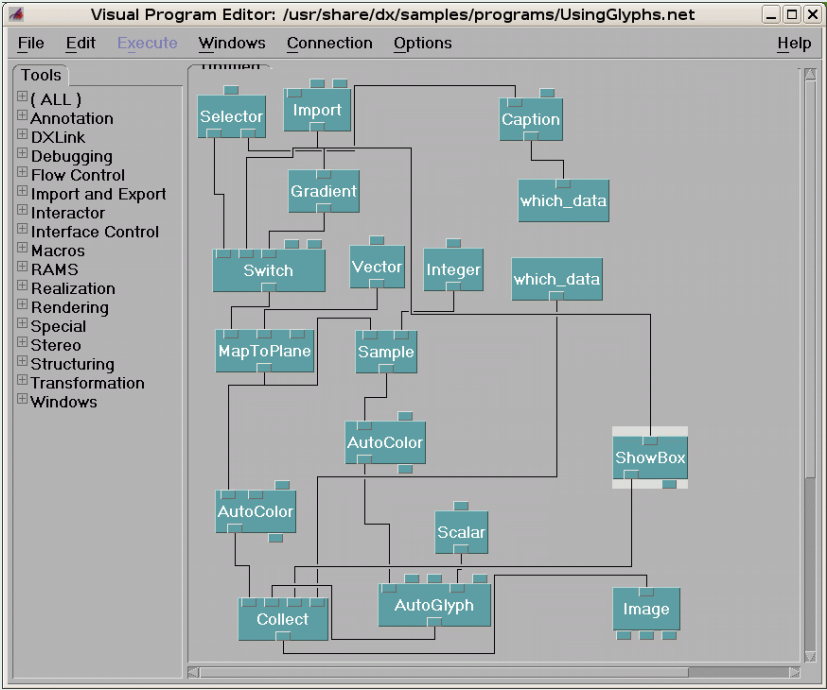
Full Screen

Close

Quit



OpenDX



Control Panel

MapToPlane point:

Selector

original data

AutoGlyph scale:

Sample density

300

0.90

Close Help

Home Page

Title Page

Page 77 of 128

Go Back

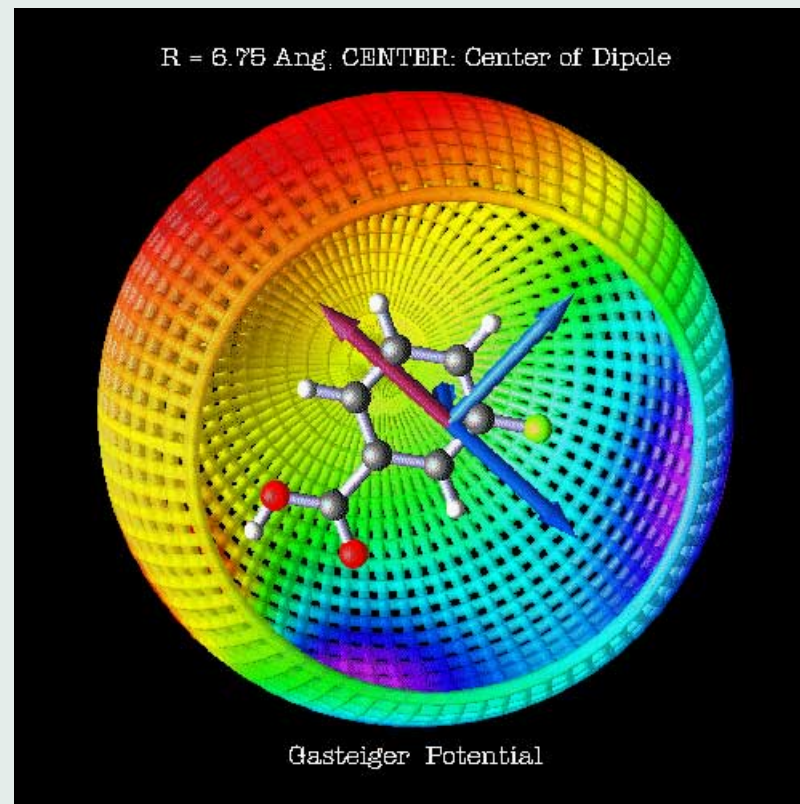
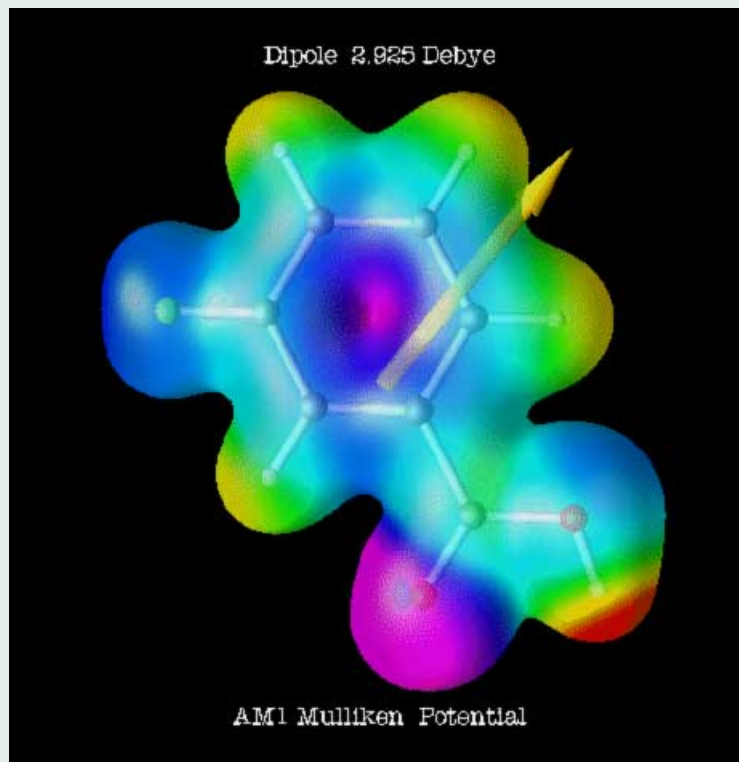
Full Screen

Close

Quit

OpenDX : chemia

Wizualizacja potencjałów chemicznych wokół cząsteczki.



<http://www.opendx.org/highlights.php>

kategoria "Chemistry"

Home Page

Title Page

◀

▶

◀

▶

Page 78 of 128

Go Back

Full Screen

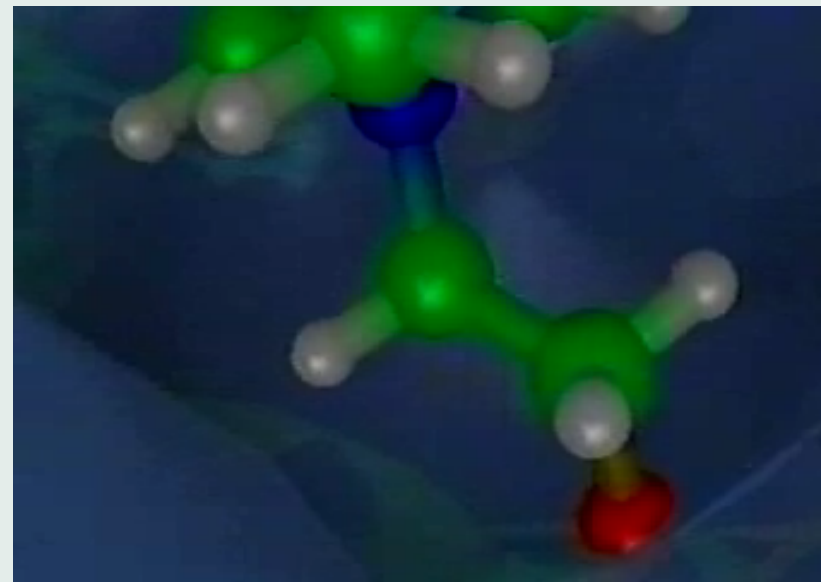
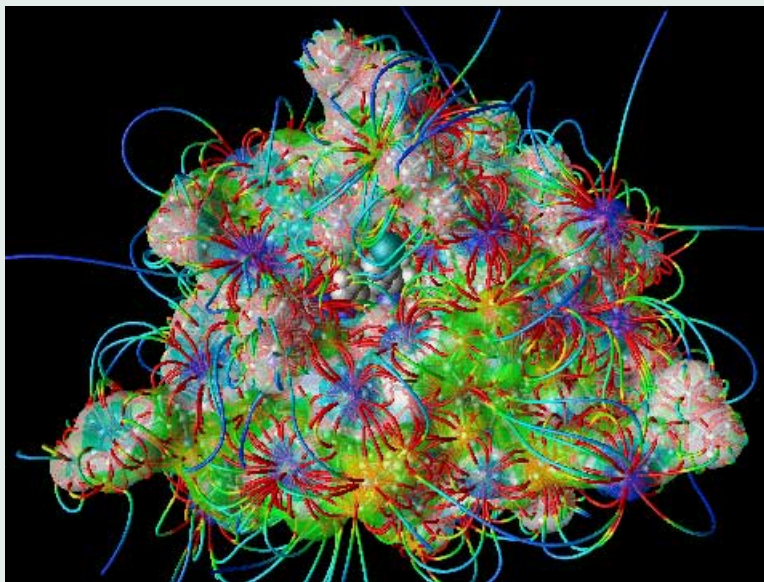
Close

Quit

OpenDX : chemia

Po lewej wiązania i potencjał elektrostatyczny cząsteczki leku zwalczającego HIV-1

Po prawej acetolcholinoesteraza



<http://www.opendx.org/highlights.php>,
kategoria “Chemistry”

Home Page

Title Page

◀◀

▶▶

◀

▶

Page 79 of 128

Go Back

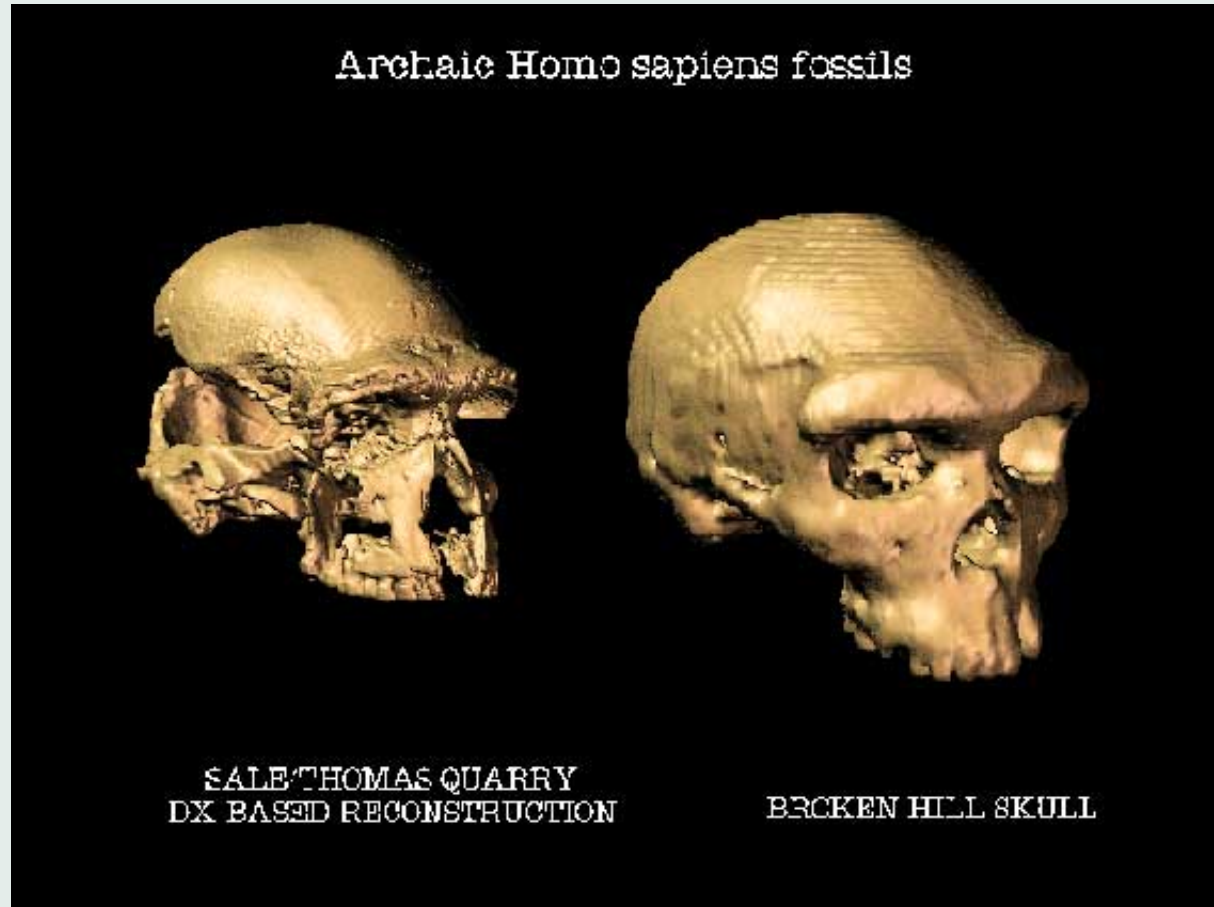
Full Screen

Close

Quit

OpenDX : antropologia

Po lewej – rekonstrukcja czaszki humanoida sprzed 400 tys lat.



<http://www.opendx.org/highlights.php>

kategoria "Anthropology"

Home Page

Title Page

◀

▶

◀

▶

Page 80 of 128

Go Back

Full Screen

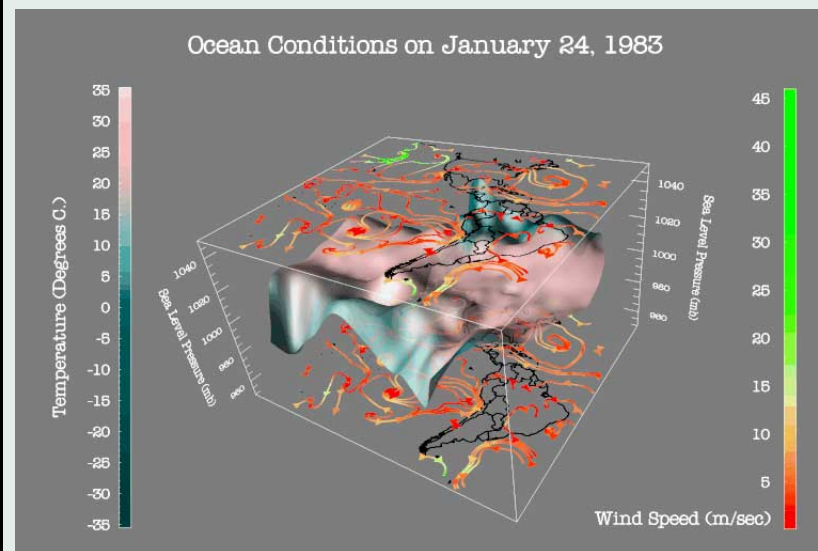
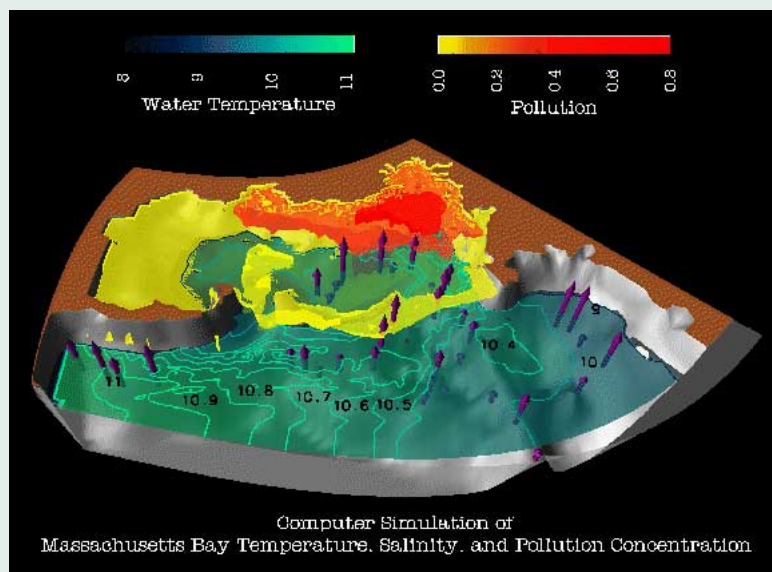
Close

Quit

OpenDX : oceanografia

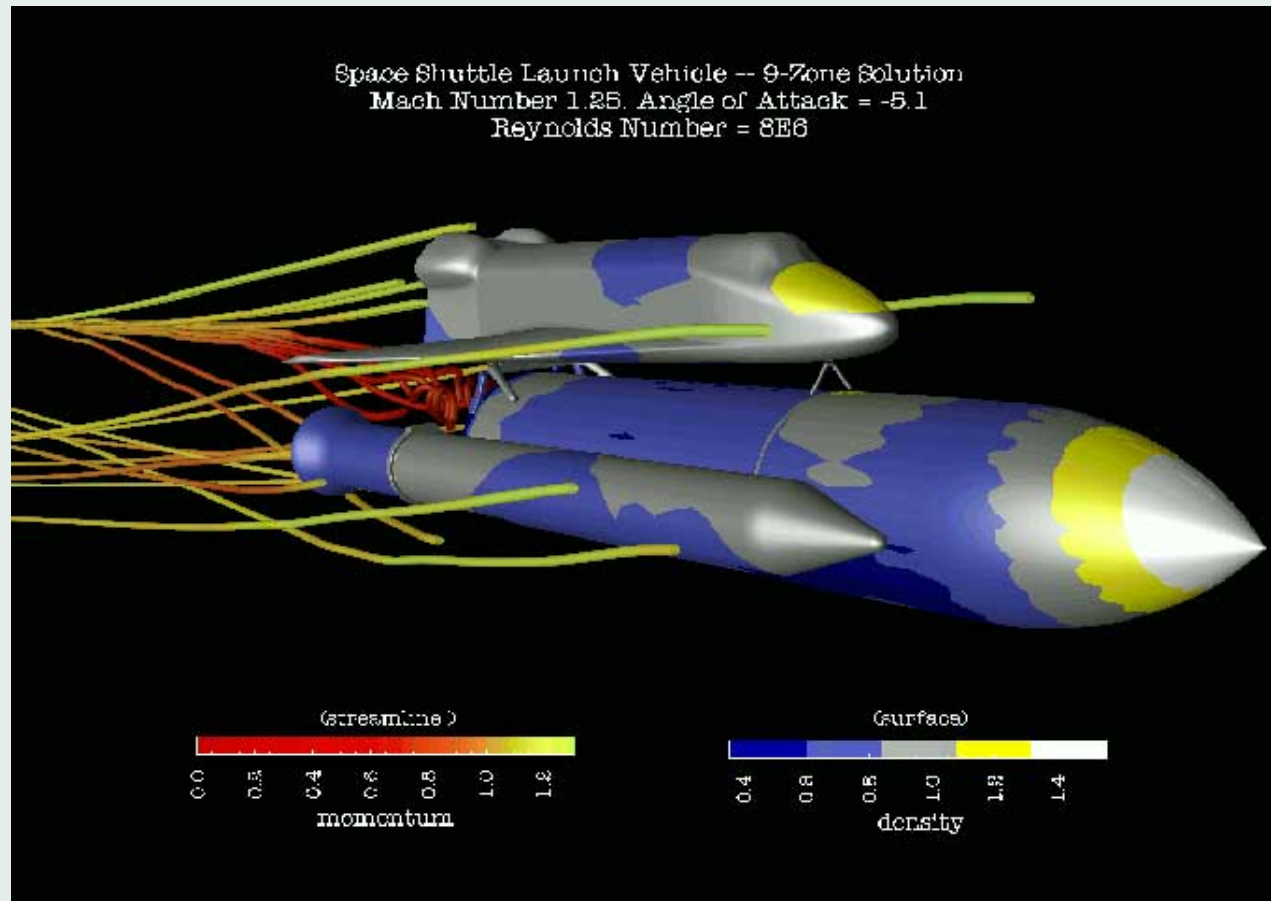
Po lewej wizualizacja zasolenia, temperatury i zanieczyszczeń w zatoce Massachuset.

Po prawej wizualizacja parametrów oceanu u wybrzeży obu Ameryk.



<http://www.opendx.org/highlights.php>
kategoria "Oceanography"

OpenDX : aerodynamika



<http://www.opendx.org/highlights.php>
kategoria "CFD"

Home Page

Title Page

◀

▶

◀

▶

Page 82 of 128

Go Back

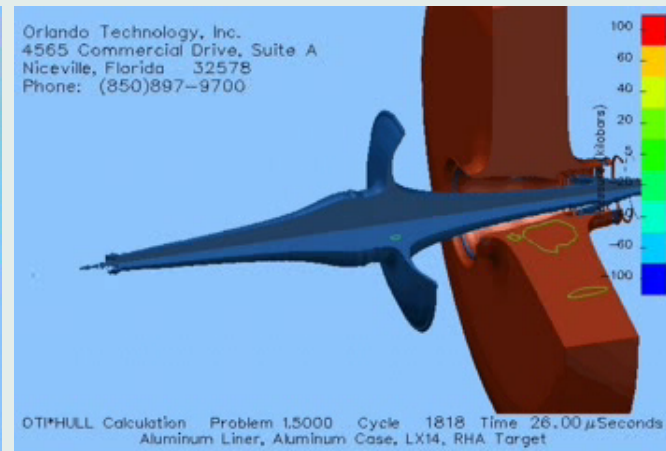
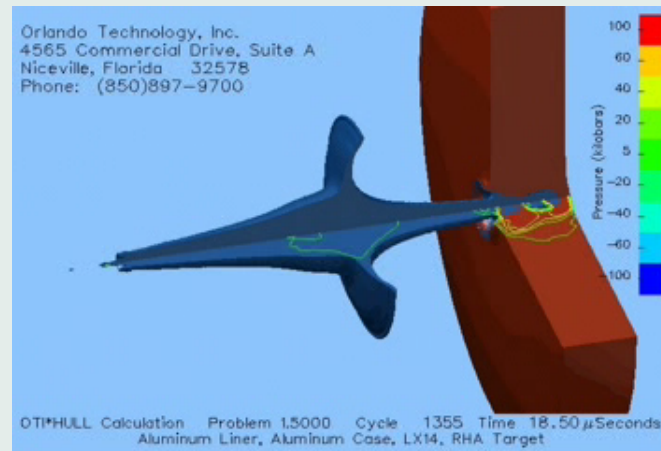
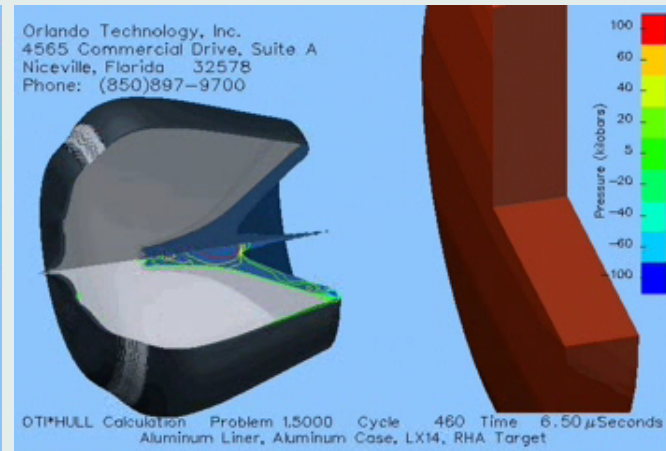
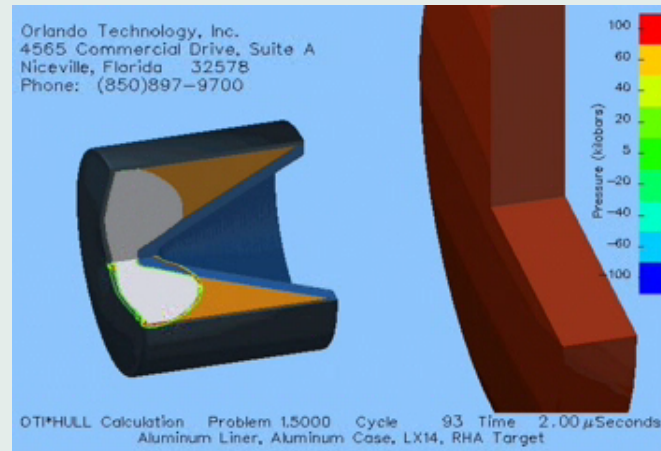
Full Screen

Close

Quit

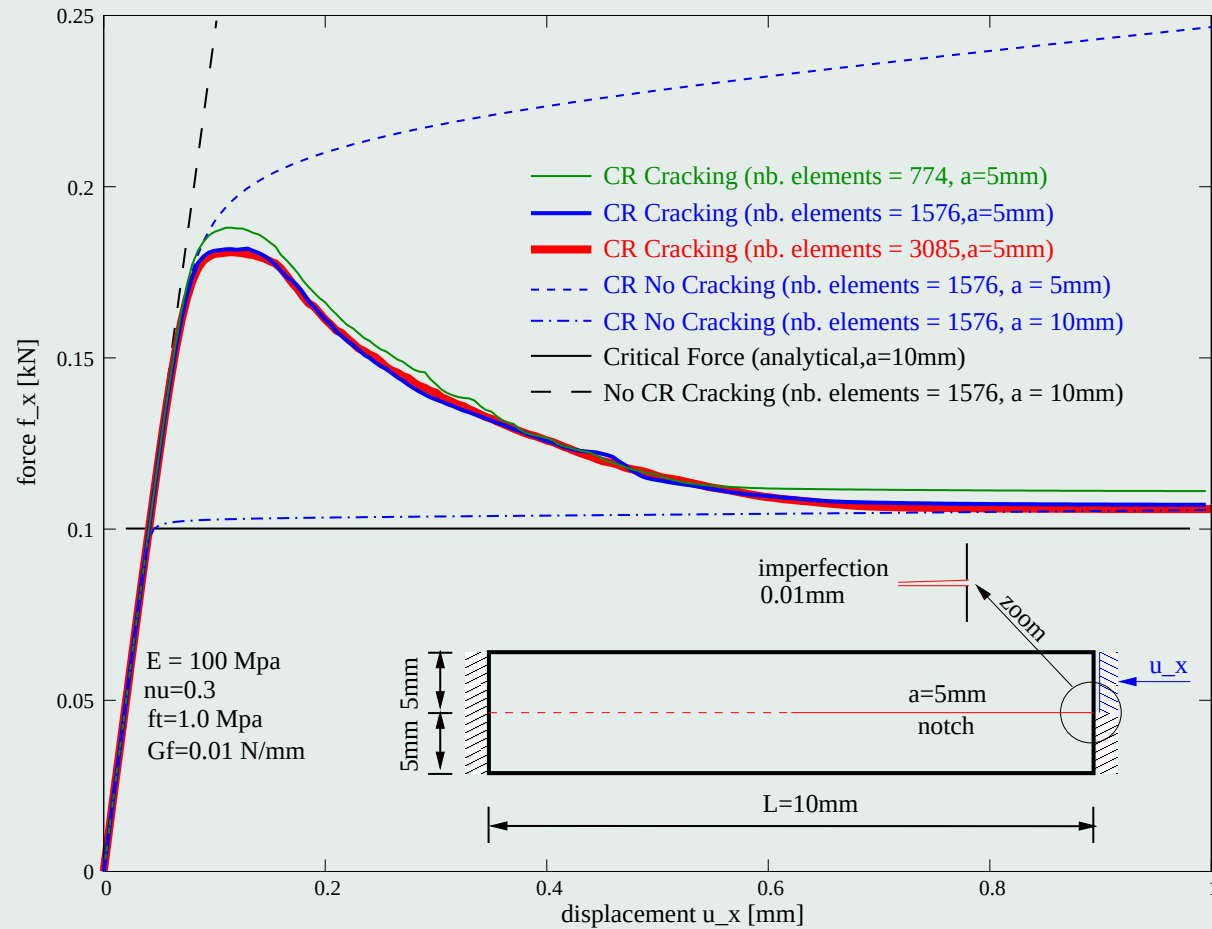
OpenDX : mechanika materiałów

Symulacja działania pocisku kumulacyjnego.



<http://www.opendx.org/highlights.php>
kategoria "Physics and Mathematics"

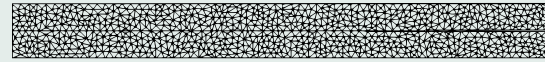
OpenDX : mechanika pękania



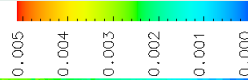
Rysunki dzięki uprzejmości dr Łukasza Kaczmarczyka.

OpenDX : mechanika pękania

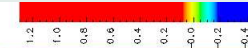
$u_x=0.005\text{mm}$, $u_y=0.004\text{mm}$, $f_x=0.0124\text{kN}$



rotation angle



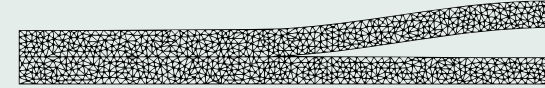
sigma_x



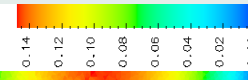
sigma_y



$u_x=0.1\text{mm}$, $u_y=0.49\text{mm}$, $f_x=0.180\text{kN}$



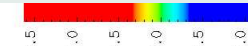
rotation angle



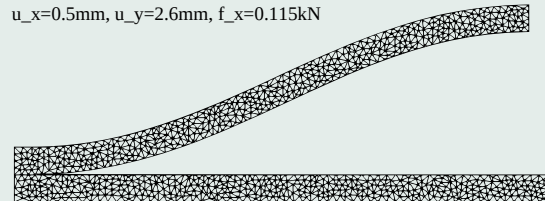
sigma_x



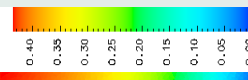
sigma_y



$u_x=0.5\text{mm}$, $u_y=2.6\text{mm}$, $f_x=0.115\text{kN}$



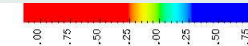
rotation angle



sigma_x



sigma_y

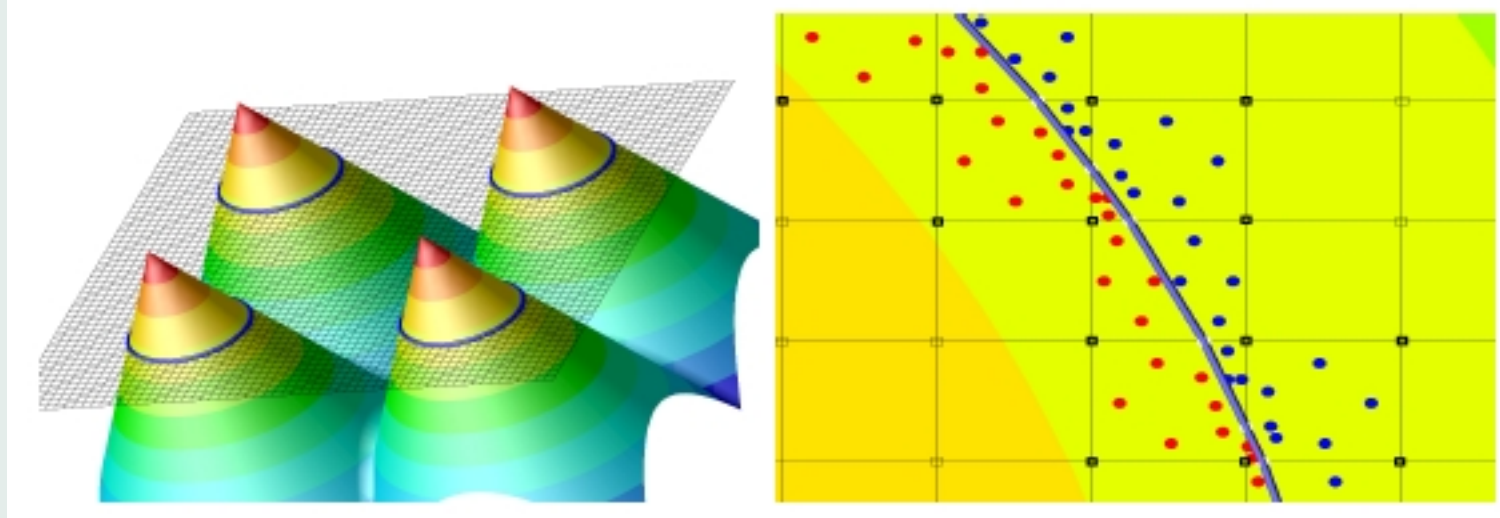


Rysunki dzięki uprzejmości dr Łukasza Kaczmarczyka.

OpenDX : elementy XFEM

Po lewej ilustracja metody zbiorów poziomujących (level set).

Po prawej interfejs wewnątrz elementów i specjalnie dobrane punkty całkowania.



Rysunki dzięki uprzejmości dr Łukasza Kaczmarczyka.

Home Page

Title Page



Page 87 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

Wizualizacja grafów

- GraphViz
- Tulip

Modelowanie mikrostruktury materiałów

Generacja mikrostruktur w 3D

- Microstructure builder – zestaw oprogramowania do generacji modeli na podstawie danych z mikroskopów elektronowych
- Wizualizacja mikrostruktur w 3D za pomocą narzędzi bazujących na bibliotece VTK

Analiza mikrostruktur w 2D

Automatyczna generacja i analiza modeli MES z rastrowych obrazów mikrostruktur za pomocą programu OOF2

Microstructure Builder

- Zestaw oprogramowania opracowany przez Joe Fridy (Alcoa), David Saylor (CMU, NIST) przy współpracy Tony Rollett, Kee-Young Jung, Steve Sintay and Abhijit Brahme. Wykorzystuje mapy EBSD wygenerowane w trzech ortogonalnych płaszczyznach do zbudowania albo siatki powierzchniowej ziaren albo regularnej siatki voxelowej.
- Dystrybuowany w wersji źródłowej, wymaga: GNU Compiler Collection (Free) Fortran 90/95 compiler (g95** or gfortran are FREE) LAPACK Libraries (Free) PERL (Free)

Generacja geometrii ziaren

Oprogramowanie bazuje na założeniu, że ziarna materiału można aproksymować jako klastry złożone z elipsoid. Każda elipsoida jest opisywana przez swoje półosie

$$\left(\frac{x}{a}\right)^2 + \left(\frac{y}{b}\right)^2 + \left(\frac{z}{c}\right)^2 \leq 1 \quad (1)$$

Przy założeniu że elipsoidy mają tę samą wielkość i orientację przyjmuje się, że jednorodna funkcja dystrybucji elipsoid $f(a,b,c)$ pozwala na opisanie rozmiaru i kształtu ziaren. Pełna forma funkcji $f(a,b,c)$ nie daje się efektywnie wyznaczać, ale może być aproksymowana w następujący sposób:

$$f(a, b, c) = f(a, b) \cdot f(c, b) \quad (2)$$

gdzie funkcje $f(a, b)$ i $f(c, b)$ mogą być otrzymane ze zbioru ortogonalnych map ze skanów.

Procedura generacji mikrostruktury

1. Na podstawie funkcji $f(a,b,c)$ generowany jest początkowy zbiór elipsoid. Liczba elipsoid jest wielokrotnie większa niż złożona liczba ziaren (o czynnik 10 do 100)
2. Z wygenerowanego zbioru elipsoid wybiera się tylko minimalny podzbiór w którym, elipsoidy jak najmniej się pokrywają i jak najlepiej wypełniają przestrzeń. Do znalezienia optymalnej konfiguracji korzysta się z algorytmu symulowanego wyżarzania.
3. W otrzymanym podzbiorze elipsoid mogą być obszary, które są pokryte przez więcej niż jedną elipsoidę. W celu wygenerowania rozłącznych ziaren ściśle wypełniających przestrzeń korzysta się z algorytmów bazujących na automatach komórkowych bądź alternatywnie z algorytmów wykorzystujących diagramy Voronoi

Home Page

Title Page

◀

▶

◀

▶

Page 92 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

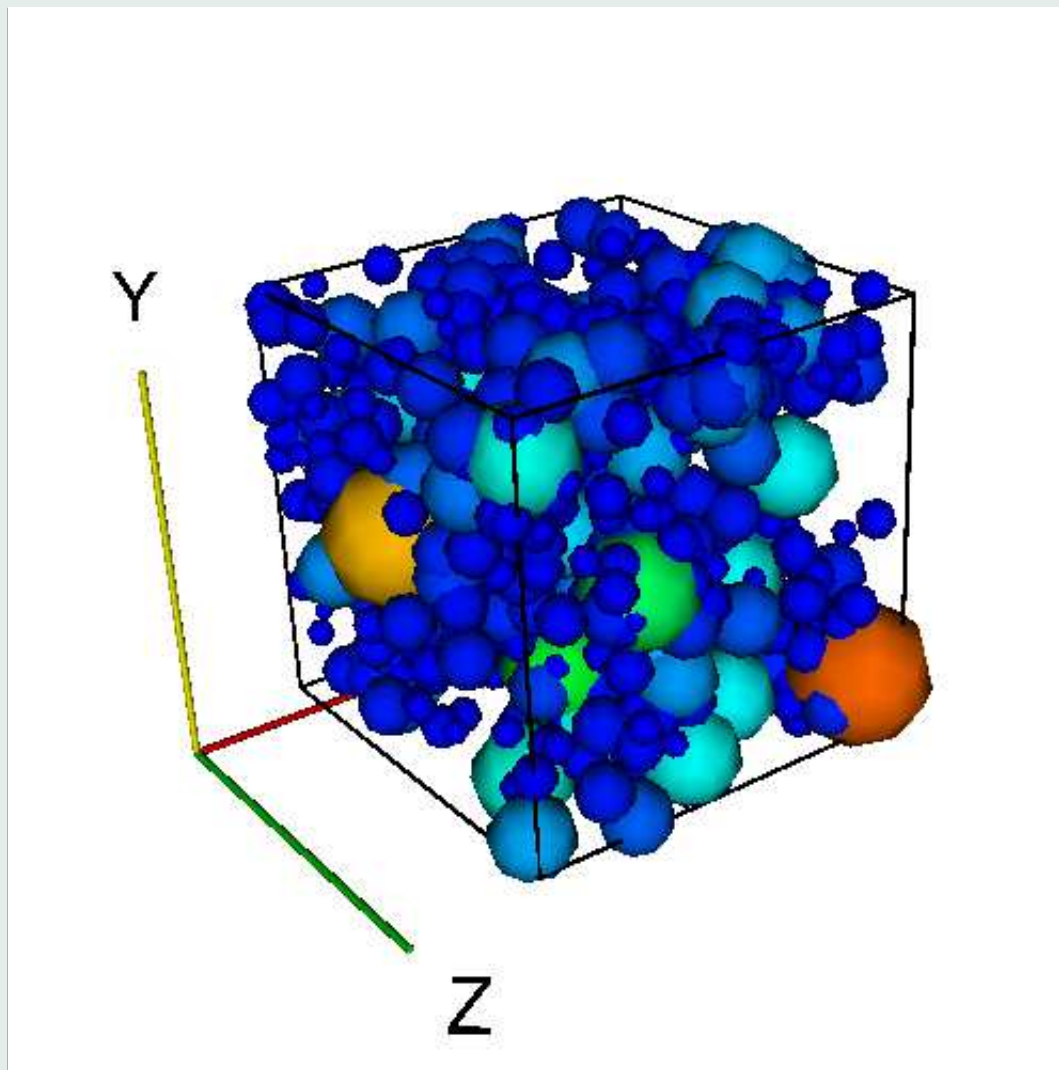
Mikrostruktury o ziarnach sferycznych

Początkowa liczba elipsoid: 585

Liczba elipsoid w optymalnym upakowaniu: 469

Liczba wygenerowanych ziaren: 22

Mikrostruktury o ziarnach sferycznych



Początkowa dystrybucja 585 elipsoid.

[Home Page](#)

[Title Page](#)

◀

▶

◀

▶

Page 93 of 128

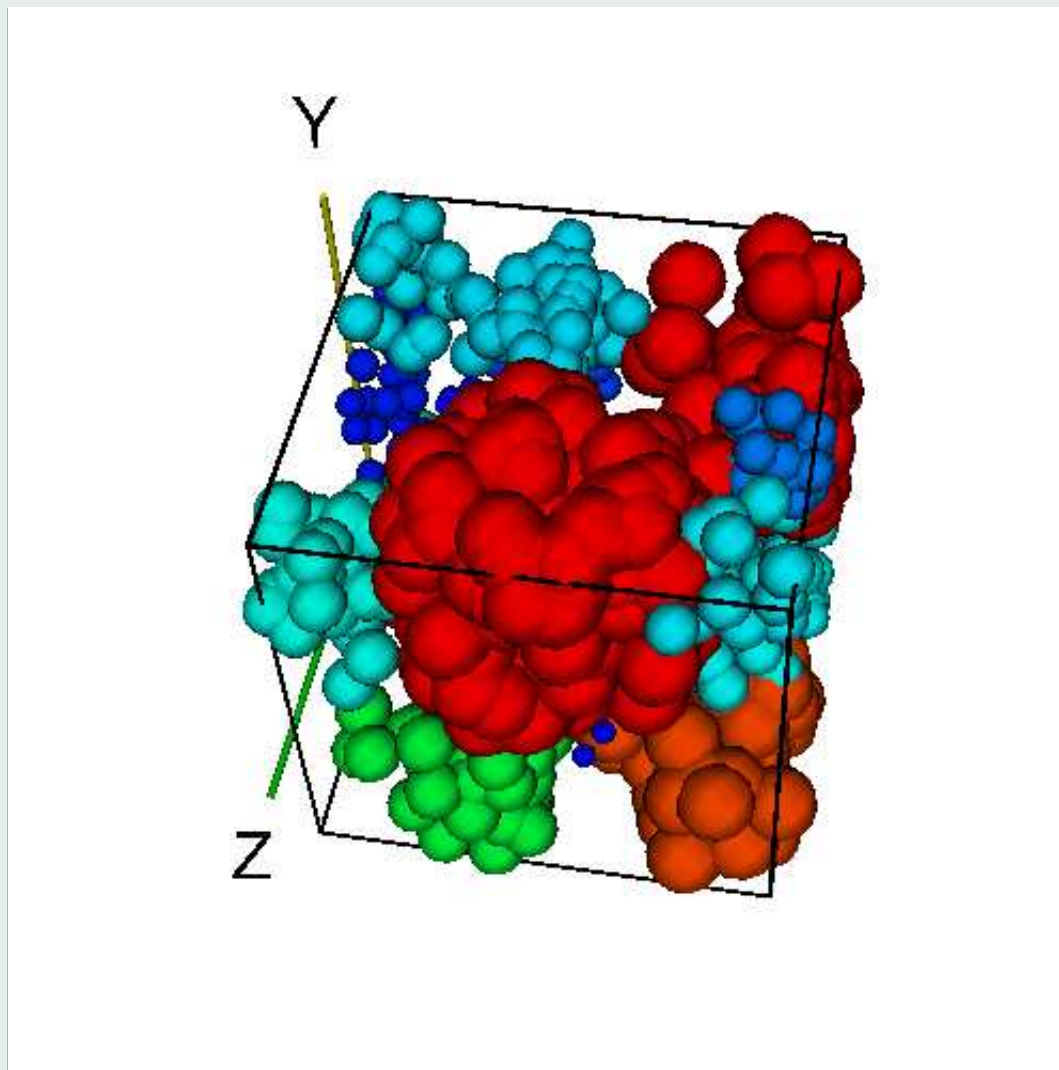
[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

Mikrostruktury o ziarnach sferycznych



Optymalna dystrybucja 469 elipsoid.

[Home Page](#)

[Title Page](#)

◀

▶

◀

▶

Page 94 of 128

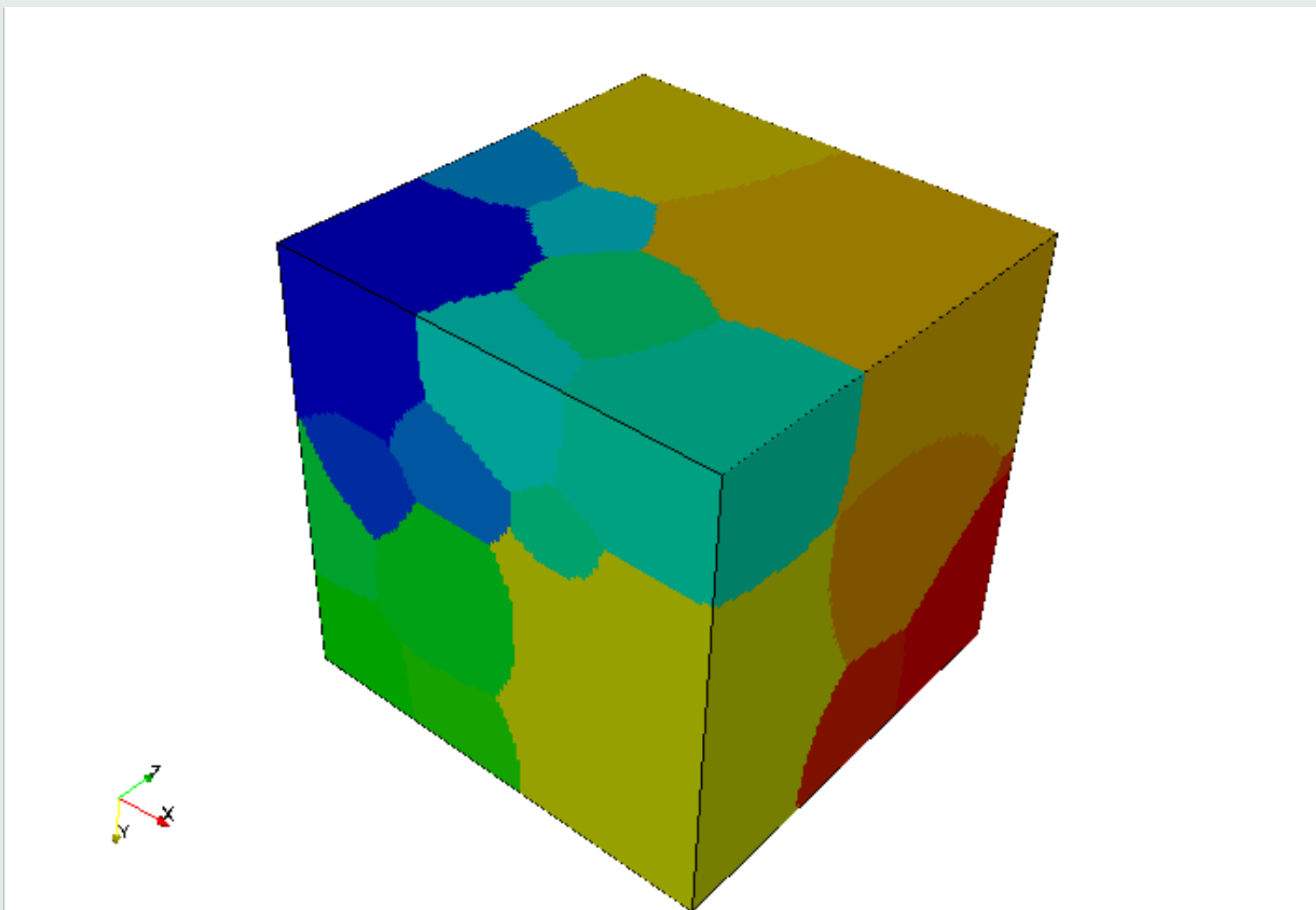
[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

Mikrostruktury o ziarnach sferycznych



Voxelowy model struktury złożonej z 22 ziaren.

[Home Page](#)

[Title Page](#)

◀

▶

◀

▶

Page 95 of 128

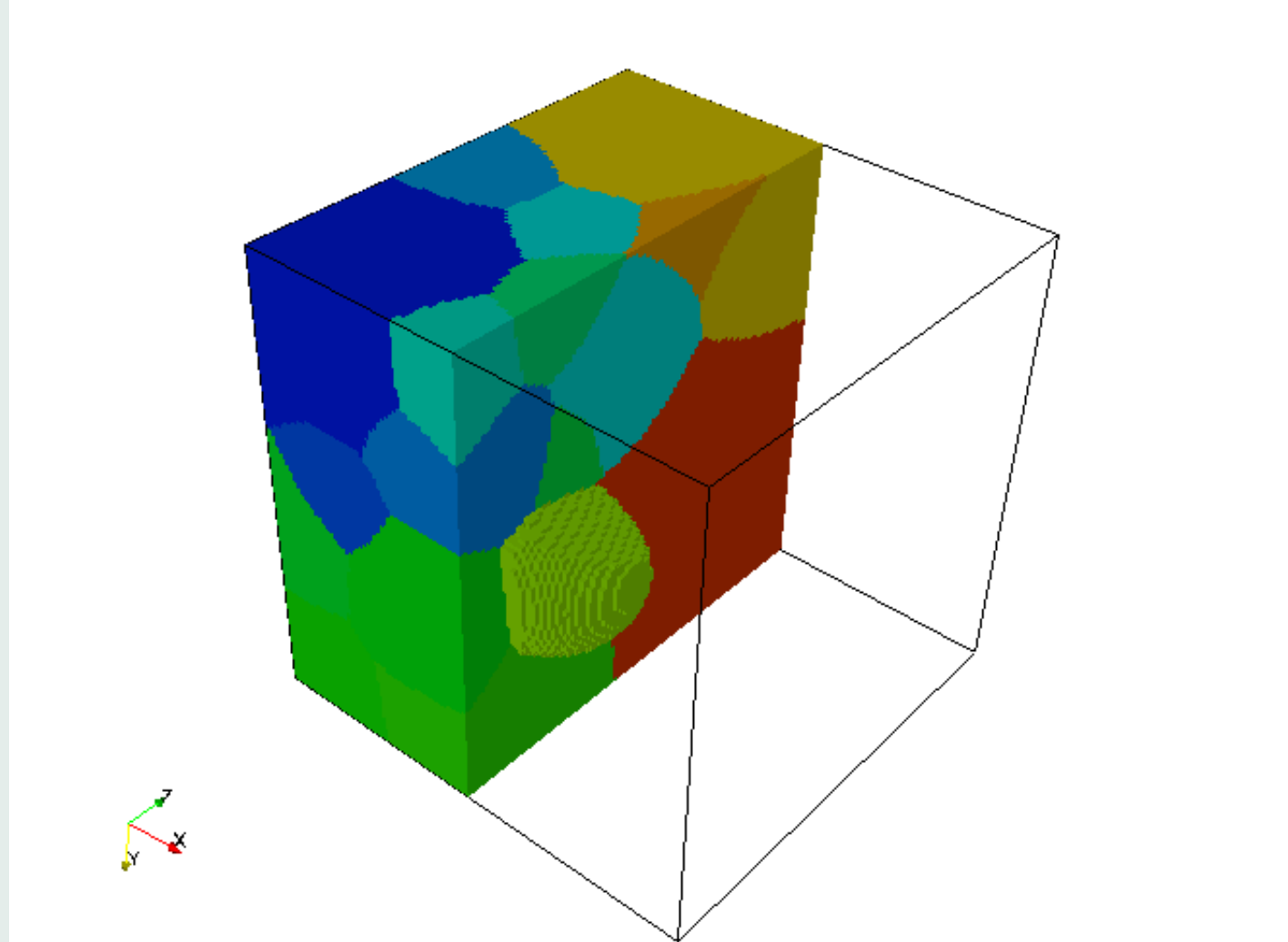
[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

Mikrostruktury o ziarnach sferycznych



Przekrój przez mikrostrukturę. Dobrze widoczny charakter voxelowy modelu.

[Home Page](#)

[Title Page](#)

◀◀

▶▶

◀

▶

Page 96 of 128

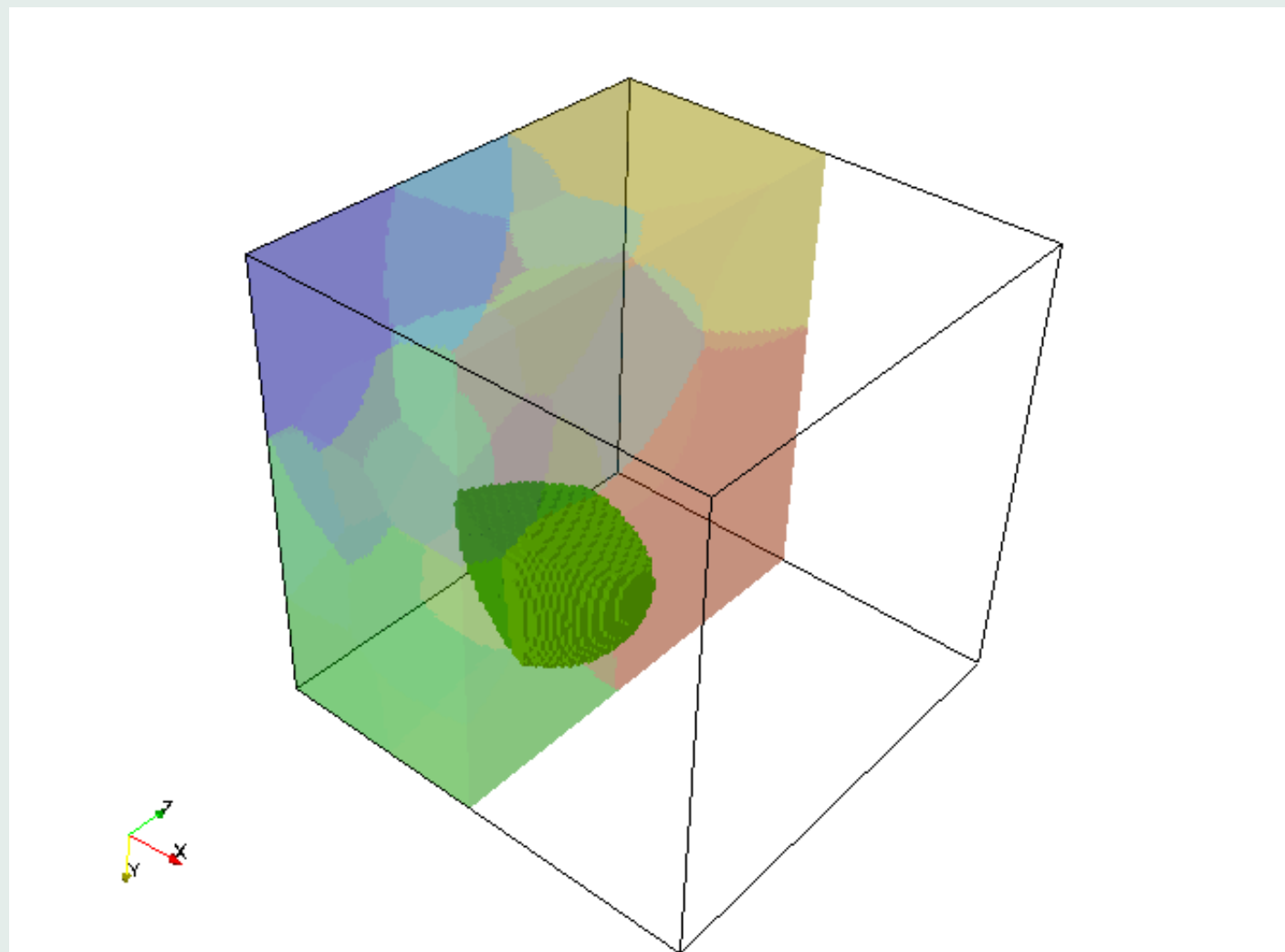
[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

Mikrostruktury o ziarnach sferycznych



Inny sposób wizualizacji mikrostruktury.

[Home Page](#)

[Title Page](#)

◀◀

▶▶

◀

▶

Page 97 of 128

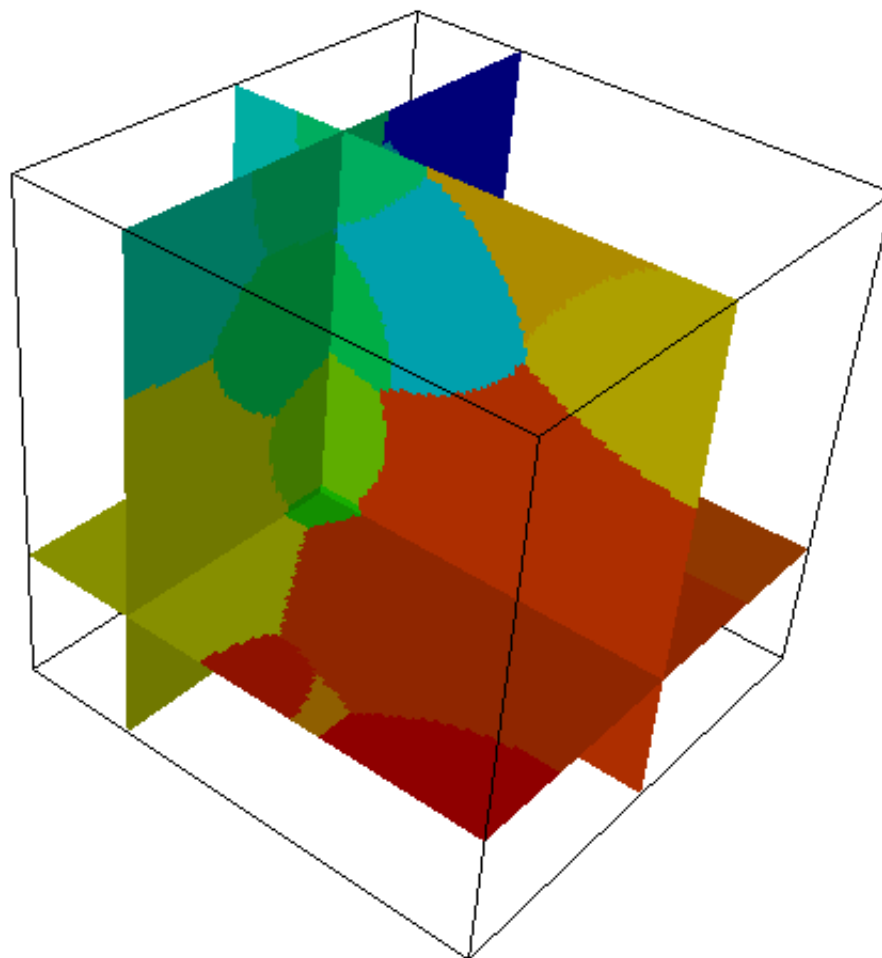
[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

Mikrostruktury o ziarnach sferycznych



Przekroje przez mikrostrukturę

[Home Page](#)

[Title Page](#)

◀◀

▶▶

◀

▶

Page 98 of 128

[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

Home Page

Title Page

◀

▶

◀

▶

Page 99 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

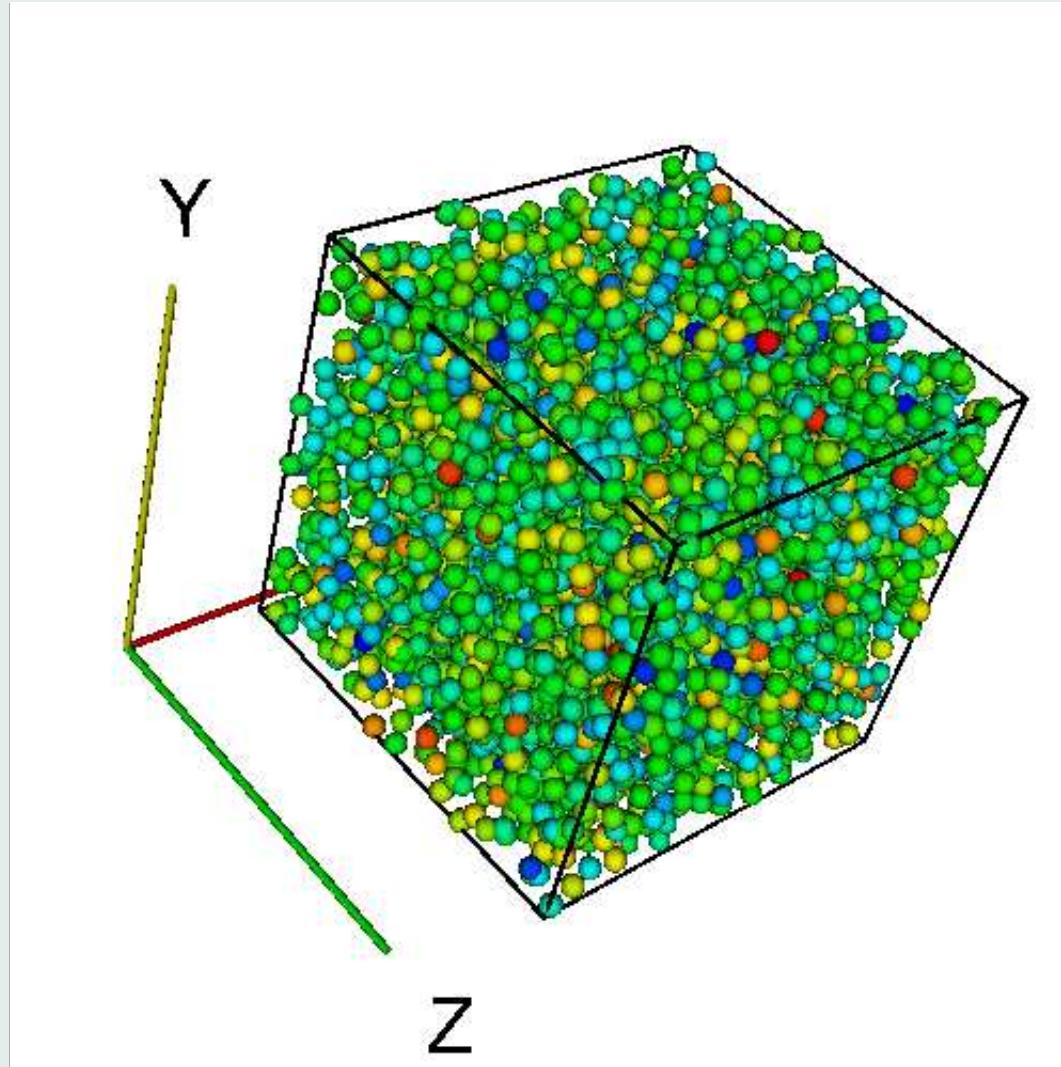
Mikrostruktura średniej wielkości

Początkowa liczba elipsoid: 4681

Liczba elipsoid w optymalnym upakowaniu: 3516

Liczba ziaren: 164

Mikrostruktura średniej wielkości



Początkowa dystrybucja 4681 elipsoid.

[Home Page](#)

[Title Page](#)

◀

▶

◀

▶

Page 100 of 128

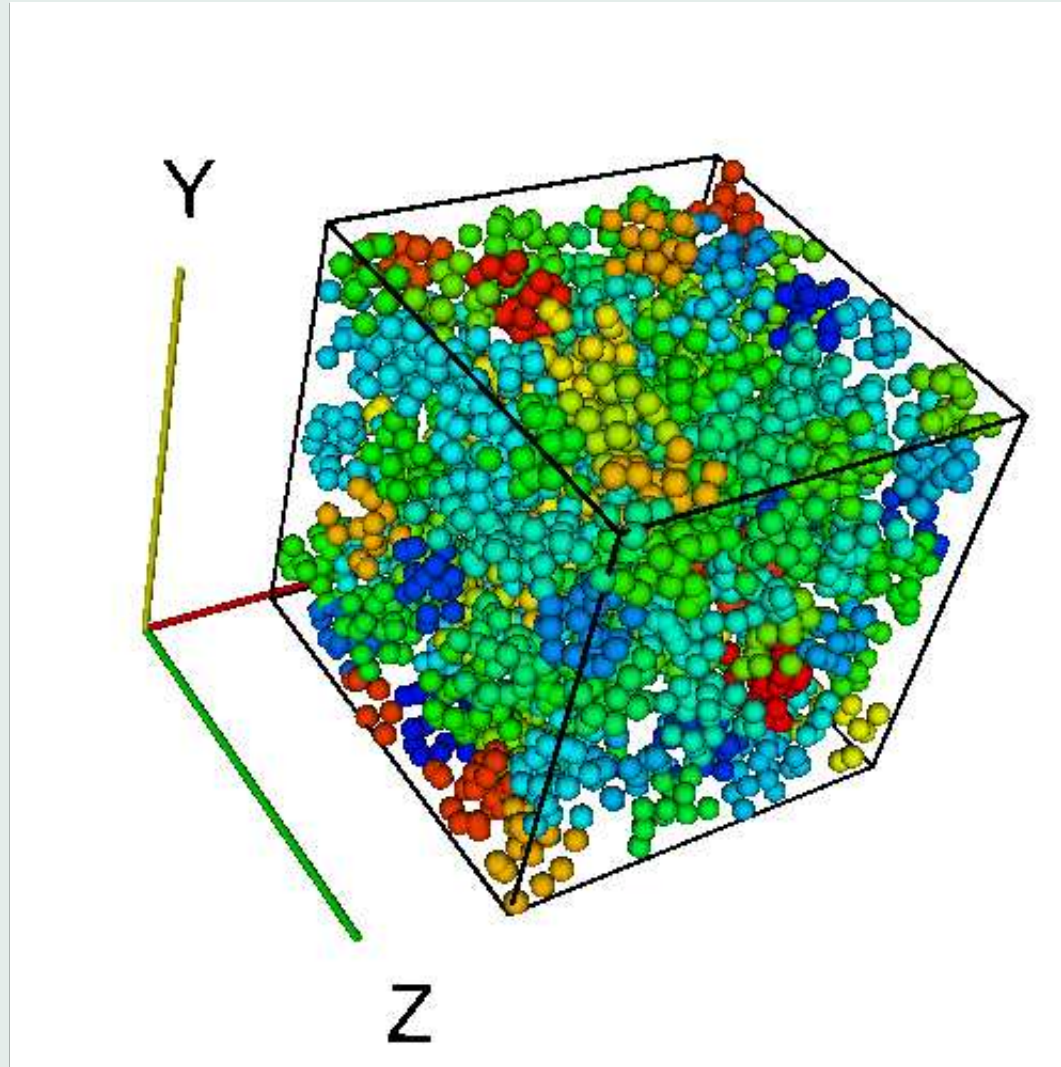
[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

Mikrostruktura średniej wielkości



Optymalna dystrybucja 3516 elipsoid.

[Home Page](#)

[Title Page](#)

◀

▶

◀

▶

Page 101 of 128

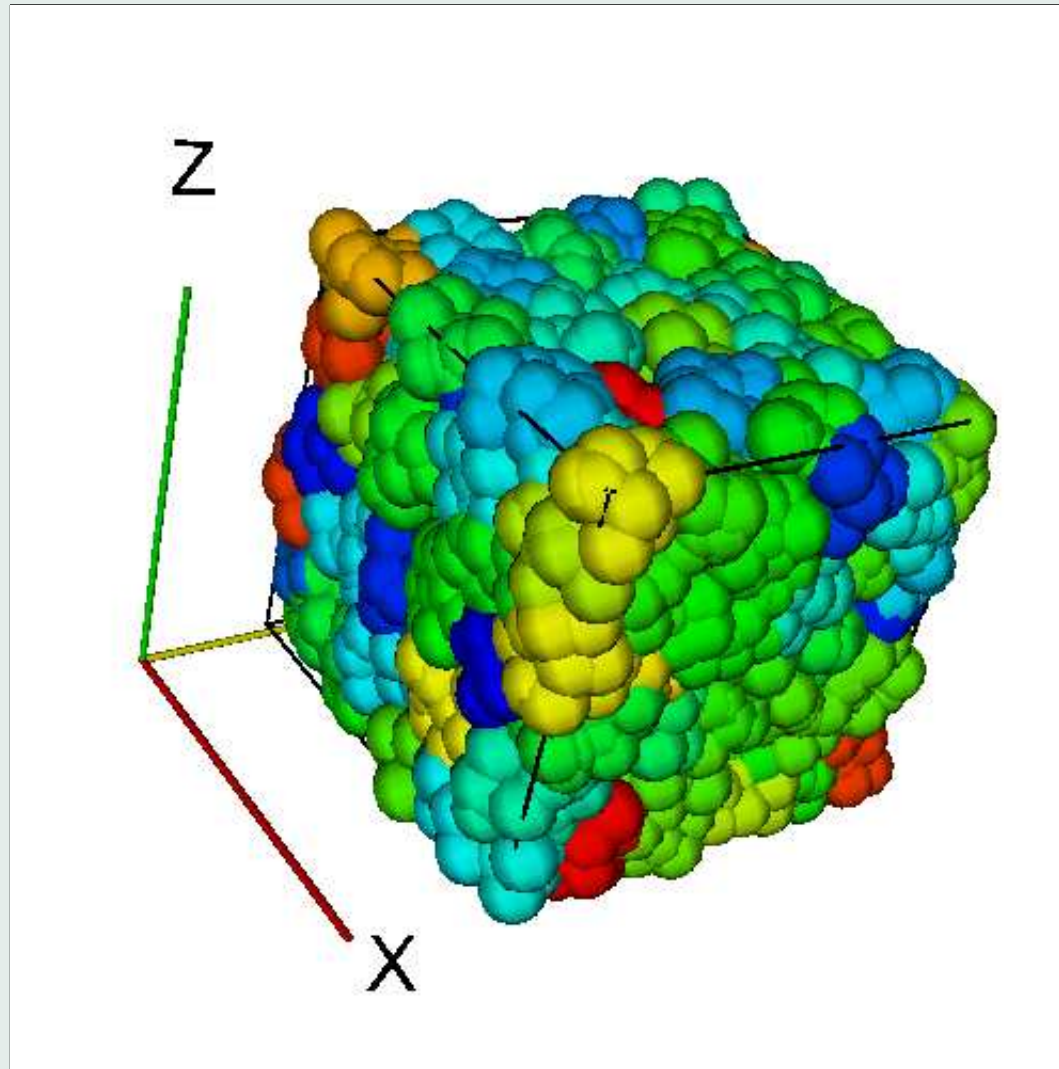
[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

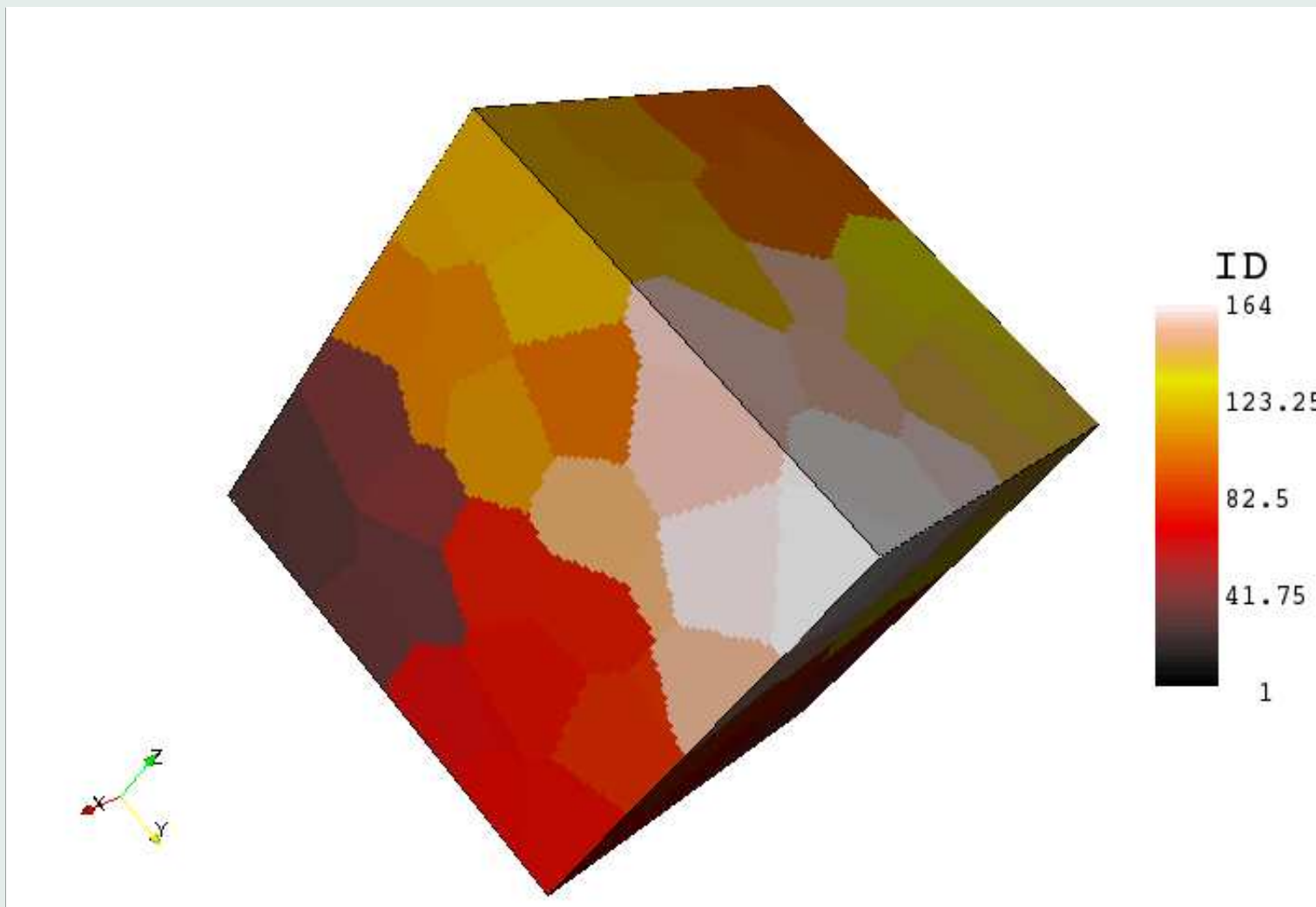
[Quit](#)

Mikrostruktura średniej wielkości



Optymalna dystrybucja elipsoid. Elipsoidy nie zostały przeskalowane w celu pokazania jak w przybliżeniu zostaną zagregowane w ziarna

Mikrostruktura średniej wielkości



Mikrostruktura ze 164 ziarnami. Alternatywna mapa kolorów ziaren

Home Page

Title Page

◀

▶

◀

▶

Page 103 of 128

Go Back

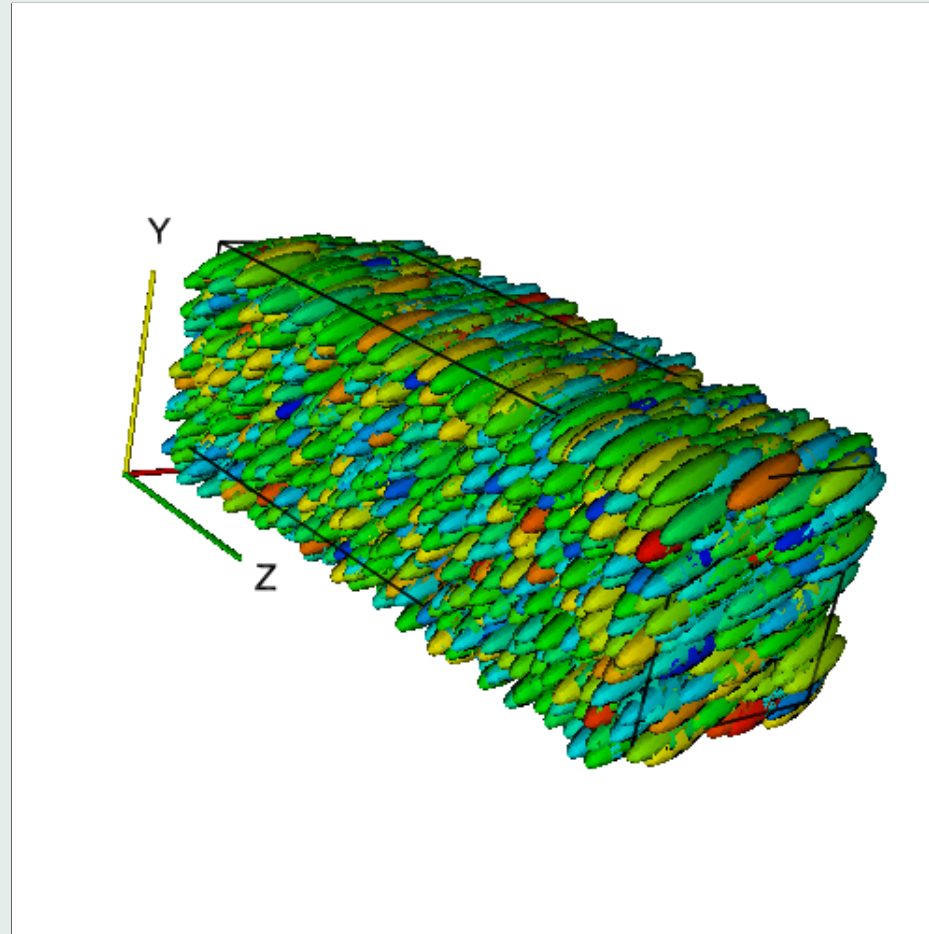
Full Screen

Close

Quit

Mikrostruktura o ziarnach wydłużonych

Ziarna w modelu są w przybliżeniu 5-cio krotnie dłuższe w kierunku Z niż w kierunkach X i Y. Ostatecznie model będzie złożony z 15 ziaren.



Początkowa dystrybucja elipsoid

Home Page

Title Page

◀

▶

◀

▶

Page 104 of 128

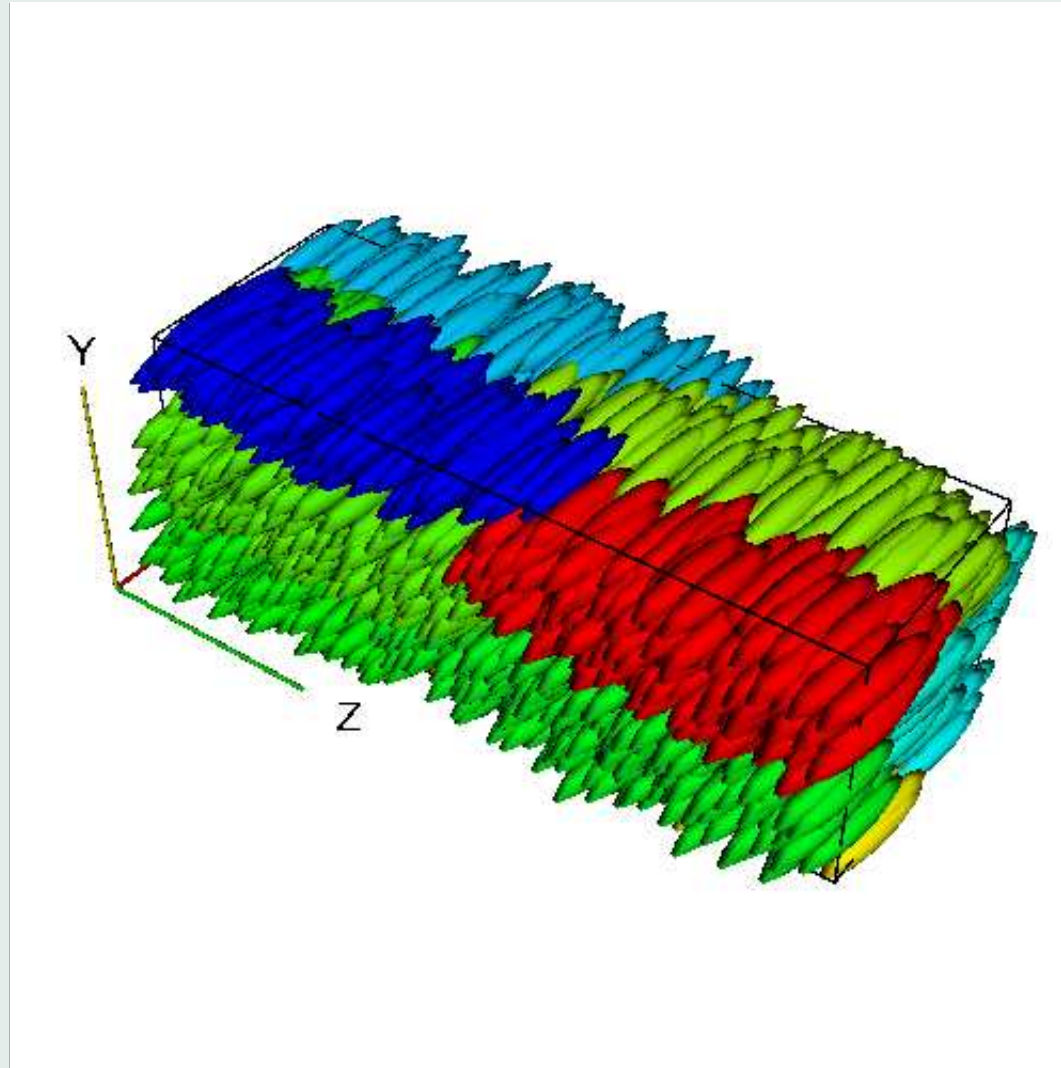
Go Back

Full Screen

Close

Quit

Mikrostruktura o ziarnach wydłużonych



Optymalne upakowanie elipsoid.

[Home Page](#)

[Title Page](#)

◀

▶

◀

▶

Page 105 of 128

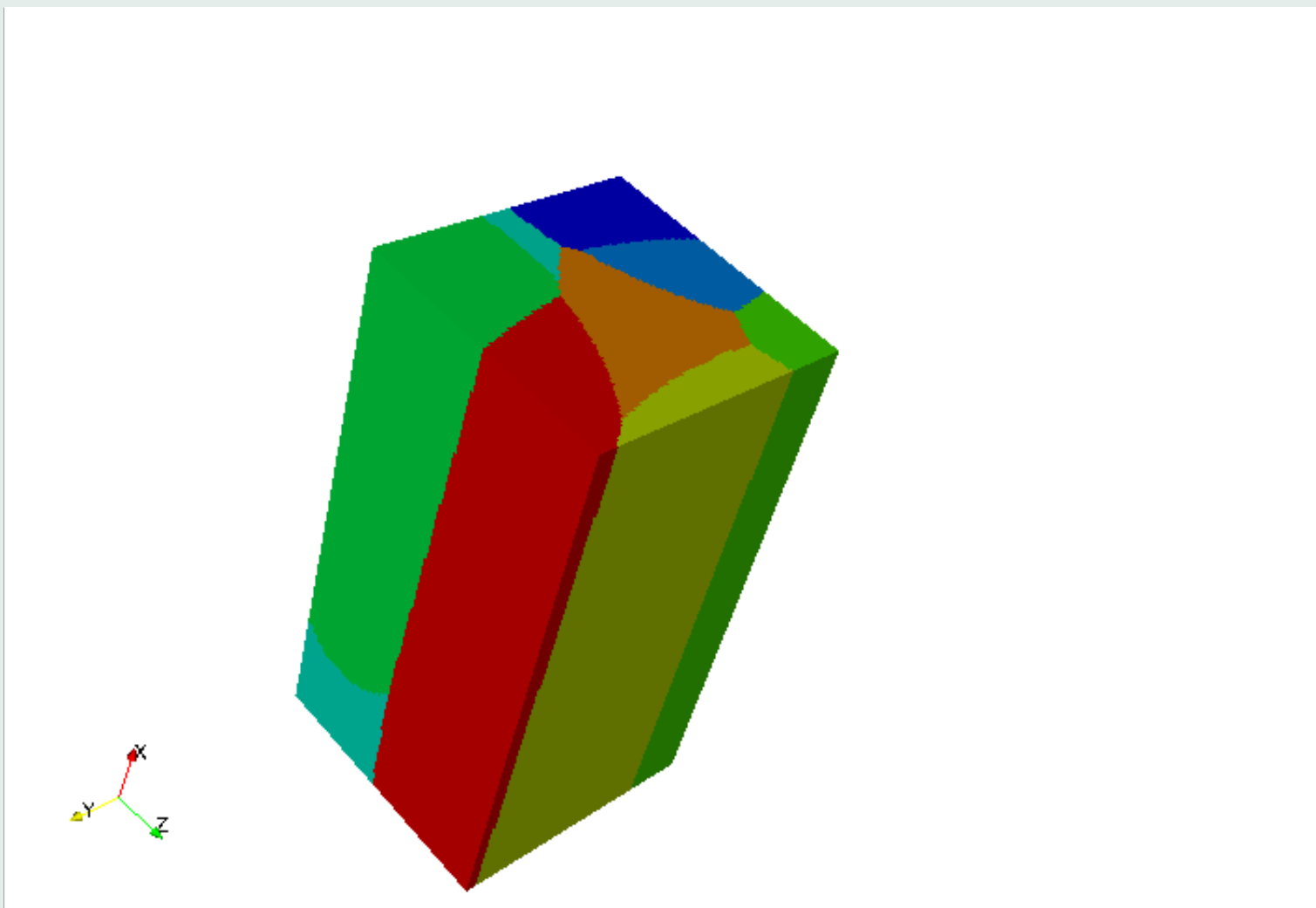
[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

Mikrostruktura o ziarnach wydłużonych



Mikrostruktura z wydłużonymi ziarnami.

[Home Page](#)

[Title Page](#)

◀

▶

◀

▶

Page 106 of 128

[Go Back](#)

[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

Analiza mikrostruktur w 2D programem OOF2

Program OOF2 jest połączeniem programu do obróbki obrazów rastrowych z programem do analizy metodą elementów skończonych. OOF2 umożliwia wyodrębnienie poszczególnych podobszarów mikrostruktury, przypisanie im własności fizycznych, wygenerowanie i dopasowanie siatki do geometrii mikrostruktury oraz przeprowadzenie analizy zdefiniowanych pól fizycznych metodą elementów skończonych. Program OOF2 jest zaimplementowany w językach C++ i Python i możliwe jest jego rozbudowywanie o dodatkowe elementy związane albo z analizą obrazów rastrowych albo z symulacjami MES.

OOF2 jest rozwijany i dystrybuowany przez NIST/MSEL Center for Theoretical and Computational Materials Science

<http://www.ctcms.nist.gov/oof>.

Home Page

Title Page

◀

▶

◀

▶

Page 107 of 128

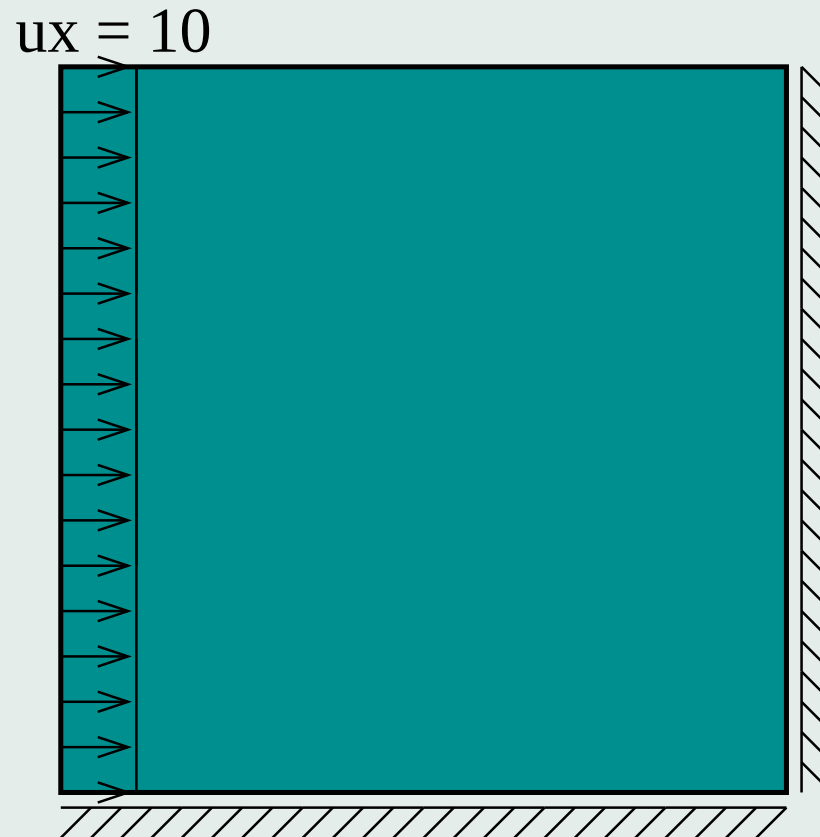
Go Back

Full Screen

Close

Quit

Etapy analizy programem OOF2



Model mechaniczny obszaru reprezentatywnego (RVE).

Home Page

Title Page

◀◀

▶▶

◀

▶

Page 108 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

Etapy analizy programem OOF2

Wczytanie mikrostruktury



Home Page

Title Page

◀◀

▶▶

◀

▶

Page 109 of 128

Go Back

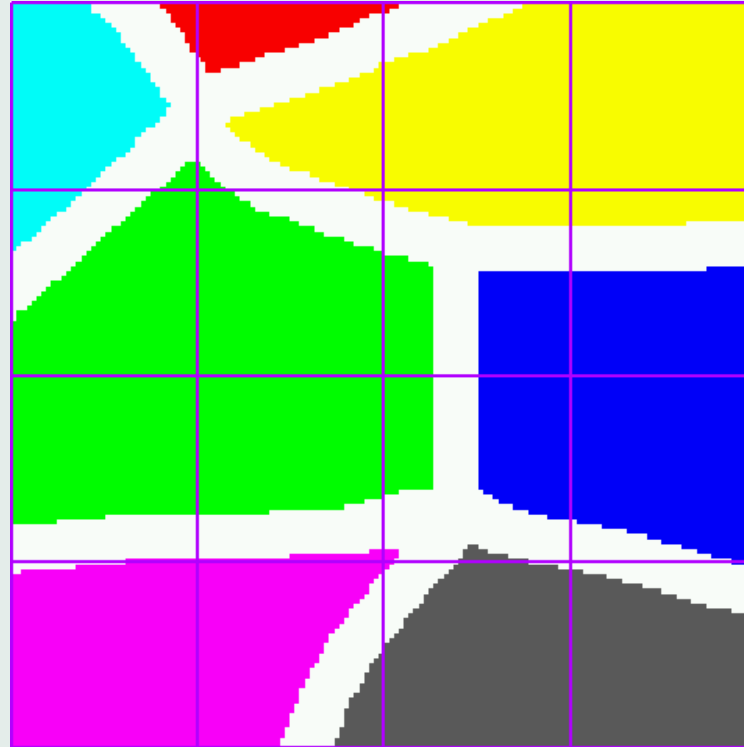
Full Screen

Close

Quit

Etapy analizy programem OOF2

Dopasowanie szkieletu do mikrostruktury



Początkowy szkielet

Home Page

Title Page

◀◀

▶▶

◀

▶

Page 110 of 128

Go Back

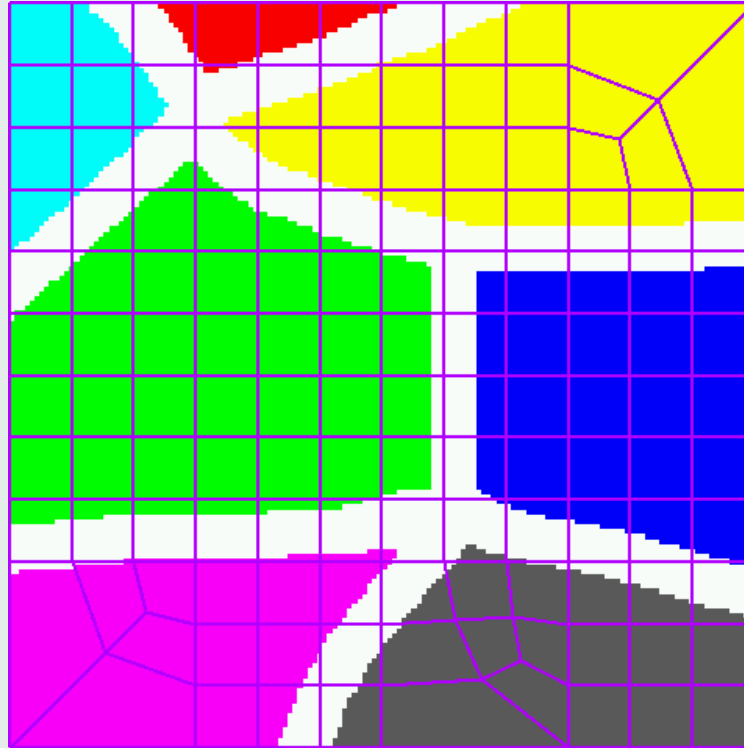
Full Screen

Close

Quit

Etapy analizy programem OOF2

Dopasowanie szkieletu do mikrostruktury



Podział elementów niejednorodnych

Home Page

Title Page

◀◀

▶▶

◀

▶

Page 111 of 128

Go Back

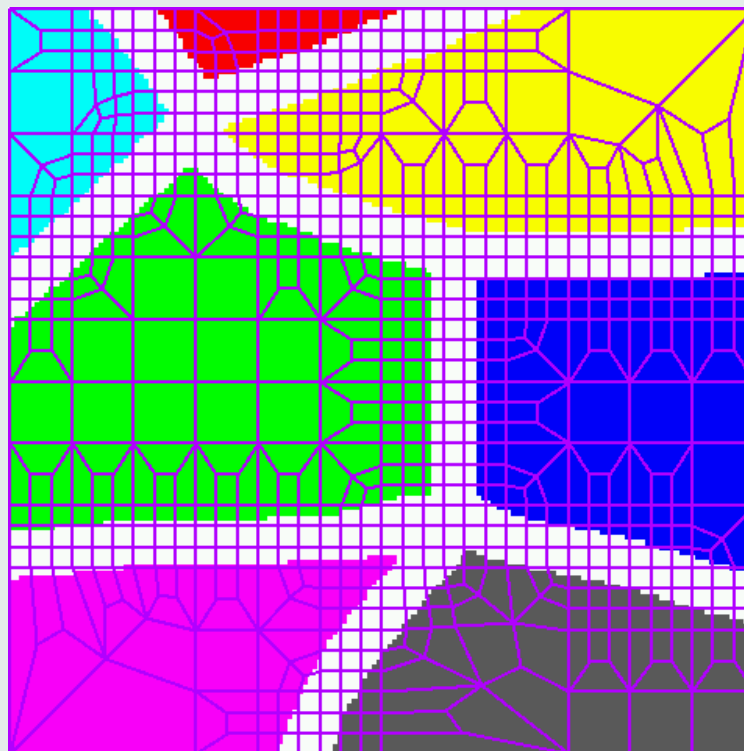
Full Screen

Close

Quit

Etapy analizy programem OOF2

Dopasowanie szkieletu do mikrostruktury



Dalszy podział elementów w celu lepszego dopasowania do granic ziaren.

Home Page

Title Page

◀

▶

◀

▶

Page 112 of 128

Go Back

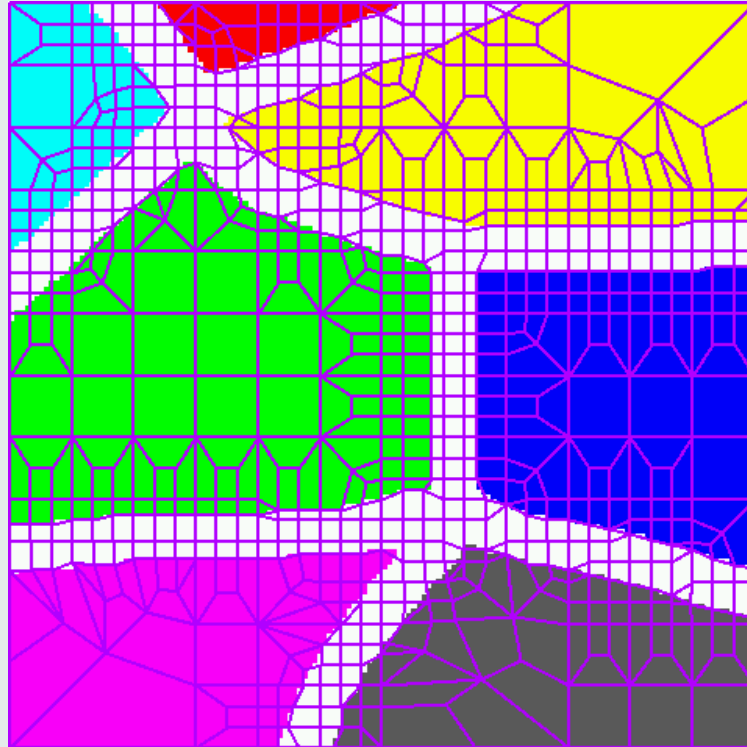
Full Screen

Close

Quit

Etapy analizy programem OOF2

Dopasowanie szkieletu do mikrostruktury



Dopasowywanie i wygładzanie szkieletu.

Home Page

Title Page

◀◀

▶▶

◀

▶

Page 113 of 128

Go Back

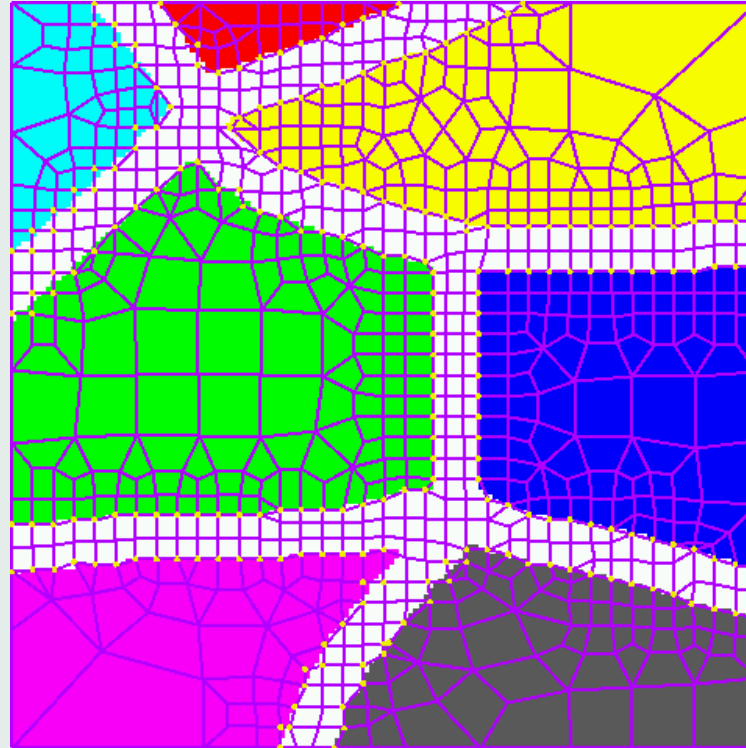
Full Screen

Close

Quit

Etapy analizy programem OOF2

Dopasowanie szkieletu do mikrostruktury



Ostateczne zagęszczanie siatki szkieletu.

Home Page

Title Page

◀

▶

◀

▶

Page 114 of 128

Go Back

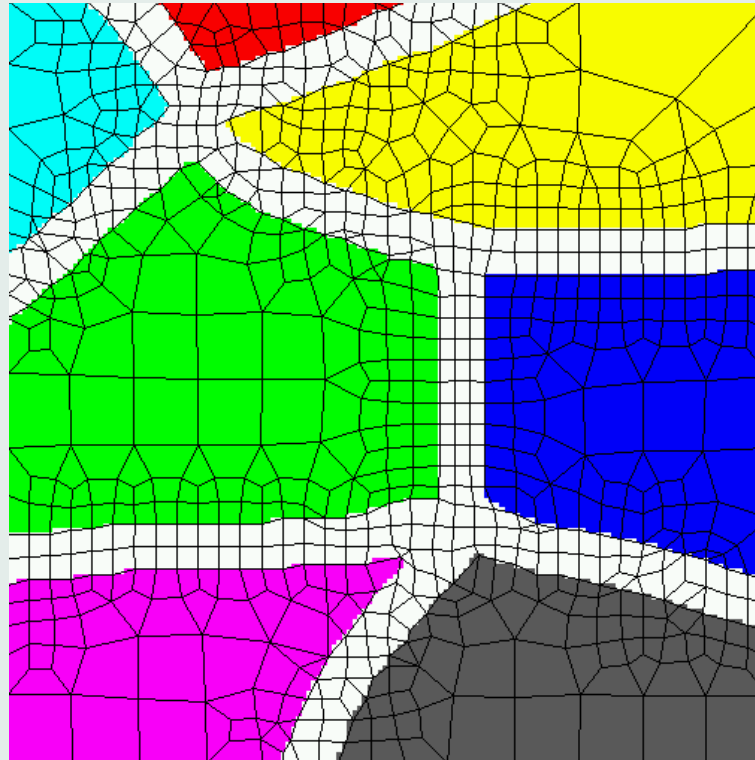
Full Screen

Close

Quit

Etapy analizy programem OOF2

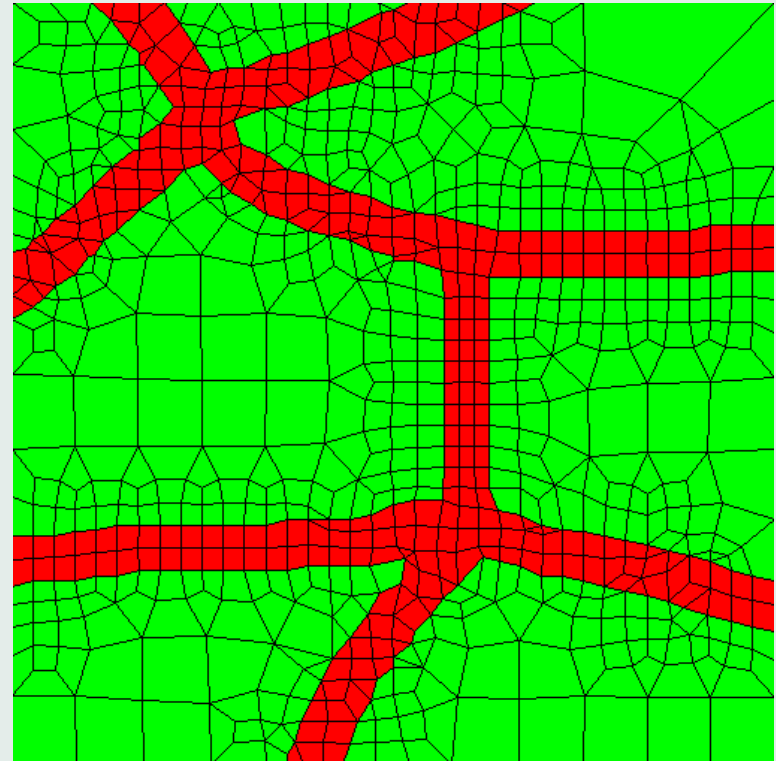
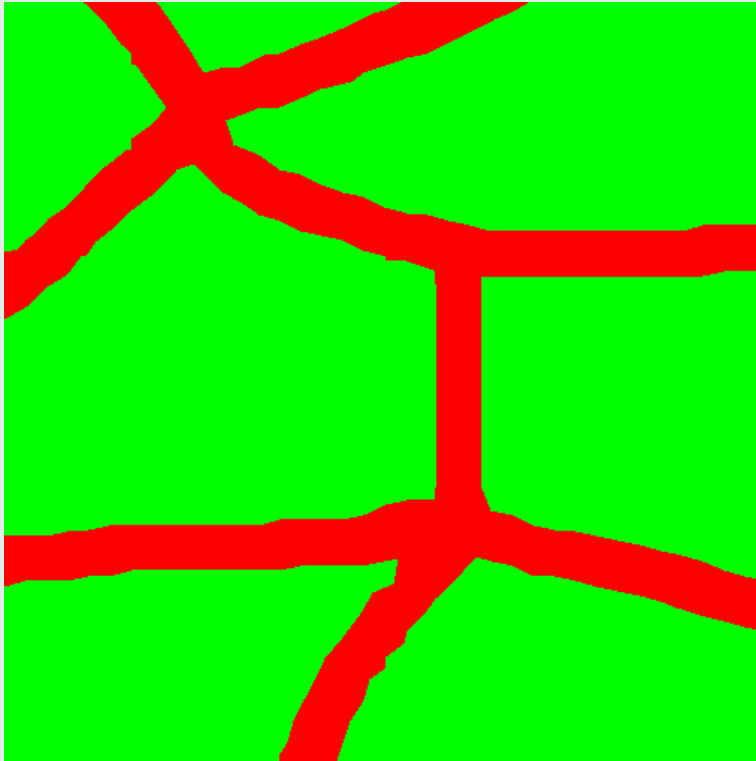
Wygenerowana siatka na mikrostrukturze



Etapy analizy programem OOF2

Zdefiniowanie materiału

Dla uproszczenia założono, własności materiałowe ziaren są takie same.



[Home Page](#)

[Title Page](#)

◀◀

▶▶

◀

▶

Page 116 of 128

[Go Back](#)

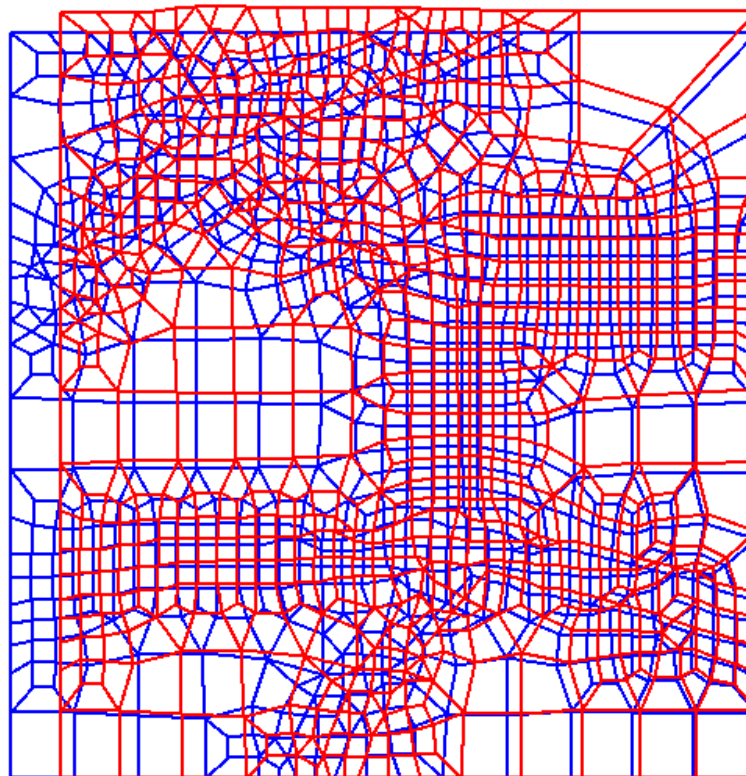
[Full Screen](#)

[Close](#)

[Quit](#)

Etapy analizy programem OOF2

Rezultaty - przemieszczenia na siatce



Home Page

Title Page

◀◀

▶▶

◀

▶

Page 117 of 128

Go Back

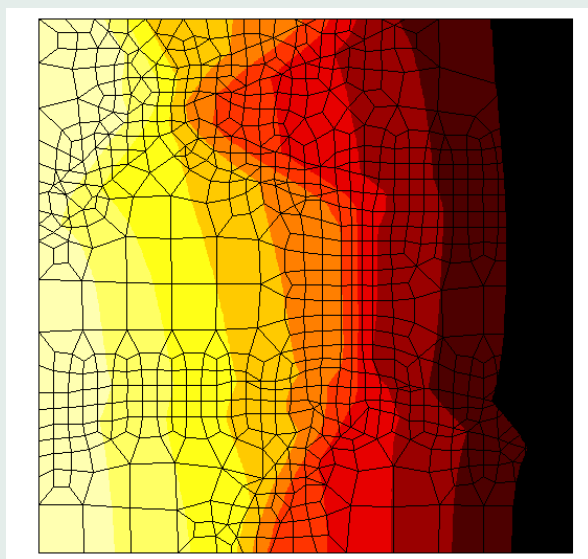
Full Screen

Close

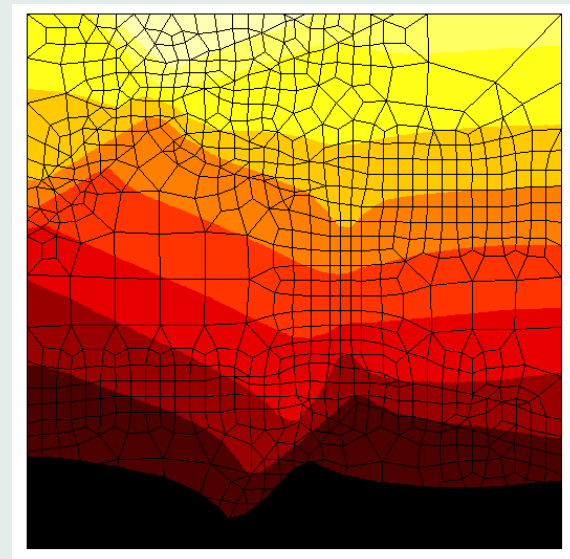
Quit

Etapy analizy programem OOF2

Rezultaty - mapy składowych przemieszczenia



Składowa X



Składowa Y

Home Page

Title Page



Page 119 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

Narzędzia dla programistów

- Języki programowania, interpretery, kompilatory
- Zintegrowane środowiska programistyczne
- Biblioteki procedur
- Narzędzia z zakresu inżynierii oprogramowania

O czy nie było

- Przetwarzanie równoległe
- Grid Computing
- Aplikacje sieciowe
- Bazy danych
- Wspomaganie eksperymentów, akwizycja danych
- Systemy czasu rzeczywistego
- Systemy ekspertowe
- Obliczenia inteligentne

Home Page

Title Page



Page **121** of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

Podziękowania

W przygotowaniu tej prezentacji wykorzystano materiały (przede wszystkim rysunki) dostępne na stronach omawianych programów. Składam w tym miejscu serdeczne podziękowania wszystkim tym, którzy takie materiały opracowali i udostępnili.

Home Page

Title Page

◀

▶

◀

▶

Page 122 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

Copyrights

This work is licensed under the Creative Commons Attribution 3.0 Unported License. To view a copy of this license, visit <http://creativecommons.org/licenses/by/3.0/> or send a letter to Creative Commons, 444 Castro Street, Suite 900, Mountain View, California, 94041, USA.

Home Page

Title Page

◀◀ ▶▶

◀ ▶

Page 123 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

Dziękuję za uwagę

Home Page

Title Page



Page 124 of 128

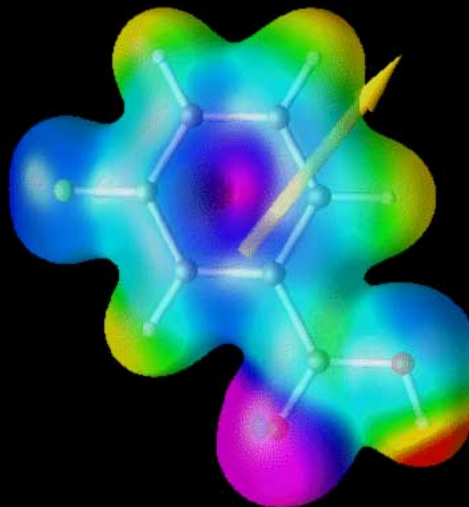
Go Back

Full Screen

Close

Quit

Dipole 2.925 Debye



AM1 Mulliken Potential

Home Page

Title Page



Page 125 of 128

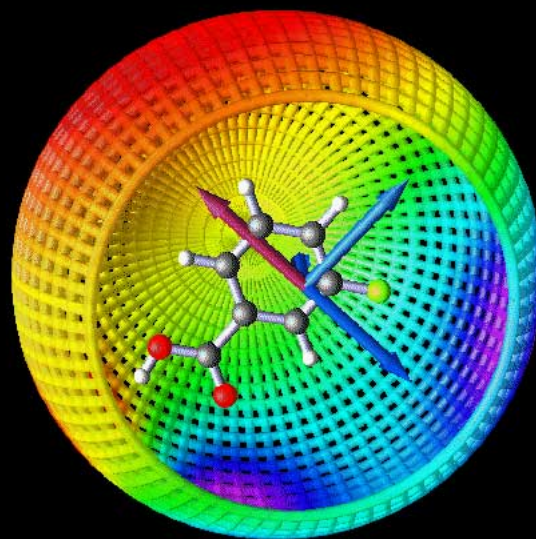
Go Back

Full Screen

Close

Quit

R = 6.75 Ang, CENTER: Center of Dipole



Gasteiger Potential

Home Page

Title Page



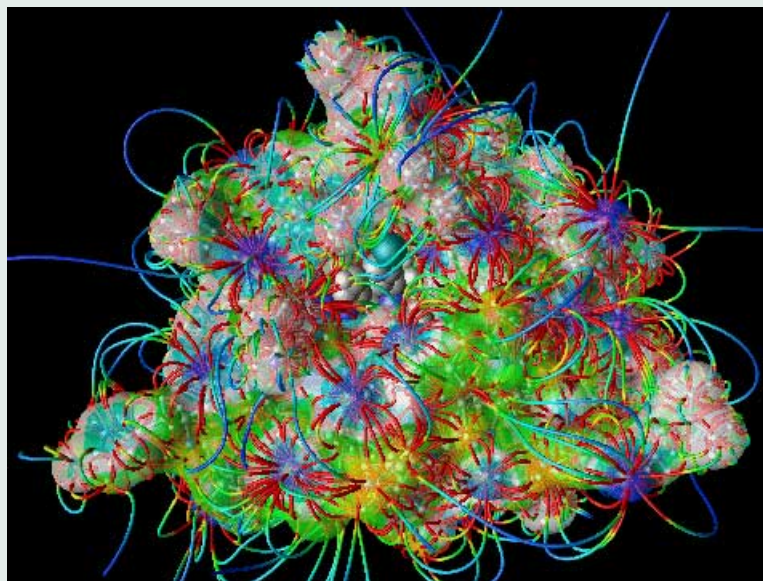
Page 126 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit



Home Page

Title Page

◀ ▶

◀ ▶

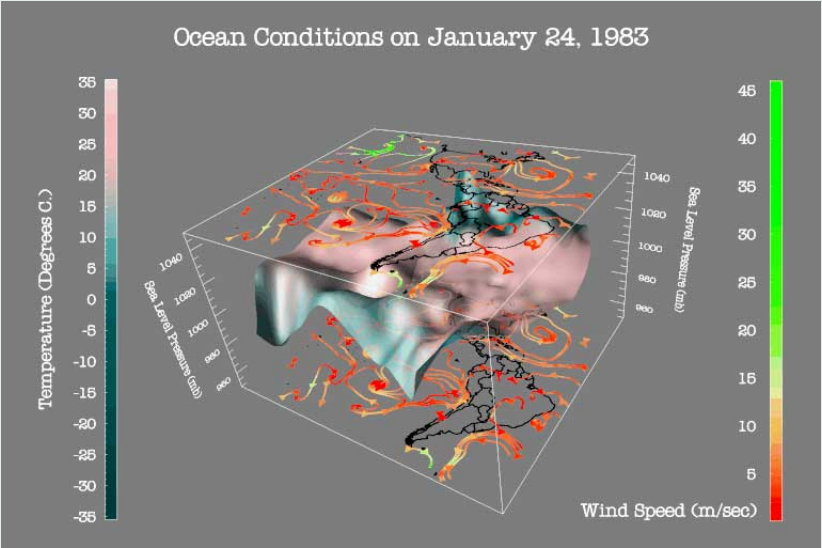
Page 127 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit



Home Page

Title Page



Page 128 of 128

Go Back

Full Screen

Close

Quit

