

**Raport projektu celowego**  
**Obliczenia wielkiej skali i wizualizacja do zastosowań**  
**w wirtualnym laboratorium z użyciem klastra SGI**

Zadanie WP 2.1. Zdalny dostęp do bibliotek naukowych  
Wykorzystanie oprogramowania matematycznego w Polsce

Maciej Brzeźniak

Poznańskie Centrum Superkomputerowo-Sieciowe

Poznań, marzec 2003 r.

# Spis treści

<b>Wstęp</b>	<b>4</b>
<b>1. Informacje o pakietach naukowych wykorzystywanych w Polsce</b>	<b>6</b>
1.1. Opisy oprogramowania	6
1.1.1. Aplikacje	6
1.1.1.1. Abaqus	6
1.1.1.2. Accelrys/MSI	8
1.1.1.3. Adams	9
1.1.1.4. Amber	10
1.1.1.5. ANSYS	12
1.1.1.6. AVS	14
1.1.1.7. AVS/Express	15
1.1.1.8. CFX	16
1.1.1.9. CPMD	16
1.1.1.10. DGAUSS / UNICHEM	17
1.1.1.11. Fidap	18
1.1.1.12. FLUENT (CFD)	19
1.1.1.13. GAMESS	20
1.1.1.14. GAUSSIAN	21
1.1.1.15. GENSTAT	22
1.1.1.16. GLIM 4	22
1.1.1.17. GMT	22
1.1.1.18. Maple V	24
1.1.1.19. MATHEMATICA	25
1.1.1.20. MATLAB	26
1.1.1.21. MOLDY	27
1.1.1.22. MOLPRO	28
1.1.1.23. MSC/Dytran	28
1.1.1.24. MSC/Fatigue	28
1.1.1.25. MSC/Marc	29
1.1.1.26. MSC/Mvision	29
1.1.1.27. MSC/Nastran	29
1.1.1.28. MSC/Patran	31
1.1.1.29. NWChem	31
1.1.1.30. OPERA	32
1.1.1.31. Pro/ENGINEER	34
1.1.1.32. PRO/MECHANICA	35
1.1.1.33. Reduce	36

1.1.1.34. SAS	37
1.1.1.35. Sybyl	38
1.1.2. Biblioteki	39
1.1.2.1. Aztec	39
1.1.2.2. CERN Program Library	40
1.1.2.3. COMPLIB	40
1.1.2.4. ESSL	41
1.1.2.5. HP MLIB	41
1.1.2.6. IMSL	42
1.1.2.7. Intel Math Kernel Library	43
1.1.2.8. LIBM, LIBSCI (Cray)	44
1.1.2.9. NAG Fortran Library	45
1.1.2.10. NAG Fortran 90 Library	46
1.1.2.11. NAG Graphics Library	47
1.1.2.12. OpenGL	47
1.1.2.13. Open Inventor	48
1.1.2.14. PESSL	49
1.2. Podsumowanie	49

<b>2. Oprogramowanie wcielane do systemu udostępniania bibliotek matematycznych w ramach projektu celowego</b>	<b>51</b>
--	-----------

# Wstęp

## *Motywacja dla powstania tego dokumentu*

W badaniach naukowych zachodzi potrzeba prowadzenia obliczeń, które wymagają użycia zaawansowanych bibliotek matematycznych. Na komputerach dużej mocy pracujących w centrach naukowych w Polsce zainstalowane są wysoko-wydajne, zoptymalizowane dla poszczególnych maszyn wersje bibliotek obliczeniowych.

Istnieje potrzeba stworzenia systemu udostępniającego te specjalizowane biblioteki naukowe szerokiemu gronu naukowców. Jedną z głównych cech takiego systemu miałyby być prostota dostępu oraz możliwość uzyskania rzeczywistego przyspieszenia działania wykorzystującej go aplikacji.

Na świecie prowadzonych jest kilka projektów, w toku których rozwijane są środowiska udostępniania rozproszonych zasobów obliczeniowych. Należą do nich m.in. *Ninf*, *NetSolve*, *RCS* oraz *NEOS*. W ramach projektu celowego *Obliczenia wielkiej skali i wizualizacja do zastosowań w wirtualnym laboratorium z użyciem klastra SGI* opracowane będzie rozwiązanie umożliwiające udostępnianie bibliotek matematycznych zainstalowanych na komputerach pracujących w polskich centrach obliczeniowych. Rozwiązanie bazować będzie na jednym z dwóch systemów *Ninf* lub *NetSolve*.

Przed podjęciem decyzji, jakie oprogramowanie ma zostać włączone do systemu udostępniania bibliotek matematycznych rozwijanego w ramach projektu celowego, konieczne jest zebranie informacji na temat zainstalowanego w Polsce oprogramowania, jego cech, funkcjonalności oraz możliwości wcielenia do projektowanego systemu.

## *Typy oprogramowania matematycznego*

Spotykane są dwie główne metody dostępu do oprogramowania naukowego. Część dostępna jest w formie programów wykonywalnych. Użytkownicy uruchamiają programy/aplikacje, bezpośrednio lub za pośrednictwem systemu kolejkowego, podając na ich standardowy strumień wejściowy dane wejściowe dla obliczeń w postaci pliku. Wyniki obliczeń umieszczane są w odpowiednim pliku wynikowym. W drugiej metodzie dostępu do oprogramowania użytkownicy piszą własne aplikacje, z reguły w języku *Fortran* lub *C*. W tych aplikacjach wykorzystują biblioteki gotowych funkcji obliczeniowych. Kod aplikacji użytkownika jest kompilowany a następnie łączony z odpowiednią biblioteką programową. Część oprogramowania, łączy cechy obu wymienionych podejść. W podstawowej wersji dostępne jest ono w postaci wykonywalnych poleceń (aplikacji) może być jednak używane również z programu użytkownika, poprzez interfejs programistyczny. Część dostawców udostępnia, często za dodatkową opłatą licencyjną, tzw. SDK (ang. source development kit), np. *Accelrys Cerius2 SDK* lub biblioteki zawierające API (ang. *Application Programming Interface* - interfejs programistyczny) do wykorzystania przez programistów.

## *Zakres raportu*

Przedmiotem zainteresowania tego raportu jest głównie drugi z wymienionych typów oprogramowania. Takie oprogramowanie może być stosunkowo łatwo wcielone do systemu udostępniania bibliotek matematycznych rozwijanego w ramach projektu celowego. Jednakże raport obejmie także pierwszą grupę oprogramowania.

Możliwe jest bowiem wcielenie części pakietów programowych dostępnych w postaci aplikacji do systemu udostępniania. Wprawdzie wymagałoby to dużego nakładu pracy i nie jest to przedmiotem projektu celowego, jednakże w naszej opinii jest to warte rozważenia w przyszłości, ze względu na dużą powszechność tego typu oprogramowania i częstość jego wykorzystywania w ośrodkach KDM.

### *Układ dokumentu*

W pierwszym punkcie raportu przedstawione są ogólne informacje o pakietach programowych, ich przeznaczeniu, cechach i rozmieszczeniu. Prezentacja podzielona jest na dwie części: aplikacje i biblioteki. Pierwsza z nich zawiera informacje o oprogramowaniu dostępnych w postaci programów wykonywalnych, często z graficznym, interaktywnym interfejsem użytkownika. Druga część prezentacji zawiera informacje dotyczące bibliotek programistycznych.

Drugi punkt dokumentu zawiera informacje dotyczące zakresu oprogramowania, które zostanie wcielenie do systemu udostępniania bibliotek opracowywanego w ramach projektu celowego a także krótkie uzasadnienie wyboru.

# 1. Informacje o pakietach naukowych wykorzystywanych w Polsce

W akademickich centrach obliczeniowych w Polsce zainstalowane są systemy komputerowe o rozmaitych architekturach: od systemów skalarnych, poprzez systemy wektorowe, skalarnie-równoległe i klastrowe. Jednym z głównych zastosowań komputerów jest prowadzenie obliczeń przy wykorzystaniu specjalistycznego oprogramowania.

To oprogramowanie charakteryzuje się wysokim stopniem optymalizacji kodu wykonywalnego zapewniającym możliwość maksymalnego wykorzystania mocy, jaką oferują poszczególne maszyny. W tym punkcie raportu zostały przedstawione informacje o pakietach naukowych zainstalowanych na komputerach dużej mocy w ośrodkach obliczeniowych w Polsce.

## 1.1. Opisy oprogramowania

W następnym punkcie zostanie zaprezentowana lista pakietów programowych wraz z krótkim omówieniem ich cech, metody dostępu i przeznaczenia.

Informacje umieszczone w tym raporcie udostępnione zostały przez ośrodki obliczeniowe w Gdańsku, Krakowie, Łodzi, Poznaniu i Wrocławiu. PCSS uzyskał je dzięki uprzejmości: pana Rafała Tylmana (TASK, Gdańsk), pana Andrzeja Oziębły (Cyfronet, Kraków), pana Tomasza Bernera (Pł, Łódź) oraz pani Agnieszki Kwiecień (WCSS, Wrocław).

### 1.1.1. Aplikacje

W tym punkcie omówione zostanie oprogramowanie naukowe dostępne w postaci aplikacji.

#### 1.1.1.1. Abaqus

##### *Ogólne*

Abaqus jest pakietem inżynierskim, stosowanym do oceny wytrzymałościowej elementów maszyn i konstrukcji, a także do symulacji zagadnień nieliniowych mechaniki ciała stałego i płynów. Aplikacja, w analizie numerycznej, wykorzystuje metodę elementów skończonych.

##### *Zastosowanie:*

- zagadnienia mechaniki ciała stałego i płynów
- ocena wytrzymałościowa elementów maszyn i konstrukcji z uwzględnieniem obciążenia, temperatury, punktów łączeń, ewentualnych zderzeń i innych warunków środowiskowych; przewidywaniu zmęczenia materiału
- analiza przepływu ciepła, plastyczności materiałów,
- badania sejsmiczne i geotechnicznych,
- badania nad zderzeniami pojazdów,

- badania akustyczne,
- obróbka metali (np. wytłaczanie i formowanie), , badań sejsmiczne i geotechniczne,
- w przemysł lotniczym, samochodowym, stoczniowym, maszynowym oraz hutniczym i wydobywczym.

### *Producent/dostępność*

ABAQUS powstał i jest rozwijany przez amerykańską firmę Hibbit, Karlsson & Sorensen, Inc. Pakiet dostępny jest na wielu platformach sprzętowych, począwszy od komputerów klasy PC z Intel Pentium, przez stacje robocze HP, Compaq, IBM, SGI do superkomputerów Compaq AlphaServers, HP, IBM RS.6000, serie SGI Onyx, serie SGI Origin.

### *Moduły i funkcjonalność*

To co wyróżnia ABAQUS spośród innych programów, to jego modułarna budowa. Architektura programu oparta jest na koncepcji bibliotek. Pozwoliło to na stworzenie możliwości łączenia dowolnych ich elementów. Użytkownik może tworzyć dowolne kombinacje elementów skończonych, materiałów, procedur analizy i sekwencji obciążeń. Pakiet ma budowę modułową, co pozwala na dosyć swobodną konfigurację całości w zależności od specyfiki zastosowań. Użytkownik ma ponadto możliwość dopisywania własnych procedur. Podstawowe moduły biblioteczne to:

- **biblioteka modeli materiałów**, na którą składa się zbiór modeli metali o własnościach izotropowych i anizotropowych, poddawanych procesom cieplnym i deformacyjnym, zbiór modeli przeznaczonych do analizy innych materiałów: gumy, tworzyw sztucznych, zbrojonego betonu, pianek, gruntów i skał geologicznych
- **biblioteka elementów skończonych**, która umożliwi modelowanie skomplikowanych geometrii układów jedno-, dwu- i trójwymiarowych (belki, powłoki, elementy ciągłe) oraz obliczenia dotyczące odkształceń; zawiera sprawdzone w praktyce i przetestowane elementy skończone.
- **biblioteka procedur analizy** - posiada funkcje analizy stanu naprężeń, odkształceń i przemieszczeń dla dowolnych, liniowych i nieliniowych procesów mechanicznych, oferuje funkcje analizy stanów ustalonych i niestacjonarnych procesów transportowych ciepła, masy i pędu, a także analizy akustycznej, analizy akustyczne i piezoelektryczne. Analizy te mogą być przeprowadzone niezależnie, sekwencyjnie bądź jako całkowicie sprzężone z analizą naprężeń.
- **Abaqus/Standard** - program o przeznaczeniu ogólnym, implementujący metodę elementów skończonych i udostępniający bibliotekę powszechnie używanych elementów (w jednym, dwóch i trzech wymiarach). Umożliwia modelowanie metali, plastików, gum, skał, itp. Pakiet pozwala na modelowanie różnego rodzaju warunków brzegowych, obciążeń i na włączanie powierzchni kontaktowych; zawiera wszystkie procedury analizy oprócz całkowania nieliniowych równań ruchu metodą jawną. Pakiet napisany jest w języku Fortran. Jego pierwsza wersja powstała w 1978 roku.
- **Abaqus/Explicit** - wykorzystuje metodę elementów skończonych do rozwiązywania zagadnień złożonych (np. o dużej dynamice, ekstremalnych obciążeniach mechanicznych, siłowych lub termicznych). W pakiecie położono nacisk na nieliniową analizę obciążeń dynamicznych. Użytkownik może modelować materiały takie jak w Abaqus/Standard, (tzn. metale, gumę, plastyki, grunty, skały).

- **ABAQUS/CAE** (ang. Complete ABAQUS Environment) dostarcza prostego i spójnego interfejsu do tworzenia, zlecania, monitorowania i przetwarzania wyników otrzymanych z symulacji ABAQUS/Standard i ABAQUS/Explicit. Łączy w sobie funkcjonalność preprocesora ABAQUS/Pre i postprocesora ABAQUS/Post ze starszych wersji ABAQUSa.

Pakiet CAE podzielony jest na moduły, z których każdy definiuje logiczny aspekt procesu tworzenia i analizowania modelu, np. definiowanie geometrii, definiowanie własności materiału. Każdy moduł posiada swój własny zestaw kluczy, parametrów i danych służących do utworzenia pliku wejściowego (z rozszerzeniem .inp) dla modułu obliczeniowego (Standard lub Explicit). Moduł obliczeniowy (ang. solver) czyta plik wejściowy, dokonuje obliczeń podczas których wysyła informacje do CAE pozwalające śledzić postępy, na końcu umieszcza rezultaty w bazie wyników (plik z rozszerzeniem .odb). Wyniki zapisane w bazie można wczytać do CAE i dalej przetwarzać. Jeżeli przewidywany czas obliczeń jest zbyt długi należy opuścić środowisko CAE po utworzeniu pliku wejściowego i posłużyć się poleceniem abaqus do zlecenia obliczeń. Po zakończeniu symulacji można uruchomić CAE ponownie i wczytać bazę modelu (plik z rozszerzeniem .cae) i bazę wyników (plik z rozszerzeniem .odb) w celu wizualizacji układu..

- **Abaqus/Viewer**

### *Źródło/ Więcej informacji*

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/apl/abaqus.html>

<http://gepard.cyf-kr.edu.pl/APLIKACJE/ABAQUS/abaqus.html>

<http://list.wcss.wroc.pl/docs/kdmug/c4s2.html>

Więcej informacji: <http://www.hks.com>

### *Wykorzystanie*

Gdańsk, Kraków, Poznań, Wrocław

## **1.1.1.2. Accelrys/MSI**

### *Ogólne*

Oprogramowanie Accelrys/MSI (ang. *Molecular Simulation Inc.*) jest pakietem chemicznym, wykorzystywanym w: chemii, fizyce, biologii.

Niektóre z dostępnych pakietów.

#### **Insight II i Cerius2**

Oba pakiety przeznaczone są do szeroko rozumianego modelowania molekularnego w środowisku 3D. Składają się ze zintegrowanego środowiska użytkownika oraz modułów pozwalających na modelowanie, modyfikowanie, wizualizację i analizę dużych układów biomolekularnych (np. białek, kwasów nukleinowych) oraz chemii i fizyki nowych materiałów, od modelowania homologii do projektowania katalizatorów. Dostępne tylko dla platformy SGI z możliwością pracy zdalnej via X11.

**Insight II** umożliwia konstruowanie, manipulowanie i wizualizację przestrzennych modeli makrocząsteczek (jak białka, kwasy nukleinowe), ciał stałych (szkło, metale, nieorganiczne ciała stałe) oraz analizę i badanie ich właściwości. Posiada własne biblioteki danych o peptydach, zeolitach, tlenkach metali, metalach i różnych



fragmentach struktur chemicznych. Pozwala na przewidywanie optymalnych konformacji cząsteczek z wykorzystaniem mechaniki molekularnej oraz mechaniki kwantowej.

**Cerius 2** to program do symulacji oraz modelowania cząsteczkowego. Służy do badania właściwości chemicznych, optycznych oraz magnetycznych cząsteczek.

**Cerius2 SDK (ang. Source Development Kit)** - Pozwala wykorzystywać algorytmy Cerius2, sprawdzone i przetestowane metody do manipulacji danymi o molekułach. Pozwala na pisanie w językach Fortran 77, C lub C++.

**Quanta** - Pakiet przeznaczony do wszechstronnego modelowania, symulacji i analizy molekuł (2D, 3D). Wykorzystywany do badań przy projektowaniu nowych leków. Posiada narzędzia do analizy i wizualizacji.

**Catalyst** - Pakiet szczególnie przydatny podczas opracowywania struktury chemicznej leków.

Inne pakiety: Catalysis, Polymer, Discover, EOM, Homology, Xsight

**Felix** - pozwala wyznaczać i analizować widma NMR'owskie cząsteczek.

**DMol** - program funkcyjnej teorii gęstości (DFT), pozwala prowadzić obliczenia dla układów molekularnych i okresowych. Pozwala analizować reakcje i własności związków organicznych, organo-metalicznych, nieorganicznych i innych.

**Discover** - dostarcza duży zakres metod symulacji, pozwalając na charakteryzowanie struktury i przewidywanie właściwości molekuł, materiałów i związków biologicznych. Jest używany jako narzędzie w projektowaniu molekuł. Zapewnia możliwość analizowania systemów i materiałów, których analiza tradycyjnymi metodami symulacji nie była możliwa.

### *Źródło/ więcej informacji*

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/apl/msi.html>

<http://gopard.cyf-kr.edu.pl/APLIKACJE/MSI/msi.html>

<http://list.wess.wroc.pl/docs/kdmug/c4s2.html>

Więcej informacji: [http://www.accelrys.com/support/life/sdk/users/prog\\_guide/02\\_Introduction.html](http://www.accelrys.com/support/life/sdk/users/prog_guide/02_Introduction.html)

<http://www.accelrys.com/cerius2/>

### *Producent / dostępność*

Firma Accelrys (do 1 czerwca 2001 MSI - ang. *Molecular Simulations Inc.*) jest obecnie największym dostawcą oprogramowania naukowego z dziedziny modelowania molekularnego. Udostępnia oprogramowanie na platformy UNIX oraz PC/Windows.

### *Wykorzystanie*

Gdańsk, Poznań (Discover, DMol), Kraków, Wrocław, Łódź

## **1.1.1.3. Adams**

### *Ogólne*

Adams (Automatic Dynamic Analysis of Mechanical Systems) jest pakietem inżynierskim, zapewniającym środowisko obliczeniowe do wykonywania skomplikowanych obliczeń numerycznych, analizy i wizualizacji.

Jest on zintegrowanym systemem służącym do symulacji ruchu układów mechanicznych. Pozwala on na tworzenie "wirtualnych prototypów", które umożliwiają szybką analizę układów mechanicznych, aż do uzyskania optymalnego rozwiązania. Prototypy te symulują zachowanie się złożonych układów mechanicznych, analizują wszelkie możliwości, a w wyniku dają optymalne rozwiązanie.

### *Moduły i funkcjonalność*

- Adams/View
- Adams/Solver
- Adams/Animation - pozwala na wizualizację ruchu analizowanego układu w czasie rzeczywistym
- Adams/Flex
- Adams/Vehicule - zajmuje się minimalizacją i maksymalizacją funkcji, głównie nieliniowych; zawiera również zbiór funkcji rozwiązujących standardowe problemy macierzowe jak np. programowanie liniowe, może być użyty do symulacji dynamiki pojazdów.
- moduły do wymiany danych pomiędzy systemem Adams i popularnymi systemami MES (takimi jak ANSYS, czy MSC/NASTRAN), do przekazywania geometrii modelu pomiędzy Adams'em i pakietami CAE/CAD/CAM (moduł ADAMS/IGES)

### *Źródło/więcej informacji*

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/apl/adams.html>

### *Wykorzystanie*

Gdańsk

## **1.1.1.4. Amber**

### *Ogólne*

Amber (Assisted Model Building with Energy Refinement ) jest programem chemicznym, zapewniającym wykonywanie obliczeń z dziedziny dynamiki molekularnej, ze szczególnym uwzględnieniem biomolekul. Może być wykorzystywany do modelowania cząsteczek i makrocząsteczek w próżni oraz w roztworach (np. w wodzie).

Aplikacja posiada gotową bazę danych z definicjami 20 standardowych aminokwasów, kwasów nukleinowych, w której znajdują się parametry oddziaływania typu atom-atom, ładunki atomowe oraz informacje topologiczne dla podstawowych fragmentów białek i kwasów nukleinowych DNA i RNA.

### *Zastosowanie:*

- tworzenie dużej molekuly z małych fragmentów molekularnych
- znalezienie konformacyjnego minimum energii dla takiej cząsteczki
- przeprowadzenie symulacji cząsteczki metodą dynamiki molekularnej
- wykonanie analizy podstawowej uzyskiwanych konformacji i trajektorii
- wykonanie analizy drgań normalnych

- wykonanie analizy geometrii molekuł, z uwzględnieniem danych uzyskiwanych ze spektroskopii NMR
- obliczenie różnicy energii swobodnej pomiędzy różnymi stanami molekularnymi.

### *Moduły i funkcjonalność*

Moduły do tworzenia danych wejściowych (współrzędnych dla poszczególnych atomów w badanym układzie, topologii układów oraz parametrów dla wiązań i kątów):

- PREP - służy do tworzenia nowej bazy danych lub do dodawania dodatkowych informacji do istniejącej bazy danych
- EDIT - do określenia współrzędnych systemu
- LINK - do ustalania topologii systemu
- PARM - do oznaczenia wiązań, kątów i typów atomów w systemie

Moduły do obliczania energii

- SANDER - program z protokołem "simulated annealing". Opiera się na więzach odległościowych i na kątach torsyjnych (widma NOE) oraz na przesunięciach chemicznych i objętościach pochodzących z widm NOESY. Wykorzystuje więzy energetyczne (energy restraints) pochodzące z analizy widm NMR.
- GIBBS - do analizy zaburzeń energii, wykorzystuje metodę FEP (free energy perturbation) i TI (thermodynamic integration).
- NMODE - do analizy drgań normalnych, do przeszukiwania minimum lokalnego, wykonywania analizy wibracyjnej oraz poszukiwania stanów przejściowych.

Moduły dodatkowe

- ANAL - analiza statyczna systemu; analiza struktury DNA
- CARNAL i NDANAL - analiza dynamiczna systemu; analiza struktury DNA
- NMODE - obliczenia z zakresu mechaniki molekularnej
- NMANAL, LMANAL - obliczenia fluktuacji atomowych i różnych funkcji korelacji
- NUCGEN - do budowania modeli struktury DNA.

### *Narzędzia programistyczne*

Aplikacja posiada zaawansowany język skryptowy Interface, który może być wykorzystywany do tworzenia plików uruchamiających programy SANDER oraz GIBBS. Korzystając z Interface, można uruchomić kilka zadań wykonywanych przez pakiet Amber z jednego skryptu startowego (poprzez zmianę ustalonych elementów symulacji dla każdego zadania).

### *Źródło/ więcej informacji*

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/apl/amber.html>

<http://gepard.cyf-kr.edu.pl/APLIKACJE/AMBER/amber.html>

### *Wykorzystanie:*

Gdańsk, Kraków, Poznań

### 1.1.1.5. ANSYS

ANSYS jest wiodącym na świecie pakietem do obliczeń MES umożliwiającym kompleksową symulację w każdej niemal dziedzinie nauki i przemysłu. Łatwość obsługi programu i komfortowy interfejs graficzny umożliwia nawet niedoświadczonemu użytkownikowi dokonywanie pierwszych analiz po krótkim wprowadzeniu. ANSYS składa się z wielu narzędzi. Umożliwia to optymalne dobieranie wymaganych opcji do własnych potrzeb. Stosowanie metody elementów skończonych (MES) przynosi już po krótkim czasie korzyści znacznie przewyższające poniesione koszty. Możliwe staje się projektowanie optymalnych pod wieloma względami konstrukcji (np. o minimalnym ciężarze, energooszczędnych itd.) drastycznie maleje liczba kosztownych prototypów, skrócony jest znacznie czas wprowadzania produktu na rynek.

#### *Moduły / funkcjonalność*

- **Tworzenie modelu (preprocessor)** - W preprocesorze użytkownik tworzy geometrię konstrukcji podobnie jak w systemach CAD oraz generuje siatkę elementów. Możliwe jest korzystanie z operacji Boole'a (np. dodawanie czy odejmowanie brył) jak również projektowanie parametryczne. Program umożliwia również transfer modeli stworzonych we wszystkich i popularnych systemach CAD. Istnieje wiele sposobów generowania siatki. Przy statycznych i termicznych analizach liniowych możliwe jest stosowanie metody adaptacyjnej pozwalającej na automatyczne stworzenie siatki tak, aby błąd nie przekroczył zadanej wartości. Również w analizach nieliniowych program automatycznie tworzy siatki bardzo dobrej jakości, które mogą być dodatkowo zagęszczane.
- **Prezentacja wyników (postprocessor)** - Postprocesor służy do graficznej i tekstowej prezentacji wyników. Jego możliwości to między innymi: izolowanie i izopowierzchnie, wyniki w postaci wektorowej, deformacje, przebiegi momentów zginających, sił normalnych i tnących, przedstawienie wyników w dowolnym przekroju, diagramy, tworzenie list, sortowanie, selekcja.

#### **ANSYS/Mechanical**

ANSYS/Mechanical jest najczęściej używanym programem z rodziny ANSYS. Umożliwia dokonywanie liniowych i nieliniowych analiz strukturalnych z uwzględnieniem takich zjawisk jak duże odkształcenia, zjawiska kontaktowe, plastyczność, hipersprężystość itd. ANSYS/Mechanical umożliwia również analizy stałych i zmiennych w czasie pól temperatur z uwzględnieniem konwekcji, przewodnictwa cieplnego, promieniowania, zmiany fazy oraz pól sprzężonych (akustyka, piezoelektryczność, naprężenia termiczne) Możliwości obliczeniowe ANSYS/Mechanical:

- statyka/dynamika
- drgania własne,
- analiza harmoniczna,
- analiza spektralna,
- stany nieustalone,
- wyboczenie,
- kinematyka,
- mechanika pęknięć,
- laminaty,
- nieliniowości

- duże odkształcenia i przemieszczenia,
- powierzchnie kontaktowe z uwzględnieniem tarcia,
- izotropowa/anizotropowa plastyczność,
- właściwości materiałowe zależne od temperatury,
- lepkosprężystość, lepkoplastyczność
- Pola temperatur
- stałe i zmienne w czasie,
- zmiana fazy,
- konwekcja, promieniowanie, przewodnictwo cieplne
- Akustyka
- Pola sprzężone - możliwość uwzględnienia równoczesnego wpływu sił i temperatur

### **ANSYS/Multiphysics**

ANSYS/Multiphysics jest maksymalnie rozbudowana wersja programu ANSYS. Poza możliwościami ANSYS/Mechanical zawiera następujące narzędzia:

- Mechanika płynów
- przepływy laminarne i turbulenty,
- gazy ściśliwe i nieściśliwe,
- transport ciepła,
- interakcja płyn-struktura (wpływ ciśnienia cieczy na wytrzymałość i deformacje opływającego profilu),
- mieszanie płynów
- Elektromagnetyzm
- pola ustalone, niestalone, harmoniczne,
- wysokie częstotliwości,
- symulacja obwodów elektrycznych,
- pola sprzężone:
- elektromagnetyzm/pola temperatur,
- elektromagnetyzm/struktura

Dalsze możliwości programu ANSYS (wspólne dla większości modułów)

- ponad 100 typów elementów,
- własny język programowania (APDL) - umożliwia automatyzację wielu zadań, projektowanie parametryczne,
- możliwość dołączenia własnych procedur w Fortranie,
- optymalizacja konstrukcji - dobieranie kształtu konstrukcji tak aby uzyskać optymalne wartości funkcji celu (np. ciężaru, naprężeń, temperatur itd.) przy zachowaniu narzuconych przez użytkownika ograniczeń np. maksymalnego ugięcia),
- substruktury (superelementy) - grupy elementów mogą zostać połączone w superelementy w celu ułatwienia modelowania i skrócenia czasu obliczeń
- submodeling - technika ta umożliwia wycięcie z konstrukcji obszarów o wysokich gradientach naprężeń, temperatur lub potencjału magnetycznego i ponowne obliczenia przy użyciu gęstszej siatki i uwzględnieniu wpływu pozostałej części struktury. Umożliwia to liczenie bardzo dużych struktur.

### *Źródło / dalsze informacje:*

*Źródło:* <http://gepard.cyf-kr.edu.pl/APLIKACJE/ANSYS/ansys.html>

*Więcej informacji:* <http://www.ansys.com>

<http://www.mesco.com.pl>

### *Wykorzystanie:*

Kraków, Łódź

## **1.1.1.6. AVS**

### *Ogólne*

AVS (Application Visualisation System) służy do graficznej prezentacji danych, zawiera podsystemy do grafiki dwu- i trójwymiarowej, przetwarzania obrazów, animacji, wizualizacji dźwięków oraz budowania systemów otwartych, przenośnych na różne platformy sprzętowe. Działa on wyłącznie w środowisku X-Window. AVS zawiera podsystemy do grafiki 2 lub 3 wymiarowej, przetwarzania obrazów, animacji. Program umożliwia budowanie schematów prezentacji danych. Schematy te złożone są ze wzajemnie zależnych modułów, które można podzielić na następujące kategorie: moduły czytające dane, przetwarzające je (filtry), opisujące dane w pewnej geometrii, moduły wyjścia. Użycie któregoś z gotowych schematów upodabnia AVS do typowych pakietów graficznych. Wielką zaletą AVS jest możliwość tworzenia własnych - dostosowanych do własności danych - modułów lub adaptacji już istniejących, a także zapamiętywania utworzonych schematów. Istnieje również obszerna biblioteka modułów i schematów public domain.

### *Zastosowanie*

- wizualizacja dynamiki płynów
- analiza strukturalna
- wizualizacja w chemii obliczeniowej

### *Moduły*

- biblioteka z gotowymi schematami i modułami
- biblioteka standardowych typów danych
- "dataflow manager" ustalający kolejność uruchamiania modułów
- język opisu sieci modułów (CLI)
- biblioteki i generator kodu szkieletowego umożliwiające włączanie do systemu kodu napisanego przez użytkownika.
- Data Viewer
- Geometry Viewer Interactive 3D Geometric Display
- Image Viewer
- Graph Viewer
- Advanced Visualization Techniques
- Presentation

### *Źródło/ więcej informacji:*

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/apl/avs.html>  
<http://gepard.cyf-kr.edu.pl/APLIKACJE/AVS/avs.html>

Więcej informacji: <http://www.avs.com>

### *Wykorzystanie:*

Gdańsk, Kraków, Poznań

## **1.1.1.7. AVS/Express**

### *Ogólne*

AVS/Express jest to obiektowy system programowania wizualnego, wykorzystujący zasób narzędzi z AVS ujmując je w nowe ramy systemu w pełni obiektowego. Posiada on biblioteki modułów: importu danych (wraz z współpracą z bazami danych), przetwarzania numerycznego, analizy obrazów, wizualizacji i interfejsu użytkownika. W stosunku do klasycznego AVS zwiększa zakres metod wizualizacji, umożliwia tworzenie kompletnych, skompilowanych aplikacji graficznych, a także wykorzystanie obiektów AVS/Express jako klas we własnych programach użytkownika. Dostępny jest w dwóch wersjach. Visualisation Edition będącym bezpośrednim następcą AVS 5 o wzbogaconych możliwościach przetwarzania numerycznego i wizualizacji. Developer Edition stanowiącym Visualisation Edition rozszerzony o możliwość dostępu do niskopoziomowych modułów przetwarzania danych, ich wizualizacji oraz o narzędzia umożliwiające budowanie gotowych aplikacji.

### *Zastosowanie:*

- wizualizacja danych obliczeniowych i eksperymentalnych w naukach podstawowych
- inżynieria - problemy wytrzymałościowe
- przemysł naftowy - analiza danych sejsmicznych
- dynamika cieczy i gazów
- aerodynamika
- diagnostyka medyczna
- systemy informacji geograficznej.

### *Producent/ dostępność:*

System AVS/Express jest produktem firmy AVS/Uniras.

### *Źródło/ więcej informacji:*

Źródło: [http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/apl/avs\\_express.html](http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/apl/avs_express.html)  
<http://gepard.cyf-kr.edu.pl/APLIKACJE/AVS/avs.html>

Więcej informacji: <http://www.avs.com>

### *Wykorzystanie:*

Gdańsk, Kraków, Poznań

### 1.1.1.8. CFX

#### *Ogólne*

Oprogramowanie CFX-4 jest jednym z najbardziej popularnych narzędzi do przewidywania złożonych przepływów mających miejsce w procesach i przemyśle chemicznym. Zapewnia zestaw narzędzi, min. możliwość współpracy z narzędziami CAD, wysoko zautomatyzowane narzędzia do tworzenia geometrii, siatek i zaawansowanych modeli dla turbulencji, combustion, radiacji (promieniowania) i przepływów wielofazowych. Te narzędzia pozwalają symulować rzeczywiste przemysłowe procesy przepływu.

obliczeń. CFX-5 stosuje zaawansowane modele i metody obliczeń, umożliwia równoległe wykonanie kodu a także narzędzia do pre- i postprocessingu. Istnieje możliwość tworzenia geometrii bezpośrednio z użyciem preprocesora CFX-5 lub zaimportowania jej z pakietów CAD w ich wewnętrznym formacie. CFX-5 automatycznie buduje kompletną siatkę używając określanych w menu opcji modelowania, warunków brzegowych i własności cieczy. Obliczenia ciśnienia i zachowania momentum są prowadzone równoległe co daje korzyści dla wydajności obliczeń.

#### *Zastosowanie:*

Obszary zastosowania zawierają (CFX-4 i CFX-5):

- przemysł lotniczy i kosmiczny
- przemysł motoryzacyjny
- inżynierię biomedyczną
- bezpieczeństwo i pożarnictwo
- ochronę zdrowia
- przemysł morski
- metalurgie
- przemysł petrochemiczny, paliwowy i gazowy
- wytwarzanie energii

#### *Źródło i dalsze informacje*

Źródło: <http://www.software.aeat.com/cfx/products/>, <http://www.software.aeat.com/cfx/>

Dalsze informacje: <http://www-waterloo.ansys.com/cfx/products/cfx-4/>

<http://www-waterloo.ansys.com/cfx/products/cfx-5/>

### 1.1.1.9. CPMD

CPMD (ang. Car-Parrinello Molecular Dynamics) to pakiet z dziedziny dynamiki molekularnej implementujący metodologię Car-Parinell. Pierwszą wersję pakietu napisał Jurg Hutter w laboratorium badawczym IBM w Zurichu, kolejne wersje rozwijane były przy współudziale ludzi i organizacji z całego świata. Obecnie za licencjonowanie pakietu odpowiada IBM corp i MPI Stuttgart. Po dopełnieniu formalności licencyjnych pakiet jest udostępniany za darmo organizacjom niekomercyjnym.

CPMD dostępny jest na wiele architektur i jest dobrze zrównoleglony (przy użyciu MPI i Mixed MPI/SMP).

Główne własności pakietu:



- Praca z pseudopotencjałami norm-conserving oraz ultrasoft.
- przybliżenia LDA, LSD i GGA, energia swobodna
- układy periodyczne i aperiodyczne, k-points
- symetria punktowa i przestrzenna
- optymalizacja funkcji falowej (bezpośrednia, diagonalizacja, ...)
- dynamika molekularna zespołów mikrokanonicznego (NVE), kanonicznego (NVT) oraz izotermiczno-izobarycznego (NPT)
- dynamika molekularna typu path integral
- response functions
- stany wzbudzone
- własności elektronowe.

Źródło: <http://list.wcss.wroc.pl/docs/kdmug/c4s2.html>

### 1.1.1.10. DGAUSS / UNICHEM

#### *Ogólne*

UniChem jest graficznym pre- i postprocesorem z interfejsami do programów mechaniki kwantowej. Posiada m.in. interfejs do programu DGAUSS. DGauss jest pakietem do obliczeń z użyciem metody DFT (dyskretna transformata Fouriera) ze gaussowskim zbiorem bazowym.

Możliwości programu DGauss to m.in.:

- obliczenia SCF
- obliczenia równowagi geometrii molekuł
- ocena częstotliwości drgań harmoniczných
- analiza populacji Mulliken'a
- obliczanie momentu dipolowego

#### *Zastosowanie*

Unichem jest używany do sterowania obliczeniami programu DGauss, w tym monitorowania jego działania, wizualizacji struktury molekuł, orbitali cząsteczkowych, potencjałów elektrostatycznych, ładunków atomów i innych własności cząsteczek. DGauss może być używany do prowadzenia dokładnych teoretycznych obliczeń dla dużego zakresu związków, włączając małe cząsteczki, związki organo-metaliczne, układy biologiczne i inne.

#### *Producent / Dostępność*

Stworzone przez personel Cray Corp., U.S.A. Sprzedawane przez Accelrys, Oxford, U K.

#### *Źródło / więcej informacji*

Źródło: <http://www.cwcp.ac.uk/cwcp/unichem.html>

### 1.1.1.11. Fidap

#### *Ogólne*

Fidap (Fluid Dynamics Analysis Package) to program do symulacji przepływu płynów z transportem energii i mas. Opiera się on na metodzie elementów skończonych. Program może pracować w trybie tekstowym lub graficznym. Umożliwia także wykonywanie pewnych funkcji systemowych takich jak edycja i drukowanie plików, uruchamianie zadań w tle itp. Posiada on kompletne możliwości do każdego etapu przepływu płynów: tworzenia modelu, generacji siatek, wprowadzania danych, symulacji problemu, wizualizacji wyników, a także zapewnia edycję plików i uruchamianie zadań w tle.

#### *Zastosowanie:*

- przetwarzanie polimerów
- biomedycyna
- metalurgia
- przetwarzanie szkła
- obliczanie nacisku i odchylenia stałych struktur (w zależności od temperatury)
- obliczanie przepływów ciepła w płynie

#### *Moduły i funkcjonalność*

Wszystkie moduły są wykonywane pod kontrolą programu FIDAP. Komunikacja pomiędzy różnymi modułami odbywa się poprzez wspólne bazy: modelu i wyników.

- Fidap - moduł główny kontrolujący prace pozostałych modułów przez wspólne bazy modeli i wyników.
- FIPREP - moduł do tworzenia geometrii modelu, specyfikacji klasy problemu i równań do rozwiązania, własności materiału i warunków brzegowych
- FI-BC - moduł do interaktywnej graficznej generacji warunków początkowych i brzegowych, tworzenia grup elementów brzegowych
- FICONV - zapewnia konwersję do plików "neutral" (PATRAN, I-DEAS), inne użytkowe funkcje
- FI-GEN, FIMESH - służy do generacji siatek
- FIPOST - wizualizacja wyników
- FISOLV - moduł analizy
- GAMBIT - preprocesor do modelowania geometrii i generowania siatki

#### *Źródło / więcej informacji*

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/apl/fidap.html>

<http://gopard.cyf-kr.edu.pl/APLIKACJE/FLUENT/fidap.html>

#### *Wykorzystanie:*

Gdańsk, Kraków, Łódź

### 1.1.1.12. FLUENT (CFD)

#### *Ogólne*

Programy CFD (Computational Fluid Dynamics) firmy Fluent Inc. umożliwiają szczegółową analizę zagadnień związanych z przepływem płynów, eliminując konieczność przeprowadzenia czasochłonnych i kosztownych badań doświadczalnych podczas cyklu projektowania i modernizacji urządzeń. Programy CFD pozwalają uzyskać niezbędne informacje o przepływie płynu (rozkład pola prędkości, pole ciśnienia), ruchu ciepła (pole temperatury) i masy (w tym reakcje chemiczne). Osiąga się to poprzez numeryczne rozwiązanie równań opisujących wymianę pędu, bilansu energii i masy. Jest dostępnych kilka numerycznych metod, które umożliwiają rozwiązanie wspomnianych równań. Są to:

- metoda elementów skończonych,
- metoda objętości skończonej.

Każda z tych metod posiada zalety jak również pewne ograniczenia w zależności od klasy zagadnień. Produkty firmy Fluent wykorzystują obie metody tak, aby użytkownik miał możliwość analizy jak najszerszej grupy zagadnień. Tymi produktami są następujące programy:

**FLUENT4.5** - solver metody objętości skończonej, siatka strukturalna, płyny ściśliwe i nieściśliwe, przepływy poddźwiękowe i naddźwiękowe

**FLUENT6.0** zawiera:

- solver metody objętości skończonej, siatka niestrukturalna, płyny ściśliwe i nieściśliwe, przepływy poddźwiękowe (dawniej program UNS),
- solver metody objętości skończonej, siatka niestrukturalna, płyny ściśliwe, przepływy poddźwiękowe i naddźwiękowe (dawniej program RAMPANT)),

#### *Zastosowanie:*

- Badania kosmiczne/obronność: opływy okrętów podwodnych, samolotów, wentylacja kabin i pomieszczeń,
- Przemysł biomedyczny: przepływy krwi w sztucznych i naturalnych organach, przepływy w urządzeniach biomedycznych, oczyszczanie powietrza, przepływy powietrza w naturalnych organach człowieka, atomizery.
- Przemysł chemiczny: przepływ ciepła i masy w reaktorach chemicznych z uwzględnieniem reakcji chemicznych, procesy mieszania w zbiornikach, procesy separacyjne (filtracja), procesy z przemianą fazową (suszenie, odparowanie, kondensacja),
- przemysł elektroniczny i półprzewodników: przepływy powietrza i profile temperatur w obudowach, przepływy powietrza, rozkład temperatur wokół podzespołów elektronicznych i płytek drukowanych, depozycja par, wzrost kryształów, krzepnięcie i utwardzanie lutów,
- Przemysł metalurgiczny: odlewanie metali (przemiany fazowe), konwekcja w zbiornikach wlewowych, wytłaczanie aluminium,
- Motoryzacyjny: obliczanie współczynników oporu powietrza, klimatyzacja wnętrza pojazdów, chłodzenie bloków silnika, projektowanie radiatorów i dysz.
- Energetyka ciepła: wymienniki ciepła, regeneratory ciepła, projektowanie systemów ogrzewczych i klimatyzacyjnych, spalanie paliw płynnych, stałych i gazowych chłodzenie natryskowe.

- Spożywczy: pasteryzacja, sterylizacja, tunele chłodzące, zamrażanie,
- zbiorniki paliwa, rurociagi,

Źródło: <http://gepard.cyf-kr.edu.pl/APLIKACJE/FLUENT/fluent.html>

### 1.1.1.13. GAMESS

#### *Ogólne:*

GameSS (ang. General Atomic and Molecular Electronic Structure System ) jest wielofunkcyjnym pakietem do obliczeń metodą ab initio w dziedzinie chemii kwantowej .

#### *Moduły i funkcjonalność*

- obliczanie różnych własności cząsteczek (momentów dipolowych, gęstości elektronowej i spinowej, potencjału elektrostatycznego); wyznaczanie wielu własności molekularnych, od momentów dipolowych po hiperpolaryzowalności; szeroki wachlarz baz funkcyjnych obejmuje atomy aż do radonu, bazy można także wczytywać z zewnątrz.
- obliczanie funkcji falowych metodami RHF, UHF, ROHF, GVB lub MCSCF
- obliczanie energii na poziomie CI (oddziaływanie konfiguracji oraz poprawki do energii na poziomie MP2)
- obliczanie długości wiązań oraz rozkładu ładunku w cząsteczce oparty na chemii kwantowej
- gradienty analityczne są dostępne dla funkcji SCF, dla automatycznej optymalizacji geometrii i badania przejść stanów
- poszukiwania punktów siodłowych na powierzchni energii potencjalnej
- wyznaczania ścieżki reakcji od punktu siodłowego do reagentów lub produktów reakcji
- wyznaczanie funkcji falowych metodami SCF wielu typów (RHF, UHF, ROHF, GVB, MCSCF) oraz poprawki korelacyjne (CI, PT2, CC, DFT) dla niektórych z nich
- wyznaczanie hessianu energii w celu przewidywania częstości drgań i własności termodynamicznych

Wraz z pakietem udostępnianych jest kilka programów graficznych pozwalających obejrzeć rezultaty obliczeń. Wiele obliczeń może być realizowanych z użyciem technik bezpośrednich jak również równoległe na odpowiedniej platformie sprzętowej.

#### *Producent/ dostępność*

Program rozwijany jest na Uniwersytecie Stanowym Iowa przez profesora Marka Gordona oraz członków jego grupy.

#### *Źródło/ więcej informacji*

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/apl/games.html>

Źródło: <http://list.wcss.wroc.pl/docs/kdmug/c4s2.html>

#### *Wykorzystanie:*

Gdańsk, Kraków, Poznań, Wrocław, Łódź

### 1.1.1.14. GAUSSIAN

#### *Ogólne*

Gaussian jest to system przeznaczony do modelowania różnych układów chemicznych oraz do obliczeń dotyczących budowy, struktury i własności molekuł przy użyciu mechaniki kwantowej. Program zawiera programy do konwersji standardowych formatów danych i wyników.

Istnieje możliwość wizualizacji uzyskanych wyników przy użyciu pakietu AVS, należy jednak najpierw otrzymane wyniki przetworzyć na format właściwy dla AVS przy użyciu programu formchk, wchodzącego w skład Gaussiana .

Stosowany jest przez chemików, fizyków i inżynierów w dziedzinie chemii teoretycznej i eksperymentalnej. Program jest szczególnie przydatny w obszarach, w których szybko zachodzące zmiany i krótko trwające stany pośrednie układów uniemożliwiają obserwację eksperymentalną zachodzących w nich procesów. Gaussian umożliwia badanie układów na poziomie ab initio oraz na poziomie bardziej uproszczonym (np. półempirycznym).

Obliczenia w pakiecie dokonywane są różnymi metodami: półempirycznymi, Hartree-Fock molecular orbital, post, testującymi stabilność funkcji falowej, uwzględniającymi stabilność solwentu. Program może obliczać energię systemów tak dużych jak 378-atomowy związek DNA.

Obliczenia mogą być prowadzone na układach w stanie gazowym lub roztworach, w stanie podstawowym lub stanie wzbudzonym.

Gaussian 03 jest potężnym narzędziem do analizy wpływu podstawników, badania mechanizmów reakcji, obliczeń powierzchni energii potencjalnej i energii wzbudzenia.

#### *Zastosowanie:*

Gaussian 03 służy do określania wielu własności molekuł i reakcji, włączając w to:

- energię i strukturę molekularną
- energię i strukturę stanów przejściowych
- częstotliwość drgań
- widma IR i Ramana
- własności termochemiczne
- energię wiązań i reakcji
- orbitale molekularne
- ładunki atomowe
- momenty multipolowe
- osłanianie NMR i wrażliwość magnetyczną
- powinowactwo elektronowe i potencjały jonizacyjne
- polaryzowalność i hyperpolaryzowalność
- potencjały elektrostatyczne i gęstość elektronową

### *Producent/ Dostępność*

Pakiet Gaussian został pierwotnie opracowany przez zespół J.A. Pople'a. Pierwsza wersja pakietu udostępniona została w 1976 roku pod nazwą Gaussian-76. Kolejne wersje nazywano odpowiednio do roku, w którym były wydawane, Gaussian-80, -82, -86, -88, -90, -92, -94, -98 i ostatnia wersja -03.

Program Gaussian można uruchamiać na większości z dostępnych platform sprzętowych i systemowych, począwszy od komputerów klasy PC/Macintosh z Windows, Linux lub MacOS, poprzez praktycznie wszystkie uniksowe stacje robocze, po superkomputery wszystkich producentów. Gaussian może być wykonywany równolegle w środowiskach SMP oraz rozproszonych (po zakupieniu dodatkowego pakietu Linda).

### *Źródło/ więcej informacji*

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/apl/gaussian.html>

<http://list.wcss.wroc.pl/docs/kdmug/c4s2.html>

### *Wykorzystanie:*

Gdańsk, Kraków, Poznań, Wrocław, Łódź

#### **1.1.1.15. GENSTAT**

GENSTAT 5 jest rozbudowanym programem do analizy statystycznej. GENSTAT zawiera nie tylko komendy do wykonywania wybranej analizy statystycznej. **Jest to również język programowania z graficznym interfejsem, umożliwiającym pisanie własnych programów**, gdy dostępne metody statystyczne są niewystarczające.

Źródło: <http://gepard.cyf-kr.edu.pl/BIBLIOTEKI/genstat.html>

Wykorzystanie: Kraków

#### **1.1.1.16. GLIM 4**

GLIM 4 (Generalized Linear Interactive Modelling) jest programem ułatwiającym dopasowywanie modeli liniowych do danych statystycznych.

Źródło: <http://gepard.cyf-kr.edu.pl/BIBLIOTEKI/glim.html>

Wykorzystanie: Kraków

#### **1.1.1.17. GMT**

### *Ogólne*

GMT (ang. General Mapping Tools) jest zbiorem narzędzi (programów) umożliwiającym przetwarzanie danych w układzie przestrzennym (x, y i x, y, z). GMT dostarcza (badaczom zajmującym się naukami o ziemi) szereg narzędzi do przetwarzania danych i ich graficznej prezentacji. Należą do nich procedury próbkowania, filtry, wyznaczanie trendów w szeregach czasowych, interpolacja przestrzenna, operacje matematyczne na danych dwuwymiarowych, próbkowanie powierzchni wzdłuż dowolnie określonego przekroju, określanie nachylenia powierzchni etc. Wynikiem programu może być: jednowymiarowa tablica ASCII, dwuwymiarowy plik binarny, plik postscriptowy, raport o przebiegu działania.

Programy służące do prezentacji wyników obliczeń umożliwiają użytkownikowi tworzenie wykresów w skali liniowej  $\log_{10}$  i  $x^a \cdot y^b$ , biegunowych i prostokątnych histogramów, map z zamalowanymi obszarami lądu i linii brzegowej w 15 popularnych odwzorowaniach, nakładania na siebie warstw tematycznych, rysunków kolorowych i monochromatycznych, podkreślania rzeźby przez zastosowanie sztucznego oświetlenia.

Odwzorowania geograficzne realizowane przez GMT:

- stożkowe równo-powierzchniowe Albersa (Albers Conic Equal-Area)
- stożkowe Lamberta (Lamber Conic Conformal)
- azymutalne, równopowierzchniowe Lamberta (lambert Azimuthal Equal-Area)
- stereograficzne równokątne (Stereographic Equal-Angle)
- ortograficzne (Orthographic)
- azymutalne równoodległościowe (Azimuthal Equidistant)
- Mercatora
- TM i UTM (Universat Transverse Mercator)>
- nachylone Mercatora (Oblique Mercator)
- cylindryczne Cassiniego (Cassini Cylindrical)
- Hammera
- Mollweide'go
- Winkel Tripel
- przerwane sinusoidalne (Interrupted Sinusoidal)
- liniowe

### *Zastosowanie*

- filtracje danych w układzie przestrzennym i czasowym
- usuwanie trendu z szeregów czasowych
- wyznaczanie trendu w przestrzeni
- interpolacje danych do regularnej siatki
- wizualizacje dwu i trójwymiarową w różnych (20) odwzorowaniach kartograficznych
- manipulacje danymi w postaci binarnej i tablicy ASCII

### *Producent/ dostępność*

GMT napisany jest w języku C i może być używany na dowolnej platformie UNIX-owej. W trakcie jego tworzenia autorzy przyjęli zasadę, charakterystyczną dla UNIXA, że proces przetwarzania:

dane surowe --> przetwarzanie --> prezentacja

jest podzielony na szereg elementarnych kroków, które realizowane są przez niezależne narzędzia GMT lub UNIX.

### *Źródło/więcej informacji:*

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/apl/gmt.html>

### 1.1.1.18. Maple V

Maple V jest uniwersalnym, interaktywnym pakietem matematycznym dostarczającym środowiska do pracy z wyrażeniami algebraicznymi, dwu- i trójwymiarową grafiką oraz programowania. Służy do obliczeń symbolicznych, przekształceń i upraszczania wyrażeń, dokładnej reprezentacji wielkości matematycznych, wykorzystywany do rozwiązywania problemów z algebry, analizy, kombinatoryki, algebry wyższej, teorii liczb, funkcji specjalnych, statystyki, rachunku operatorowego, geometrii. Zastosowanie rachunku symbolicznego pozwala, w przeciwieństwie do podejścia numerycznego, na rozwiązywanie problemów matematycznych w sposób dokładny. Maple V umożliwia przygotowywanie kompletnych opracowań i artykułów naukowych. Przekształcenia oraz wyniki obliczeń są w standardowej notacji matematycznej nadającej się wprost do publikacji. Całość zorganizowana jest w postaci arkusza, w którym umieszcza się wyniki, przebieg obliczeń, grafikę oraz dowolny opis.

Możliwości:

- standardowy zapis matematyczny (na terminalach graficznych)
- wizualizacja graficzna (2D, 3D, animacje)
- dostępność obliczeń symbolicznych, automatyczne przekształcenia i uproszczenia wyrażeń oraz dokładna reprezentacja wielkości matematycznych i reprezentacja zmiennoprzecinkowa o zadanej dokładności
- posiada bibliotekę zawierającą ponad 2500 funkcji
- możliwość zapisu sesji w postaci arkusza, dzięki czemu możliwe jest przenoszenie zadań między różnymi platformami sprzętowymi
- możliwość automatycznego tworzenia dokumentacji projektu
- rozszerzalność, efektywny i przejrzysty język programowania (procedury, definicje operatorów, typy złożone, debugging)
- przenośność pomiędzy różnymi komputerami i systemami operacyjnymi (ponad 30 platform)
- automatyczna generacja wyjścia (C, Fortran, TEX)

*Zastosowania*

- ekonomia
- przemysł
- finanse i statystyka
- astronomia
- chemia
- fizyka kwantowa

*Producent / dostępność:*

Pakiet Maple został stworzony w latach osiemdziesiątych przez grupę naukowców z University of Waterloo i ETH Zurich.

*Źródło/ więcej informacji*

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/apl/maple.html>

<http://gepard.cyf-kr.edu.pl/APLIKACJE/MAPLE/maple.html>



## *Wykorzystanie*

Gdańsk, Kraków, Poznań

### **1.1.1.19. MATHEMATICA**

#### *Ogólne*

Mathematica firmy Wolfram Research Inc. jest jednym z najlepszych systemów do obliczeń symbolicznych i numerycznych oraz graficznej prezentacji otrzymanych wyników. Obliczenia symboliczne i numeryczne obejmują:

- algebrę liniową,
- liczby zespolone,
- rozwiązywanie równań i układów równań,
- różniczkowanie i całkowanie,
- aproksymacje i interpolacje,
- optymalizacje,
- transformaty Fourier'a i Laplace'a,
- równania różniczkowe i cząstkowe,
- analizę wektorową,
- funkcje specjalne.

Funkcje graficzne systemu Mathematica umożliwiają tworzenie:

- wykresów funkcji i danych pomiarowych,
- wykresów dwu- i trójwymiarowych,
- wykresów warstwicznych i cieniowanych,
- wielościanów,
- powierzchni obrotowych,
- pól wektorowych,
- animacji.

System Mathematica posiada własny język programowania, pozwalający w pełni wykorzystać dostępne narzędzia. **Można również, korzystając z interfejsu MathLink, przyłączyć programy napisane w języku C.** Z systemem Mathematica współpracują dodatkowe moduły, realizujące obliczenia z różnych dziedzin. Są to np. moduły: Electrical Engineering Pack, Finance Pack, Time Series Pack, Optica, Mechanical Systems Pack, MathLive, Nodal, MathTensor, TSiDynamics, TSiControls, MathLink for Excel, MathLink for Spyglass, MathLink for Matlab. System Mathematica posiada specjalny interfejs graficzny X Front End umożliwiający pracę w systemie okienkowym.

#### *Producent / dostępność*

System Mathematica jest dostępny na wielu platformach sprzętowych i pracuje w różnych systemach operacyjnych.

### *Źródło/ więcej informacji*

Źródło: <http://gepard.cyf-kr.edu.pl/APLIKACJE/MATHEMATICA/mathematica.htm>

Więcej informacji: <http://www.wolfram.com>, <http://www.gambit.krakow.pl>

### *Wykorzystanie*

Gdańsk, Kraków, Poznań, Wrocław, Łódź

## **1.1.1.20. MATLAB**

### *Ogólne:*

Matlab (ang. *MATrix LABORatory*) jest środowiskiem obliczeniowym przeznaczonym do wykonywania skomplikowanych obliczeń numerycznych i wizualizacji. System integruje numeryczną analizę, rachunek macierzy, przetwarzanie sygnałów oraz graficzną reprezentację w łatwym do użycia środowisku, gdzie problemy i ich rozwiązania są przedstawiane w zapisie matematycznym bez użycia tradycyjnego programowania. Matlab jest językiem programowania wysokiego poziomu. Zakres zastosowań pakietu obejmuje różne dziedziny nauki i techniki, w tym: biologię, medycynę, chemię, ekonomię i meteorologię.

Nazwa MATLAB pochodzi od MATrix LABoratory i wiąże się z pierwotną koncepcją pakietu, polegającą na udostępnieniu użytkownikowi procedur LINPACK-a i EISPACK-a przy pomocy prostego interakcyjnego języka poleceń.

### *Główne funkcje:*

- obliczenia numeryczne do szybkiego generowania wyników
- grafika do wizualizacji i analizy danych
- interaktywny język i środowisko programistyczne
- narzędzia do budowy własnego GUI
- integracja z zewnętrznymi aplikacjami składającymi się z komponentów C, C++, Fortran, Java, COM, Excel.
- import danych z plików i urządzeń zewnętrznych (dodatkowo dostęp do baz danych i kolejnych urządzeń)
- konwersja aplikacji MATLABa na C i C++ przy użyciu kompilatora.

### *Moduły:*

- MATLAB - moduł główny, właściwe środowisko obliczeniowe
- SIMULINK - program do symulacji systemów dynamicznych
- Control System Toolbox - zbiór algorytmów, które umożliwiają projektowanie, analizę i modelowanie systemów kontroli
- System Identification Toolbox - zajmuje się problemem budowy matematycznych modeli dynamicznych systemów opartych na zastanym zbiorze danych
- Optimization Toolbox - zajmuje się minimalizacją i maksymalizacją funkcji, głównie nieliniowych; zawiera również zbiór funkcji rozwiązujących standardowe problemy macierzowe jak np. programowanie liniowe

- Signal Processing Toolbox - wspomaga szeroki zakres operacji i przetwarzania sygnałów, np. projektowanie i implementację filtrów, parametryczne modelowanie, analizę spektralną
- Nonlinear Control Design Toolbox - z tym modułem można dobrać parametry do nieliniowego modelu pobranego z SIMULINK
- Statistics Toolbox
- Neural Network Toolbox - sieci neuronowe
- Image Processing Toolbox - zbiór funkcji wspomagających operacje przetwarzania obrazów od wyświetlania poprzez filtrowanie, analizę do różnego rodzaju transformacji
- Partial Differential Equations Toolbox
- Financial Toolbox
- Wavelet Toolbox

### *Producent/ dostępność*

Pierwsza wersja MATLAB-a została napisana w Fortranie w 1980. Jej autorem jest C.Moler. W pięć lat później firma MathWorks Inc. wprowadziła na rynek wersję komercyjną, napisaną w języku C. Wersja ta do dzisiaj została znacznie rozszerzona i obejmuje różne platformy sprzętowe począwszy od PC, a skończywszy na superkomputerach.

### *Źródło / więcej informacji*

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/apl/matlab.html>  
<http://gepard.cyf-kr.edu.pl/APLIKACJE/MATLAB/matlab.html>  
<http://list.wcss.wroc.pl/docs/kdmug/c4s2.html>

### *Wykorzystanie:*

Gdańsk, Kraków, Poznań, Wrocław

## **1.1.1.21. MOLDY**

### *Ogólne*

Moldy (ang. MOLEcular DYnamics simulation code ) jest programem chemicznym. Służy on do symulacji fazy skondensowanej, metodą klasycznej dynamiki molekularnej. Program pozwala wykonywać obliczenia dla dowolnego zbioru sztywnych molekuł, jonów i atomów w zespołach NVT lub N-sigma-T (z wykorzystaniem metody Parrinello-Rahmana). Siły krótkozasięgowe liczone są metodą cel połączonych, a długozasięgowe metodą Ewalda. Program dopuszcza potencjały Lennarda-Jonesa, 6-exp, Buckingham-Born-Meyera, MCY i 4-6-8-12-exp. Łatwo można dodać inne typy potencjałów.

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/apl/moldy.html>

### *Wykorzystanie*

Gdańsk, Łódź

### 1.1.1.22. MOLPRO

MOLPRO jest całościowym pakietem do obliczeń w dziedzinie chemii kwantowej, oferującym zaawansowane jak i podstawowe metody ab initio, ze szczególnym uwzględnieniem metod korelacyjnych. Główne cechy MOLPRO:

- pełny zakres metod ab initio
- moduły direct i local dla obliczeń w trybie Direct SCF oraz Localized Moeller-Plesset
- obliczenia przeprowadzane z utrzymaniem maksymalnej możliwej precyzji
- możliwość generowania danych wsadowych dla Gaussiana, Moldena, formaty XYZ, i inne
- przyjazna i bardzo elastyczna składnia danych wejściowych (proste słownictwo, wyrażenia, zmienne, pętle, warunki, procedury, itp.)

Pakiet napisany jest głównie w języku Fortran90. Twórcami pakietu są H.J. Werner, P.J. Knowles i wielu innych, którzy przyczynili się do jego rozwoju. Licencjonowaniem MOLPRO zajmuje się Uniwersytet Birmingham.

Źródło: <http://list.wcss.wroc.pl/docs/kdmug/c4s2.html>

### 1.1.1.23. MSC/Dytran

Dytran to pakiet służący do modelowania szybkozmiennych zjawisk dynamicznych, jak zderzenia, wybuchy, tłoczenie. Program jest używany do trójwymiarowych symulacji odpowiedzi dynamicznej ciał stałych, struktur oraz płynów. Jest zaprojektowany do symulacji i analizy nieliniowych, szybkozmiennych zdarzeń (np. wzajemne oddziaływanie płynów i struktur). Może być użyty do praktycznego rozwiązywania różnego rodzaju problemów, jak umocnienia, przestrzenie powietrzne, czy w budownictwie okrętowym. Typowym zastosowaniem jest budowa i testowanie działania poduszki powietrznej w czasie wypadku, uderzenie ptaka w samolot.

MSC/DYTRAN jest dostępny na większość unix'owych stacji i serwerów.

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/apl/dytran.html>

### 1.1.1.24. MSC/Fatigue

Fatigue jest jednym z modułów pakietu MSC/Patran . Program służy do badania "zmęczenia", wyznaczania długości życia materiału analizowanego wczesniej Metodą Elementów Skonczonych, np. programem NASTRAN. Posiada on kilka możliwych poziomów użycia, takich jak: globalna "multi-location" analiza (ściśle powiązana z Patranem), szczegółowa, pojedyncza optymalizacja. MSC/Fatigue dostarcza systematycznego podejścia do oceniania cyklu życia produktu. MSC/FATIGUE jest częścią składową pre- i postprocesora PATRAN.

#### *Zastosowanie*

- wyznaczanie długości życia materiału
- analiza powstania pęknięć
- analiza propagacji pęknięć

#### *Moduły i funkcjonalność*

Dzięki MSC/FATIGUE możliwe jest przeprowadzenie 3 typów analizy:

- Analiza wytrzymałości zmeczeniowej (Total Life Analysis), zwana również metoda S-N, bazująca na metodzie Wohlera,
- Analiza powstawania pęknięć (Crack Initiation Analysis), zwana również metoda odkształcen miejscowych.
- Analiza powiększania szczeliny (Crack Growth Analysis), zwana też analiza propagacji szczeliny, czy sprężysto-liniowa mechanika pęknięć (LEFM).

#### *Źródło/ więcej informacji*

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/apl/fatigue.html>

<http://gepard.cyf-kr.edu.pl/APLIKACJE/MSC/fatigue.html>

Więcej informacji: <http://www.macsch.com/products/fatigue>

#### *Wykorzystanie:*

Grańsk, Kraków

#### **1.1.1.25. MSC/Marc**

MSC/Marc to powszechnie stosowany program do zaawansowanych symulacji wykorzystujących metodę elementów skończonych. Jest produktem od lat stosowanym w wielu branżach przemysłowych w celu poprawienia produktów oraz do rozwiązywania problemów inżynierskich.

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/apl/marc.html>

#### **1.1.1.26. MSC/Mvision**

MVISION Builder and Evaluator dostarcza szczegółowych informacji o materiałach używanych w technice. Zmniejsza czas projektowania dzięki danym o jakości materiałów, czy testach materiałów. Pozwala on na przenoszenie danych do innych aplikacji, np. MSC/PATRAN CAE , MSC/NASTRAN . Pakiet ten może być użyty do gromadzenia (w bazach danych) danych o testach materiałów i wykorzystaniu ich w analizie i konstrukcji szczegółowej. MSC/Mvision Evaluator jest aplikacją przeznaczoną dla inżynierów do wyboru i pracy z danymi o właściwościach materiałów w materiałowym systemie informacyjnym Mvision . Evaluator łączy moc narzędzi do wyboru materiałów ze zdolnością do tworzenia raportu.

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/apl/msi.html>

#### **1.1.1.27. MSC/Nastran**

MSC/NASTRAN jest programem rozwiązującym skomplikowane problemy inżynierskie przy pomocy metody elementów skończonych. Jest programem przeznaczonym głównie do obliczeń wytrzymałościowych i termicznych oraz optymalizacji konstrukcji. Główne dziedziny zastosowań to przemysły maszynowy, samochodowy i lotniczy, a także stoczniowy, hutniczy i wydobywczy, w których niesolidne wyniki mogą powodować bardzo duże straty. Użytkownik może tworzyć dowolne kombinacje elementów skończonych, materiałów, procedur analizy i sekwencji obciążeń.

### *Moduły i funkcjonalność*

Program Nastran jest ściśle związany z pre- i postprocesorem Patran, oferującym całkowicie zintegrowane środowisko do modelowania i analizy. Zawiera następujące biblioteki:

- biblioteka elementów skończonych - pozwala na modelowanie dowolnie skomplikowanych geometrii układow i zawiera sprawdzone w praktyce i przetestowane elementy skończone
- biblioteka modeli materiałów - służy do modelowania izotropowych i anizotropowych materiałów w procesach adiabatycznych i izotermicznych, dla małych i dużych prędkości odkształceń, dla skończonych deformacji. Biblioteka materiałów zawiera także modele przeznaczone do analizy gum, plastyków, kompozytów, zbrojonych betonów, pianek i materiałów geotechnicznych, takich jak grunty czy skały.
- biblioteka procedur analizy - służy do analizy stanu naprężeń, odkształceń, przemieszczeń, transportu masy, ustalonego i nieustalonego przepływu ciepła; również analizy akustyczne i piezoelektryczne. Analizy te mogą być przeprowadzone niezależnie, sekwencyjnie, bądź jako całkowicie sprzężone z analizą naprężeń.

### *Zastosowanie*

Przy pomocy programu MSC/NASTRAN można rozwiązywać takie problemy jak:

- liniowa statyka z obciążeniami bezwładnościowymi,
- analiza statyczna z nieliniowościami geometrii i materiału,
- bezpośrednia i modalna zespolona analiza wartości własnych,
- bezpośrednia i modalna analiza częstotliwościowa,
- liniowa statyka i analiza drgań z cykliczną symetrią,
- przepływy ciepła,
- aeroelastyczność,
- wielopoziomowe superelementy,
- akustyka,
- analiza kompozytów,
- cykliczna symetria,

do których stosuje się elementy typu p i elementy adaptacyjne typu hp.

### *Producent / dostępność*

MSC/NASTRAN powstał i jest rozwijany przez amerykańską firmę The MacNeal-Schwendler Corporation. W programie tym zastosowano nowoczesne technologie i algorytmy baz danych, algebry macierzy rzadkich i analizy numerycznej. Obecna wersja jest w większości napisana w Fortranie (około 1.5 miliona instrukcji).

### *Źródło/ więcej informacji*

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/apl/nastran.html>

<http://gepard.cyf-kr.edu.pl/APLIKACJE/MSC/nastran.html>

więcej informacji: <http://www.macsch.com/products/nastran>

### 1.1.1.28. MSC/Patran

MSC/Patran dostarcza środowiska MCAE (ang. *Mechanical Computer Aided Engineering*), stanowi pre- oraz postprocesor dla pakietów inżynierskich wykorzystujących metodę elementów skończonych, m.in.

MSC/Nastran. MSC/PATRAN może on również współpracować z programem ABAQUS.

Patran może być wykorzystany do symulacji wykonania produktu i procesu wytworzenia we wczesnej fazie procesu projektowania. Dostarcza on narzędzi do tworzenia zadanej geometrii obiektu, jak również wczytywania istniejącej. Stworzony projekt jest zapisywany jako baza danych. Patran posiada też narzędzia do wizualizacji wyników, które umożliwiają rozpoznanie informacji krytycznych, w tym minimum, maksimum, kierunków i współzależności. Pakiet posiada graficzny interfejs i pomoc "online".

W MSC/PATRAN użytkownik może tworzyć geometrie układu, jak również importować już gotową geometrie z następujących systemów CAD'owskich:

- Euclid 3
- IGES
- CATIA
- Pro/Engineer
- Unigraphics

#### *Producent / dostępność*

MacNeal Schwendler Corporation

#### *Źródło / więcej informacji*

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/apl/patran.html>

<http://gepard.cyf-kr.edu.pl/APLIKACJE/MSC/patran.html>

### 1.1.1.29. NWChem

NWChem jest pakietem do obliczeń w dziedzinie chemii teoretycznej. Zaprojektowany jest do wydajnego uruchamiania w środowiskach wieloprocesorowych - zarówno na maszynach SMP jak i rozproszonych. Pakiet jest skalowalny, zarówno przy wzroście rozmiaru problemu, jak i przy zwiększaniu dostępnych zasobów (np. dodanie procesorów). Drugą ważną cechą pakietu jest jego modularność - łatwość rozbudowy o moduły użytkownika implementowane w dowolny sposób.

NWChem dostarcza wielu metod do wyznaczania własności systemów molekularnych z wykorzystaniem standardowych opisów mechaniki kwantowej elektronowych funkcji falowych lub gęstości. Dodatkowo NWChem umożliwia przeprowadzenie klasycznych symulacji dynamiki molekularnej. Pakiet zawiera standardowy zakres metod wyznaczania energii i gradientów w oparciu o metodologię SCF, DFT (także SODFT), poprawki korelacyjne na bazie m.in. CASSCF oraz PT2 i in.

Pakiet jest obecnie udostępniany za darmo, po dopełnieniu formalności licencyjnych można ściągnąć go przez sieć ze strony domowej NWChem.

Źródło: <http://list.wcss.wroc.pl/docs/kdmug/c4s2.html>

### 1.1.1.30. OPERA

#### *Ogólne*

Oprogramowanie OPERA firmy Vector Fields zawiera dwa systemy Opera-2d i Opera-3d.

Opera-2d jest dwuwymiarowym pakietem obliczeniowym, wykorzystującym metodę elementów skończonych, umożliwiającym analizę pól elektromagnetycznych w skomplikowanych obiektach fizycznych.

Opis modelu odbywa się za pomocą znanych z pakietów CAD metod (możliwe jest również bezpośrednie wczytywanie geometrii obiektów utworzonych za pomocą programu AutoCad).

Pakiet Opera-2D zaopatrzony jest w bardzo efektywny i łatwy w obsłudze moduł postprocesora (zintegrowany z preprocesorem) umożliwiający zarówno wizualizację obiektu jak i wyników rozwiązania w postaci wykresów liniowych, map barwnych oraz obrazów wektorów pola. Umożliwia to łatwą weryfikację poprawności uzyskanego rozwiązania. Postprocesor zapewnia również obliczanie wielkości całkowych takich jak energia, straty, siły i momenty działające na obiekt jak również określanie całek liniowych oraz powierzchniowych z dowolnych wyrażeń opisanych przez użytkownika.

Opera-3d jest w pełni trójwymiarowym pakietem obliczeniowym, wykorzystującym metodę elementów skończonych, umożliwiającym analizę pól elektromagnetycznych w skomplikowanych obiektach fizycznych. Dzięki zastosowaniu do opisu pola elektromagnetycznego różnego rodzaju potencjałów elektromagnetycznych uzyskano maksymalnie oszczędny model matematyczny.

Korzystanie z preprocesora pakietu jest proste dzięki umieszczeniu wszystkich opcji w postaci rozwijalnych menu oraz udostępnieniu szerokiego zakresu możliwości powielania i transformacji tworzonych obiektów z możliwością definiowania przez użytkownika z własnych funkcji transformacji.

Opera-3D umożliwia modelowanie obiektów o nieliniowej charakterystyce magnesowania, w tym także magnesów trwałych opisanych krzywą od magnesowania, jak również materiałów anizotropowych oraz uwarstwionych (pakiety blach). Pakiet charakteryzuje się prostym sposobem definiowania warunków brzegowych odpowiadającym warunkom fizycznym występującym w badanym obiekcie. Badanie dokładności rozwiązania jest ułatwione dzięki możliwości zmiany rzędu stosowanych funkcji aproksymujących poszukiwane rozwiązanie poprzez przejście z elementów ośmiowęzłowych na elementy 20-węzłowe.

Pakiet Opera-3D zaopatrzony jest w bardzo efektywny i łatwy w obsłudze moduł postprocesora umożliwiający zarówno wizualizację obiektu jak i wyników rozwiązania w postaci wykresów liniowych i przestrzennych, map barwnych oraz obrazów wektorów pola przedstawianych w postaci tzw. jeży lub strzałek zorientowanych przestrzennie. Umożliwia to łatwą weryfikację poprawności uzyskanego rozwiązania. Postprocesor zapewnia również obliczanie wielkości całkowych takich jak energia, straty, siły i momenty działające na obiekt jak również określanie całek objętościowych oraz powierzchniowych z dowolnych wyrażeń opisanych przez użytkownika.

Od wersji 7 pakietu Opera 3-D możliwe jest modelowanie bryłowe (dostępnego dotychczas wyłącznie za pośrednictwem programu IDEAS) bezpośrednio do preprocesora pakietu. W związku z tym zostały wprowadzone nowe możliwości tworzenia siatki przestrzennej:

#### *Moduły i funkcjonalność:*

Opera-2d udostępnia szereg modułów obliczeniowych zorientowanych na rozwiązanie specyficznych zagadnień:



- Moduł ST jest modułem specjalizowanym ukierunkowanym na rozwiązywanie zagadnień elektrostatycznych oraz magnetostatycznych występujących szczególnie w problemach modelowania maszyn elektrycznych, układów zapisu magnetycznego, soczewek magnetycznych, systemów rezonansu magnetycznego, ekranowania magnetycznego, akceleratorów cząstek i wielu innych.
- Moduły AC, TR i VL są modułami pozwalającym na rozwiązywanie problemów pól elektromagnetycznych zmiennych w czasie w tym:
  - AC - analizy problemów harmonicznym rozwiązywanym z zastosowaniem metody zespolonej z uwzględnieniem nieliniowości materiału oraz możliwością modelowania pętli histerezy poprzez wprowadzenie przenikalności zespolonej. Moduł ten umożliwia również modelowanie obiektów z wymuszeniem napięciowym pozwalając łączyć równania polowe występujące w płaszczyźnie rozwiązania z równaniami obwodowymi opisującymi elementy zewnętrzne np. rezystancje i indukcyjności połączeń czolowych.
  - TR - analizy problemów niestacjonarnych z pełnym rozwiązaniem równania względem czasu,
  - VL - analizy zjawisk w obiektach poruszających się w polu prądów stałych ruchem liniowym lub obrotowym z zastosowaniem specjalnych procedur dostosowania modelu (upwinding).
- Moduł SA jest modułem pozwalającym na automatyczną zmianę siatki podziałowej w oparciu o błąd uzyskanego rozwiązania. Opcja ta jest możliwa jedynie dla zagadnień magnetostatycznych.
- Moduł TH jest modułem specjalizowanym ukierunkowanym na rozwiązywanie rozkładów niestacjonarnych pól cieplnych obliczonych w oparciu o źródła ciepła będące wynikiem np. przepływu prądów wirowych obliczonych pakietem AC.

OPERA-3d składa się z następujących modułów:

- Moduł Tosca jest modułem specjalizowanym ukierunkowanym na rozwiązywanie zagadnień elektrostatycznych oraz magnetostatycznych występujących szczególnie w problemach modelowania maszyn elektrycznych, układów zapisu magnetycznego, soczewek magnetycznych, systemów rezonansu magnetycznego, ekranowania magnetycznego, akceleratorów cząstek i wielu innych.
- Moduł Elektra jest modułem pozwalającym na rozwiązywanie problemów pól elektromagnetycznych zmiennych w czasie w tym:
  - analizy problemów harmonicznym rozwiązywanym z zastosowaniem metody zespolonej z uwzględnieniem nieliniowości materiału oraz możliwością modelowania pętli histerezy poprzez wprowadzenie przenikalności zespolonej,
  - analizy problemów niestacjonarnych z pełnym rozwiązaniem równania względem czasu,
  - analizy zjawisk w obiektach poruszających się w polu prądów stałych ruchem liniowym lub obrotowym z zastosowaniem specjalnych procedur dostosowania modelu (upwinding).

Moduł ten zorientowany jest na rozwiązywanie problemów: modelowania maszyn elektrycznych i transformatorów także w stanach niestacjonarnych, defektoskopii elektromagnetycznej, systemów rezonansu magnetycznego, układów nagrzewania indukcyjnego oraz ekranowania elektromagnetycznego.

- W związku z nowymi możliwościami został wprowadzony nowy element menu preprocesora MESH zarządzający procesem tworzenia siatki przestrzennej.

### *Producent / dostępność*

Pakiet Opera-3D jest dostępny również w wersji na PC co umożliwia ewentualne przygotowywania modeli z użyciem tańszego sprzętu.

### *Źródło / dalsze informacje*

Źródło: <http://gepard.cyf-kr.edu.pl/APLIKACJE/OPERA/opera.html>

### *Wykorzystanie*

Kraków

## **1.1.1.31. Pro/ENGINEER**

### *Ogólne*

Pro/ENGINEER (Pro/E) jest narzędziem do całosciowego wspomagania procesów projektowania - od koncepcji wstępnej, aż po technologie wytwarzania.

Pro/PDM (Parametric Design Manager) - modul pełnego zarządzania projektem oraz wszystkimi dotyczącymi go danymi, stworzony specjalnie dla potrzeb wielostanowiskowego projektowania równoczesnego (concurrent engineering). Zapewnia elastyczne zarządzanie danymi, tak by każdy członek zespołu pracującego nad produktem miał dostęp do takich informacji, jakie będą mu potrzebne w pracy. Poziomy dostęp do informacji uzależniony jest od funkcji, jaką pełni dana osoba w zespole. Przede wszystkim jednak Pro/PDM służy do definiowania struktury projektu oraz nadawania poszczególnym członkom zespołu konstrukcyjnego i technologicznego praw do wprowadzania oraz zatwierdzania zmian. Zapewnia ciągły monitoring całego procesu projektowego. Dostępny jest w wersjach: Pro/PDM Server Connection i Pro/PDM for ORACLE. **Do modyfikacji oraz tworzenia własnych aplikacji systemowych służy Pro/PDM Toolkit.**

Pro/MECHANICA - rodzina modułów obliczeniowych opartych na metodzie elementów geometrycznych (MEG). Służy do rozwiązywania zagadnień związanych z wielokryterialną i interdyscyplinarną optymalizacją procesu projektowania. Użycie MEG pozwala na stosunkowo najwierniejsze odwzorowanie geometrii obiektu za pomocą trójwymiarowych, wielomianowych elementów typu "p", co daje bez porównania większą zgodność obliczeń z warunkami rzeczywistymi. Większość stosowanych do tej pory metod obliczeniowych (MES) opierała się na siatkach elementów płaskich typu "h".

### *Moduły i funkcjonalność:*

- Pro/MECHANICA STRUCTURE - optymalizacja konstrukcji na podstawie analizy strukturalnej naprężeń wywołanych liniowym obciążeniem statycznym.
- Pro/MECHANICA MOTION - analiza i obliczenia kinematyczne wraz z symulacją dynamiczną.
- Pro/MECHANICA THERMAL - obliczenia i optymalizacja konstrukcji poddanych działaniu zjawisk termicznych.
- Pro/MECHANICA VIBRATION - obliczenia i optymalizacja konstrukcji poddanych obciążeniom zmiennym w czasie (drżania własne, drżania wymuszone, uderzenia, itp.) Pro/MECHANICA CUSTOM

LOADS - obliczenia i optymalizacja konstrukcji z uwzględnieniem obciążeń, których funkcja zmienności definiowana jest przez użytkownika.

- Pro/MECHANICA TIRE MODEL - specjalistyczny moduł do dynamicznej symulacji zachowania opony.
- Pro/FLY-THROUGH-jest nawigatorem, który, w czasie rzeczywistym, pozwala poruszać się na zewnątrz oraz wewnątrz dużych złożonych części. Umożliwia więc obserwatorowi wizualną, dynamiczną inspekcję konstrukcji. Nawigator ma do dyspozycji, w zależności od potrzeb, trzy podstawowe sposoby inspekcji: Examine Mode, Walk Mode oraz Fly Mode.

### *Producent/ dostępność*

Produkt firmy Parametric Technology Corporation, powstały w Stanach Zjednoczonych u schyłku lat osiemdziesiątych, stał się do dnia dzisiejszego najlepiej sprzedającym się oprogramowaniem spośród systemów CAD/CAM/CAE klasy "high-end", co znalazło odzwierciedlenie w ilości instalacji - ok. 50000 stanowisk u przeszło 9000 użytkowników.

### *Źródło i dalsze informacje*

Źródło: <http://gepard.cyf-kr.edu.pl/APLIKACJE/MECHANICA/proengineer.html>

## **1.1.1.32. PRO/MECHANICA**

### *Ogólne*

System MECHANICA służy do projektowania, analizy, optymalizacji i syntezy elementów i układów mechanicznych. MECHANICA przeznaczona jest głównie dla konstruktorów i inżynierów mechaników. Łączy oryginalne metody i algorytmy z dobrym graficznym interfejsem, tworząc efektywne i łatwe w użyciu narzędzie wspomagające kolejne etapy procesu projektowania. System stosuje Metodę Elementów Geometrycznych, opartą na adaptacyjnej metodzie określania elementów skończonych, co daje znaczące korzyści w porównaniu z tradycyjną metodą elementów skończonych (szybkość, dokładność).

### *Moduły i funkcjonalność*

W skład pakietu MECHANICA wchodzi jako najważniejsze następujące moduły:

- MECHANICA Applied Structure, który umożliwia:
  - zaprojektowanie geometrii detalu mechanicznego przy pomocy graficznego interfejsu CADowskiego: można również wykorzystać projekt opracowany przy użyciu praktycznie dowolnego programu typu CAD,
  - automatyczne wygenerowanie trójwymiarowej siatki elementów typu p, Metoda Elementów Geometrycznych,
  - wybór materiału z biblioteki lub zdefiniowanie parametrów nowego materiału,
  - zdefiniowanie wieżow i działających sił
  - obliczenie rozkładu naprężeń z zadaną dokładnością
  - obliczenie rozkładu odkształceń z zadaną dokładnością,

- zoptymalizowanie kształtu detalu według wybranego kryterium przy zadanych ograniczeniach (np. minimalizacja masy przy zadanym maksymalnym napreżeniu)
- MECHANICA Applied Thermal, który jest rozszerzeniem Applied Structure i umożliwia:
  - obliczanie rozkładu temperatury w detalu przy zadanych źródłach ciepła,
  - użycie tej samej siatki elementów geometrycznych i elementów typu p co w Applied Structure,
  - użycie jednej siatki dla różnych rozkładów temperatur,
  - wykonanie optymalizacji kształtu przy kombinowanych ograniczeniach termicznych i wytrzymałościowych.
- MECHANICA Applied Motion, który umożliwia:
  - złożenie mechanizmu i wykonanie pełnej, trójwymiarowej analizy statycznej, kinetycznej i dynamicznej,
  - złożenie mechanizmu z elementów przygotowanych w CAD lub pobranych z biblioteki, przy użyciu kilkudziesięciu dostępnych rodzajów połączeń,
  - uzyskanie licznych wykresów pokazujących zależność między zmianami parametrów i zachowaniem się mechanizmu,

### *Producent / dostępność*

Opracowany został w amerykańskiej firmie RASNA Corporation, która już nie istnieje. Obecnie pod nazwą Pro/MECHANICA system jest rozwijany przez firmę Parametric Technology Incorporation.

### *Źródło i dalsze informacje*

Źródło: <http://gepard.cyf-kr.edu.pl/APLIKACJE/MECHANICA/mechanica.html>

Dalsze informacje: <http://www.ptc.com>

### **1.1.1.33. Reduce**

Reduce jest interaktywnym systemem algebry komputerowej. Służy on do wymagających żmudnych obliczeń przekształceń wyrażeń algebraicznych i symbolicznych, umożliwia automatyczne i sterowane upraszczanie wyrażeń algebraicznych. Program może nie rozwiązać problemu, dać rozwiązanie częściowe lub błędne.

Istnieje wiele pakietów, które rozszerzają możliwości programu Reduce (ładuje się je poleceniem: load\_package nazwa\_pakietu).

- izic, gnuplot
- ALGINT - umożliwia całkowanie wyrażeń zawierających pierwiastki kwadratowe
- AVECTOR, ORTHOVEC - udostępniają algebrę na wektorach i skalarach
- ARNUM - umożliwia operacje na liczbach algebraicznych
- GENTRAN, SCOPE - zapewniają generację programów obliczających numerycznie wartości wyrażeń numerycznych w językach Fortran, Pascal i C
- GROBNER, ROOTS - obliczenia na pierścieniach wielomianów
- LIMITS - obliczanie granic
- SUM, TPS - operacje na szeregach
- TAYLOR - operacje na szeregach Taylora

- ODESOLVE - rozwiązywanie równań różniczkowych zwyczajnych

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/apl/reduce.html>

### **1.1.1.34. SAS**

#### *Ogólne*

System SAS (Statistical Analysis System) jest nowoczesnym systemem przetwarzania informacji. System SAS, rozwijany od roku 1974, służył w przeszłości głównie do analizy danych statystycznych. Obecny jego kształt to zespół wielu modułów, przeznaczonych do analizy dużych zbiorów danych dla potrzeb podejmowania decyzji, badan rynku, opracowywania danych eksperymentalnych i wspomagania innych obliczeń wykorzystujących metody statystyczne oraz do tworzenia kompleksowych systemów informacyjnych.

#### *Moduły i funkcjonalność*

Główne funkcje, cechy i mechanizmy systemu SAS to:

- narzędzia prezentacji i wizualizacji danych,
- zarządzanie wbudowana baza danych,
- narzędzia analizy statystycznej,
- łatwy dostęp do różnych danych, niezależny od ich źródła i formatu,
- wbudowany system wspomagania tworzenia aplikacji,
- translatory języków programowania (m.in. 4GL, SQL, język programowania ekranów),
- język projektowania obiektowego i biblioteka obiektów,
- przetwarzanie klient/serwer,
- wspomaganie przenoszenia aplikacji między różnymi platformami operacyjnymi, niezależność sprzętowa,
- możliwość wyboru poziomu zaawansowania mechanizmów i tworzenia aplikacji

Wersja 8.2 systemu SAS obejmuje następujące moduły:

- Base SAS - podstawa systemu SAS
- SAS/ASSIST - generator programów i graficzny interfejs do systemu SAS
- SAS/GRAPH - narzędzia graficzne do prezentacji i analizy danych
- SAS/FSP - interakcyjne środowisko wprowadzania danych
- SAS/AF - interakcyjne środowisko rozwoju aplikacji
- SAS/STAT - zaawansowana analiza statystyczna
- SAS/INSIGHT- interakcyjna analiza statystyczna
- SAS/LAB - narzędzia pomocnicze analizy statystycznej przy badaniach laboratoryjnych i inżynierskich
- SAS/IML - interakcyjny język macierzowy do manipulacji danymi
- SAS/OR - narzędzia badań operacyjnych, optymalizacji, zarządzania projektami, programowania matematycznego
- SAS/ETS - narzędzia prognozowania, modelowania ekonometrycznego, analizy szeregów czasowych i raportowania finansowego
- SAS/QC - techniki poprawy jakości (projektowanie eksperymentów, analiza jakości)

## *Źródło / dalsze informacje*

Źródło: <http://gepard.cyf-kr.edu.pl/APLIKACJE/SAS/sas.html>

Dalsze informacje: <http://www.sas.com>

## *Wykorzystanie*

Kraków, Poznań

### **1.1.1.35. Sybyl**

#### *Ogólne*

SYBYL jest pakietem programów do budowania, modelowania i analizy struktur molekularnych. Pozwala on opisywać i przewidywać zachowanie się molekuł. Program zawiera obszerną bibliotekę cząsteczek i fragmentów strukturalnych, z których można składać bardziej złożone struktury. Pozwala też na wprowadzanie własnych cząsteczek lub ich budowanie z jednoczesnym dopasowaniem ich geometrii do danych standardowych. Celem każdego oprogramowania tego typu jest budowanie, analiza i manipulacja molekulami. Pakiet SYBYL, z firmy TRIPOS Inc. uchodzi za jeden z bogatszych w mechanizmy pozwalające osiągnąć powyższe cele.

#### *Moduły i funkcjonalność*

Główne moduły funkcjonalne to:

- Basic - jest to środowisko graficzne służące do pracy dla pozostałych modułów (przygotowywanie danych wejściowych, wizualizacja danych, wykonywanie podstawowych obliczeń mechaniki i dynamiki molekularnej)
- BioPolymer - zestaw narzędzi do modelowania i analizy (określanie struktury, modyfikacja własności biologicznych) małych cząsteczek oraz biomolekuł (białek, kwasów nukleinowych, cukrów)
- Advanced Computation - umożliwia zaawansowane obliczenia z dziedziny chemii kwantowej, mechaniki i dynamiki molekularnej
- Dynamics - różne algorytmy do symulacji dynamiki molekularnej.

Moduły uzupełniające:

- Composer - służy do budowania trójwymiarowych modeli białek na podstawie danej sekwencji aminokwasów i analogii do pokrewnych związków
- QSAR (ang. *Quantitive Structure/Activity Relationship*) - posiada zaimplementowane różnorodne techniki do przewidywania aktywności i właściwości cząsteczek w oparciu o ich 3-wymiarową strukturę
- Molcad - do wizualizacji schematu wiązań wodorowych, topologii lokalnej, hydrofobowości i potencjału elektrostatycznego
- Triad - przetwarzanie danych NMR, ich wizualizacja oraz analiza
- CONCORD
- RECEPTOR

Moduł Advanced Computation zawiera pakiet MOPAC. MOPAC jest powszechnie używanym programem do obliczeń związanych z półempiryczną mechaniką kwantową. Pozwala analizować własności i reakcje w gazach, roztworach i ciałach stałych.

### *Źródło / więcej informacji*

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/apl/sybyl.html>

<http://www.schrodinger.com/Products/mopac.html>

<http://gepard.cyf-kr.edu.pl/APLIKACJE/SYBYL/sybyl.html>

Więcej informacji: <http://www.tripos.com>

### *Wykorzystanie*

Gdańsk, Kraków, Łódź

## **1.1.2. Biblioteki**

W tym punkcie omówione zostanie oprogramowanie dostępne w postaci bibliotek programistycznych.

### **1.1.2.1. Aztec**

#### *Ogólne*

Biblioteka Aztec jest równoległą biblioteką iteracyjną do rozwiązywania układów równań liniowych. Pakiet powstał na potrzeby modelowania pływów i ich reakcji (MPSalsa). Głównym celem twórców pakietu było dostarczenie metod interakcyjnych działających na równoległych komputerach, a więc zapewniających wysoką wydajności obliczeń, które są jednocześnie łatwe w użyciu. Poza dostarczaniem metod iteracyjnych dla inżynierów, biblioteka Aztec jest używana również w badaniach nad "preconditioners", w tym nad wielopoziomowymi "preconditioners".

Prostota używania jest uzyskana przez stosowanie notacji globalnych rozproszonych macierzy. Pozwala ona pozwalają użytkownikowi określać fragment (różne wiersze dla różnych procesorów) jego macierzy aplikacji dokładnie tak, jak odbywa się to w konfiguracji seryjnej (np. używając globalnego schematu numeracji). Kwestie numeracji lokalnej, zmiennych-duchów i komunikacji są ignorowane przez użytkownika i zamiast tego obliczone przez zautomatyzowaną funkcję transformacji. Efektywność jest uzyskiwana poprzez wykorzystanie standardowych technik pamięci współdzielonej, lokalnie numerowanych podmacierzy, zmiennych-duchów i obliczaniu lokalnych macierzy w taki sposób, żeby obliczenia dotyczące danego fragmentu macierzy były prowadzone przez dany procesor a komunikacja danych zależnych (potrzebnych przy obliczaniu innych fragmentów macierzy) były szybkie.

Wykorzystywane metody to CG, CGS, BiCGSTAB, GMRES, TFQMR "Preconditioners": punktowy i blokow Jacobi, metoda Gauss-Seidel, wielomian "least-squares" i dekompozycja domeny nakładającej przy użyciu rzadkich LU, ILU, BILU dla domen.

#### *Źródło i dalsze informacje*

<http://www.cs.sandia.gov/CRF/aztec1.html>

<http://www.cs.sandia.gov/CRF/MPSalsa/>

## *Wykorzystanie*

Łódź

### **1.1.2.2. CERN Program Library**

Podstawowe biblioteki numeryczne CERN to:

- libkernlib.a - biblioteka zawiera podstawowe najczęściej używane podprogramy i pakiety numeryczne i organizacyjne. Użycie podprogramów z tej biblioteki nie wymaga dołączania innych bibliotek.
- libmathlib.a - zawiera wiele podprogramów ogólnego przeznaczenia, w tym pakiet LAPACK. Zwykle wymaga dołączenia biblioteki libkernlib.a.
- libpacklib.a - zawiera różne pakiety takie jak: CSPACK, CDLIB, EPIO, FATLIB, FFREAD, HBOOK, KAPACK, MINUIT, ZBOOK, ZEBRA. Biblioteka zawiera w sobie libkernlib.a

Ponadto biblioteka CERN obejmuje programy takie jak: FATMEN, GARFIELD, HEPDB, PAW, PAW++, POISCR.

## *Interfejs programistyczny*

Fortran 77

## *Źródło / dalsze informacje*

Źródło: <http://gepard.cyf-kr.edu.pl/BIBLIOTEKI/cern-grizzly.html>

## *Wykorzystanie:*

Kraków

### **1.1.2.3. COMPLIB**

## *Funkcjonalność*

Biblioteka COMPLIB jest biblioteka fortranowskich procedur matematycznych na komputery SGI.

Zawiera między innymi następujące pakiety:

- blas - podstawowe operacje na skalarach, wektorach i macierzach (Level 2,3)
- linpack - układy równań liniowych
- eispack - wartości i wektory własne
- FFT - szybkie transformaty Fouriera
- convolution - konwolucje

## *Interfejsy programistyczne*

Fortran 77 / 90.

## *Źródło / dalsze informacje*

Źródło: <http://gepard.cyf-kr.edu.pl/BIBLIOTEKI/complib.html>



## *Wykorzystanie*

Kraków, Poznań (SGI Power Challenge XL)

### **1.1.2.4. ESSL**

#### *Funkcjonalność*

Engineering Scientific Subroutine Library (ESSL) jest **biblioteką podprogramów z zakresu**: algebry liniowej, operacji na macierzach, równań różniczkowych, transformaty Fouriera, zagadnień własnych, sortowania, wyszukiwania, interpolacji, generacji liczb losowych.

Realizuje funkcje:

- BLAS level 2, 3
- LAPACK
- zagadnienia własne macierzy
- rozwiązywanie układów równań (gęste, "banded" i rzadkie)
- transformaty Fouriera
- generacja liczb losowych

#### *Interfejsy programistyczne*

Podprogramy biblioteki ESSL mogą być wywoływane z aplikacji napisanych w językach: **Fortran, C i C++**.

#### *Źródło / dalsze informacje:*

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/devel/essl.html>

Więcej informacji - [http://www-1.ibm.com/servers/eserver/pseries/library/sp\\_books/essl.html](http://www-1.ibm.com/servers/eserver/pseries/library/sp_books/essl.html)

## *Wykorzystanie*

Gdańsk, Kraków, Poznań

### **1.1.2.5. HP MLIB**

#### *Funkcjonalność:*

Biblioteka MLIB to wysokowydajna biblioteka funkcji obliczeniowych, zoptymalizowanych dla maszyn HP, dla procesorów RISC i Intel. Zawiera podprogramy obejmujące BLAS 1, 2 i 3, solvery gęstych i rzadkich układów równań, m.in. LAPACK, ScaLAPACK, SuperLU\_DIST; szybkie transformaty Fouriera i konwolucje. Biblioteka MLIB korzysta z wysoko-efektywnej implementacji BLAS 1, 2 i 3 a także z implementacji podzbioru nowego standardu BLAS. LAPACK jest w pełni zgodny z publiczną biblioteką LAPACK 3.0. ScaLAPACK jest w pełni zgodny z publicznym ScaLAPACK 1.7. SuperLU\_DIST jest zgodny z SuperLU\_DIST 2.0.

Optymalizacja MLIB obejmuje:

- szeregowanie instrukcji w celu maksym. liczby instrukcji maszynowych wykonywanych w cyklu zegara
- restrukturyzację algorytmów dla zwiększenia liczby obliczeń wykonanych przy każdym dostępie do pamięci
- zarządzanie pamięcią cache, dla minimalizacji chybień

- wielowątkowe, równoległe wykonania na maszynach wieloprocesorowych

Biblioteki VECLIB, LAPACK, ScaLAPACK i SuperLU\_DIST wspierają:

- 32-bitowe adresowanie
- 64-bitowe adresowanie
- 64-bitowe adresowanie i 64-bitowe liczby całkowite (Integer8 języka Fortran lub typ "long long" języków C i C++; te biblioteki nazywają się odpowiednio VECLIB8, LAPACK8, ScaLAPACK8 i SuperLU\_DIST8.

Biblioteki występują w formie biblioteki współdzielonej i archiwum.

Biblioteka VECLIB jest zbiorem podprogramów dla języka Fortran zoptymalizowanych do użytku na serwerach HP, zapewniającą procedury obliczeniowe dla aplikacji inżynierskich i naukowych. Biblioteka zawiera podprogramy dla:

- operacji na gęstych wektorach, włączając BLAS 1
- operacji na macierzach, włączając BLAS 2 i BLAS 3.
- podzbiór standardu BLAS
- operacje na rzadkich wektorach i macierzach, włączając Sparse BLAS
- procedury do rozwiązywania symetrycznych i półsymetrycznych układów równań liniowych
- pełną funkcjonalność METIS
- rozwiązywanie rzadkich, symetrycznych i ogólnych układów równań oraz zagadnień własnych macierzy
- dyskretną transformatę Fouriera
- konwolucje i korelacji
- rozmaite zadania takie jak sortowanie, generowanie liczb pseudolosowych itp.

### *Interfejsy programistyczne*

Fortran 77, Fortran 90, C, C++

### *Źródło / dalsze informacje:*

[http://h21007.www2.hp.com/dspp/tech/tech\\_TechSoftwareDetailPage\\_IDX/1,1703,1204,00.html](http://h21007.www2.hp.com/dspp/tech/tech_TechSoftwareDetailPage_IDX/1,1703,1204,00.html)

### *Wykorzystanie*

Kraków

## **1.1.2.6. IMSL**

Oprogramowanie IMSL zawiera biblioteki do analizy numerycznej wysokiej dokładności. Składa się z 1000 wysoko-zoptymalizowanych funkcji matematycznych napisanych dla ponad 65 platform sprzętowych. Realizuje funkcje obliczeniowe z zakresu:

- statystyki
- optymalizacji
- szybkich transformat Fouriera (FFT)
- interpolacji
- równań różniczkowych
- korelacji

- regresji
- analizy serii czasowych
- i inne

*Zastosowania:*

- duże korporacje, laboratoria badawcze, instytucje akademickie
- inżynieria
- prace badawczo-rozwojowe
- inżynieria finansowa
- fizyka,
- analiza biznesowa,
- biotechnologia
- zarządzanie danymi (amng. data mining)

*Producent/ dostępność:*

Bazowe implementacje bibliotek IMSL: Math, Stat and Special Funtions są dostępne dla użytkowników kompilatora Fortran Pro na platformie Windows, Macintosh, Linux i Unix.

*Interfejsy programistyczne:*

C, Fortran, Java (w nowej wersji, niedostępnej w ośrodkach KDM)

*Źródło i dalsze informacje*

Źródło: <http://www.absoft.com/imsl.htm>

<http://www.vni.com/products/imsl/index.html>

*Wykorzystanie*

Poznań (Cray T3E)

### **1.1.2.7. Intel Math Kernel Library**

*Ogólne*

Biblioteka Intel Math Kernel Library (Intel MKL) jest złożona z wysoko zoptymalizowanych funkcji obliczeniowych. Intel MKL zawiera funkcjonalność biblioteki LAPACK, BLAS, dyskretne transformaty Fouriera, funkcje przejściowe wektorów oraz funkcje statystyczne. Biblioteki są zoptymalizowane dla systemów opartych o procesory Intel, w tym Pentium 4, Pentium M, Centrino, Xeon i Itanium® 2. Zapewniają dużą wydajność obliczeń oraz możliwość wykonania równoległego (można je łączyć z aplikacjami wątkowymi). Posiadają interfejsy dla wielu kompilatorów.

Optymalizacja obejmuje zaawansowane techniki zarządzania pamięcią cache, owocujące szczególnie w operacjach macierz-macierz. Dodatkowo, wprowadzono techniki zarządzania jednostkami stało i zmiennoprzecinkowymi dla minimalizacji zależności pomiędzy nimi. Funkcje LAPACK zostały

zoptymalizowane na poziomie blokowania oraz poprzez zrównoleglenie. Funkcje BLAS zoptymalizowano na poziomie kodu źródłowego, krytyczne funkcje zoptymalizowano na poziomie kodu maszynowego. Optymalizacja objęła również funkcje BLAS poziomu 3, głównie przez zrównoleglenie kodu dla wielu procesorów. Dyskretne transformat Fouriera zostały zoptymalizowane poprzez minimalizację wykorzystania cache oraz zrównoleglenie. Biblioteka VML zapewnia wysoką wydajność dla wektorów operacji takich jak funkcje trygonometryczne, wykładnicze, logarytmiczne itp. Biblioteka VSL dostarcza zbiór zwektoryzowanych generatorów liczb losowych, zaimplementowanych i dostrojonych dla wysokiej wydajności. Pliki biblioteki Intel MKL mogą być łączone statycznie lub dynamicznie. Od wersji 6.0 dodano bibliotek dla pozwalające wykrywać cechy procesora związane z wydajności przy wykonywaniu kodu biblioteki statycznej. Pozwala to wykorzystywać specyficzne cechy danego procesora, dla uzyskania wysokiej wydajności.

### *Moduły/ funkcjonalność*

- Funkcje algebry liniowej
  - biblioteka LAPACK
  - biblioteka BLAS: BLAS1, BLAS2 i BLAS3 oraz Sparse BLAS
- dyskretne transformaty Fouriera - DFT (ang. Discrete Fourier Transforms) - zawierają wielowymiarowe funkcje (od 1d do 7d)
- funkcje przejściowe wektorów - biblioteka VML (ang. Vector Math Library) - zawierają implementacje kosztownych obliczeniowo operacji matematycznych takich jak potęgowanie, funkcje trygonometryczne, wykładnicze, hyperboliczne, logarytmiczne itp. dla wektorów liczb rzeczywistych
- generator liczb losowych VSL (ang. Vector Statistical Random Number Generator ) - zawiera funkcje generujące liczby losowe dla różnych dystrybuant prawdopodobieństwa dla różnych dokładności i jakości

### *Interfejsy programistyczne*

Dostępne są interfejsy dla języków C i Fortrana.

### *Zastosowania*

- Obliczenia matematyczne, inżynierskie, naukowe i finansowe.
- Fizyka, chemia, symulacje medyczne i ekonomiczne.

### *Źródło / dalsze informacje:*

<http://www.intel.com/software/products/mkl/>

### *Wykorzystanie*

Gdańsk

## **1.1.2.8. LIBM, LIBSCI (Cray)**

### *Funkcjonalność*

Na komputerach Cray Research dostępne są biblioteki matematyczne (LIBM) oraz naukowe (LIBSCI).

Tematycznie pakiet LIBM można podzielić na:

- ogólne funkcje arytmetyczne,
- funkcje wykładnicze i logarytmiczne,
- funkcje trygonometryczne,
- funkcje konwersji typów,
- funkcje specjalne (zapewniają dostęp do funkcji języka C z języka Fortran),
- procedury zwiększonej precyzji,
- procedury obsługi błędów,
- funkcje logiczne.

Procedury biblioteki naukowej (LIBSCI) można podzielić na następujące sekcje:

- podprogramy algebry liniowej typu wektor-wektor (BLAS1),
- podprogramy algebry liniowej typu macierz-wektor (BLAS2),
- podprogramy algebry liniowej typu macierz-macierz (BLAS3),
- podprogramy rozwiązywania zwartych (LAPACK, LINPACK, EISPACK) i rozrzedzonych (SPARSE) systemów liniowych,
- procedury przetwarzania sygnałów (np. szybkiej transformaty Fouriera FFT),
- procedury sortowania i przeszukiwania (SEARCH).

### *Interfejs programistyczny*

Źródło: [http://www.man.poznan.pl/zasoby/aplikacje/bibl\\_mat/libm.html](http://www.man.poznan.pl/zasoby/aplikacje/bibl_mat/libm.html)

### *Wykorzystanie:*

Poznań (Cray J916, Cray T3E, Cray SV1)

## **1.1.2.9. NAG Fortran Library**

### *Ogólne*

Biblioteka NAG (ang. Numerical Algorithm Group) jest biblioteka fortranowskich procedur matematycznych wysoko zoptymalizowanych na różne typy komputerów. Jest to biblioteka, zawierająca procedury z zakresu wszystkich podstawowych działów analizy numerycznej. Biblioteka zawiera podprogramy z zakresu metod numerycznych i obliczeń statystycznych.

### *Funkcjonalność*

Składa się z kilku części, które zawierają procedury z zakresu: arytmetyki zespolonej, zer wielomianów, pierwiastków równań transcendentnych, sum szeregów, form kwadratowych, równań różniczkowych zwyczajanych ODE, równań różniczkowych cząstkowych PDE, równań nieliniowych, równań całkowych, interpolacji, wygładzania, minimum i maksimum funkcji, operacji na macierzach, wektorów własnych, wyznaczników, układów równań liniowych, ortogonalizacji, algebry liniowej, podstawowych statystyk opisowych, analizy korelacji i regresji, metod wielowymiarowych, analizy wariancji, generatora liczb losowych, estymacji jednej zmiennej, statystyk nieparametrycznych, analizy tablic kontyngencji, analizy przeżywalności,

analizy szeregów czasowych, badań operacyjnych, sortowania, obsługi błędów, funkcji specjalnych, stałych matematycznych, stałych maszynowych, iloczynów wewnętrznych, obsługi wejścia/wyjścia.

### *Interfejsy programistyczne*

NAG Fortran Library (Mark 18) jest to biblioteka procedur napisanych dla standardu **Fortran 77**.

### *Źródło / dalsze informacje*

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/devel/nag77.html>

### *Wykorzystanie*

Gdańsk, Kraków, Poznań, Wrocław

## **1.1.2.10. NAG Fortran 90 Library**

### *Funkcjonalność*

NAG Fortran 90 Library jest to biblioteka procedur numerycznych napisanych w standardzie Fortran 90. Biblioteka składa się z kilku części, które zawierają procedury z zakresu: arytmetyki zespolonej, zer wielomianów, pierwiastków równań transcendentnych, sum szeregów, form kwadratowych, równań różniczkowych zwyczajanych ODE, równań różniczkowych cząstkowych PDE, równań nieliniowych, równań całkowych, interpolacji, wygładzania, minimum i maksimum funkcji, operacji na macierzach, wektorów własnych, wyznaczników, układów równań liniowych, ortogonalizacji, algebry liniowej, podstawowych statystyk opisowych, analizy korelacji i regresji, metod wielowymiarowych, analizy wariancji, generatora liczb losowych, estymacji jednej zmiennej, statystyk nieparametrycznych, analizy tablic kontyngencji, analizy przeżywalności, analizy szeregów czasowych, badań operacyjnych, sortowania, obsługi błędów, funkcji specjalnych, stałych matematycznych, stałych maszynowych, iloczynów wewnętrznych, obsługi wejścia/wyjścia.

### *Interfejsy programistyczne*

NAG Fortran 90 Library jest to biblioteka procedur napisanych dla standardu **Fortran 90**.

### *Źródło / więcej informacji*

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/devel/nag90.html>  
<http://gepard.cyf-kr.edu.pl/BIBLIOTEKI/nag-smok.html>

### *Wykorzystanie*

Gdańsk, Kraków, Poznań (Cray J916, Cray T3E, SGI Power Challenge XL, SGI Power Challenge L 10000, )

### 1.1.2.11. NAG Graphics Library

#### *Funkcjonalność*

Biblioteka NAG Graphics Library umożliwia graficzną reprezentację wyników obliczeń numerycznych. Procedury graficzne, które można linkować z innymi modułami zaimplementowanymi w Fortranie, można podzielić na następujące grupy:

- kreślenie punktów i odcinków
- rysowanie krzywych
- rysowanie osi liczbowych, ramek i tytułów
- przedstawianie powierzchni
- prezentacje danych
- pola wektorowe
- wykresy konturowe
- kreślenie funkcji
- kreślenie funkcji specjalnych
- grafika do prezentacji rozwiązań ODE
- grafika do prezentacji obliczeń statystycznych

Istnieje możliwość generacji grafiki w następujących standardach: PostScript, GKS, HPGL, DEC ReGIS, Lineprinter, X.

#### *Interfejsy programistyczne*

Fortran 77 / Fortran 90.

#### *Źródło / więcej informacji:*

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/devel/nagg.html>  
<http://gepard.cyf-kr.edu.pl/BIBLIOTEKI/index.html>

#### *Wykorzystanie:*

Gdańsk, Kraków

### 1.1.2.12. OpenGL

#### *Funkcjonalność*

Biblioteka OpenGL jest to zestaw funkcji API do tworzenia dwu- i trójwymiarowych aplikacji graficznych, które mogą być uruchamiane na wielu platformach. Standard OpenGL oferuje następujące funkcje:

- kodowanie barw - odbywa się ono w trybie Red-Green-Blue-Alpha (RGBA)
- oglądanie i modelowanie - pozwala na rozmieszczanie obiektów na trójwymiarowej scenie, a następnie oglądanie renderowanej sceny z wybranego punktu widokowego
- oświetlanie materiałów - polecenie służy do przedstawiania barw przy podaniu właściwości materiału i źródła światła w pomieszczeniu

- odwzorowanie tekstur - renderowanie obrazów powierzchni na ścianach wielokątów
- podwójne buforowanie - pomaga zlikwidować mruganie w animacjach
- anti-aliasing - zmniejsza postrzępienie krawędzi rysowanych linii
- buforowanie Z - wykorzystywane do śledzenia bliskości obiektu w stosunku do oglądającego, a także do usuwania powierzchni ukrytych

### *Interfejsy programistyczne*

Fortran 77 / Fortran 90, C / C++.

### *Źródło / więcej informacji:*

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/devel/opengl.html>

### *Wykorzystanie*

Gdańsk, Kraków, Poznań

## **1.1.2.13. Open Inventor**

### *Funkcjonalność*

Biblioteka Open Inventor jest to zestaw narzędzi zorientowanych obiektowo wykorzystywanych do tworzenia interakcyjnych aplikacji trójwymiarowych. Przeznaczenie: maszyny SGI. Programowanie polega na posługiwaniu się sceną z bazą danych, która zawiera następujące elementy: sześciany, wielokąty, światła, kamery, obiekty tekstowe, przeglądarki, edytory. Istnieje również możliwość tworzenia nowych klas obiektów. Zostały zaimplementowane podstawowe cechy trójwymiarowej grafiki, np.: animacje, poziom szczegółowości wyświetlania, operacje na obiektach (zaznaczanie, wycinanie, wkejanie, zasłanianie, nazewnictwo, interaktywne manipulowanie).

### *Interfejsy programistyczne*

C++.

### *Źródło / dalsze informacje*

Źródło: [http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/devel/open\\_inventor.html](http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/devel/open_inventor.html)

Dalsze informacje: <http://www.sgi.com/software/inventor>

### *Wykorzystanie*

Gdańsk



### 1.1.2.14. PESSL

#### *Funkcjonalność*

Biblioteka Parallel Engineering Scientific Subroutine Library (PESSL) jest biblioteką funkcji matematycznych składającą się z następujących części:

- PBLAS - równoległe podprogramy algebry liniowej (poziom 2 i 3)
- równania liniowe
- analiza symboliczna
- transformata Fouriera
- generacja liczb losowych

#### *Interfejsy programistyczne*

Podprogramy biblioteki PESSL mogą być wywoływane z aplikacji napisanych w językach Fortran, C i C++.

#### *Źródło / dalsze informacje*

Źródło: <http://www.task.gda.pl/kdm/poradnik/devel/pessl.html>

Dalsze informacje - [http://www-1.ibm.com/servers/eserver/pseries/library/sp\\_books/essl.html](http://www-1.ibm.com/servers/eserver/pseries/library/sp_books/essl.html)

#### *Wykorzystanie:*

Gdańsk, Poznań

## 1.2. Podsumowanie

Przeprowadzony przegląd oprogramowania pokazuje wielość i różnorodność naukowych aplikacji obliczeniowych oraz wielość bibliotek naukowych stosowanych w akademickich centrach komputerowych

#### *Aplikacje obliczeniowe*

Aplikacje adresowane są do naukowców z wielu dziedzin od matematyków, inżynierów, konstruktorów, poprzez chemików, fizyków, biologów kończąc na specjalistach z dziedziny nauk o Ziemi. Część oprogramowanie aplikacyjnego przeznaczona jest do konkretnego zastosowania lub grupy zastosowań. Pakiety oprogramowania (jak np. Accelrys/MSI) adresują szereg gałęzi poszczególnych dziedzin nauki. Inne pakiety mają zastosowanie uniwersalne (np. Mathematica, Matlab, Reduce), służąc jednak raczej jako narzędzia wspomagające procesy projektowania, symulacji czy analizy niż kompletne rozwiązania dla danej dziedziny badań.

#### *Biblioteki obliczeniowe*

Z drugiej strony w ośrodkach obliczeniowych istnieje wiele bibliotek obliczeniowych. Dostępne są one dla tych spośród naukowców, którzy tworzą własne programy. Wielość pakietów obliczeniowych dostępnych w postaci bibliotek wynika z różnego zapotrzebowania na poszczególne funkcjonalności obliczeniowe w różnych dziedzinach nauki. Jednakże daje się zauważyć, że większość pakietów bibliotecznych, poza specyficzną funkcjonalnością, realizuje pewien wspólny zbiór operacji obliczeniowych. Do tych operacji należą m.in.

zadania algebry liniowej zgrupowane w biblioteki operacji BLAS (ang. Basic Linear Algebra Subprograms), LAPACK (ang. Linear Algebra Package), LINPACK, Eispack a także funkcje obliczające transformaty Fouriera oraz funkcje statystyczne. Tabela 1. zbiera informacje o pakietach matematycznych, które realizują wymienione funkcjonalności.

Nazwa pakietu	BLAS	Sparse BLAS	BLAS subset	LAPACK	Linpack	Eispack	FFT
Complib	✓			✓	✓	✓	✓
ESSL	✓			✓	✓	✓	✓
HP MLIB	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
Intel Math Kernel Library	✓	✓		✓	✓		
LIBSCI (Cray)	✓		✓	✓	✓	✓	✓
NAG Fortran Library	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓

**Tabela 1 Zestawienie oprogramowania dostępnego w postaci bibliotek obliczeniowych i realizowanych przez nie zestawów funkcji matematycznych**

## **2. Oprogramowanie wcielane do systemu udostępniania bibliotek matematycznych w ramach projektu celowego**

W punkcie 1 dokumentu przedstawiono przegląd oprogramowania zainstalowanego w akademickich centrach obliczeniowych w Polsce. Większość oprogramowania aplikacyjnego jest dość mocno specjalizowana dla konkretnych zastosowań/dziedzin nauki, poza tym, z reguły nie dostarcza interfejsu programistycznego, za pomocą którego możnaby je włączyć do systemu udostępniania. Natomiast większość bibliotek matematycznych realizuje pewną grupę funkcji matematycznych, które mogą być wykorzystywane przez naukowców z różnych dziedzin. Należą do nich operacji algebry liniowej zgrupowane w bibliotekach BLAS, LAPACK, Linpack i Eispack a także funkcje statystyczne, funkcje wyliczające transformaty Fouriera i inne.

Rozwijane na świecie systemy udostępniania bibliotek matematycznych obejmują wymienione grupy funkcji. Przykładowo systemy NetSolve i NetSolve udostępniają m.in. pakiety BLAS i LAPACK. System udostępniania bibliotek matematycznych dla Polskich ośrodków naukowych powinien docelowo obejmować te powszechnie używane grupy funkcji matematycznych. Przemawia za tym także fakt, że włączenie poszczególnych implementacji tych funkcjonalności obliczeniowych do systemu udostępniania pozwalałoby wykorzystać moc obliczeniową poszczególnych, rozproszonych i heterogenicznych zasobów obliczeniowych w jednolity i prosty (od strony użytkownika) sposób.

Zdaniem PCSS i TASK prace w ramach projektu celowego powinny objąć biblioteki BLAS i LAPACK. Stworzenie mechanizmów pozwalających na ich udostępnianie w środowisku klastra SGI i polskiej sieci akademickiej pozwoli na łatwy dostęp do tych funkcjonalności matematycznych wielu użytkownikom końcowym, którzy nie mają bezpośredniego dostępu do wysoko-wydajnych zasobów obliczeniowych. Adaptacja i rozszerzenie istniejących systemów udostępniania bibliotek tak, by mogły one udostępniać biblioteki BLAS i LAPACK w środowisku klastra SGI otworzy drogę do udostępniania w przyszłości kolejnych pakietów funkcji obliczeniowych.