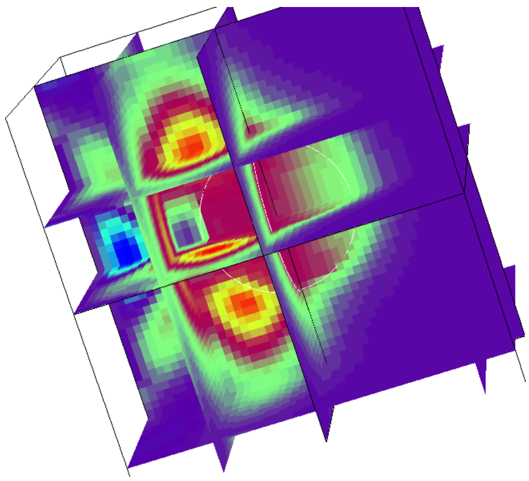
České vysoké učení technické v Praze
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

Czech Technical University in Prague
Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering

Ing. Milan Šiňor, Dr.

Modelování a vizualizace šíření elastických vln v obecném nehomogenním prostředí

Modeling and visualization of elastic waves propagation in arbitrary heterogeneous media



Praha 2006

Summary

Quantitative ultrasound nondestructive material evaluation is based on the understanding to ultrasonic signal propagation in materials. Quantitative examination of properties and material structure by ultrasound method is in principle an inverse problem and can be attacked only if the direct problem is understood, i.e. if it is known how the parameters of the scattered ultrasonic fields are affected by known discontinuities. General constitutive relationships of modern materials, boundary conditions appropriate for the problem, internal defects and heterogeneous medium limits the use of analytical approach to solution of wave phenomena.

Approximate solution of elastodynamic wave equation can be found numerically by methods like e.g. finite difference method (FDM) and finite elements method (FEM). Method LISA (Local Interaction Simulation Approach) elaborated in this work is formally similar to finite difference method and the key factor of the method is the general description of interaction between neighbouring nodes of computational mesh.

We are developing computer package consisting of several programs that are based on the method LISA. Our LISA package can be used e.g. for the study of:

a) Refraction of acoustic waves on the solid-liquid interface.

b) Propagation of acoustic waves in anisotropic elastic media.

c) Elastic waves propagation in multiphase media.

d) Description of heterogeneous media with non-perfect interfaces.

e) Characterization of internal media discontinuities (e.g. cracks, voids, slippages, inferior material properties).

Such analysis can be performed for different kinds of acoustic sources and diverse pulse shapes. As a result of the numerical solution of elastodynamic wave equation pulse response of the material can be obtained. Consequently velocities and attenuation of individual wave patterns can be evaluated from these data.

This paper is intended as a very brief introduction to quantitative ultrasound evaluation i.e. characterization of properties and structure of diverse materials like e.g. intermetalics (materials with shape memory, multiphase materials, high-temperature alloys), composites or bio-materials (bone marrow).

Understanding to the data obtained by numerical computing in general can be markedly intensified by visualization. Last but not least visualization can help significantly to students to understand to the tricky phenomena of wave propagation in complex media. Consequently visualization is a prominent part of this lecture and several video movies is an integral part of the presentation.

Souhrn

Šíření akustických vln v pevných látkách představuje základ ultrazvukových metod diagnostiky materiálů a defektoskopie konstrukcí. Kvantitativní vyšetřování vlastností a struktury materiálů ultrazvukovými metodami je v podstatě inverzní problém, k jehož řešení je nezbytné porozumět modelu šíření a rozptylu akustických vln. Matematicky se jedná o řešení soustavy parciálních diferenciálních rovnic s příslušnými okrajovými podmínkami. Právě tyto okrajové podmínky, vady a nedokonalosti materiálu a obecné konstitutivní vztahy moderních materiálů omezují použití analytických přístupů k řešení vlnového problému.

Proto je nezbytné hledat řešení pomocí numerických metod jako jsou např. metoda konečných diferencí (MKD) a metoda konečných prvků (MKP). Přístup metody LISA (Local Interaction Simulation Approach), který je rozpracován v této práci, vychází z obecného předpisu interakce mezi sousedními uzly výpočetní sítě. Řešení vlnové rovnice touto metodou formálně připomíná metodu konečných diferencí.

Pro metodu LISA vyvíjíme stejnojmenný programový balík sestávající z několika programů, které je možné využít například pro studium:

a) Refrakce akustických vln na rozhraní tekutina-pevná látka.
b) Šíření akustických vln v anizotropním elastickém prostředí.
c) Šíření vln ve vícefázovém (po částech homogenním) materiálu.
d) Heterogenních prostředí s neideálním kontaktním rozhraním.
e) Vnitřních nespojitostí prostředí (např. typu trhlina či skluz krystalových rovin).

Tuto analýzu lze realizovat pro různé druhy buzení (silové, kinematické, různé tvary pulsů…). Jako výsledek numerických simulací je možné získat pulsní odezvu materiálu, ze které mohou být vyhodnoceny rychlosti a útlumové charakteristiky jednotlivých typů vln.

Tato práce může posloužit jako úvodní seznámení s možnostmi kvantifikace ultrazvukových měření, čímž máme na mysli vyšetřování vlastností a struktury takových materiálů jako jsou intermetalika (materiály s tvarovou pamětí, vícefázové materiály, vysokoteplotní slitiny), kompozity nebo biomateriály (např. kostní tkáň).

K pochopení studované problematiky může bezpochyby výrazně přispět také vizualizace získaných výsledků. Vizualizace je v neposlední řadě důležitá i pro studenty, kteří se s uvedenou problematikou seznamují. Proto v přednášce věnujeme poměrně velkou a jistě zaslouženou pozornost vizualizaci výsledků získáných numerickými výpočty.

Technická poznámka

Tento dokument je napsán ve formátu LaTeX [2] a přeložen programem pdfTeX [3], s jehož pomocí získáme dokument ve formátu PDF s aktivními hypertextovými odkazy. V práci jsou odkazy na soubory typu MPEG [4], VRML [5] a netCDF [21], které jsou uloženy na adrese [1], kde je také možné získat více informací o vhodných prohlížečích příslušných datových formátů. Zde je rovněž k dispozici PDF verze habilitační práce opět s aktivními hypertextovými odkazy a HTML verze, u které ovšem již ze samé podstaty HTML dokumentu a při uvážení možností dnešních prohlížečů pochopitelně nesmíme příliš lpět na typografické kvalitě.

Klíčová slova

šíření akustických vln, numerické řešení parciálních diferenciálních rovnic, metoda konečných diferencí, systémy počítačové algebry, netCDF, vizualizace, MPEG, AVI, VRML

Keywords

acoustic waves propagation, numerical solution of partial differential equations, finite difference method, computer algebra systems, netCDF, visualization, MPEG, AVI, VRML

ISBN xx-xxx-xxxx-X

Obsah

1 Základní pojmy z klasické teorie pružnosti

Přednáška je věnována šíření elastických vln zejména v pevných látkách. Tato problematika je pochopitelně velmi rozsáhlá, a proto jsou v této části pouze naznačeny některé základní pojmy, ze kterých budeme vycházet při numerickém studiu šíření elastických vln v obecném nehomogenním prostředí. Pro hlubší studium této problematiky je k dispozici řada publikací a některé z nich jsou uvedeny v [1].

Ze zkušenosti víme, že napětí (7) a deformace (5) jsou ve vzájemném vztahu, který charakterizuje elastické vlastnosti daného prostředí. Tento vztah je závislý na fyzikálním i chemickém složení prostředí, na jeho krystalické struktuře, na vnějších termodynamických podmínkách apod. Tyto okolnosti nás nutí studovat elastické vlastnosti zvlášť u látek skupenství pevného a zvlášť u látek skupenství kapalného a plynného.

V této práci se při studiu elastických vlastností pevných látek omezíme na *malé deformace* a také budeme předpokládat, že vztah mezi napětím a deformací je *lineární.* Příslušná teorie se nazývá *klasická* nebo též *lineární teorie pružnosti.*

Vzhledem k vyhrazenému prostoru je následující pasáž velmi stručná a nezbytně zjednodušená. Opět je nutné se odkázat např. na [1], kde je možné nalézt více podrobností.

1.1 Elastická deformace

Uvažujme pevné, elastické těleso v klidovém stavu a bod P o souřadnicích $P(x, y, z) \equiv P(x_1, x_2, x_3)$ [1] v tomto tělese. Působením vnějších sil (a také tepla, elektrického pole atd.) dochází k elastickému posunutí tohoto bodu. Označme si jeho nové souřadnice $P'(x'_1, x'_2, x'_3)$. Dále předpokládáme, že tyto nové souřadnice jsou funkcemi [2] prostoru a času a můžeme proto zavést *vektor posunutí* [3] $\boldsymbol{u}$ se složkami

$$u_i(x_j, t) = x'_i - x_i\,, \qquad i = 1, 2, 3\,. \tag{1}$$

K posouzení deformace tělesa ovšem musíme vzít v úvahu body dva. Proto kromě bodu P uvažujme v nedeformovaném tělese ještě bod Q, který je infinitesimálně vzdálen od bodu P a jeho souřadnice označme $x_i + dx_i$. Dále označme jako x'_i a $x'_i + dx'_i$ souřadnice bodů P' a Q', které odpovídají poloze bodů P a Q v deformovaném stavu tělesa.

Srovnejme čtverce vzdáleností obou bodů v původním a v deformovaném stavu tělesa. Označíme-li ds vzdálenost bodů PQ a ds' vzdálenost $P'Q'$, máme pro čtverce těchto vzdáleností vyjádření [4]:

$$ds^2 = dx_i\, dx_i = \delta_{jk}\, dx_j\, dx_k\,, \tag{2}$$

$$ds'^2 = dx'_i\, dx'_i = \left(\delta_{ij} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right)\left(\delta_{ik} + \frac{\partial u_i}{\partial x_k}\right) dx_j\, dx_k\,, \tag{3}$$

kde jsme za dx'_i dosadili Taylorův rozvoj funkce $u_i(x_j + dx_j)$ a zanedbali jsme členy vyšších řádů; δ_{ij} označuje Kroneckerův symbol.

K posouzení změny ve vzdálenosti obou bodů vezměme rozdíl $ds'^2 - ds^2$, který můžeme po úpravě psát ve tvaru

$$ds'^2 - ds^2 = 2\epsilon_{jk}\, dx_j\, dx_k\,, \tag{4}$$

[1] V celé práci předpokládáme kartézskou souřadnou soustavu.

[2] O všech funkcích zde předpokládáme, že jsou spojité a mají spojité parciální derivace všech potřebných řádů.

[3] Někdy se nazývá také přetvoření.

[4] V tomto textu používáme standardním způsobem Einsteinovo sumační pravidlo.

kde veličiny ϵ_{jk} definované vztahem

$$2\epsilon_{jk} = \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_j} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\frac{\partial u_i}{\partial x_k}\,, \qquad j,k = 1,2,3 \tag{5}$$

jsou v indexech j,k symetrické. Pokud jsou ϵ_{jk} různé od nuly, je ze vztahu (4) zřejmé, že dochází ke změně vzdálenosti obou bodů a ϵ_{jk} popisují *deformaci tělesa.*

Ze vztahu (5) je také patrné, že veličiny ϵ_{jk} jsou složkami tenzoru druhého řádu, který je symetrický. Tento tenzor se nazývá *tenzorem konečné (velké) deformace.*

Derivace druhého řádu v definici (5) ovšem výrazně komplikují další operace s tímto tenzorem. Proto se v následujícím textu ve výrazech pro složky deformací omezíme na lineární členy. Zavádí se pojem *malých deformací*, při nichž předpokládáme, že složky posunutí u_i a jejich derivace jsou tak malé, že je můžeme zanedbat ve srovnání s 1. Složky malé deformace e_{jk} dostaneme proto z rovnice (5) zanedbáním kvadratických členů:

$$e_{jk} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_j}\right), \qquad j,k = 1,2,3\,. \tag{6}$$

Veličiny e_{jk} jsou opět složkami symetrického tenzor druhého řádu, který se nazývá *tenzorem malé deformace.*

1.2 Tenzor napětí

Na objemový element uvnitř *deformovaného* tělesa působí obecně dva druhy sil a to *síly objemové* a *síly plošné.*

Síla objemová působí na jednotlivé objemové elementy tělesa a je úměrná hmotnosti tohoto elementu. Vztáhneme ji na jednotku objemu a označíme $\boldsymbol{F}$ se složkami F_i. Na objemový element dV bude proto působit objemová síla $\boldsymbol{F}\,dV$.

Plošná síla působící na povrchu dS námi uvažovaného objemového elementu je úměrná jeho velikosti, tj. má tvar $\boldsymbol{T}\,dS$, přičemž vektor $\boldsymbol{T}$ se nazývá *vektorem napětí.* Směr vektoru napětí $\boldsymbol{T}$ obecně nesplývá se směrem vnější normály $\boldsymbol{\nu}$ plochy dS, a proto jej označujeme $\overset{\boldsymbol{\nu}}{\boldsymbol{T}}$, přičemž definujeme *tenzor napětí* τ_{ij} vztahem

$$\overset{\nu}{T}_i = \tau_{ij}\nu_j\,, \qquad i,j = 1,2,3\,. \tag{7}$$

Podobně jako tenzor deformace je tenzor napětí τ_{ij} symetrický tenzor druhého řádu.

1.3 Hookův zákon

Při odvození pohybových rovnic elastického tělesa je vhodné znát vztah mezi tenzorem napětí τ a tenzorem deformace e. Tento vztah se nazývá *Hookův zákon* [10].

Hookův zákon můžeme v jednorozměrném případě psát ve tvaru

$$\tau = E\,e\,. \tag{8}$$

V tomto případě se τ nazývá prostě *napětím*, e *relativním prodloužením* a konstanta E *Youngovým modulem pružnosti (modulem pružnosti v tahu).*

Při zobecnění Hookova zákona na vícerozměrný systém se opět omezíme na lineární teorii pružnosti, tj. budeme předpokládat, že deformace jsou charakterizovány složkami tenzoru malých deformací e_{kl} a složky tenzoru napětí τ_{ij} jsou jejich lineárními funkcemi.

Vzhledem k symetrii tenzorů e_{kl} a τ_{ij} tak dostáváme šest rovnic, které můžeme zapsat ve tvaru

$$\tau_{ij} = C_{ijkl}\, e_{kl}\,, \qquad i,j,k,l = 1,2,3\,. \tag{9}$$

Tenzor C_{ijkl} je čtvrtého řádu a jeho složky se nazývají *elastickými koeficienty.* Tenzor C_{ijkl} má obecně $3^4 = 81$ složek. Z rovnice (9) je ovšem zřejmé, že tenzor C_{ijkl} je symetrický jak v indexech i a j, tak v indexech k a l. Vzhledem k této symetrii by mělo být obecně nezávislých $6 \times 6 = 36$ elastických koeficientů. Z energetických úvah [10] ovšem vyplývá, že tenzor C_{ijkl} je symetrický i při záměně první dvojice indexů s druhou ($C_{ijkl} = C_{klij}$) a nezávislých koeficientů tenzoru C_{ijkl} je z původních 81 pouze $6 + 15 = 21$.

Těchto 21 nezávislých koeficientů odpovídá nejobecnějšímu případu anizotropie, který přísluší krystalické soustavě trojklonné (triklinické). Například jednoklonný krystal má 13 nezávislých koeficientů a krychlová soustava tři [11].

1.4 Dynamické rovnice elastického tělesa

Ze vztahu pro rovnováhu sil v objemovém elementu dV je možné odvodit *rovnice statické rovnováhy* deformovaného elastického tělesa ve tvaru [10]:

$$\frac{\partial \tau_{ji}}{\partial x_j} + F_i = 0\,, \qquad i,j = 1,2,3\,. \tag{10}$$

Naším cílem je ale získat pohybové rovnice pro obecné elastické prostředí. Při dynamických problémech předpokládáme, že u_i, τ_{ij} a F_i jsou obecně funkcemi nejen souřadnic x_i, ale také času t, a že mají spojité derivace potřebných řádů.

Od rovnic statické rovnováhy snadno dospějeme k rovnicím dynamickým, použijeme-li d'Alembertova principu [5]. Podle d'Alembertova principu dostaneme pohybové rovnice připojením síly setrvačnosti k působícím objemovým a plošným silám. Síla setrvačnosti objemového elementu dV se rovná záporně vzatému součinu jeho hmotnosti a zrychlení. Je tedy silou objemovou.

Označíme-li $\rho(x_j, t)$ hustotu a $\partial^2 u_i/\partial t^2$ zrychlení uvažovaného objemového elementu, dostáváme pro složky síly setrvačnosti $\boldsymbol{F}^{(S)}$ vztah

$$F_i^{(S)} = -\rho\, dV\, \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}\,, \qquad i = 1,2,3\,. \tag{11}$$

Tato síla je vztažena na objemovou jednotku, a proto ji můžeme přičíst k objemové síle $\boldsymbol{F}$ v rovnici (10). Po úpravě je možné psát pohybové rovnice ve tvaru

$$\frac{\tau_{ij}}{x_j} + F_i = \rho\, \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}\,, \qquad i,j = 1,2,3\,. \tag{12}$$

V této rovnici vystupují na pravé straně složky posunutí, na levé straně složky napětí. S pomocí Hookova zákona můžeme tuto rovnici upravit tak, že v ní budou vystupovat buď jen složky posunutí nebo pouze složky napětí. Pro naše účely bude vhodný první způsob, tj. vyjádříme τ_{ij} pomocí rovnice (9) jako lineární funkce derivací posunutí u_i. Tak dostáváme pohybové rovnice ve tvaru

$$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(C_{ijkl}\, \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right) + F_i = \rho\, \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}\,, \qquad i,j,k,l = 1,2,3\,. \tag{13}$$

[5] Např. http://www.google.com/search?q=+d'Alembert+principle, http://en.wikipedia.org/wiki/D'Alembert's_principle

Vezmeme také v úvahu vnější tření. V této práci pro jednoduchost předpokládejme, že tření je závislé pouze na rychlosti a působí proti směru pohybu:

$$F_i^{(R)} = -R_i \frac{\partial u_i}{\partial t}\,, \qquad i = 1,2,3\,, \tag{14}$$

kde R_i jsou složky koeficientu tření.

Sílu $\boldsymbol{F}^{(R)}$ opět připočteme k objemové síle v rovnici (13) a po úpravě dostáváme elastodynamické rovnice ve tvaru, ze kterého budeme vycházet při numerickém řešení v následující části práce:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(C_{ijkl}\frac{\partial u_k}{\partial x_l}\right) + F_i = \rho\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} + R_i\frac{\partial u_i}{\partial t}\,, \qquad i,j,k,l = 1,2,3\,. \tag{15}$$

Pro neohraničené prostředí jsou řešením této rovnice obecně 3 typy objemových vln šířících se 3 obecně různými rychlostmi [13]. Těmto vlnám přísluší různé směry polarizace, které jsou navzájem ortogonální. Nechť $\boldsymbol{k}$ je směr šíření fáze a $\boldsymbol{U}^{(j)}$, $j = 1,2,3$ vektory polarizace jednotlivých módů. Pak mohou nastat 2 situace:

1. Pokud má jeden z vektorů $\boldsymbol{U}^{(j)}$ směr shodný s $\boldsymbol{k}$, pak se tento mód nazývá *podélný* a zpravidla se označuje L (longitudinal). Zbývající 2 módy, jejichž polarizace leží v rovině kolmé na $\boldsymbol{k}$, se nazývají *příčnými* a označují se T_i (transverse). V některých speciálních případech, například v izotropním prostředí, postupují oba příčné módy společně a vzniká tak obecně elipticky polarizovaná vlna, která se označuje T.
2. Pokud žádný z vektorů $\boldsymbol{U}^{(j)}$ nesplňuje předchozí podmínku, vybere se mód, jehož vektor polarizace $\boldsymbol{U}^{(j)}$ svírá s $\boldsymbol{k}$ nejmenší úhel (zřejmě menší než $\pi/4$). Tento mód se pak nazývá *kvazipodélným* qL a zbývající módy *kvazipříčnými* qT.

Způsoby značení módů nejsou ale jednotné, používá se např. označení S (*shear*) místo T.

Reálné prostředí je ovšem prostorově omezené a na chování vln mají významný vliv okrajové podmínky. Proto kromě popsaných *objemových* vln existuje i celá řada vln *povrchových*, mezi které patří vlny Rayleighovi, Loveho a Lambovi. Tato problematika je podrobněji vysvětlena např. v [11, 12, 13].

2 Metoda LISA

Mějme elastodynamickou vlnovou rovnici ve tvaru (15). Analytické řešení této soustavy rovnic je možné pouze pro jisté specifické a relativně vzácné úlohy. V případě zcela obecného nehomogenního prostředí a při obecných okrajových podmínkách analytické řešení zpravidla neexistuje a vlnovou rovnici je proto nutné řešit numericky s použitím počítače. K tomu je nejprve třeba soustavu řešených rovnic diskretizovat, poté určit numerické vlastnosti (např. stabilitu) a nakonec napsat samotný numerický kód. K numerickému řešení je možné použít např. metodu konečných prvků (MKP, FEM) [6] či některou z jejich variant a nebo některou variantu metody konečných diferencí (MKD, FDM) [7].

V této práci se budeme věnovat jedné variantě metody konečných diferencí, kterou nazýváme *LISA/SIM – Local Interaction Simulation Approach / Sharp Interface Model*. Tuto metodu navrhl zřejmě jako první P. P. Delsanto [6, 7] a v našem případě se jedná o jisté zobecnění, které spočívá v započtení vnějších sil a útlumových členů.

[6] Více např. http://www.google.com/search?q=finite+elements+method.

[7] Např. http://www.google.com/search?q=finite+difference+method.

Odvození příslušných diferenčních schémat standardním způsobem (víceméně na papíře) by bylo v našem případě poněkud zdlouhavé a značně náchylné k lidským chybám. Proto jsme využili systém počítačové algebry Reduce [14], s jehož pomocí bylo možné odvození provést velmi efektivně a víceméně automaticky. Tento přístup má celou řadu výhod. Například lze snadno vygenerovat pro soustavu rovnic několik verzí diferenčních schémat a poté můžeme navzájem porovnat výsledky získané použitím těchto různých kódů. A nebo je např. možné diferenční schéma rychle aktualizovat v případě, že přidáme nebo změníme některé členy u řešené soustavy diferenciálních rovnic. Takto odvozená diferenční schémata poté implementujeme v rámci poměrně obecných počítačových programů.

Podrobnější postup odvození nalezneme opět v [1], kde je princip metody LISA/SIM nejdříve názorně vysvětlen pro jednu prostorovou dimenzi (1D) a homogenní i heterogenní prostředí s ideálním i neideálním kontaktem na rozhraní mezi materiály. Neideální kontakt na rozhraní [9] je reprezentován tenzorem kvality kontaktu a s jeho pomocí je možné charakterizovat nejen různé typy vad v modelovaném vzorku (např. trhliny), ale také nelineární efekty a hysterezní vlastnosti materiálu.

2.1 LISA/SIM ve 2D

Uvažujme nyní kosočtverečnou (rombickou) krystalickou soustavu, která má všechny tři krystalové osy navzájem kolmé. V tomto případě se také mluví o ortotropním materiálu. Je možné ukázat [11], že kosočtverečná soustava má 9 nezávislých elastických koeficientů a tenzor elastických koeficientů má v maticové reprezentaci následující strukturu:

$$C_{ijkl} = \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & 0 & 0 & 0 \\ C_{2211} & C_{2222} & C_{2233} & 0 & 0 & 0 \\ C_{3311} & C_{3322} & C_{3333} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{2323} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{1313} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{1212} \end{pmatrix} . \tag{16}$$

Při uvážení symetrie (translační invariance) vzhledem k ose x_3 je možné soustavu rovnic (15) převést pro kosočtverečnou soustavu na systém rovnic:

$$\frac{\partial}{\partial x_l}\left(C_{klmn}\frac{\partial u_m}{\partial x_n}\right) + F_k = \rho\,\frac{\partial^2 u_k}{\partial t^2} + R_k\,\frac{\partial u_k}{\partial t}\,, \qquad k,l,m,n = 1,2\,, \tag{17}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_l}\left(C_{3l3l}\frac{\partial u_3}{\partial x_l}\right) + F_3 = \rho\,\frac{\partial^2 u_3}{\partial t^2} + R_3\,\frac{\partial u_3}{\partial t}\,, \qquad l = 1,2\,. \tag{18}$$

Z rovnice (18) je zřejmé, že šíření ve směru osy x_3 je možné řešit nezávisle, a proto se nyní soustředíme na řešení soustavy rovnic (17). Po dosazení (16) do rovnice (17) můžeme tyto rovnice upravit na tvar

$$\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\sigma_k\frac{\partial u_k}{\partial x_k} + \lambda\frac{\partial u_h}{\partial x_h}\right) + \frac{\partial}{\partial x_h}\left[\mu\left(\frac{\partial u_k}{\partial x_h} + \frac{\partial u_h}{\partial x_k}\right)\right] + F_k = \rho\,\frac{\partial^2 u_k}{\partial t^2} + R_k\,\frac{\partial u_k}{\partial t}\,, \tag{19}$$

kde $k = 1,2,\;\; h = 3-k = 2,1,\;\; \sigma_k = C_{kkkk}\,,\;\; \lambda = C_{1122}\,,\;\; \mu = C_{1212} = C_{1313} = C_{2323}\,.$

2.1.1 Diskretizace

Diferenční schémata pro rovnice (19) odvodíme za následujících předpokladů:

- Vlnová rovnice je diskretizována na pravoúhlé síti s délkami hran $\Delta x, \Delta y$.
- Posunutí $U^{ij} = \begin{pmatrix} u_1^{ij} \\ u_2^{ij} \end{pmatrix}$ jsou diskretizována v bodech (i, j).
- Materiálové parametry předpokládáme konstantní uvnitř každé buňky se středem v bodě $(i + 1/2, j + 1/2)$.
- Hodnoty materiálových matic mohou být nespojité se skoky podél hranic buněk.
- Ve vzdálenosti $\delta \ll \Delta x \sim \Delta y$ od bodu sítě (i, j) jsou umístěny body $(i \pm \delta, j \pm \delta)$, s jejichž pomocí aproximujeme derivace posunutí.
- V případě ideálního kontaktního rozhraní pro zavedení spojitosti napětí na rozhraní definujeme body $(i \pm \delta, j \pm \epsilon)$ a $(i \pm \epsilon, j \pm \delta)$, přičemž $\epsilon \ll \delta \ll \Delta x \sim \Delta y$.

Na základě těchto předpokladů je možné získat diferenční schémata ve tvaru:

$$U^{i,j,n+1} = -U^{i,j,n-1} + \sum_{k=-1}^{1} \sum_{l=-1}^{1} R_{kl}^{ij} \, U^{i+k,j+l,n} \,, \tag{20}$$

kde n označuje časový index a koeficienty R_{kl}^{ij} jsou funkcí materiálových parametrů a silového pole $\boldsymbol{F}$. Koeficienty R_{kl}^{ij} jsou v čase konstantní s vyjímkou R_{00}^{ij}, které mohou záviset na časově proměnné síle $\boldsymbol{F}$.

Jak již bylo zmíněno, celé odvození těchto diferenčních schémat bylo realizováno s pomocí systému počítačové algebry Reduce.

Pro neideální kontaktní rozhraní ve 2D postupujeme obdobně jako pro ideální kontakt. Pouze každou buňku výpočetní sítě rozdělíme ještě do 4 menších buněk a ve výsledku získáme 4× více rovnic. Celý výpočet pak ovšem také bude velmi orientačně 4× náročnější jak na operační paměť, tak i na výpočetní čas. Podrobnosti jsou uvedeny v [1].

2.1.2 Diferenční schémata pro hraniční uzly výpočetní sítě

Diferenční schémata pro volné okrajové podmínky ($\tau_{ij} = 0$) a absorpční (radiační) okrajové podmínky odvodíme analogickým způsobem jako schémata pro vnitřní uzly výpočetní sítě. V tomto případě dostaneme 8 různých diferenčních schémat pro 4 hrany a 4 rohy. Absorpční okrajové podmínky představují složitější úlohu, pro kterou jsou k dispozici pouze přibližné aproximace pro vyjádření těchto okrajových podmínek. Několik přístupů jsme vyzkoušeli a podrobnější informace je uvedena v části 3.1 a v [1].

Pro volné okrajové podmínky se ale vedle klasického odvození diferenčních schémat pro hraniční uzly nabízí ještě jedna možnost: Volné okrajové podmínky mohou být získány také z diferenčního schématu pro vnitřní bod sítě (20), pokud jsou materiálové konstanty položeny rovny nule vně vlastní výpočetní oblasti. Tuto skutečnost je opět možné snadno ověřit prostředky počítačové algebry.

Je zřejmé, že tento přístup má řadu výhod. Především není nutné odvozovat diferenční schémata pro jednotlivé hranice a rohy výpočetní sítě, přičemž tato schémata mají navíc obecně nižší řád přesnosti než schéma pro vnitřní uzly. A také z podmínky stability obvykle vyplývá nutnost použití kratšího časového kroku pro diferenční schémata na hranicích výpočetní oblasti.

2.1.3 Generace kódu pro diferenční schéma

Po odvození diferenčních schémat za použití systému počítačové algebry můžeme Reduce použít také ke generování vlastních numerických programů, ve kterých budou tato schémata implementována. Jako příklad si můžeme opět vzít diferenční schéma (20), jehož odvození bylo provedeno v maticově-vektorovém zápisu. Pro jeho počítačovou implementaci toto schéma rozepíšeme do skalárního tvaru

$$u^{i,j,n+1} = -u^{i,j,n-1} + \sum_{k=-1}^{1}\sum_{l=-1}^{1}\left(c_{uu}^{ijkl}u^{i+k,j+l,n} + c_{vu}^{ijkl}v^{i+k,j+l,n}\right), \tag{21}$$

$$v^{i,j,n+1} = -v^{i,j,n-1} + \sum_{k=-1}^{1}\sum_{l=-1}^{1}\left(c_{uv}^{ijkl}u^{i+k,j+l,n} + c_{vv}^{ijkl}v^{i+k,j+l,n}\right), \tag{22}$$

kde koeficienty c_{pq}^{ijkl}, $p = u, v$; $q = u, v$ jsou funkcemi materiálových parametrů μ, ν, λ, σ_1, σ_2, R_i a F_i. Tyto koeficienty jsou s vyjímkou c^{ij00} nezávislé na čase a je proto možné je spočítat pouze jednou na začátku celého výpočtu. Numerický kód pro výpočet c_{pq}^{ijkl} je pochopitelně také automaticky generován.

Spolu s kódem, který implementuje diferenční schémata (20) s předem počítanými koeficienty, je rovněž automaticky generován kód pro okrajové podmínky volné i absorpční[8]. Zdrojový kód numerického jádra má v tomto konkrétním případě v jazyce C přibližně 1300 řádek a jeho velikost je asi 60 kB.

Druhou možností je počítat koeficienty c_{pq}^{ijkl} v každém časovém kroku. To je možné využít např. tehdy, pokud počítáme relativně velké úlohy a nemáme dostatek operační paměti. Program vyžaduje v tomto případě asi třetinovou velikost operační paměti oproti variantě s předem napočítanými koeficienty. Ovšem doba výpočtu také zhruba 3× vzroste.

Při implementaci neideálního kontaktního rozhraní byly rovněž realizovány dvě verze kódu: jedna s předem napočítanými koeficienty a druhá, která počítá koeficienty až během samotného výpočtu.

2.2 LISA/SIM ve 3D

Analogicky 2D úloze můžeme řešit elastodynamické vlnové rovnice (15) v trojrozměrném případě pro souřadnice $(x_1,\ x_2,\ x_3)$ a posunutí $\boldsymbol{u} = (u_1,\ u_2,\ u_3)$:

$$\frac{\partial}{\partial x_l}\left(C_{klmn}\frac{\partial u_m}{\partial x_n}\right) + F_k = \rho\,\frac{\partial^2 u_k}{\partial t^2} + R_i\,\frac{\partial u_k}{\partial t}\,, \qquad k, l, m, n = 1, 2, 3\,. \tag{23}$$

Soustavu rovnic (23) budeme opět diskretizovat na pravoúhlé síti a budeme předpokládat konstantní materiálové parametry uvnitř každé výpočetní buňky. Odvození diferenčních schémat jsme realizovali pro zcela obecný případ tenzoru elastických konstant s 21 nezávislými koeficienty (viz část 1.3). V tomto případě je ovšem získaný numerický kód poměrně značně paměťově a časově náročný. Často se spokojíme s jednoduššími typy krystalových soustav, a proto jsme odvodili a implementovali diferenční schéma také pro ortotropní materiály, pro které má tenzor elastických koeficientů pouze 9 nezávislých parametrů, viz (16). Paměťové i časové nároky jsou v tomto případě podstatně příznivější.

[8] Jak již bylo uvedeno, pro absorpční okrajové podmínky podmínky je použito několik různých algoritmů.

2.2.1 Diskretizace

Diskretizace ve 3D případě je velmi podobná 2D úloze. Pouze v tomto případě již není možné provést odvození ve vektorovém tvaru, ale po složkách. Na závěr celého odvození (podrobnosti viz [1]) lze dospět k diferenčním schématům pro posunutí u_m ve tvaru

$$u_m^{(i,j,k),n+1} = -u_m^{(i,j,k),n-1} + \sum_{l=1}^{3} \sum_{a,b,c=-1}^{1} c_{lm}^{ijkabc} \, u_l^{(i+a,j+b,k+c),n} , \quad m = 1, 2, 3 , \tag{24}$$

kde (i, j, k) označuje uzly výpočetní sítě a n reprezentuje čas. Celé odvození diferenčních schémat bylo opět realizováno za pomoci systému počítačové algebry. A ve speciálním případě (pro ortotropní materiál, bez tlumících členů, vnějších sil, stejná velikost prostorového kroku ve všech dimenzích . . .) souhlasí s výsledky uvedenými v [8].

2.2.2 Generace kódu pro diferenční schéma

Pro diferenční schémata (24) je možné opět vygenerovat numerický kód např. v jazyce C.

K vlastní implementaci platí podobné poznámky jako v případě 2D. Uveďme zde alespoň některé:

- Řada koeficientů c_{lm}^{ijkabc} ve vztazích (24) je nulových, např. všechny, pro které platí $a \neq 0 \wedge b \neq 0 \wedge c \neq 0$.
- Tyto koeficienty mohou být uloženy pro každý uzel (i, j, k) výpočetní mříže.
- Koeficienty c_{lm}^{ijkabc} jsou podobně jako ve 2D až na několik vyjímek nezávislé na čase a je proto možné je spočítat pouze jednou na začátku samotného výpočtu. Příslušné numerické programy pro výpočet c_{lm}^{ijkabc} jsou opět automaticky generovány stejně jako funkce implementující diskretizační schéma pro jeden časový krok.

Podobně jako v případě 2D jsme z důvodu úspory operační paměti implementovali několik verzí kódu s ohledem na to, jaké máme právě pro daný výpočet priority. To znamená, že jednou z možností je počítat koeficienty c_{lm}^{ijkabc} v každém časovém kroku, čímž získáme výraznou úsporu operační paměti za cenu delšího výpočtu.

3 Implementace metody LISA

3.1 Okrajové podmínky

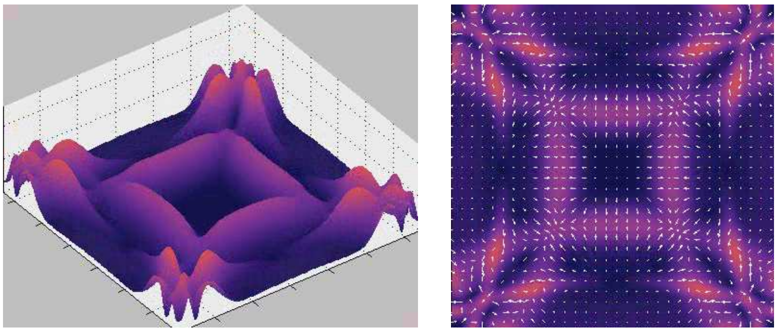
Ve 2D i 3D verzích našich numerických programů určených ke studiu šíření elastických vln je v současné době implementováno několik typů okrajových podmínek (o.p.), například:

1. Řešení na hranici je určeno předem danou hodnotou či funkcí (Dirichletova o.p.).
2. Volné okrajové podmínky (Neumannova okrajová podmínka).
3. Absorpční (radiační) okrajové podmínky.

Samostatnou kapitolou je implementace absorpčních okrajových podmínek. Zdroj informací k tomuto tématu je pochopitelně velmi bohatý [9], více informací je opět možné nalézt v habilitační práci [1].

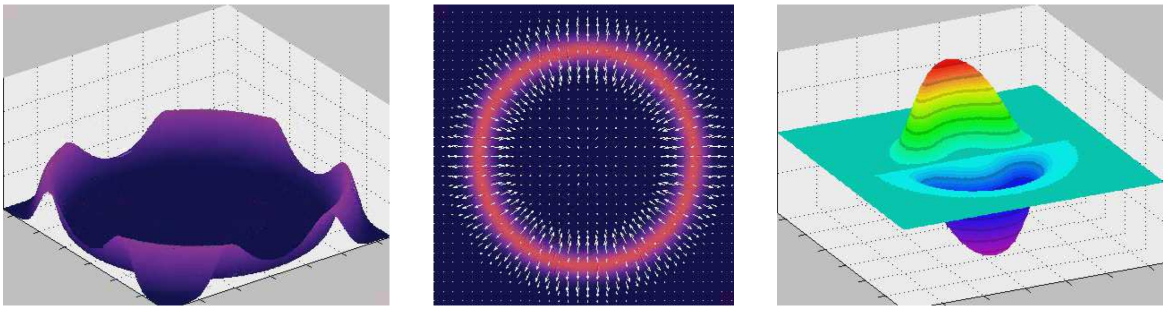
Absorpční okrajové podmínky je možné přesně (zcela bez odrazů na hranici) realizovat pouze za jistých speciálních podmínek, např. při výpočtu na kruhové oblasti [15]. Jedním

[9]Např. http://www.google.com/search?q=nonreflecting+boundary+conditions, http://www.google.com/search?q=absorbing+boundary+conditions.



Animace ve formátu MPEG, 524 kB   Animace ve formátu MPEG, 2.18 MB

Obrázek 1: Ilustrace volných okrajových podmínek.



Animace ve formátu MPEG, 202 kB   Animace ve formátu MPEG, 1.48 MB   Animace ve formátu MPEG, 333 kB

Obrázek 2: Ilustrace absorpčních (radiačních) okrajových podmínek.

z typických postupů je tzv. paraxiální aproximace, u které koeficient odrazu $r_j(\theta)$ se dá vyjádřit ve tvaru [16]

$$r_n(\theta) \approx \left(\frac{1-\cos\theta}{1+\cos\theta}\right)^n, \tag{25}$$

kde n je stupeň aproximace a θ je úhel dopadu vlny měřený od normály hranice oblasti. Z tohoto vztahu je patrné, že paraxiální aproximace poskytuje uspokojivé výsledky pouze za jistých podmínek. Navíc se ukázala řada problémů se stabilitou výpočtu při implementaci těchto okrajových podmínek.

Zkusili jsme celou řadu metod na výpočet absorpčních okrajových podmínek. K naší plné spokojenosti zejména s ohledem na stabilitu řešení ale zatím slouží pouze jediná, která je superpozicí několika řešení s jistou kombinací okrajových podmínek podle Dirichleta a Neumanna [17].

Ukázka výpočtu s volnými a absorpčními okrajovými podmínkami je na obrázcích 1 a 2. Názornější než statické obrázky jsou animace příslušných výpočtů [10], které zobrazují časový vývoj řešení. Na obr. 1 a 2 je signál reprezentující explozi uprostřed výpočetní oblasti šířící se v homogenním prostředí. Zobrazen je modul posunutí $\sqrt{u_1^2+u_2^2}$. Podle typu okrajových podmínek je zřejmý odraz či absorpce na hranicích výpočetní oblasti. Odkaz na soubory ve formátu MPEG je na obr. 1 pro volné okrajové podmínky a na obr. 2 pro absorpční okrajové podmínky. Bílé šipky reprezentují rychlostní pole. Snímek zcela vpravo na obr. 2 odkazuje na časový vývoj pouze podélné složky posunutí. Na této animaci je např. pěkně demonstrován vliv volby barevné mapy na názornost zobrazení. Mapa barev je zde zvolena s výraznými přechody mezi jednotlivými barevnými složkami. Při použití této barevné mapy by byly např. velmi dobře patrné odrazy signálu na hranicích při nevhodné implementaci okrajových podmínek.

[10] A ještě vhodnější je pracovat přímo s netCDF soubory, viz část 3.2.

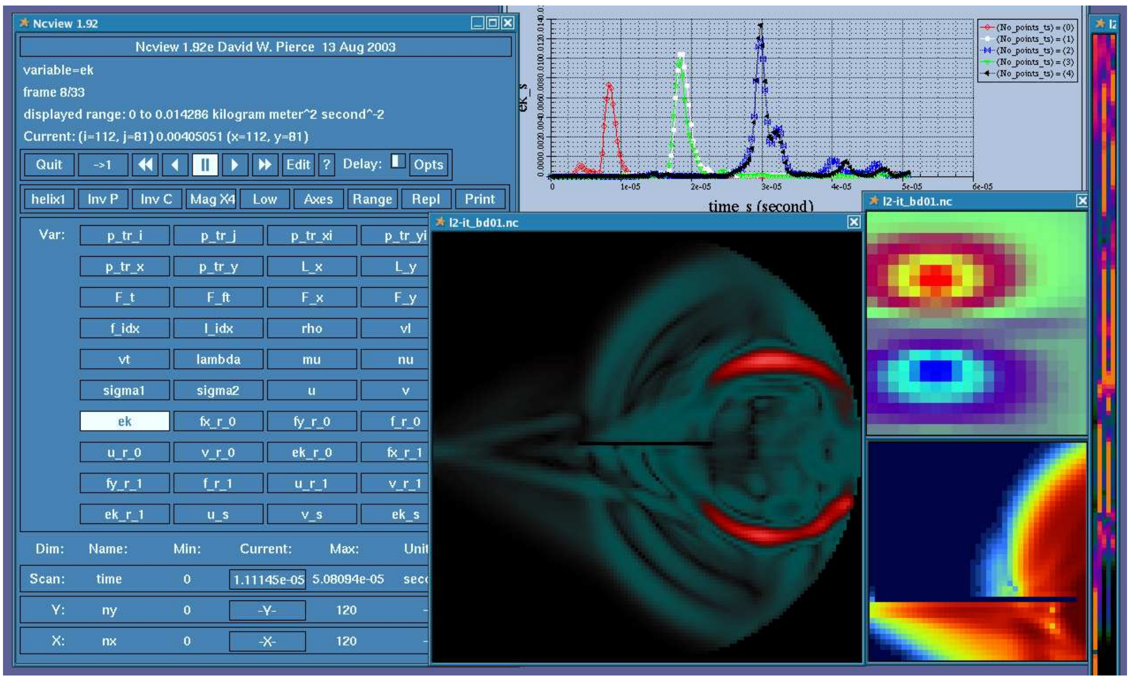
3.2 Uložení napočítaných dat – formát NetCDF

Při archivaci napočítaných dat v případě 2D a 3D výpočtů je vhodné postupovat poměrně uvážlivě. Jako příklad si vezměme 2D výpočet na relativně malé sítí 1000×1000 bodů. Pro uložení 1 proměnné v jednoduché přesnosti v binárním tvaru je třeba 4 MB paměti. Při uložení 1000 časových snímků je již potřeba 4 GB pouze pro 1 proměnnou. Proměnných, které nás zajímají, je obvykle více, např. jednotlivé složky posunutí u_i , rychlostí v_i , složky tenzoru napětí τ_{ij} , kinetická energie… Proto není možné ukládat výsledky všech proměnných pro každý časový krok na celé výpočetní oblasti. Volíme si zpravidla jen některé veličiny a i u nich hodnoty zaznamenáme pouze pro jisté vybrané časy. Mohou existovat také určité části výpočetní sítě, ve kterých si přejeme podrobnější záznam výsledků. Např. pokud porovnáváme výsledky výpočtů s měřeními, jistě uvítáme možnost zvolit si menší oblast, na které může být záznam podrobnější, např. pro každý časový krok výpočtu. Jindy může být naopak vhodné např. redukovat počet prostorových bodů v oblasti záznamu. Všechny tyto různé typy výsledků je ideální mít v jediném souboru a to případně i včetně vstupních parametrů. S ohledem na paměťové nároky by soubor měl být binární a pokud možno přenositelný mezi různými počítačovými platformami, což není ani u datových formátů zcela samozřejmé.

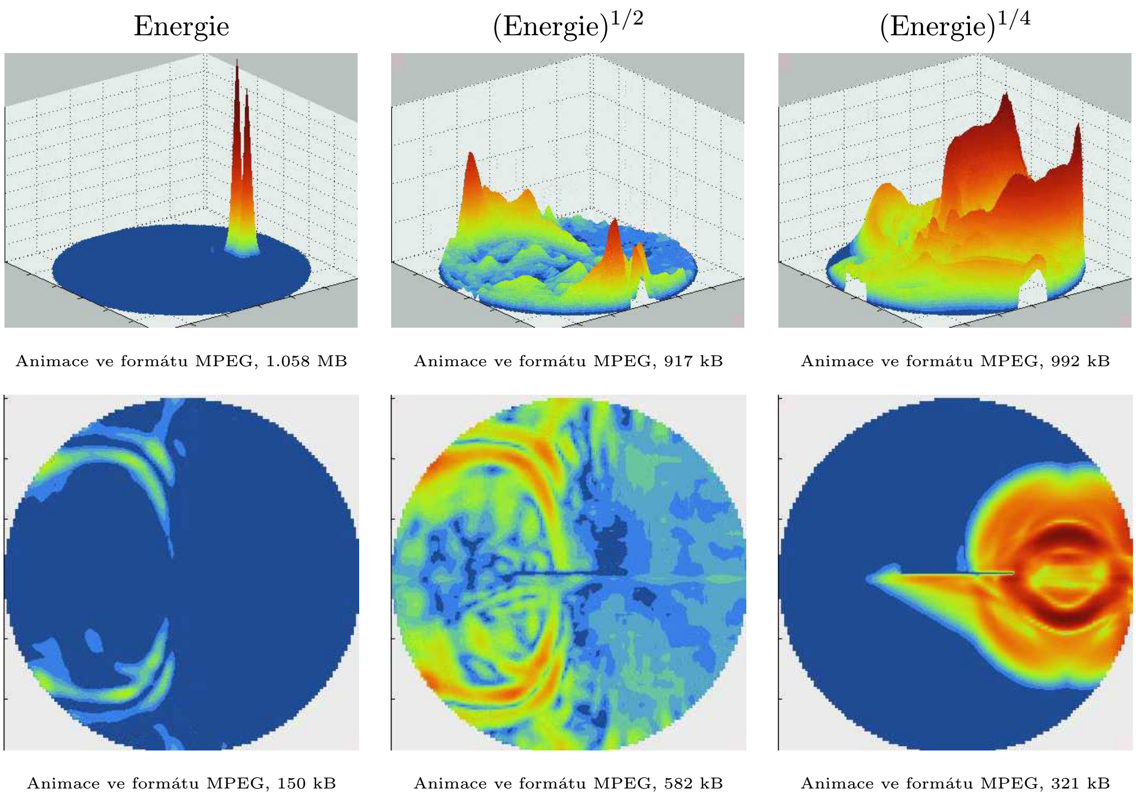
Proto před námi stála otázka výběru vhodného datového formátu, který by splňoval naše požadavky. Přehled a charakteristiky vědeckých datových formátů je možné nalézt např. na adrese [19] [11]. Pro naše účely jsme nakonec volili mezi formáty HDF [20] a netCDF (Network Common Data Form) [21]. Volba padla na formát netCDF. Více podrobností o tomto datovém formátu je možné nalézt např. v [1].

Se soubory ve formátu netCDF můžeme efektivně pracovat v celé řadě programů. K rychlému a pohodlnému prohlížení netCDF souborů je k dispozici několik nástrojů. Vhodný je např. program ncBrowse [24]. Jako velmi doporučeníhodný se ale ukazuje zejména program Ncview [25]. Ukázka programu Ncview je na obr. 3. Vlevo je panel

[11] A zajisté na http://www.google.com/search?q=scientific+data+format.



Obrázek 3: Ukázka aplikačního rozhraní programu Ncview.



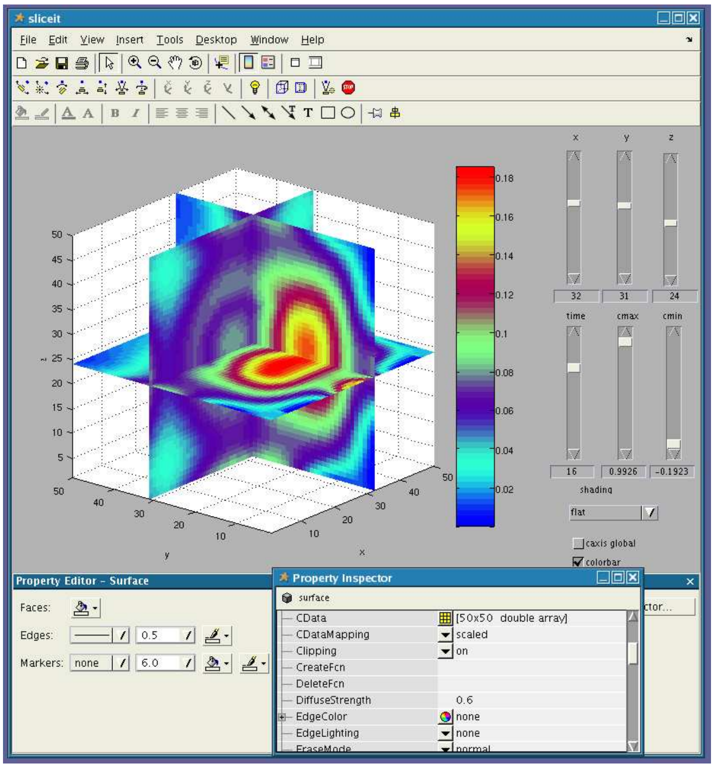
Obrázek 4: Časový vývoj šíření energie v Brazilském sendvičovém disku.

s ovládacími prvky a seznamem proměnných. Dole uprostřed je snímek signálu, který se šíří prostředím. Vpravo od tohoto záznamu jsou 2 detailní pohledy na vybrané oblasti v okolí zdroje signálu a v okolí trhliny. Zcela vpravo jsou podrobné záznamy z detektorů umístěných po okraji výpočetní oblasti. Průběh několika takových signálů je pak zobrazen na obrázku vpravo nahoře.

Jako malá ukázka je na obr. 4 odkaz na 6 animací dokumentujících modelování šíření signálu podél trhliny pro Brazilský sendvičový disk [18]. Na horní řadě snímků je například velmi dobře patrná pomalu se šířící povrchová Rayleighova vlna. Animace mají také dokumentovat nutnost vhodné volby měřítka a reprezentace hodnot barvami pro zdůraznění efektů, které nás zajínmají.

V programu Matlab [22] je poměrně snadné sestavit grafické uživatelské prostředí pro práci s daty. Realizoval jsem např. funkci `sliceit`, která umožňuje interaktivní zobrazení funkce $f(x, y, z, t)$. Vlastní aplikace poskytuje pouze minimum ovládacích prvků, které jsou určitě zcela postačující k rychlé práci s daty. Je možné se snadno pohybovat po časové ose a měnit polohu řezů v prostorových rovinách. Dále již je v grafické podobě obsaženo pouze několik základních funkcí pro změnu parametrů zobrazení typu `shading` či `caxis`, protože zřejmě nemá příliš smysl implementovat vlastnosti, které jsou v Matlabu snadno dostupné standardními prostředky. Proto využití veškerých dalších velmi bohatých možností Matlabu je k dispozici snadno z příkazové řádky a také pomocí grafického uživatelského rozhraní Matlabu, jak je také ukázáno alespoň na jednom obrázku 5.

Nejen pro 3D úlohy se jako efektivní formát zobrazení dat jeví VRML Virtual Reality Modeling Language [5]. VRML model je možné vytvořit např. v Matlabu poměrně lehce funkcí `vrml`. Vhodný prohlížeč pro VRML modely nalezneme např. na adrese [5]. Podrobnější diskuse k tomuto formátu je v [1].



Obrázek 5: Ukázka použití funkce `sliceit` v prostředí Matlab.

3.3 Vstupní data pro soubor programů LISA

Implementace metod LISA/SIM ve 2D a 3D v rámci počítačových programů je realizována poměrně obecným způsobem.

Vstupní soubor je prozatím pouze relativně jednoduchý textový, přesto se slušnými možnostmi definice vstupních parametrů.

Pokud jde např. o tvar geometrických oblastí s definicí materiálových parametrů, jako typické příklady standardně předdefinovaných prvků ve 2D můžeme uvést: obdélník, kružnice, kruhová výseč, elipsa, polygon (n-úhelník) a každý z nich s libovolným úhlem natočení. Pro 3D jsou k dispozici: kvádr, koule, kulová výseč, elipsoid, válec.

Externími nástroji mohou být ale sestaveny např. zcela libovolné konfigurace materiálových parametrů, které jsou uloženy ve vstupním netCDF souboru. Takto je možné vzít např. fotografii povrchu materiálu a na základě barevných odstínů přiřadit jednotlivým složkám elastické koeficienty.

Každému nemusí tento typ vstupního souboru vyhovovat. Jeden z prvních pokusů grafické nadstavby napsané v Pythonu [23] je uveden v [26]. Vstupní soubor je možné generovat také programy typu Matlab, Octave, Scilab, Perl a bash . . . To je výhodné např. tehdy, pokud si přejeme takový vstupní signál, který není v programech LISA standardně definován, např. $\int \sin(x)/x \, dx$.

Jako vstupní parametry mohou vystupovat složky posunutí u_i i vnější síly f_i. Těchto signálů může být při respektování velikosti operační paměti téměř libovolný počet, mohou se nacházet kdekoliv v rámci výpočetní sítě a mohou mít libovolnou orientaci. Jako časový a prostorový profil signálu je možné zvolit buď některou z předdefinovaných funkcí, např. Gauss, sinus, polygon, funkce chyb, Rickerova funkce . . . , přičemž signál může být ještě modulován další funkcí. Také je možné vygenerovat vstupní signál externími nástroji a nebo použít jako zdroj signálu např. výsledky měření z reálného experimentu.

4 Ilustrační výsledky

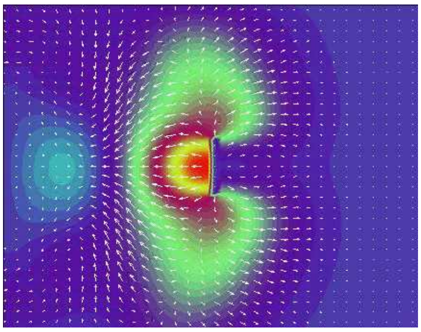
Obrázky zde uvedené jsou vesměs pouze ilustrační a byly získány numerickým řešením elastodynamické vlnové rovnice ve 2D a 3D zpravidla pro velmi jednoduché konfigurace materiálových parametrů.

Pokud není uvedeno jinak, jsou čas a amplituda v grafech vyjádřeny v libovolných jednotkách.

Papír je ovšem poněkud statické médium a k prezentaci výsledků máme dnes již k dispozici atraktivnější možnosti. Tím máme na mysli např. animace či video sekvence. Proto se v této části nachází příklady s odkazy na MPEG soubory. O tom, jak takovou animaci vytvořit, je rovněž stručně pojednáno v [1], kde je také diskutována volba vhodného prohlížeče.

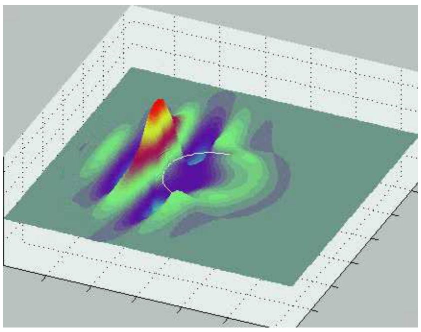
Ještě vhodnější je ovšem pracovat přímo s napočtenými daty, které jsou uloženy v souboru s vhodným datovým formátem, např. netCDF [21]. Data pak můžeme pohodlně analyzovat s pomocí některého z prohlížečů, které jsou uvedeny v části 3.2 nebo zpracovat s pomocí programů, skriptů či funkcí napsaných např. pro systémy typu Matlab či Python.

Vzhledem k vyhrazenému prostoru jsou v této části uvedeny s aktivními hypertextovými odkazy pouze 4 ukázky z celé řady filmových sekvencí ve formátu MPEG a souborů ve formátu VRML, které máme k dispozici, další jsou na adrese [1]. Je zde uveden pouze stručný popis souboru a ilustrační snímek z příslušné video-sekvence či VRML souboru.



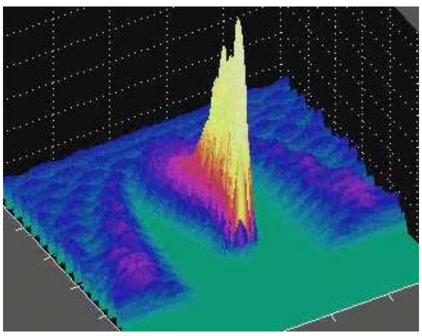
Obrázek 6: Rozptyl vlny s Gaussovým profilem na trhlině ve skle. Superponované vektorové pole reprezentuje podélnou složku rychlosti.

(Animace ve formátu MPEG, 584 kB)



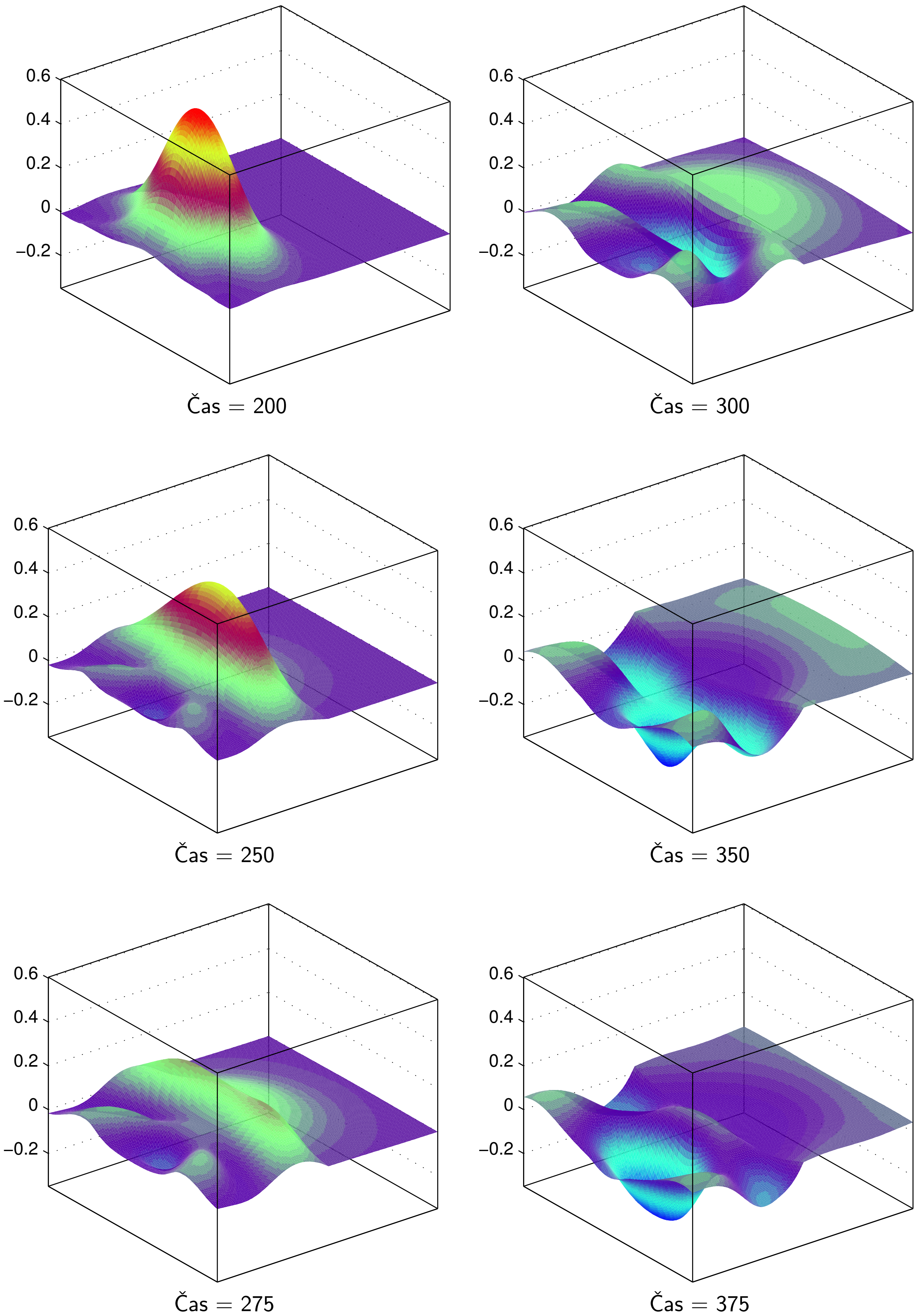
Obrázek 7: Rozptyl gaussovského pulsu modulovaného sinem na kruhové hliníkové vložce v plexisklu.

(Animace ve formátu MPEG, 711 kB)

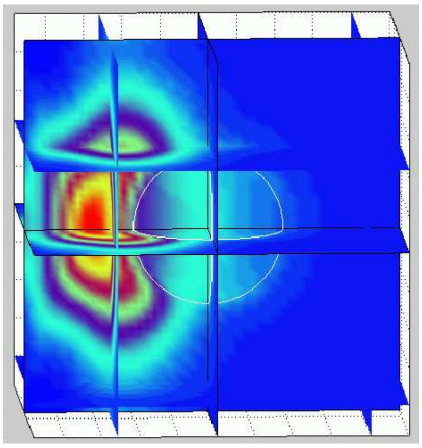


Obrázek 8: Rovinná vlna dopadající na akustickou čočku. Zobrazena je kinetická energie.

(Animace ve formátu MPEG, 230 kB)



Obrázek 9: Odraz podélné vlny s Gaussovým profilem na rozhraní plexisklo–hliník při absorpčních okrajových podmínkách. Zobrazena je podélná složka posunutí.



Obrázek 10: Rozptyl gaussovského pulsu na kulové hliníkové vložce v plexisklu při volných okrajových podmínkách. VRML model reprezentuje podélnou složku posunutí v čase $T = 170$.

(Soubor ve formátu VRML, 1.1 MB)

5 Závěr

V této práci jsme se věnovali vývoji a implementaci modelu LISA, který slouží ke studiu šíření elastických vln v libovolném nehomogenním prostředí. I z toho, co zde bylo vlastně jen naznačeno, je snad zřejmé, že zde uvedená kolekce programů LISA v sobě stále skrývá velké možnosti a může být s úspěchem využita při studiu šíření akustických vln, při diagnostice materiálů a v defektoskopii. Možnosti programů zde byly předvedeny pouze s pomocí několika jednoduchých modelových úloh. Jsem přesvědčen, že k důkladnějšímu pochopení potenciálu uvedeného přístupu nestačí studium statického textu, a proto je pro první seznámení na adrese [1] k dispozici hypertextová verze habilitační práce ve formátech PDF a HTML s odkazy na několik video-souborů věnovaných řešení některých jednoduchých, přesto snad názorných úloh z teorie šíření elastických vln. Ještě užitečnější je ale pracovat přímo s napočtenými daty ve formátu netCDF. Proto je na uvedené adrese k dispozici také několik netCDF souborů s výsledku simulací jednoduchých modelových úloh.

Reference

[1] M. Šiňor: Modelování a vizualizace šíření elastických vln v obecném nehomogenním prostředí, http://kfe.fjfi.cvut.cz/~sinor/r/lisa/h2005/

[2] LaTeX – A document preparation system, http://www.latex-project.org/

[3] pdfTeX, http://www.tug.org/applications/pdftex/

[4] MPEG . ORG - MPEG Pointers and Resources, http://www.mpeg.org/

[5] Web3D Consortium – Open Standards for Real-Time 3D Communication, http://www.web3d.org/

[6] P. P. Delsanto, T. Whitcombe, H. H. Chaskelis, R. B. Mignogna: *Connection Machine Simulation of Ultrasonic Wave Propagation in Materials I: The One-dimensional Case.* Wave Motion, 1992, **16**, s. 65.

[7] P. P. Delsanto, R. S. Schechter, H. H. Chaskelis, R. B. Mignogna, R. B. Kline: *Connection Machine Simulation of Ultrasonic Wave Propagation in Materials II: The Two-dimensional Case.* Wave Motion, 1994, **20**, s. 295.

[8] P. P. Delsanto, R. S. Schechter, R. B. Mignogna: *Connection Machine Simulation of Ultrasonic Wave Propagation in Materials III: The Three-dimensional Case.* Wave Motion, 1997, **26**, s. 329–339.

[9] P. P. Delsanto, M. Scalerandi: *A spring model for the simulation of the propagation of ultrasonic pulses through imperfect contact interfaces.* J. Acoust. Soc. Am., 1998, **104**, s. 2584–2591.

[10] M. Brdička, L. Samek, B. Sopko: *Mechanika kontinua.* Praha: Academia, 2000.

[11] D. Royer, E. Dieulesaint: *Elastic Waves in Solids I. Free and Guided Propagation.* Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2002.

[12] D. Royer, E. Dieulesaint: *Elastic Waves in Solids II. Generation, Acousto-optic Interaction and Applications.* Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2002.

[13] J. L. Rose: *Ultrasonic Waves in Solid Media.* Cambridge University Press, 1999.

[14] REDUCE Home Page, http://www.uni-koeln.de/REDUCE

[15] M. J. Grote: *Nonreflecting Boundary Conditions for Time Dependent Wave Propagation*, In: Artificial Boundary Conditions with Applications to Computational Fluid Dynamics, Ed. L. Tourrette, Nova Science Publishers Inc., New York, 2001.

[16] R. Clayton, B. Engquist: *Absorbing boundary conditions for acoustic and elastic wave equations.* Bulletin of the Seismological Society of America, Dec. 1977, Vol. **67**, No. 6, s. 1529–1540.

[17] W. D. Smith: *A nonreflecting plane boundary for wave propagation problems.* Journal of Computational Physics, 1974, **15**, s. 492–503.

[18] Suo, Z., Hutchinson, J.W., *Sandwich Test Specimens for Measuring Interface Crack Toughness*. Materials Science and Engineering A107 135-143, 1989.

[19] Scientific Data Format Information FAQ, http://www.cv.nrao.edu/fits/traffic/scidataformats/faq.html

[20] The NCSA HDF Home Page, http://hdf.ncsa.uiuc.edu/

[21] Unidata – NetCDF, http://my.unidata.ucar.edu/content/software/netcdf/

[22] The MathWorks – MATLAB and Simulink for Technical Computing, http://www.mathworks.com/

[23] Python Programming Language, http://www.python.org/

[24] ncBrowse, A Graphical netCDF File Browser, http://www.epic.noaa.gov/java/ncBrowse/

[25] Ncview: a netCDF visual browser, http://meteora.ucsd.edu/~pierce/ncview_home_page.html

[26] P. Hora, M. Šiňor: Šíření napěťových vln v nehomogenním prostředí. In: Defectoscopy 2002. Liberec: Czech Society for Nondestructive Testing, 2002, s. 75–83. ISBN 80-214-2247-5.

Životopis: Ing. Milan Šiňor, Dr.

Adresa:	České vysoké učení technické v Praze Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská Břehová 7, 115 19 Praha 1
Telefon:	+420-22191 2287, +420-22435 8613
Fax:	+420-2688 4818
E-mail:	sinor@antu.fjfi.cvut.cz

Vzdělání:	– maturita, Střední průmyslová škola elektrotechnická, Praha 2. Obor Přístrojová a provozní technika jaderných zařízení, 1981. – Ing., ČVUT FJFI Praha. Obor Fyzikální inženýrství, 1986. – Dr., ČVUT FJFI Praha. Obor Fyzikální inženýrství, 1995.
Zaměstnání:	– studijní pobyt, ČVUT FJFI Praha, 1987 – 1988 – doktorské studium, ČVUT FJFI Praha, 1988 – 1992 – odborný pracovník, ČVUT FJFI Praha, 1992 – 1994 – akademický pracovník, ČVUT FJFI Praha, od r. 1994
Delší zahraniční pobyty:	– Politecnico di Torino, Itálie, 1996, 1 měsíc. – University of Bergen, Department of Physics, Norsko, 2003, 3 týdny. – CERN, Ženeva, Švýcarsko, od r. 1994, 2 – 5 týdnů za rok.

Odborné zájmy:

Věnuji se fyzice plazmatu, atomové fyzice, fyzice vysokých energií a vysokých hustot energie, počítačové fyzice, analýze dat, vizualizaci, aplikaci počítačové algebry, v poslední době také např. polohově citlivým detektorům ionizujícího záření, fyzice nanostruktur a modelování fotonických krystalů. V uvedených oblastech jsem také autorem řady počítačových simulačních programů.

Publikace:

- Článek v mezinárodním recenzovaném časopise: 13
- Editor sborníku mezinárodní konference: 4
- Příspěvek na mezinárodní konferenci (ve sborníku): 38
- Původní článek v českém vědeckém a odborném časopise: 3
- Původní příspěvek na české konferenci (ve sborníku): 45
- Autorovi známé kladné ohlasy prací v zahraničních publikacích: 17

Řešitel grantu ČR: 2
Spoluřešitel zahraničního grantu: 7
Spoluřešitel grantu ČR: 35
Organizační nebo programový výbor mezinárodní konference: 6

Vedení studentského projektu: 32 studentů, 129 semestrů
Vedení obhájené diplomové práce: 9
Vedení obhájené bakalářské práce: 7
Konzultant obhájené diplomové a bakalářské práce: 17
Konzultant PGS práce: 4

Zavedení a přednášení nového předmětu v řádném studiu:

- Programování osobních počítačů (1993 – 8)
- Fyzika na počítači 1,2 (1993 – 8)
- Kvantová a statistická fyzika na počítači (1993 – dosud)
- Fyzika 3,4 (1996– dosud)
- Praktická informatika pro inženýry 2,3 (1997 – dosud)
- Workshop fyziky mikrosvěta a megasvěta (1999 – 03)
- Atomová fyzika (2000– dosud)
- Techniky pro počítačový přenos znalostí (2001 – dosud)
- Vybrané partie z fyziky (od šk. r. 2006/07)
- Nanofyzika (od šk. r. 2006/07)
- Úvod do HP-UX (od šk. r. 2006/07)
- Atomová a molekulová fyzika (od šk. r. 2006/07 na ČVUT FBMI)

Některé další školní aktivity v rámci ČVUT FJFI †:

- Přednášky v rámci předmětu Úvod do zaměření, koordinace těchto přednášek na katedře fyzikální elektroniky (KFE).
- Přednášky v rámci předmětu Problémový seminář.
- Organizace prezentací studentů v rámci obhajob ročníkových a bakalářských prací, rešeršních prací, výzkumných úkolů a diplomových prací pro studijní zaměření Laserová technika a optoelektronika, Fyzikální elektronika a Informatická fyzika na závěr každého semestru, od. r. 2000.
- Člen propagační komise FJFI, od r. 1998.
- Člen pedagogické komise FJFI, od r. 2004.
- Koordinace a tvorba Studijních programů za KFE, od. r. 1998.
- Organizace Dnů otevřených dveří (DOD) za KFE, od. r. 1998.
- Koordinace Fyzikálního týdne na KFE, účast na realizaci studentských miniprojektů, od r. 1999.
- Oponentské posudky zejména pro Fond rozvoje vysokých škol (FRVŠ), doposud vypracováno více než 25 posudků, od r. 2001.
- Tajemník katedry fyzikální elektroniky ČVUT FJFI Praha, od r. 1997.
- Administrace systémů Komponenta studium (KOS) a Věda, výzkum, vnější styky (VVVŠ) na KFE, od r. 1999.
- Administrace a správa WWW stránek KFE na http://kfe.fjfi.cvut.cz/, od r. 1977.
- Správa WWW stránek KFE na http://www.fjfi.cvut.cz/, od r. 2000.
- Podíl na administraci počítačové učebny (v současné době učebna UNIX) na KFE, od r. 1991.

† Všem uvedeným aktivitám se věnuji od uvedeného roku až do současnosti.

Některé další znalosti:

- Administrace operačních systémů UNIX (HP-UX, IRIX, Linux, Solaris).
- Programovací jazyky: C, C++, Fortran, Pascal, Java, Perl, PHP, Python, SQL . . .
- Počítačové algebraické a integrované výpočetní systémy: Mathematica, Maple, MuPAD, Maxima, Axiom, Matlab, Scilab, Octave . . .
- Typografie a hypertex, typografické systémy: TEX, LATEX, HTML, XML . . .