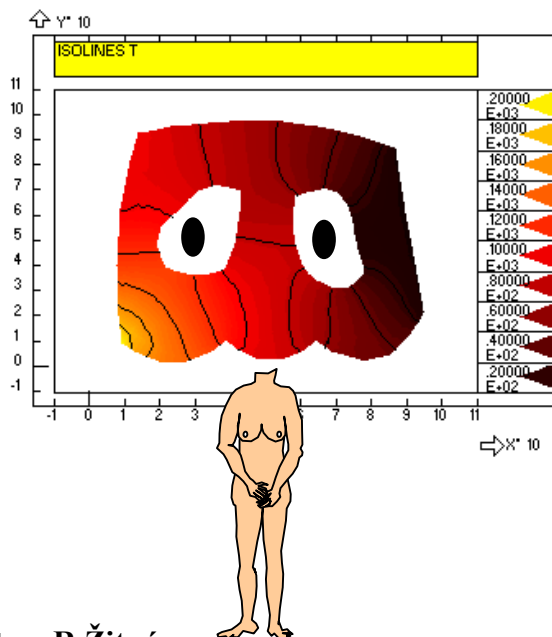


# FEMINA V3.x

Programy pro Metodu konečných prvků

## Část I.

Uživatelský manuál



Autor: R.Žitný  
červenec 2003

# OBSAH

## Seznam symbolů

## Použitá literatura

<b>1. Úvod</b>	<b>7</b>
<b>2. Příklady formulace a řešení problémů v programech FEMINA.....</b>	<b>10</b>
2.1. Ovládání programů	12
2.2. Teplotní pole v desce	14
2.3. Ohmický ohřev 3D	23
2.4. Uživatelský program (výpočet plochy oblasti)	26
2.5. Laminární proudění (proudová funkce)	27
2.6. Laminární proudění (primitivní proměnné: rychlosti a tlak)	33
2.7. Potrubní síť	39
2.8. Táhla – nelineární statika	47
2.9. Statika nosníků a trubek	48
2.10. Rotační skořepiny	49
2.11. Rovinná napjatost a rovinná deformace	52
2.12. Serie mísičů se zpětným promícháváním – integrální model	53
2.13. FFT konvoluce, dekonvoluce, korelace	55
2.14. Regresní analýza	56
2.15. Optimalizace a identifikace matematického modelu	59
2.15.1. Identifikace funkce (regresní analýza)	60
2.15.2. Identifikace modelu RTD	61
2.15.3. Transmisní tomografie	62
2.15.4. Elektrotomografie	64
2.15.5. Stanovení součinitele přenosu tepla	67
<b>3. Příkazy programu FEMINA a interpret příkazů.....</b>	<b>69</b>
3.1. Entity	
3.2. Zahájení a ukončení úlohy	
3.3. Nastavení kreslicího okna MODEL	
3.4. Definice geometrie	
3.5. Definice vlastností elementů	
3.6. Definice funkčních závislostí	
3.7. Příkazy pro výpis entit na displeji	
3.8. Příkazy pro export import dat	
3.9. Vykreslování a identifikace entit v okně MODEL	
3.10. Vytvoření sítě elementů	
3.11. Zadávání hodnot atributů uzlových parametrů	
3.12. Výpočet (SOLVE)	
3.13. Interpretace příkazového souboru (řídící příkazy)	
3.14. Optimalizace parametrů matematického modelu systému	
3.15. Způsoby zpracování příkazů	
3.16. Předdefinované proměnné interpretu výrazů	
3.17. Abecední seznam příkazů a proměnných interpretu výrazů	
<b>4. Základy teorie vybraných problémů.....</b>	<b>91</b>
<b>4.1. Proudění, transportní rovnice</b>	
4.1.1. Plouživé proudění newtonské kapaliny (proudová funkce)	
4.1.2. Navierovy Stokesovy rovnice, formulace s proudovou funkcí	*
4.1.3. N-S rovnice, formulace s proudovou funkcí a vířivostí (UPWIND)	
4.1.4. N-S rovnice – formulace v proměnných rychlosti a tlak, nestlačitelná kapalina,	
4.1.5. N-S rovnice – formulace v proměnných rychlosti a tlak, pseudostlačitelná tekutina	

- 4.1.6. N-S rovnice – formulace pouze s  $u_x$   $u_y$  (eliminace tlaku – metoda pokutové funkce)
- 4.1.7. Proudění s minimální dissipací a kinetickou energií (metoda nejmenších čtverců)
- 4.1.8. Proudění s minimální kinetickou energií (metoda Lagrangeových multiplikátorů)
- 4.1.9. Teplotní pole ve známém rychlostním poli kapaliny s ohmickým ohřevem
- 4.1.10. Rozložení elektrického potenciálu
- 4.1.11. Transport hmoty s chemickou reakcí prvního řádu
- 4.1.12. Potrubní sítě – rozložení tlaků
- 4.1.13. Potrubní sítě – teplotní pole, výměníky tepla
- 4.1.14. Potrubní sítě – transport hmoty
- 4.1.15. Potrubní sítě – metoda entalpických bilancí, výměníky tepla
- 4.2. Strukturní analýza pružných těles**
  - 4.2.1. Systém táhel (velké deformace metodou Monte Carlo)
  - 4.2.2. Táhla (velké deformace iterační metodou)
  - 4.2.3. Nosníky, potrubní sítě
  - 4.2.4. Rotačně symetrické skořepiny
  - 4.2.5. Dvourozměrná napjatost a deformace, rotačně symetrická tělesa
- 4.3. RTD zpracování časových závislostí a modely obyčejných diferenciálních rovnic**
  - 4.3.1. Vyhlazování funkčních průběhů
  - 4.3.2. Import dat s kvadratickou interpolací
  - 4.3.3. Aproximace chvostu
  - 4.3.4. Korekce na zvýšení pozadí
  - 4.3.5. Výpočty momentů
  - 4.3.6. FFT konvoluce, dekonvoluce, korelace, filtrace
  - 4.3.7. Řešení soustavy obyčejných diferenciálních rovnic
  - 4.3.8. Lineární a nelineární regresní analýza
  - 4.3.9. Optimalizace

**Příloha: Výpis struktury databáze \$FEM**

## Seznam symbolů

$a$	teplotní vodivost	$[\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$
$a_e$	axiální teplotní disperze	$[\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$
$A_N$	preexonenciální faktor reakce rozkladu proteinů	$[\text{s}^{-1}]$
$c_p$	měrná tepelná kapacita	$[\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}]$
$c_N$	koncentrace proteinů	$[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$
$D$	průměr trubky	$[\text{m}]$
$D_e$	ekvivalentní průměr trubky	$[\text{m}]$
$D_N$	součinitel difúze	$[\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$
$E_N$	aktivační energie reakce rozkladu proteinů	$[\text{kJ} \cdot \text{kmol}^{-1}]$
$E$	aktivační energie v Ebert Panchalově modelu foulingu ropy	$[\text{kJ/mol}]$
$E$	modul pružnosti	$[\text{Pa}]$
$f$	Fanningův třecí součinitel	$[-]$
$g$	gravitační zrychlení	$[\text{m} \cdot \text{s}^{-2}]$
$h$	charakteristický rozměr elementu	$[\text{m}]$
$k$	součinitel přestupu tepla, ale též součinitel prostupu tepla	$[\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}]$
$L_i$	plošná souřadnice v trojúhelníku	$[-]$
$L_{ij}$	délka tyčového elementu i-j	$[\text{m}]$
$M_{ij}$	matice hmotnosti nebo tepelných kapacit	$[\text{kg}]$
$N_i$	bázová funkce	$[-]$
$Nu$	Nusseltovo číslo	$[-]$
$p$	tlak	$[\text{Pa}]$
$p_e$	externí přetlak	$[\text{Pa}]$
$Pe$	Pecletovo číslo elementu	$[-]$
$Q$	zdroj tepla	$[\text{W} \cdot \text{m}^{-3}]$
$r$	radiální souřadnice	$[\text{m}]$
$R$	univerzální plynová konstanta $=8.314 \cdot 10^{-3}$	$[\text{kJ/mol}]$
$Re$	Reynoldsovo číslo	$[-]$
$t$	čas	$[\text{s}]$
$\Delta t$	časový krok	$[\text{s}]$
$T$	teplota	$[\text{C}]$
$T_W$	teplota stěny	$[\text{C}]$
$T_e$	teplota vnějšího media	$[\text{C}]$
$u_x, u_y$	složky rychlosti v kartézském souřadném systému	$[\text{m} \cdot \text{s}^{-1}]$
$u_x, u_r$	složky rychlosti v cylindrickém souřadném systému	$[\text{m} \cdot \text{s}^{-1}]$
$U$	elektrický potenciál	$[\text{V}]$
$\dot{V}$	objemový průtok	$[\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}]$
$W$	testovací (váhová) funkce	$[-]$
$W_i$	tepelná kapacita i-tého proudu výměníku tepla	$[\text{W}]$
$x, y$	kartézské souřadnice	$[\text{m}]$
$x, r$	cylindrické souřadnice	$[\text{m}]$
$\alpha$	koeficient asymetrie testovacích funkcí (upwind)	$[-]$
$\alpha$	koeficient Ebert Panchalova modelu foulingu ropy	$[\text{m}^2 \cdot \text{K}/\text{J}]$
$\beta$	součinitel objemové roztažnosti ( $=1/(273.15+T)$ ) pro plyny)	$[\text{K}^{-1}]$
$\gamma$	smyková rychlost	$[\text{s}^{-1}]$
$\gamma$	koeficient Ebert Panchalova modelu foulingu ropy	$[\text{Pa} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{K}/\text{J}]$
$\varepsilon$	efektivita výměníku tepla	$[-]$
$\lambda$	tepelná vodivost	$[\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}]$
	ale též penalizační parametr	$[\text{Pa} \cdot \text{s}]$
$\mu$	dynamická viskozita,	$[\text{Pa} \cdot \text{s}]$
	ale též Poissonova konstanta	$[-]$
$\theta$	váhový koeficient časové diskretizace ( $=1$ implicitní, $=0$ explicitní metoda)	$[-]$
$\rho$	hustota	$[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$
$\psi$	proudová funkce	$[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$
$\omega$	vířivost	$[\text{s}^{-1}]$

## Použitá literatura

1. Bazeley G.P., Cheung Y.K., Irons B.M., Zienkiewicz O.C.: Triangular elements in bending – conforming and nonconforming solutions, Proc.Conf.Matrix method in Struct.Mech., Air Force Inst. of Tech., Wright Patterson A.F.Base, Ohio, Oct. 1965
2. Bell K.: A refined triangular plate bending element, Int.J.Num.Meth.in Eng., Vol.1, (1969), pp.101-122
3. Bird R.B., Stewart W.E., Lightfoot E.N.: Přenosové jevy, Academia Praha 1968
4. Champion-Renson A., Crochet M.J.: On the stream function-vorticity finite element solutions of Navier-Stokes equations, Int.J.Num.Meth.in Engng, Vol.12, (1978), pp. 1809-1818
5. Churchill S.W.: Friction factor equation spans all fluid-flow regimes. Chem.Eng. 84, No.5, 91 (1977)
6. Ebert W., Panchal C.B.: Analysis of Exxon crude-oil, slip-stream coking data, Engineering Foundation Conference on Fouling mitigation of heat Exchangers, California, 18-23 June 1955
7. Fortran PowerStation Programmer's Guide, Microsoft Corporation 1995
8. Gresho P.M., Sani R.L.: Incompressible Flow and the Finite Element Method, J.Wiley&Sons, Chichester, 2000
9. Hood P.: Frontal solution program for unsymmetric matrices, Int.Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol.10, (1976), pp.379-399
10. Hughes T.J.R., Brooks A.: A multi-dimensional upwind scheme with no crosswind diffusion, In: Finite Element Methods for Convection Dominated Flows, AMD, Vol.34, (1979), pp.19-36
11. Huyakorn P.S. et al.: A comparison of various mixed-interpolation finite elements in the velocity-pressure formulation of the navie-Stokes equations, Computer and Fluids, Vol.6, (1978), pp.25-35
12. Kawahara M. et al: Steady and unsteady finite element analysis of incompressible viscous fluid, Int.Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol.10, (1976), pp.437-456
13. Krupka V., Schneider P.: Stavba chemických zařízení I, VUT Brno 1986
14. Lewis R.W., Morgan K., Thomas H.R., Seetharamu K.N.: The finite element method in heat transfer analysis, J.Wiley&Sons,Chichester, 1996
15. Martin H.: A theoretical approach to predict the performance of chevron-type plate heat exchangers, Chem. Eng. Process, 35 (1996), pp.301-310
16. Polley G.T. et al: Evaluation of laboratory crude oil treshold fouling data for application to refinery pre-heat trains, Appl. Thermal Eng., 22 (2002), pp.777-788
17. Schneider P., Vykutíl J.: Stavba chemických zařízení II, VUT Brno 1990
18. Steffe J.F.: Rheological methods in food process engineering, Freeman press, East Lansing, 1996
19. Thýn J. et al: Analysis and diagnostics of industrial processes by radiotracers and radioisotope sealed sources, CTU Prague 2000
20. Wang L., Sundén B.: Optimal design of plate heat exchangers with and without pressure drop specification, Appl. Thermal Eng., 23 (2003), pp.295-311
21. Zelinka I.: Umělá inteligence v problémech globální optimalizace, BEN, Praha 2002.
22. Zienkiewicz O.C., Taylor R.L.: The Finite Element Method, 5-th edition, Butterworth Heinemann, Oxford, 2000
23. Zienkiewicz O.C.: Metod konečných elementov, MIR Moskva, 1975, překlad z The Finite Element Method in Engineering Science, McGraw-Hill, London, 1971.

24. Žitný R., Šesták J., Tsiapouris A., Linke L.: Thermal pressure forming of a starch based materials - A simplified thermodynamic model, 12<sup>th</sup> IHTC Grenoble 2002
25. Žitný R.: Knihovna VTV podprogramů, část II. MKPF-metoda konečných prvků pro jedno a dvoudimensionální problémy, 16.sdělení, ČVUT FS Praha 1980
26. Žitný R.: Knihovna VTV podprogramů, část IV. MKPF-metoda konečných prvků pro jedno a dvoudimensionální problémy, 17.sdělení, ČVUT FS Praha 1980
27. Žitný R.: MINIPF.LIB, interní zpráva, ČVUT FS Praha, 2002

## 1. Úvod

Program FEMINA vznikl jako malý<sup>1</sup> vývojový nástroj pro testování nových algoritmů a výuku metody konečných prvků (FEM) se zvláštním zřetelem na analýzy různých variant výpočtu proudění, teplotních polí a rozložení dob prodlení v průtočných aparátech.

Obecně vzato má FEMINA sloužit k popisu systémů matematickými modely a především k jejich identifikaci, čímž máme na mysli stanovení optimálních parametrů zvoleného modelu, nebo to, jak vybrat nejvhodnější model z několika příbuzných variant. Pod pojmem systém se ve FEMINĚ rozumí pružné těleso, potrubní síť, aparát apod. Takový systém (uvažujme speciálně průtočný systém) lze popsat v zásadě třemi způsoby:

- 1) *Algebraickým modelem*, což je funkce, definující nějakou charakteristiku, např. rozložení dob prodlení průtočného systému. Tato informace o systému stačí např. k tomu, aby bylo možné spočítat konverzi reakcí prvního řádu v chemickém reaktoru.
- 2) *Diskrétním modelem*, který nahrazuje reálný systém soustavou elementárních průtočných jednotek, což je buď ideálně míchaná nádoba nebo zona pístového toku. Z matematického hlediska je popis systému tvořen soustavou obyčejných diferenciálních rovnic pro časové průběhy koncentrací sledované složky v elementárních průtočných jednotkách. Parametry modelu jsou v tomto případě objemy elementárních jednotek a průtoky v proudcích, které tyto jednotky propojují. Modely tohoto typu lze využít např. pro přesnější stanovení konverze reaktoru, pro odhad velikosti stagnantních zón, zkratových toků, intenzity recirkulace apod.
- 3) *Modelem kontinua*, který každému bodu  $x,y,z$  a času  $t$  přiřazuje hodnoty rychlostí, tlaků, koncentrací, teplot apod. Modely tohoto typu vychází z parciálních diferenciálních rovnic transportu hmoty, hybnosti a tepla, doplněných řadou semiempirických vztahů. Modely kontinua jsou na rozdíl od předchozích prostorově lokalizované a tudíž umožňují predikovat lokální hodnoty klíčových veličin a posoudit vliv geometrie aparátů na jejich prostorovou distribuci.

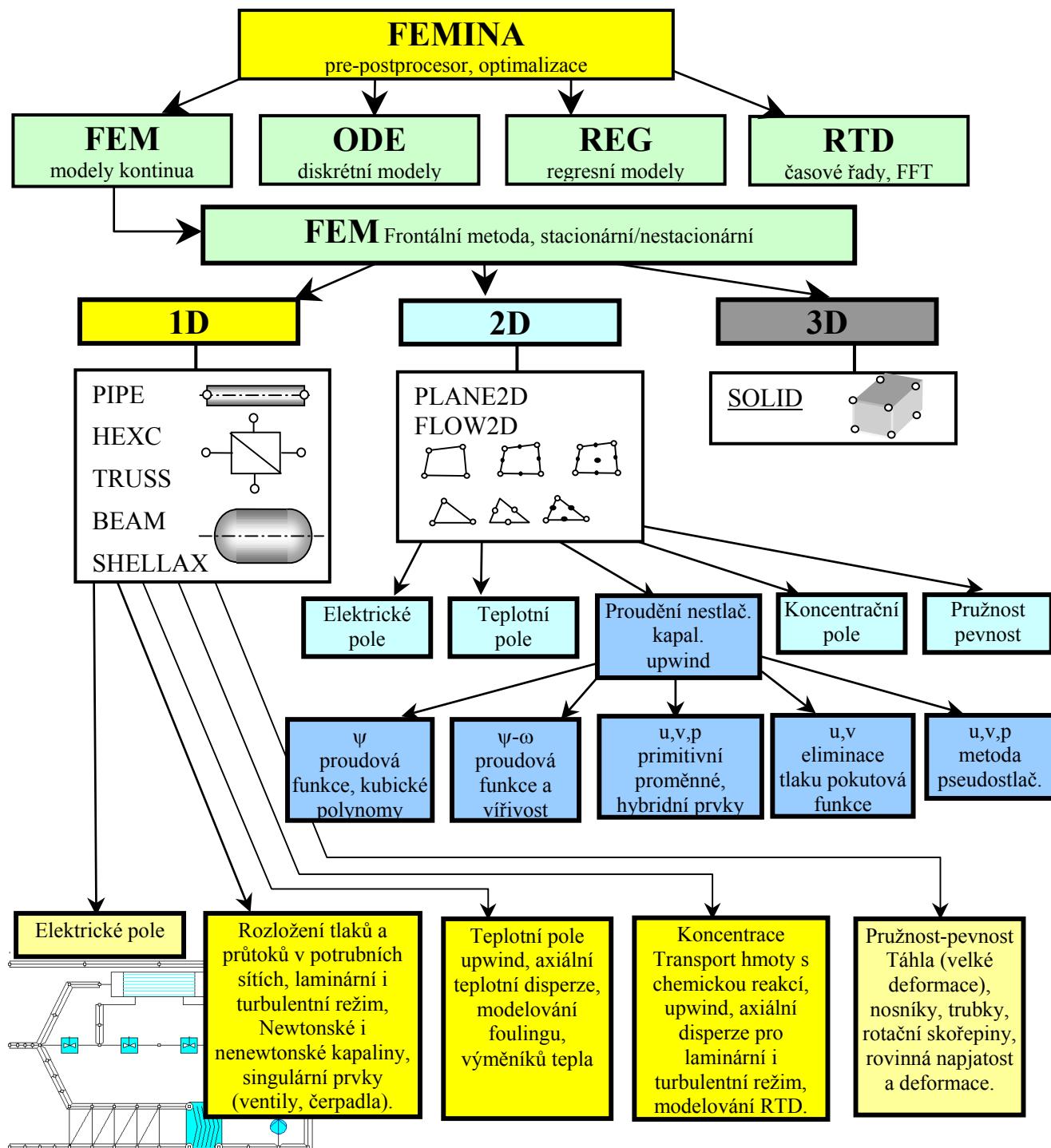
Algebraické modely se vyhodnocují nejjednodušeji, ale vzhledem k tomu, že zpravidla nejsou odvozovány z žádného základního fyzikálního principu, musí být nezbytně identifikovány z experimentů (ať již skutečných nebo numerických). Diskrétní modely se řeší též poměrně jednoduše např. integračními metodami Runge Kutta nebo integrálními transformacemi. Respektují alespoň základní princip zachování hmoty, ale ani to nestačí k jednoznačné identifikaci parametrů modelu a experimentální data jsou opět nezbytností. Transportní rovnice modelů kontinua se řeší numericky, zpravidla metodou kontrolních objemů, konečných nebo hraničních prvků. Protože je alespoň přibližně zachována bilance hmoty, hybnosti i energie, požadují tyto modely jen relativně málo dodatečných informací: Zpravidla je třeba jen zpřesnit na základě experimentálních dat okrajové podmínky (např. intenzitu turbulence na vstupu, součinitele přenosu tepla a hmoty), parametry modelů turbulence a parametry heuristických modelů mezifázového transportu.

FEMINA používá všechny tři výše uvedené typy matematických modelů. Algebraické modely jsou reprezentovány uživatelsky definovanými funkcemi nebo tabulkami, diskrétní modely (obyčejné diferenciální rovnice popisované jednoduchým jazykem v textových souborech) jsou řešeny metodami Runge Kutta a modely kontinua se řeší metodou konečných prvků (počítá se stacionární i nestacionární elektrické, teplotní, koncentrační a rychlostní pole v relativně jednoduchých jedno a dvou-dimenzionálních systémech, např. v potrubních sítích nebo rotačně symetrických aparátech). Důvodem, proč FEMINA zahrnuje všechny tři kategorie modelů je možnost identifikace parametrů jednodušších modelů na základě modelů složitějších, a např. algebraický model (nějaký empirický vztah) je možné identifikovat na základě experimentálních dat či diskrétních nebo konečněprvkových modelů. FEMINA totiž disponuje optimalizačními algoritmy (typu Marquardt Levenberg a

<sup>1</sup> Aktuální verze FEMINA má cca 22000 řádek textu zdrojového programu, a opírá se o knihovnu MINIPF.LIB jejíž délka je cca 9000 řádek programu (včetně komentářů). Velké programy jako je COSMOS nebo FLUENT mají více než 100000 řádků a jsou tedy zhruba o řád větší. Aplikace navazující na FEMINA mohou být ale docela krátké, např. nezávislý program pro výpočet teplotního pole uvedený má 45 řádek, což znamená, že je to práce maximálně na jeden den (včetně analýzy).

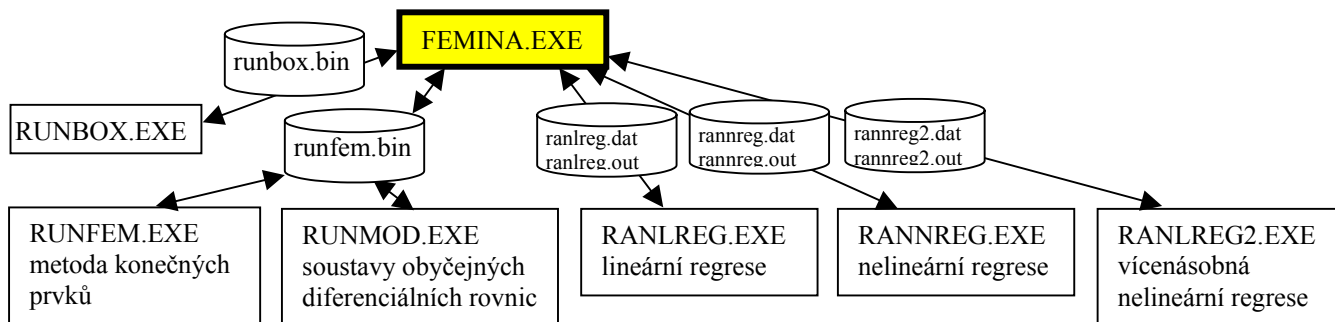
memetickým algoritmem SOMA), které umožňují vypočítat libovolné parametry libovolného modelu porovnáním s referenčními daty, přičemž referenční data lze získat buď přímo z experimentu nebo vyhodnocením řešení nějakého komplexnějšího matematického modelu. Tento referenční matematický model může, ale nemusí být řešen FEMINou, lze totiž využít výsledky CFD (Computer Fluid Dynamics) programů, např. rychlostního pole vypočteného programem Fluent nebo Cosmos – FEMINA v takovém případě hraje jen roli postprocesoru. Ani tato role však není zanedbatelná, protože optimalizace je založena na porovnávání predikce modelů při simulovaných experimentech typu vzruch – odezva (porovnávají se odezvy modelů na nástřik značkovací látky) a FEMINA tedy musí disponovat i algoritmy, které modelují chování přístrojů vyhodnocujících vypočtená rozložení koncentrací (např. chování kolimovaných detektorů záření).

Funkční struktura FEMINY se zvláštním zřetelem na modely kontinua je patrná z následujícího schématu





FEMINA je tvořena několika nezávislými programy: vlastní program FEMINA.EXE je především pre a postprocesor, zajišťující v omezené míře přípravu sítě, grafiku, import, export a interaktivní zpracování dat, a především optimalizaci zadávaných parametrů matematických modelů. Vlastní propočítání konkrétního modelu pro konkrétní parametry provádějí až programy, které FEMINA spouští a pro něž připravuje soubory vstupních dat:



Program FEMINA je psaný v Power Station Fortranu pro Windows (režim QuickWin), výpočtové programy jsou v režimu MS-DOS a plně přenositelné. Všechny programy využívají knihovnu MINIPF.LIB, v níž jsou procedury pro frontální metodu, generování sítě a grafiku (překlad i sestavení je zajištěno jediným příkazem `fl32 /MW /4Yb %1 /link minipf.lib`). Dokumentaci knihovny MINIPF zajišťuje program LIST.EXE, vypisující seznam procedur ZQUICK.TXT a stručný referenční manuál ZREFER.TXT. Překlad knihovnických podprogramů zajišťuje procedura FT.BAT, doplňování knihovny lze provádět programem `LIB minipf.lib novaproc.obj`, resp. `LIB /REMOVE:procedura.obj minipf.lib`. Aktuální verze programu, knihovny a dokumentace je přístupná na adrese

<http://www.fsid.cvut.cz/en/u218/public/default.htm#SOFTWARE>

Následující kapitoly se věnují ukázkám použití (kapitola 2 je něco jako rychlý úvod a přehled o možnostech programu FEMINA), kapitola 3 je stručný popis příkazů programů FEMINA (jakási quick reference). Kapitola 4 popisuje metody řešení diferenciálních rovnic přenosu tepla a hybnosti, použité pro konstrukci programu FEMINA.

V druhém dílu manuálu je uveden popis těch klíčových procedur knihovny MINIPF.LIB, které souvisí s metodou konečných prvků (generátory sítě, frontální metodu, bazové funkce,...) a grafikou (kreslení vrstevnic a grafů funkcí). Tato knihovna může být využita i pro implementaci vlastních algoritmů metody konečných prvků, zejména pro vývoj nových programů, které by byly volány z programů FEMINA. Třetí díl manuálu popisuje některé implementační detaily, použité datové struktury a především obsahuje aktuální výpis programu FEMINA.

## 2. Příklady formulace a řešení problémů v programech FEMINA

Programy FEMINA, používající tři typy matematických modelů, mají v podstatě tři odpovídající typy uživatelů a každý z nich vidí FEMINU jako trochu jiný program, i když způsob ovládní a prezentace výsledků je stejný:

- Nejjednodušší to má skupina uživatelů, která chápe FEMINU jen jako regresní program. Stačí vědět pouze to, v jakém tvaru je třeba připravit soubor dat (vlastně tabulku hodnot nezávisle a závisle proměnných s odpovídajícími odhady rozptylu naměřených dat) a naučit se dva příkazy FEMINY: pro přečtení souboru zpracovávaných dat (READ) a pro spuštění regresního programu (NELREG).
- Druhá skupina uživatelů jsou ti, kteří zpracovávají experimenty typu vzruch-odezva, analyzují rozložení dob prodlení a hledají přiměřený model (zpravidla diskrétní model), který by jejich data věrohodně popsal. Při řešení těchto problémů není nutné vědět vůbec nic o metodě konečných prvků, je třeba se jen naučit cca 20 základních příkazů a vědět, které základní modely jsou k dispozici, eventuálně jakým způsobem modifikovat modely existující nebo jak vytvořit modely úplně nové. Tento režim práce zahrnuje následující etapy zpracování
  - Načtení experimentálních dat časových průběhů vzruchových a odezvových funkcí (READ).
  - Zpracování těchto „surových“ dat, za nímž se skrývají různé korekce, např. extrapolace nebo vhodná aproximace chvostu (TAIL), korekce na poločas rozpadu (TCF), odstranění vlivu zvedajícího se pozadí (TCBCGR) a uventuální „ruční“ korekce, např. lokální vyhlazení křivek, šumové filtry (FFT) a normalizace (NORM). Dále je třeba vypočítat základní integrální charakteristiky odezev, tj. momenty (MOM).
  - V případě, že je již k dispozici vzruchová funkce a odpovídající odezva, počítá se impulsní odezva systému aplikací rychlé Fourierovy transformace FFT (regularizovaná dekonvoluce). FFT je ovšem možné použít i pro stanovení korelačních funkcí a výkonových spektrálních hustot zpracovávaných signálů.
  - Výběr vhodného diskrétního modelu systému, který je reprezentován soustavou obyčejných diferenciálních rovnic pro časové průběhy koncentrací a jeho načtení do FEMINY (to je jediný příkaz RMODEL) – součástí popisu modelu je i specifikace parametrů, jejich přípustného rozmezí a implicitní hodnoty. Všechny tyto údaje lze modifikovat (PARSET,PARLIM) a hodnoty vybraných parametrů (PARFIT) lze optimalizovat některým ze dvou algoritmů (OPTIMA nebo SOMA).
- Třetí skupina uživatelů vnímá FEMINU jen jako konečněprvkový program, který je trochu podobný podstatně rozsáhlejšímu programu COSMOS z hlediska cílů (řešených aplikací) i způsobu ovládní. Zvládnutí této části FEMINY je náročnější, protože je třeba se naučit alespoň 50 základních příkazů, názvy použitých konečných prvků (PIPE2D, PLANE2D, FLOW2D,...), názvy počítaných stupňů volnosti (TEMP, PRES, UX, UY, ...), názvy alepoň těch nejdůležitějších parametrů elementů (ETau, ESxx - napětí, ERe - Reynolds, ENa - síly, ...) a názvy proměnných, které se používají při interaktivní definici interpretovaných funkcí (XX, YY, TIME). Zpracování konečněprvkového modelu zahrnuje tyto etapy:
  - Vytvoření geometrického modelu. Definice oblasti řešení prostřednictvím entit BOD (PT), KŘIVKA (CR), PLOCHA (SF), OBJEM (VL). Základem je bod, neboť všechny nadřazené entity jsou definovány výčtem bodů, a tudíž změna souřadnic bodu se automaticky promítne do změny geometrie křivek a ploch (a to je zásadní rozdíl proti COSMOSu).
  - Vytvoření konečněprvkového modelu. V této etapě se specifikovaná oblast geometrického modelu pokrývá konečnými elementy (EL) a uzlovými body (ND), které elementy spojují.

Každý vytvořený element je definován výčtem uzlů určujících jeho geometrii (matice konektivity) a dále je mu přiřazena skupina parametrů EGROUP (upřesnění algoritmu), skupina MPROP (materiálové vlastnosti) a RCONST (další charakteristiky elementu, které nelze odvodit jen ze souřadnic uzlů). Každému uzlu je kromě souřadnic  $x,y,z$  přiřazeno několik parametrů DOF (Degree Of Freedom – stupňů volnosti), které jsou cílem výpočtu, např. teploty, tlaky, rychlosti, posunutí. To, které DOF budou vytvářeným uzlům přidělovány, je dáno zvoleným typem analýzy.

- Zadání počátečních a okrajových podmínek či zatížení. V libovolném uzlu je možné „zafixovat“ libovolný uzlový parametr (to je pak silná okrajová podmínka) nebo jen nastavit jeho výchozí hodnotu, která se bude během výpočtu měnit (počáteční podmínky). Stejně tak je možné libovolnému uzlovému parametru přiřadit odpovídající zatížení nebo obecněji řečeno zdrojový člen, např. teplotě přiřadit bodový zdroj tepla, posunu ve směru  $x$  osamělou sílu ve směru  $x$  atd. Nastavované hodnoty uzlových parametrů nemusí být konstanty, ale mohou to být funkce času, teploty či souřadnic, a tyto funkce lze definovat buď výrazem nebo tabulkou funkčních hodnot.
- Výpočet vybraných uzlových parametrů (teplot, rychlostí, tlaků, koncentrací) řešením parciálních diferenciálních rovnic, které popisují zvolený problém (může být stacionární i nestacionární). Převod diferenciálních rovnic na soustavu algebraických rovnic pro uzlové parametry je založen na metodě vážených residuí a sestavení i řešení této soustavy rovnic se provádí tzv. frontální metodou.
- Postprocessing probíhá většinou automaticky hned po vyřešení soustavy rovnic a spočívá ve výpočtu veličin odvozených z uzlových parametrů (např. stanovení hodnot napětí v elementech z vypočtených posuvů v uzlových bodech, nebo rychlostí v uzlech z vypočtených hodnot proudové funkce a jejích derivací).
- Grafické a číselné výstupy. Zobrazení vrstevnic odpovídajících zvolenému uzlovému parametru nebo parametru elementu. Vykreslení časových průběhů libovolného uzlového parametru v libovolných uzlech. Operativní výstupy parametrů přímo na displeji.
- Import a export dat. Vstupní data (popis geometrického modelu i konečněprvkového modelu) i výsledky výpočtu je možné zapsat do textových souborů, celou databázi je možné uložit a zase načíst i v binárním tvaru. Při běhu programu se vytváří protokol zadávaných příkazů, které se ukládají do souborů (session-file), jež lze později znovu načíst a řádek po řádku interpretovat. Součástí těchto souborů mohou být i pokyny k řízení výpočtu (cykly, příkazy skoku, podmíněné příkazy), které se jinak v manuálním režimu provádět nemohou. Takto připravený soubor může představovat parametrický popis určitého problému, jehož řešení lze snadno opakovat pro různé hodnoty vstupních parametrů (a hledat tak např. optimální řešení minimalizující odchylku mezi predikcí modelu a experimentálními daty).

Předpokládáme, že během dalšího vývoje FEMINy se vytvoří ještě čtvrtá skupina uživatelů, která bude zaměřena na zpracování a verifikaci výsledků CFD programů jako je Fluent, Cosmos, CFX a dalších. Tady je kladen akcent spíše jen na co nejpřesnější řešení nestacionárního transportu hmoty, jako základního nástroje pro verifikaci výsledků CFD programů. To totiž spočívá v porovnání hodnot snímaných skupinou detektorů s predikcí numerické simulace experimentu, které provede FEMINA na základě importovaných výsledků CFD programů.

## 2.1. Ovládání programů

Programy FEMINA jsou ovládány příkazy, některé jsou k dispozici i jako dialogová okénka z menu. Příkazy se píšou do řídicího okna CONTROL a mají jednoduchou strukturu

*klíčové slovo seznam parametrů, oddělovaných mezerami nebo čárkami, ukončený event.středníkem;*

Klíčové slovo je na 6 znaků (přesněji, rozlišuje se 6 prvních znaků), přičemž se používají i synonyma, např. *MPL* je totéž jako *MPLIST* (výpis materiálových parametrů). Maximální počet parametrů příkazu je 20 a každý parametr se zpracovává jako výraz nebo krátký program, což znamená, že se v něm mohou vyskytnout číselné konstanty i předdefinované proměnné. Často je ovšem třeba jen specifikovat určitou veličinu (stupeň volnosti, parametr elementu, typ elementu): tento výběr lze provést napsáním indexu této veličiny (1-teplota, 2-posun ve směru x, atd), nebo přímo napsáním jména proměnné

*TEMP /teplota/, UX,UY,UZ /posuvy/, RX,RY,RZ /rotace/, VOLT /napětí/, VX,VY,VZ /rychlosti/, PRES /tlak/, OMG /vířivost/, PS,PSX,PSY,PSXX,PSYY,PSXY /proudová funkce a její derivace/, CA,CN,CD /koncentrace/, KT /kinetická energie turbulence/, EPS /dissipace kinetické energie/.*

Hodnotám těchto proměnných jsou totiž před zpracováním příkazu přiřazeny odpovídající indexy, takže je lhostejné zda napíšeme např.

*NFCR 17,TEMP* nebo *NFCR 17,1* (čti jako Nodal degree of Freedom on CuRve 17 for TEMPerature).

Zpracování příkazové řádky začíná identifikací klíčového slova. Pokud toto slovo není na seznamu, pokouší se FEMINA interpretovat text řádku jako program dle syntaxe, jejíž popis je uveden u knihovních procedur MINIPF.LIB pro překlad a interpretaci výrazů a programů. Můžeme tedy napsat jako příkaz např.

*FOR I=1,4 DO DISP VI(I)*

který v cyklu od 1 do 4 zobrazí hodnoty vektoru *VI(I)*. Proměnná *I* i vektor *VI(\*)* jsou předdefinované (úplný popis viz. kap.2), zde jen krátce: jako jednoduché pracovní proměnné jsou k dispozici všechna písmena abecedy *A,B,...Z*, proměnné *NPT, ND, NE* udávají počet bodů, uzlů, elementů, *DT* časový krok atd. Vektory *HH(\*)*, *DD(\*)* obsahují charakteristické rozměry (*H,D*) pro elementy určité skupiny, a podobně *KX(\*)*, *CP(\*)*, *DENS(\*)*, *EX(\*)*, *VISC(\*)* materiálové parametry (vodivost, tepelnou kapacitu, hustotu, modul pružnosti, viskozitu) zvolené skupiny elementů. Protože program může být i přiřazovací příkaz, lze hodnoty všech těchto proměnných snadno měnit, a např.

*KX(1)=0.6*

nastaví hodnotu tepelné vodivosti skupiny materiálových parametrů číslo 1 (aby ale nedošlo k mýlce, napíšeme-li např. *KX(1)=0.6+0.001\*TEMP*, nebude tím definována funkční závislost vodivosti na teplotě, protože výraz na pravé straně se vyčíslí pro aktuální hodnotu proměnné *TEMP* a s touto konstantní hodnotou pak proběhne výpočet – teplotní závislost je třeba definovat explicitně příkazem *MPROP*). Proměnné *A,B,...,Z* lze použít i pro parametrizaci programu např. při definici geometrie. Přiřazení hodnoty se dá provést současně se zadáním hodnoty parametru. Např. *PT 1,X=0.2,Y=0.5* definuje bod číslo 1 se souřadnicemi 0.2,0.5, které jsou ale přiřazeny proměnným *X,Y* a ty lze použít v následujících příkazech, např. *PT 2,X+3,Y*.

Podobně jako u programu COSMOS není nutné zadávat všechny parametry na příkazovém řádku a stačí napsat jen klíčové slovo. Další parametry se pak zadávají v režimu řízeného dialogu. Pokud je navíc za posledním parametrem v příkazovém řádku uveden *středník*, dialog doplňování chybějících parametrů neproběhne a dosadí se implicitní hodnoty.

Interpret příkazů umožňuje spouštění jakýchkoliv cizích programů (EXE) *příkazem RUN prog.EXE*. Libovolný problém lze tedy napsat jako nezávislý program, zpracovávající data exportovaná příkazem *WRITEB* (kompletní zápis zóny dat do souboru *problem.BIN* v binárním tvaru).

Poněkud odlišně se zpracovávají příkazy, které využívají myš jako lokátor. Je to např. příkaz pro definici vztažného bodu *PT*, kde jsou dvě možné varianty: buď se na příkazovém řádku napíše všechny tři parametry (*PT index,x,y*) a žádný dialog ani aktivace myši neproběhne, nebo se napíše jen index a pak je aktivován lokátor (šipka) potvrzovaný levým tlačítkem myši. Tímto způsobem lze „naklikat“ libovolný počet bodů – zadávací sekvence končí stisknutím pravého tlačítka myši. Podobným způsobem funguje identifikace uzlového nebo vztažného bodu *NIDENT*, *PIDENT*, elementu *EIDENT*, křivky *CIDENT*, atd (příkazy bez parametrů, kdy okamžitě dochází k aktivaci grafického okna a lokátoru; prohlížení končí opět stisknutím pravého tlačítka myši).

Programy FEMINA fungují (někdy) pod operačními systémy Windows 95,98,2000. Po spuštění se zobrazí následující okna ovládaná standardním způsobem (vždy jen jedno okno je aktivní, což je indikováno fialovou horní lištou, okna aktivujeme kliknutím na lištu nebo do plochy okna):

**MODEL** – znázornění sítě, v tomto okně je možné definovat vztažné body myši.

Stavový řádek aktuálních hodnot: Počty bodů (PT), křivek (CR), ploch (SF), elementů (NE), uzlů (ND), indexy definovaných funkcí (F) nebo tabulek (T), počet skupin EGROU,RC,MPROP, čas a stupně volnosti DOF definované v uzlech (ne všechny musí být počítané).

**LIST**: Výpisy aktivované příkazy FUNLIST, PTLIST, Pohyb v okně příkazy U n (nahoru) D n (dolů), resp. PU, DU (o stránku PageUp/Down)

**VIEW**-zobrazení výsledků, nebo funkcí

**CONSOLE**: sem se píše příkazy. Všechny napsané příkazy se ukládají do souboru s příponou SES. První příkaz je jméno problému, poslední příkaz EXIT.

Informace o tom, jaká činnost operátora programu se očekává (teď např. napsání textu do okénka CONSOLE).

**HELP**. Tady najdete jen seznam jmen příkazů a předdefinovaných proměnných. Při zadání neznámého příkazu nabízí podobné (a správné) varianty.

Po tomto úvodu je možné odstartovat program FEMINA.EXE a vyzkoušet některé následující příklady. V těchto příkladech se nepoužívají předpřipravená makra a uvádí se úplný text příkazů. Makra (např. REGRES pro regresi dat, RTD pro typický postup zpracování impulsní odezvy), či dokonce zcela připravené dávkové úlohy (THOLE3.geo, STEPUPV.geo, OHMIC.geo, ...) je ovšem možné vyzkoušet také. U maker stačí napsat místo příkazu jméno makra, dávková úloha se spouští příkazem FILE *jméno* (nebo jen F *jméno*).

## 2.2. TEPLITNÍ POLE – kondukcce

Příklad je ukázkou výpočtu stacionárního i nestacionárního teplotního pole metodou konečných prvků, způsobu zadávání počátečních i okrajových podmínek funkčním předpisem a iteračního řešení nelineárního problému. Bude použita jednoduchá geometrie vícenásobně souvislé oblasti - čtvercová deska s kruhovým výřezem. V každém uzlu je využíván jediný stupeň volnosti TEMP.

Použité operace:

SCALE  $xmin, xmax, ymin, ymax$  jak nastavit rozsahy os X,Y

PT  $i, x, y$  definice vztažných bodů ( $i$ =index bodu) geometrického modelu (použití myši)

CIRCLE  $i, bod\ ve\ středu, bod\ na\ obvodě, počet\ segmentů$  kružnice zadaná dvěma body (a tvořená minimálně 4 segmenty – parabolickými křivkami)

SF8FP  $i, i1, i2, \dots, i8$  definice plochy 8-mi body (první čtyři body v rozích zakřiveného čtyřúhelníku)

Poznámka: Seznam vytvořených entit (bodů křivek, ploch, uzlů, elementů,...) je možné vypsát na displeji příkazy, které končí na LIST, např. PTLIST, CRLIST, SFLIST pro body, křivky resp. plochy.

MSF *index plochy,  $N_x, N_y, L_x, L_y$ , počet uzlů*

generování konečných elementů, které pokrývají specifikovanou plochu. Každý vytvářený element bude stejného typu (bude mít stejné číslo skupiny materiálových vlastností MPROP, skupiny reálných konstant RCONST i skupiny EGROUPO upřesňující algoritmus výpočtu matic elementů). Počet uzlů elementu určuje i topologii elementu: např. 3 a 6 jsou trojúhelníky (se třemi, resp. šesti uzly), 4 a 8 čtyřúhelníkové elementy. Záporná hodnota indikuje uzel v těžišti elementu, např. -4 znamená čtyřuzlový trojúhelníkový element se třemi uzly ve vrcholech a čtvrtým v těžišti. Parametry  $N_x, N_y$  určují na kolik úseků budou děleny dvě přilehlé strany čtyřúhelníkové plochy a  $L_x, L_y$  určují nerovnoměrnost dělení těchto stran. Kladná hodnota udává poměr délky posledního a prvního úseku (tj.  $L_x=1$  rovnoměrné dělení,  $L_x<1$  zhuštění elementů směrem ke konci strany). Orientace strany, tj. určení toho co je míněno pod pojmem začátek a konec, je zobrazeno graficky symbolem kosočtverce poblíž počátku. Záporná hodnota  $L_x$  je pokynem k tomu, aby byly generovány elementy s délkou stran symetricky se zhušťujících směrem ke krajům ( $L_x<-1$ ) nebo ke středu ( $-1<L_x<0$ ) křivky.

NMERGE

operace, která ztotožní uzly, které by měly stejné (nebo téměř stejné) souřadnice  $x, y, z$ . Tyto uzly vznikají obvykle na rozhraní dvou ploch nebo křivek (po operacích MSF nebo MCR). Operací NMERGE se počet uzlů zmenší a uzly se nově přečíslojí. Za totožné se považují uzly, jejichž vzdálenost je menší než TOL (tuto hodnotu lze zadat přiřazovacím příkazem, např. TOL=0.001) Kromě tohoto hlavního cíle operace NMERGE se zjistí konektivita mezi geometrickými body a uzly – každému bodu se přiřadí nejbližší uzel. To má význam např. při specifikaci parametrů uzlu prostřednictvím bodu (tím, že je např. určen vztažný bod geometrického modelu, ve kterém má být fixována teplota a ne přímo uzel) nebo pro operaci METER (analogový ukazatel hodnoty).

NFCR *index křivky, název parametru, typ parametru,  $P1, P2, P3$*

zadání hodnot okrajových podmínek nebo zatížení v uzlech, ležících na specifikované křivce. *Název parametru* je např. TEMP-teplota, PRES-tlak, atd. *Typ parametru (status)* je celé číslo v intervalu -10 až 50: záporná hodnota označuje silnou okrajovou podmínku (přímo zadanou hodnotu parametru), nula volný a tedy počítaný parametr, zatímco kladná hodnota indikuje zatížení nebo zdrojový člen lokalizovaný v příslušném uzlu. Toto číslo (status parametru) je

zároveň index uživatelsky definované funkce času, souřadnic nebo teploty, která umožňuje zadání měnících se okrajových podmínek nebo proměnných zatížení – touto funkcí se násobí hodnota parametru zadávaná příkazem NFCR, což je naprosto stejný postup jako u programu COSMOS/M<sup>2</sup>. Pokud příslušná funkce není definovaná, uvažuje se rovna jedné, a výpočet pak probíhá přímo se zadanými konstantními hodnotami  $P1, P2, P3$ , což jsou hodnoty parametru ve vztazných bodech křivky (dva krajní body a bod uprostřed) – tyto tři hodnoty definují kvadratický interpolační polynom, pokud jsou stejné, zadává se ve všech uzlech konstanta.

**FUNDEF** *index funkce,  $f(XX, YY, TIME, TEMP, DP, RE, DE, HE, \dots)$*

Takto se definuje funkce jako algebraický výraz (s běžnými operátory + - \* / \*\*, závorkami ( ) a funkcemi, sin, cos, abs, exp, log, ...). Jako proměnné jsou předdefinována jména  $XX, YY$  – souřadnice,  $TIME$  – čas,  $TEMP$  – teplota a řada dalších, zpravidla méně důležitých veličin. Index funkce je ve stejném rozsahu jako typ zadávaných uzlových parametrů tj. od -10 do 50. Tyto funkce je možné použít např. v příkazech NFCR (viz výše) nebo MPROP (viz dále). Někdy se požadovaný průběh nedá dost dobře vystihnout jedním algebraickým výrazem a pak je možné použít tabulku hodnot v níž se interpoluje, viz. operace CURDEF. Pak ale zase není možné definovat funkční závislost pro více proměnných současně, např. současně pro  $XX$  i  $YY$ .

**MPROP** *index skupiny materiálových parametrů, typ elementu,  $p1, f1, p2, f2, \dots$*

Materiálové vlastnosti skupiny elementů. FEMINA uvažuje celkem 11 parametrů  $p1$  až  $p11$ : tepelnou vodivost, tepelnou kapacitu, hustotu, elektrickou vodivost, modul pružnosti, Poissonovu konstantu, viskozitu, teplotní objemovou roztažnost, difuzní součinitel, aktivační energii, frekvenční faktor pro popis kinetiky jedné chemické reakce a některé další. Ne všechny tyto materiálové parametry jsou potřebné pro každý typ elementu (např. pro element PLANE2D – deska, nemá význam viskozita), proto se jako parametr příkazu zadává i typ elementu (PIPE2D, PLANE2D, FLOW2D, HEXC, ...) a v dialogu se pak uvádějí jen relevantní parametry. Každému materiálovému parametru je přiřazen index funkce  $f1, f2, \dots$  - pokud je tento index nenulový a pokud je příslušná funkce definována, násobí se jí zadávaná hodnota parametru. Takto se definuje především teplotní závislost materiálových parametrů (ale třeba i závislost viskozity na druhém invariantu rychlosti deformace).

**RCONST** *index skupiny reálných konstant, typ elementu,  $p1, p2, \dots$*

Reálné parametry elementů, které se nedají odvodit jen ze souřadnic uzlových bodů, např. tloušťka desky, průměr trubky, součinitel přestupu tepla, apod.

**EGROUP** *index skupiny elementů, typ elementu,  $i1, i2, \dots$*

Celočíselné parametry elementů, které zpravidla blíže specifikují algoritmus výpočtu lokálních matic elementů. Předávají např. informaci o tom, zda se má počítat matice tepelných kapacit, potřebná pro výpočet nestacionárního teplotního pole, zda se má uvažovat kartézský či cylindrický souřadný systém, či jakým způsobem se mají počítat integrály (počet bodů Gaussovy numerické integrace). Pro elementy, které popisují kapalinu (např. FLOW2D) se specifikuje použitá metoda řešení Navierových Stokesových rovnic. Pro elementy PIPE je možné jako parametr EGROUP zadat index funkce popisující hydraulickou charakteristiku a modelovat tím např. čerpadlo s předepsanou závislostí mezi průtokem a tlakovou diferencí. U většiny typů elementů se jako parametr EGROUP zadává i index funkce, definující vnitřní (objemový) zdroj tepla.

---

<sup>2</sup> Je-li  $-10 \leq status \leq 10$  volá se transformační funkce  $f_{status}(x, y, t, T)$ , kterou se násobí zadávané hodnoty DOF. Ty se pak přenesou do zony vstupních dat řešiče, který je interpretuje buď jako silné okrajové podmínky ( $status < 0$ ), nebo zatížení ( $status > 0$ ). Pokud je  $status > 10$  zóna vstupních dat řešiče se vynuluje a význam zadávaného DOF (pokud je vůbec zadáván) závisí na kontextu. Např. hodnoty  $status > 20$  označují uzel, v němž je pro příslušný DOF předepsána okrajová podmínka třetího druhu (a zadávaná hodnota DOF se pak interpretuje jako součinitel přestupu tepla).

SOLVE *t0, počet časových kroků,  $\Delta t$ , append, iter-electric, iter-flow, iter-thermal, iter-conc, iter-stress*

Spuštění externího programu (RUNFEM.EXE), který přečte aktuální databázi a v každém časovém kroku provede výpočet elektrického, proudového, teplotního, koncentračního nebo deformačního pole (v tomto pořadí). Pro každý z uvedených typů analýzy se specifikuje maximální počet iterací v jednom časovém kroku - pokud zadáme nulový počet iterací příslušná analýza se přeskočí. Počet iterací by měl být větší než 1 v případě nelineárních a nestacionárních problémů, kdy je třeba na každé hladině času iterovat. Pokud je však cílem získat jen stacionární řešení a nezáleží nám na přesnosti výsledků v jednotlivých časových krocích, je možné zadat počet iterací 1. Každý časový krok pak představuje jeden krok iterační s tím rozdílem, že velikost časového kroku hraje roli podrelaxačního faktoru – tím je možné ovlivnit konvergenci iteračního procesu (podrelaxační faktor lze ovšem zadat i explicitně RELFAKT=..., jeho implicitní hodnota je 1). Výsledky jednotlivých časových kroků jsou ukládány do souboru s příponou OUT, kde je lze prohlížet libovolným textovým procesorem. Po ukončení programu RUNFEM a návratu do FEMINY je databáze aktualizována a výsledky řešení lze zobrazovat v grafické formě nebo jako tabulky:

GRAPH *jméno parametru, zona parametrů* Znárodnění vrstevnic specifikovaného parametru na základě aktuálních hodnot v databázi. Zona parametrů je 1 až 4: V zoně 2 jsou aktuální výsledky řešení, v zoně 3 počáteční podmínky, v zoně 4 hodnoty z předchozí iterace. V zoně 1 jsou jen zadávané okrajové podmínky, což pro kreslení nemá valný význam.

GRATIM *jméno parametru* Zobrazení časových průběhů parametru v uzlech vybraných myší. Protože výsledky z předchozích časových kroků nejsou v databázi, využívá se soubor OUT. „Vytažené“ hodnoty časových průběhů se ukládají do tzv. matice bodů pozorování, kde je lze dále zpracovávat nebo prostě jen exportovat do souboru (viz. dále).

NID Identifikace uzlu myší a zobrazení aktuálních hodnot parametrů tohoto uzlu.

IC *číslo křivky, číslo funkce* integrál zvolené funkce podél křivky (integruje se numericky na NINT bodů, výsledek je v proměnné INTEGRAL)

IS *číslo plochy, číslo funkce* integrál zvolené funkce na ploše (podobná operace jako IC).

EXIT Ukončení programu FEMINA.

Program vždy začíná zadáním jména problému (např. THOLE3), které se stane i jménem vytvářených souborů, konkrétně THOLE3.SES (kopie příkazů), THOLE3.DBG (kopie výpisů posílaných na displej, např. výpis uzlů), THOLE3.OUT (výsledky numerického řešení v uzlových bodech, např. vypočtené teploty), THOLE3.TEP (parametry elementů, výsledky postprocessingu). Následující příkazy je možné opisovat do příkazového řádku tak jak jsou napsány ve vzorovém textu, ale zvláště u příkazů, které mají mnoho parametrů je výhodnější napsat jen klíčové slovo (např. CIRCLE), potvrdit Enter a parametry příkazu zadávat dialogově. Je možné používat i dialogová okénka z menu na horní liště programu FEMINA.

Sekvence příkazů bývá u všech konečněprvkových problémů stejná: nejprve se definují vztažné body (Points), a jejich prostřednictvím křivky CR a plochy SF. Poté se na křivkách a plochách vygeneruje síť konečných elementů a uzlových bodů (příkazy MSF nebo MCR). Ve vybraných uzlech se předepíše okrajové podmínky (příkazy NFCR, FPT, ...). Vždy je třeba uvést definice materiálových vlastností a dalších charakteristik elementů (příkazy MPROP, RCONST, EGROUPE), ale je lhostejné zda na začátku či na konci specifikace problému. Ať již jde o jakýkoliv problém (teplotní pole, proudění, potrubní síť, pružnostní analýza...) řešení se spouští vždy příkazem SOLVE s parametry, které určují počty časových kroků a iterací. Pro zajištění kompatibility s předchozími verzemi FEMINY jsou synonymem klíčového slova SOLVE i např. slova TRANEQ, PIPE, THERMAL,...



```
ANALYS 2;
EGROUP 1, PLANE2D, 0, 4, 0, 0;
```

EGROUP Skupina elementů č.1 bude tvořena elementy PLANE2D (deska). Dle následujících údajů se řídí procedura výpočtu lokálních matic. 0-stacionární řešení, 4 = čtyřbodová Gaussova integrace (přípustné hodnoty pro trojúhelníkové elementy 1,3,4,7, pro čtyřúhelníky 1,2,3), 0-rovninná úloha (1=osová symetrie).

```
MPROP 1, PLANE2D, .6, 0, 4200, 0, 998, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0;
```

MPROP Skupina materiálových vlastností č.1, potřebných pro specifikaci elementu typu PLANE2D: Kx- tepelná vodivost, číslo transformace Kx (0-žádná), cp, transformace cp, ρ, transformace ρ. Eventuální transformace by umožnily definovat vlastnosti závislé na T,t,x,y,...

```
RCONST 1, PLANE2D, 1, 0, 0, 0;
```

RCONS podobně pro reálné konstanty (1= znamená tloušťku desky)

```
SCALE -0.1, 1.1, -0.1, 1.1;
```

```
PT 1, 0, 0;
```

```
PT 2, .5, 0;
```

```
PT 3, 1, 0;
```

```
PT 4, 1, .5;
```

```
PT 5, 1, 1;
```

```
PT 6, .5, 1;
```

```
PT 7, 0, 1;
```

```
PT 8, 0, .5;
```

```
PT 9, .2, .2;
```

```
PT 10, .2, .8;
```

```
PT 11, .8, .8;
```

```
PT 12, .8, .2;
```

```
PT 13, .5, .5;
```

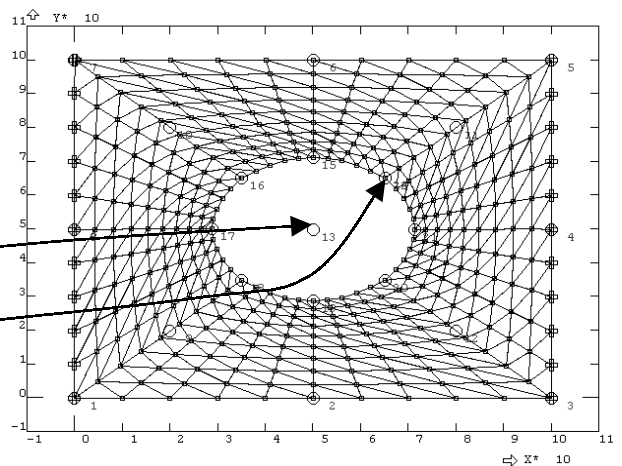
```
PT 14, .65, .65;
```

Měřítka X,Y pro grafy (xmin,xmax,ymin,ymax)

Vztažné vody (points). Je možné použít myš a potvrdit bod L-click, R-click ukončí zadávací sekvenci.

Střed kružnice

Bod na kružnici, která bude rozdělena na 4 kvadr.křivky



```
CIRCLE 1, 13, 14
```

```
SF8PT 1, 1, 3, 20, 18, 2, 12, 19, 9;
```

```
SF8PT 2, 3, 5, 14, 20, 4, 11, 21, 12;
```

```
SF8PT 3, 5, 7, 16, 14, 6, 10, 15, 11;
```

```
SF8PT 4, 7, 1, 18, 16, 8, 9, 17, 10;
```

Plocha z 8mi bodů

```
A=15
```

```
B=14
```

Někdy je užitečné uvádět místo číselných konstant proměnné nebo obecně výrazy a celé zadání problému tak parametrizovat (mohli jsme to udělat např. u předchozích příkazů popisujících geometrii). V tomto případě použijeme proměnné A,B pro označení počtu úseků na něž budou děleny strany ploch při jejich zasítování následujícími příkazy MSF. Uživatelské proměnné zavedené v programu FEMINA mají délku až 8 znaků a musí být deklarovány. Některé jsou však deklarovány předem, např. všechny jednopísmenné proměnné A,B,C,...,Z, které jsou ponechány uživateli pro volné použití.

```
MSF 1, A, B, 1, 1, 6;
```

```
MSF 2, A, B, 1, 1, 6;
```

```
MSF 3, A, B, 1, 1, 6;
```

```
MSF 4, A, B, 1, 1, 6;
```

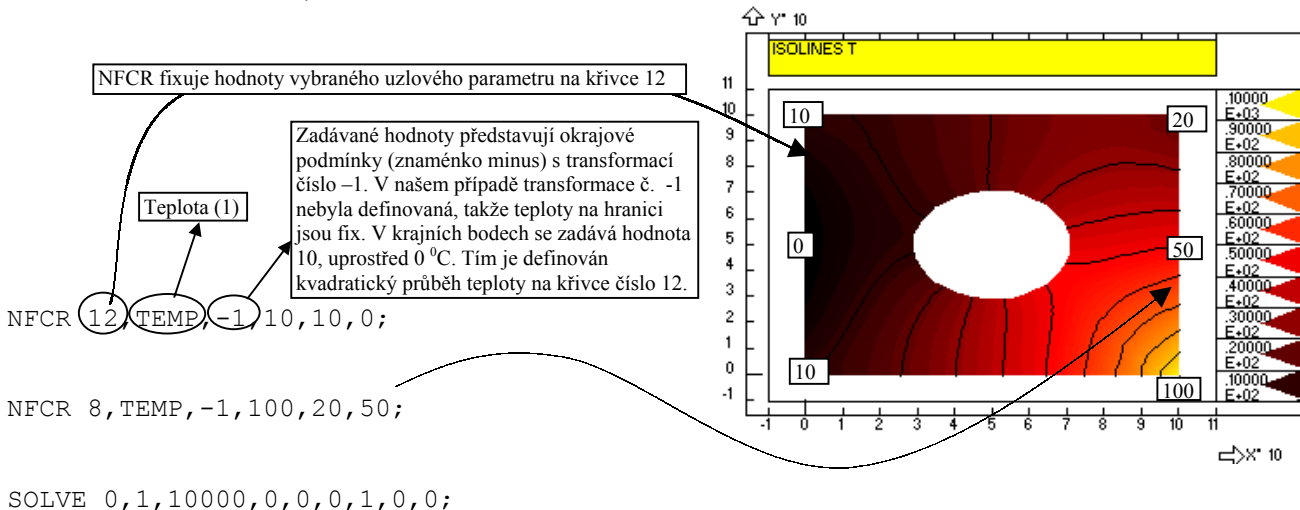
Generování sítě A x B, rovnoměrné (1,1), z trojúhelníků (6 uzlů, přípustné hodnoty 3,4,6,8)

```
NMERGE ;
```

Vyřadí uzly se stejnými souřadnicemi x,y z matice konektivity. Koincidující uzly vznikají na rozhraní ploch, protože každý příkaz MSF generuje uzly na zvolené ploše a nebere v úvahu to, že na některé straně již mohly být uzly vygenerovány předchozím příkazem MSF aplikovaným na sousední plochu. Koincidenční uzly budou zrušeny a dojde k přečíslování.

V tomto okamžiku je již vytvořena síť trojúhelníkových elementů typu *PLANE2D* a jsou definovány uzlové body s uzlovými parametry (*DOF*) z nichž využijeme jen jediný, teplotu označovanou *TEMP*. Každému *DOF* odpovídá jeden celočíselný parametr, tzv. status uzlového parametru. Zatím je ještě ve všech uzlech nulový, což znamená, že všechny *DOF* se mají počítat. Zadávání silných okrajových podmínek (v našem případě předepsaných teplot na okraji desky)

zajistíme změnou statusu na zápornou hodnotu (v intervalu -10 až -1, čemuž odpovídá až 10 různých transformačních funkcí).



Spuštění teplotní analýzy. 0 je počáteční čas, 1=počet časových kroků, 1=časový krok. Protože byla požadována jen stacionární analýza (viz. EGROUPE) na velikosti časového kroku vůbec nezáleží a při výpočtu matice soustavy se neuplatní matice tepelných kapacit. Před sestavením a řešením soustavy algebraických rovnic nejprve proběhnou transformace (procedura LOADIN) počátečních podmínek, okrajových podmínek (číslo transformace <0) i vnitřních zdrojů tepla (číslo transformace >0). Transformací se rozumí násobení zadávané číselné hodnoty okrajové podmínky nebo zdroje tepla nějakou funkcí času, teploty, souřadnic, přičemž funkce může být definována buď výrazem (viz FUNDEF) nebo tabulkou, v níž se lineárně interpoluje (viz CURDEF). Při vlastním řešení soustavy frontální metodou je v každém elementu volána procedura, jejímž úkolem je vytvořit lokální matice tepelných kapacit a tepelných vodivostí, které ovšem mohou záviset na teplotě. Proto se nejprve počítá střední teplota elementu (na základě předchozí iterace) a poté se volají transformační funkce materiálových parametrů. Tímto způsobem lze řešit i nelineární problémy s proměnnými termofyzikálními vlastnostmi, musí se ovšem zadat větší počet „časových“ kroků – vlastně iterací. Po provedení každého časového kroku se vypočtené teploty zapiší do souboru xxxxx.OUT ve znakovém tvaru a současně přenesou do zony „počátečních podmínek“.

GRAPH TEMP, 2

Výsledky (teploty v uzlových bodech) jsou dostupné ve vytvořeném souboru xxxxx.OUT, a lze je i vykreslit. První parametr příkazu GRAPH určuje proměnnou (zde teplota), jejíž rozložení (x,y) má být znázorněno formou isotherm. Druhý parametr (2) určuje zda se má vykreslit výsledek (2) nebo počáteční podmínky (3). Hodnota 1 odpovídá vykreslování vrstevnic z výchozího pole, kde jsou zadávány okrajové (netransformované) okrajové podmínky – tato varianta slouží spíše jen pro kontrolu těchto podmínek.

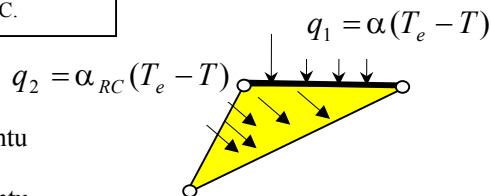
Takto vypočtené řešení odpovídá Dirichletovým okrajovým podmínkám prvního druhu nebo Neumannovým okrajovým podmínkám druhého druhu na dokonale izolované části hranice. Jednoduše řečeno, na té části hranic, kde nebylo předepsáno nic, je izolace (všimněte si, že isotermy jsou v tomto případě kolmé k hranici).

Zadávání Newtonových okrajových podmínek třetího druhu (termický odpor na hranici oblasti) je trochu komplikovanější. Jde např. o to, jakým způsobem vymezit tu část hranice, kde má být předepsán součinitel přestupu tepla  $\alpha$  a teplota vnějšího prostředí  $T_e$ . Ve FEMINě je to řešeno tak, že uzlům ležícím na této části hranice se přiřadí status s hodnotou 21 až 50 (připomeňme, že status -10 až -1 označuje silnou okrajovou podmínku, status =0 počítaný parametr bez vnitřního zdroje nebo zatížení, status 1 až 20 počítaný parametr se zdrojovým členem a teprve vyšší hodnoty indexu se týkají předepsaných okrajových podmínek třetího druhu). Zadávaná hodnota uzlového parametru jehož status je vyšší než 20 pak nepředstavuje ani předepsanou teplotu, ani intenzitu tepelného zdroje, ale přímo hodnotu součinitele přestupu tepla  $\alpha$ . Korespondující teplota vnějšího prostředí je parametrem elementu (viz RCONST) a můžeme ji zadat buď voláním příkazu RCONST, nebo jednodušeji přiřazením vektoru  $TE(i)$ , kde  $i$  je index skupiny RCONST:

TE (1) =200

Vnější teplota se zadává jako parametr elementu (jehož některá strana je součástí uvažované části hranice),  $T_e=200^\circ\text{C}$ .

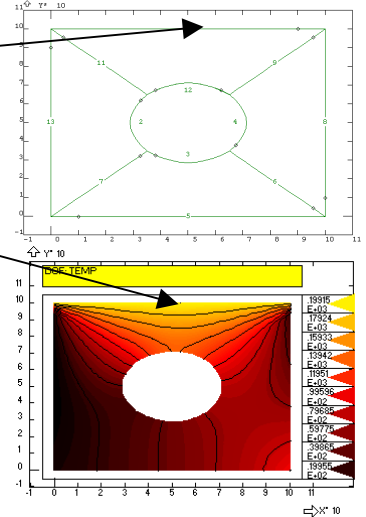
Poznámka: Možná trochu mate, že jako parametr RCONST elementu se objevuje nejenom vnější teplota  $T_e$ , ale také jakýsi součinitel přestupu tepla  $\alpha_{RC}$ . Ten se ale týká přestupu tepla plochou a ne hranicí elementu (viz hustota tepelného toku  $q_2$  na obrázku) – z hlediska elementu je to vlastně vnitřní zdroj tepla. To, co nás ale zajímá teď, je hustota toku  $q_1$  hranicí elementu.



Okrajovou podmínku třetího druhu zadáme na horní straně desky, což je křivka číslo 10.

NFCR 10, TEMP, 21, 100, 100, 100

Uzlovým parametrům typu teplota, které leží na křivce 10 je přiřazen status 21, což znamená, že je tam předepisována okrajová podmínka třetího druhu (mohlo to být jakékoliv číslo od 21 do 50, záporné hodnoty by označovaly silné okrajové podmínky). V těchto uzlech je nastavena hodnota  $\alpha=100$  (trojice konstant naznačuje, že bylo možné použít i kvadratický průběh  $\alpha$ , hodnoty 100,100,100 odpovídají třem definičním bodům křivky).



NID

Příkaz NID (Node IDentification) s výpočtem nesouvisí – je jen ukázkou toho, jak se rychle přesvědčit o tom, jaké parametry charakterizují uzlový bod – stačí na něj ukázat myši a kliknout. Informace se objeví ve stavovém okénku.

Node 0477 XY: .2000 1.0000 Zone 1: TEMP status[ 21] value= .100E+03

SOLVE 0, 1, 10000, 0, 0, 0, 1, 0, 0;

Pokračování předchozího případu, tentokrát pro nestacionární řešení s počáteční podmínkou definovanou funkčním předpisem (obvykle jako funkci souřadnic  $x,y$ ). Jako jeden z parametrů příkazu EGROU je S/T (steady/transient), který určuje algoritmus výpočtu jednotlivých elementů. V principu je tedy možné nastavit některé elementy na nestacionární výpočet a jiné zase na výpočet stacionární<sup>3</sup>. V našem případě je ovšem definován jen jeden typ elementů a ty přepneme do nestacionárního režimu jediným příkazem EGROU.

Přepíšeme první atribut elementů na TRANSIENT (1)

EGROUP 1, PLANE2D, 1, 4, 0, 0;

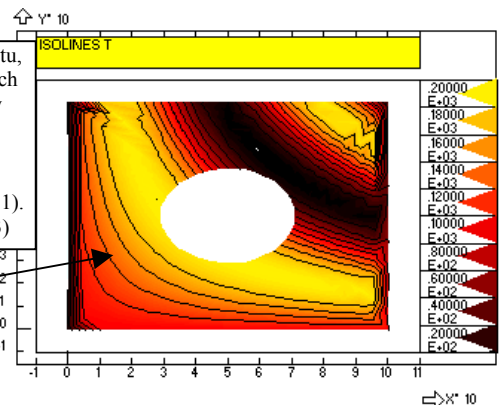
Definice transformace č.1 (v tomto případě výraz). Ve výrazu lze použít proměnné TIME, TEMP, XX, YY, UX, UY

FUNDEF 1, 100\*(1+SIN(10\*XX\*YY));

INITIA TEMP, 1;

Počáteční podmínky: první parametr (TEMP) znamená teplotu, druhý číslo funkce. Prochází se seznam uzlových bodů a jejich uzlových parametrů. Pokud mají příznak okrajové podmínky (<0) násobí se zadané hodnoty transformačními funkcemi okrajových podmínek, když ne (tj. když jde o počítaný parametr), dosadí se do pole počátečních podmínek přímo hodnota specifikované transformace (zde transformace číslo 1). Funkce GRAPH vykresluje izotermy v poli poč.podmínek (3)

GRAPH TEMP, 3



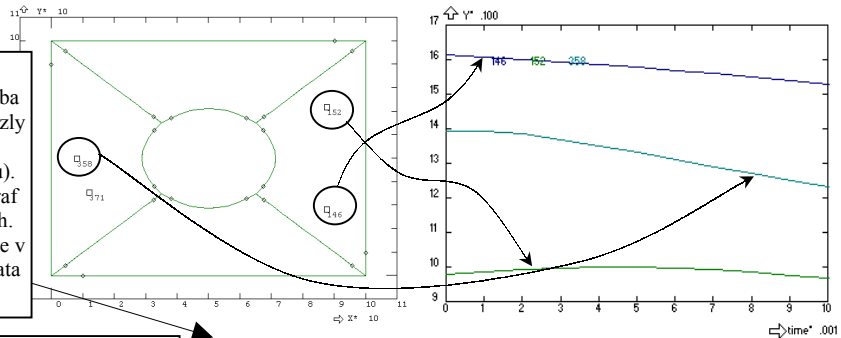
<sup>3</sup> To snad může mít význam u elementů, které reagují mnohem rychleji než ostatní –příkladem je kombinace materiálů s výrazně rozdílnými tepelnými kapacitami a vodivostmi. K této alternativě by asi bylo nutné se uchýlit tehdy, když by byly problémy se stabilitou výpočtu při větším časovém kroku (“stiff problem“).

SOLVE 0,10,10000,0,0,0,1,0,0;

10 kroků výpočtu s časovým krokem 10000 s.

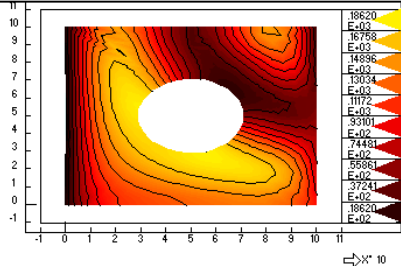
GRATIM TEMP

Vykreslování výsledků nestacionárních řešení, TEMP znamená teplotu. Pak je třeba myší (nejde to z klávesnice) lokalizovat uzly v nichž chceme vykreslit časové průběhy (opět L-click výběr, R-click konec výběru). Spustí se animace isotherm a vykreslí se graf T(t) s průběhy teplot ve vybraných bodech. Na rozdíl od GRAPH (která kreslí to, co je v operační paměti) zpracovává GRATIM data z výstupního souboru xxx.OUT.



Výsledky všech časových kroků se zapsaly do souboru xxx.OUT ve znakovém tvaru (viz ukázka, 440 uzlových bodů a 10 časových kroků). Z tohoto souboru lze příkazem LOADT načíst uzlové hodnoty z libovolného časového kroku do zony počátečních podmínek a pokračovat ve výpočtu např. s jiným časovým krokem.

```
THERMAL ANALYSIS test ND= 440
.0 1000.000 (time, dtime) INITIAL
1 10.000
2 100.000
....
440 194.081
1000.0 1000.000 (time, dtime)
1 10.000
2 101.050
....
440 .000
....
10000.0 1000.000 (time, dtime)
1 10.000
....
440 .000
```



Ukázka nestacionárního teplotního pole s časově proměnnou okrajovou podmínkou (sinusovitě se měnící teplota na části vnitřní kružnice, na křivce číslo 3).

FUNDEF -2,50\*(1+SIN(1E-6\*TIME))  
FUNLIST;

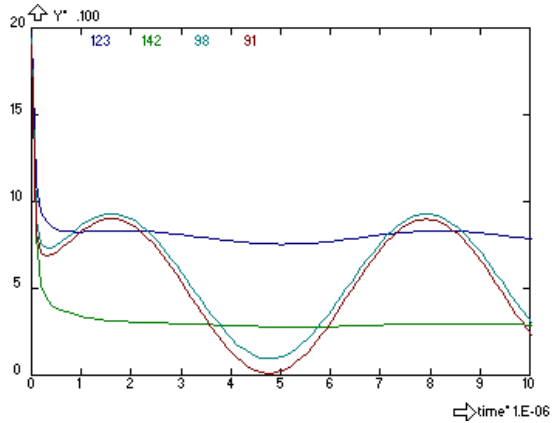
```
Index_RPN_Function
-02 015 : 50*(1+SIN(1E-6*TIME))
-01 005 : 1
01 018 : 100*(1+SIN(10*XX*YY))
```

NFCR 3,TEMP,-2,1,1,1

Na křivce 3 (čtvrtkružnice) je zadávána teplota (1) jako okrajová podmínka číslo -2 (a to je funkce času TIME). Trojice 1,1,1 jsou teploty v definičních bodech křivky, které budou násobeny funkcí číslo -2.

INITIA TEMP,1  
SOLVE 0,100,100000,0,0,0,1,0,0;

GRATIM TEMP



Poznámka: Operace GRATIM vybírá z výsledkového souboru časové průběhy DOF ve vybraných uzlech a dříve než je vykreslí, ukládá je do sloupců matice bodů pozorování, kde je lze dále zpracovávat (příkazy TCL-list, TCF-algebraické operace, ...).



## Výpočet integrálních veličin

Libovolnou funkci definovanou buď příkazem FUNDEF nebo tabulkou CURDEF lze integrovat podél křivky (CR) nebo na povrchu (SF). V definici FUNDEF lze použít i funkci *DOF*(*typ uzlového parametru, index zóny, x,y,z*), která předává hodnotu zvoleného DOF v libovolném bodě *x,y,z*. Tuto funkci lze ovšem volat jen tehdy, když byla někdy předtím provedena operace BOX, která vytvoří soubor RUNBOX.BIN, usnadňující nalezení korespondence mezi bodem *x,y,z* a elementem, v němž se bod nachází. Tyto operace budeme ilustrovat na výpočtu střední teploty na zvolené ploše

```
BOX 0.3;  
FUNDEF 11,DOF(TEMP,2,XX,YY,ZZ);  
FUNDEF 12,1;  
IS 1,11;  
S=INTEGRAL  
IS 1,12;  
DISP S/INTEGRAL
```

Funkci číslo 11 definujeme jako teplotu v obecném bodě *x,y,z*, a funkci 12 jako jedničku (použijeme ji k výpočtu plochy). Operace IS 1,11 vypočte integrál teploty přes plochu číslo 1 a výsledek umístí do proměnné INTEGRAL. Překopírujeme ho do proměnné S a opakovanou integrací vypočteme plochu povrchu – střední teplota je potom rovna S/INTEGRAL.

EXIT ← Regulérní ukončení programu FEMINA

Poznámka: Ve verzi FEMINA 3.2 bylo implementováno rozšíření funkčních závislostí tím, že ve výrazu pro definici funkce lze použít volání funkce *CVT*(*i,time*), která interpoluje data v *i*-tém sloupci rozsáhlé matice bodů pozorování (bude blíže vysvětlována až v dalším textu). Tím bylo vyslyšeno volání pracovníků VÚPP, kteří potřebovali vyjádřit termofyzikální vlastnosti současně jako funkci teploty *TEMP* a tlaku, jehož časový průběh je popsán rozsáhlou tabulkou naměřených hodnot.

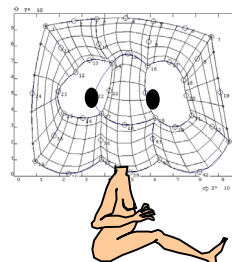
V případě, když pro definici funkce nestačí jediný algebraický výraz, je možné ji napsat i jako program v jazyce, který FEMINA používá pro interpretaci výrazů a programů; pro tuto funkci jsou vyhrazeny indexy 101, 102, ..., 105. Takováto definice může být v daném okamžiku jen jedna a je totožná s aktivním modelem, který normálně popisuje diskrétní systémy soustavou obyčejných diferenciálních rovnic (viz. příklad 2.9 serie mísičů – integrální model). Funkci, kterou chceme použít, je třeba nejprve zapsat jako text do souboru (např. se jménem *func1.mdt*) kupříkladu takto

```
\\ini  
yv(1)=a+b*temp  
if temp>100 then yv(1)=c+d*temp+e*temp**2  
yv(2)=f*time*exp(-g*time)  
\\
```

Těchto funkcí může být i víc, ale všechny musí být popsány v inicializačním souboru FEMINA.CMD kde je každému definičnímu souboru (např. *func1.mdt*) přiřazeno klíčové slovo (např. *F1*).

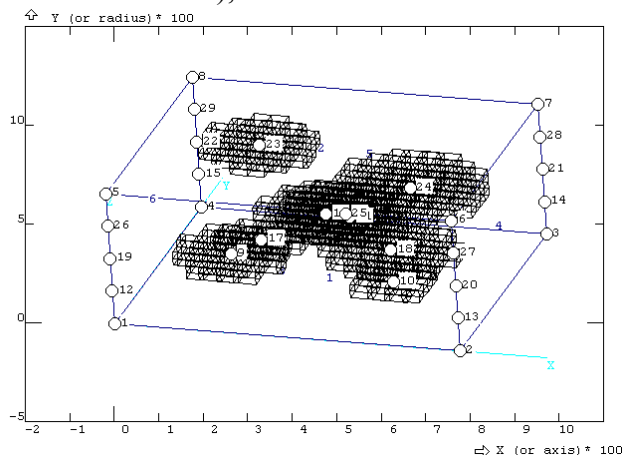
```
...  
\\model  
f1 func1.mdt  
\\model  
f2 func2.mdt  
...
```

Zvolený model je třeba před použitím načíst do FEMINY příkazem *RM klíčové slovo*. Např. *RM F1* přečte a předkompiluje soubor *func1.mdt*. Od tohoto okamžiku již jsou definovány dvě nové funkce s indexem 101 a 102 (a současně -101 a -102), jejichž hodnotami jsou prvky vektoru YV(1) a YV(2) ve výše uvedené definici.



### 2.3. Ohmický ohřev 3D

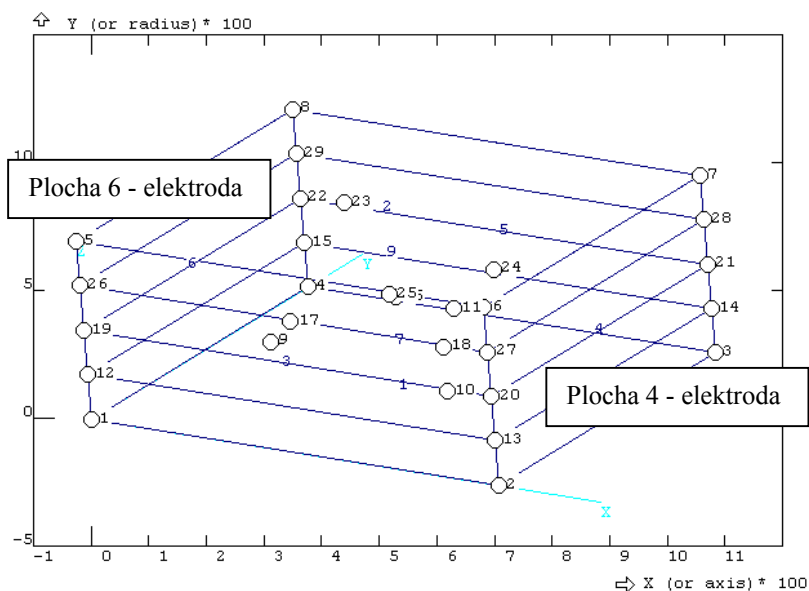
Následující příklad je trojrozměrný model teplotního a elektrického pole v tělese kvádru o rozměrech podstavy 8 x 8 cm a výšce 10 cm. Těleso je zaplněno látkou, mající termofyzikální vlastnosti vody a uvnitř této krabice jsou uloženy kulové částice s poněkud odlišnými vlastnostmi (především vyšší hodnotou elektrické vodivosti), viz obrázek.



Dvě protilehlé strany kvádru (levá a pravá) jsou chlazené elektrody, udržované při konstantní teplotě  $10^0$  C. Zbývající čtyři stěny jsou elektricky izolované, ale umožňují přenos tepla do vnějšího prostředí s konstantní teplotou při konstantní hodnotě součinitele přestupu tepla  $\alpha=50$  W/(m<sup>2</sup>K).

Geometrický model – šestistěn s osmi vrcholy (další možnou variantou je šestistěn se zakřivenými hranami, definovaný 20ti body PT) lze vytvořit buď přímo výčtem vrcholů (příkaz VL8PT) nebo, jako v tomto příkladě, tažením plochy, obdélníku v rovině x-y, ve směru osy z. Dovnitř kvádru je umístěno několik dalších bodů PT, které jsou středy koulí, vymežujících elementy, které mají mít odlišné vlastnosti. Tyto body jsou umístěny v řezech  $z=0.25$ ,  $0.5$  a  $0.75$ , kde jsou nadefinovány i pomocné plochy (číslo 7,8,9), které nesouvisí s výpočtem, ale budou použity pro vykreslení průběhů teplot a elektrického potenciálu v těchto řezech.

```
SCALE -.500E-02, .1, -.500E-02, .1;
PT 1, .000E+00, .000E+00;
PT 2, .800E-01, .000E+00;
PT 3, .800E-01, .800E-01;
PT 4, .000E+00, .800E-01;
SF4PT 1, 1, 2, 3, 4;
SFEXTR 1, 1, 0, 0, .1;
ZDEF .025;
PT 9, .200E-01, .300E-01;
PT 10, .600E-01, .200E-01;
PT 11, .400E-01, .600E-01;
PT 12, .000E+00, .000E+00;
PT 13, .800E-01, .000E+00;
PT 14, .800E-01, .800E-01;
PT 15, .000E+00, .800E-01;
SF4PT 7, 12, 13, 14, 15;
ZDEF .05;
PT 16, .400E-01, .400E-01;
PT 17, .300E-01, .200E-01;
PT 18, .600E-01, .200E-01;
PT 19, .000E+00, .000E+00;
PT 20, .800E-01, .000E+00;
PT 21, .800E-01, .800E-01;
PT 22, .000E+00, .800E-01;
SF4PT 8, 19, 20, 21, 22;
ZDEF 0.075;
PT 23, .200E-01, .600E-01;
```





```

PT 24, .600E-01, .400E-01;
PT 25, .500E-01, .200E-01;
PT 26, .000E+00, .000E+00;
PT 27, .800E-01, .000E+00;
PT 28, .800E-01, .800E-01;
PT 29, .000E+00, .800E-01;
SF4PT 9, 26, 27, 28, 29;

```

Příkazem MVL vygenerujeme 20 x 20 x 20 šestistěnnů SOLID s 8mi uzlovými body, přičemž každému elementu budou přiřazena implicitní čísla skupin EGROUP=RCONST=MPROP=1. Těm elementům, jejichž těžiště se nachází někde uvnitř koule se středy PT=9,10,... změníme číslo skupiny materiálových parametrů MPROP opakovaným použitím příkazu ERMOD.

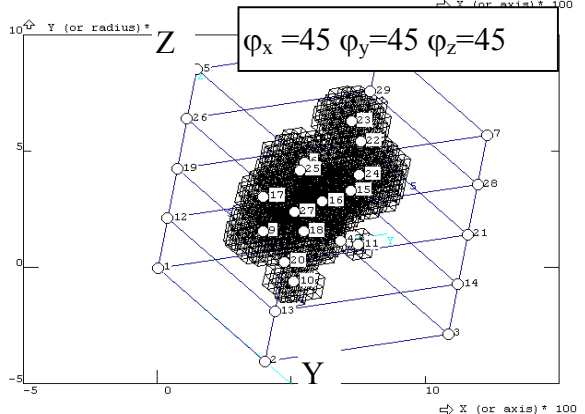
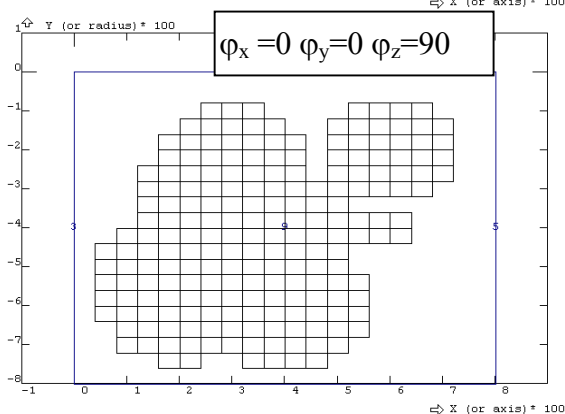
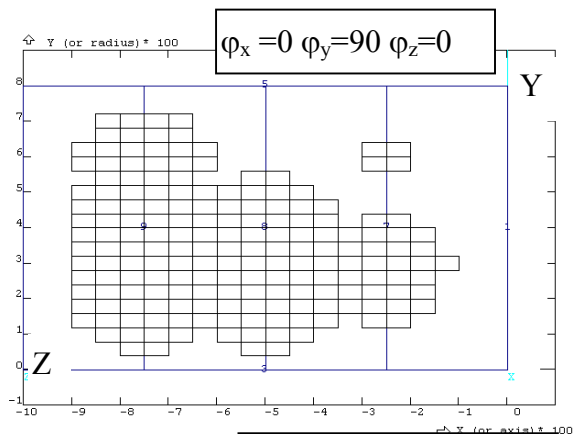
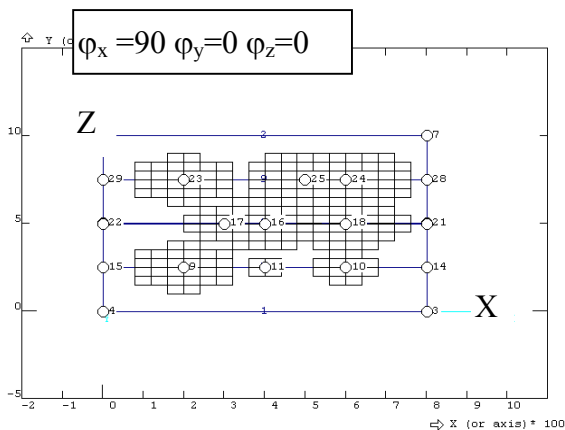
```

MVL 1, 20, 20, 20, 1, 1, 1, 8;
EGROUP 1, SOLID, 0, 2, 0, 1, 0;
MPROP 1, SOLID, .600E+00, 0, 4200, 0, 998, 0, .400E-01, 0, .100E-02, 0, .500E-03, 0, .100E-08, 0, 0, 0, 0, 0;
MPROP 2, SOLID, 1., 0, 2500, 0, 1500, 0, 0.15, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0;
ERMOD 0, 9, .013, 1, 1, 2;
ERMOD 0, 10, .009, 1, 1, 2;
ERMOD 0, 11, .006, 1, 1, 2;
ERMOD 0, 16, .015, 1, 1, 2;
ERMOD 0, 17, .009, 1, 1, 2;
ERMOD 0, 18, .015, 1, 1, 2;
ERMOD 0, 23, .013, 1, 1, 2;
ERMOD 0, 24, .017, 1, 1, 2;
ERMOD 0, 25, .015, 1, 1, 2;

```

Příkazem EGROUP zadáme typ elementů (SOLID), to, že se bude hledat stacionární řešení (0) a určí se počet uzlů Gaussovy integrace (2 x 2 x 2). Pozn. Schéma s jediným integračním uzlem vykazuje mírně oscilující řešení.

Při prohlížení 3D objektů je třeba vhodně natočit souřadný systém. Ve Femíně je používána velmi primitivní projekce, založená na pootočení souřadných os (x,y,z) o specifikované úhly. Toto nastavení zajišťuje příkaz VIEW  $\varphi_x$ ,  $\varphi_y$ ,  $\varphi_z$ . Elementy vykreslíme příkazem EPLOT s takovými parametry, které pro kresbu vybírají pouze elementy s indexem skupiny MPROP=2.





Na povrchu vyšetřovaného tělesa je třeba zadat okrajové podmínky: Zvláště jednoduché je to u elektrického potenciálu, kde jsou specifikovány pouze silné okrajové podmínky na plochách 4 a 6. U zbývajících ploch se uplatní přirozené okrajové podmínky nulové normálové derivace (elektrická izolace). Pro teplotní pole zadáme na stěnách 1,2,3,5 okrajové podmínky třetího druhu podobným způsobem jako v předchozím příkladu, tj. nastavením statusu uzlů, které leží na těchto plochách, na hodnotu vyšší než 20. Korespondující uzlové parametry jsou pak interpretovány jako hodnoty  $\alpha$ . Teplota vnějšího prostředí je parametrem elementu (RCONST) a můžeme ji zadat nejjednodušeji přiřazením vektoru  $TE(i)$ , kde  $i$  je index skupiny RCONST.

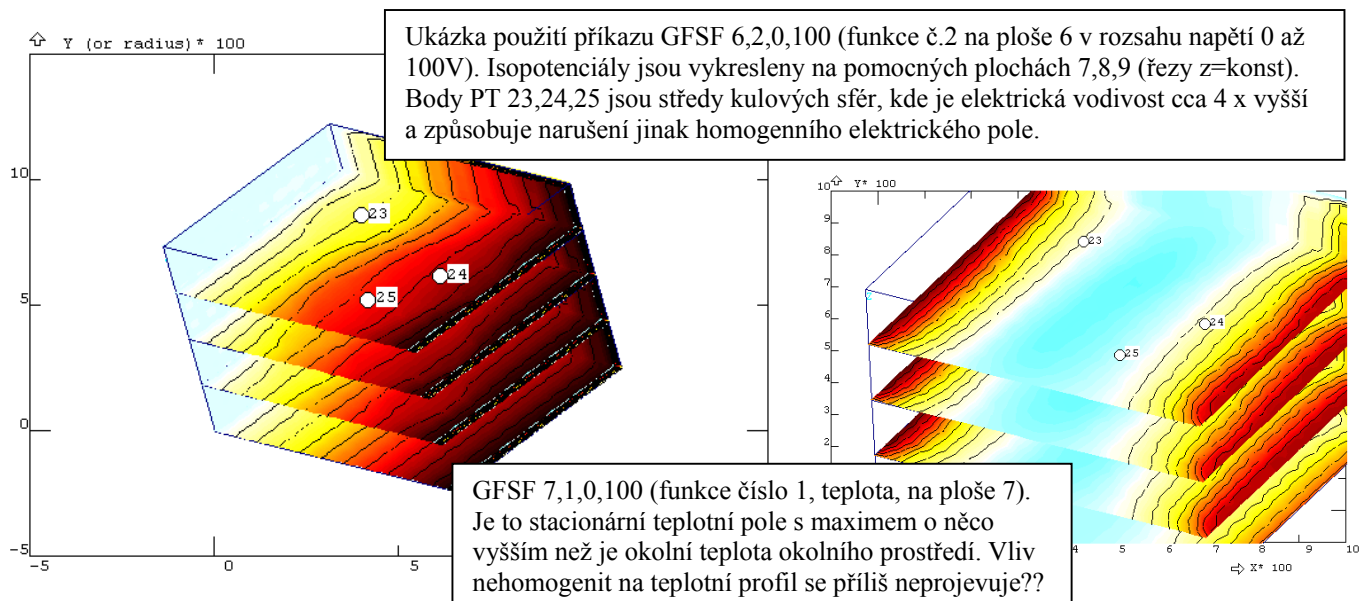
```
TE (1) =100
NFSF 4,VOLT,-1,0,0,0,0;
NFSF 6,VOLT,-1,100,100,100,100;
NFSF 6,TEMP,-1,10,10,10,10;
NFSF 4,TEMP,-1,10,10,10,10;
NFSF 1,TEMP,21,50,50,50,50;
NFSF 2,TEMP,21,50,50,50,50;
NFSF 3,TEMP,21,50,50,50,50;
NFSF 5,TEMP,21,50,50,50,50;
```

V příkazu OPTION ponecháme všechny přednastavené parametry s výjimkou parametru SOURCE – aktivujícího respektování ohmického ohřevu (objemového zdroje tepla průchodem elektrického proudu). U stacionárního výpočtu stačí jediný časový krok a jediná iterace elektrického i teplotního pole, protože uvažujeme konstantní vlastnosti (nezávislé na teplotě).

```
OPTION 0,0,1,1,0,0,15,.100E-11,1,.100E+08,1,.100E-04,.100E-04,1,0,0,0,0;
SOLVE 100,1,100,0,1,0,1,0,0;
```

Pro zobrazení výsledků je třeba použít příkaz GFSF určený k vykreslení vrstevnic libovolně interaktivně definované funkce na zvolené ploše. Protože potřebujeme vykreslit uzlové parametry TEMP a VOLT, definujeme funkce číslo 1 a 2 jako standardní interpolační funkci DOF, která počítá hodnoty zvoleného uzlového parametru v libovolném místě  $x,y,z$ . Aby tato funkce mohla pracovat, je třeba vytvořit soubor přiřazující uzlům jemné a rovnoměrné kartézské mřížky příslušné konečné elementy (tím je totiž vyřešen problém rychlého nalezení elementu v němž se libovolný bod  $x,y,z$  nachází). Tento soubor je vytvořen operací BOX (zkratka Cartesian BOXing).

```
BOX .5;
FUNDEF 1,DOF(TEMP,2,XX,YY,ZZ);
FUNDEF 2,DOF(VOLT,2,XX,YY,ZZ);
```



## 2.4. Uživatelský program

Zde si ukážeme jak napsat svůj vlastní program, který načte data exportovaná z programu FEMINA, zpracuje je, a předá zpátky výsledky. Podobný postup je třeba použít např. tehdy, když potřebujeme importovat nebo exportovat data do jiných programů (COSMOS, FLUENT, atd).

Budeme uvažovat jednoduchou aplikaci, jejímž úkolem nebude nic jiného než vypočítat a sečíst plochy všech trojúhelníkových elementů. Text programu, který má tuto akci zajistit, napíšeme v jazyce Fortran a uložíme do souboru *PROBLEM.FOR*:

```
include '$femloc'
dimension x(3),y(3)
equivalence (interc(41),a)
```

Databáze programů FEMINA se liší dle verzí, a při konkrétní aplikaci je třeba prostudovat aktuální strukturu COMMON /\$FEM/.

V souboru \$FEMLOC jsou uvedeny všechny deklarace proměnných a vektorů, které FEMINA používá - celá databáze je v jediném vektoru COMMON /\$FEM/INTERC(MAXEND).

V tomto vektoru jsou uloženy mimo jiné všechny jednoduché proměnné, využívané interpretem programu FEMINA, a např. jednoduché proměnné A, B, ..., Z začínají na pozici 41 (proměnnou A použijeme pro uložení výsledku, součtové plochy)

```
open(1,file='problem.bin',form='binary')
read(1) ityp,interc
```

Celou databázi pak můžeme přečíst jediným příkazem READ ze souboru PROBLEM.BIN. Parametr ityp určuje typ databáze (nevyužijeme)

```
a=0
do ie=1,ne
  loc=lue(ie)
  do j=1,3
    ind=iabs(iue(loc+j))
    x(j)=xx(ind)
    y(j)=yy(ind)
  enddo
  s=abs(y(1)*(x(2)-x(3))+y(2)*(x(3)-x(1))+y(3)*(x(1)-x(2)))/2.
  a=a+s
enddo
rewind(1)
write(1)ityp,interc
end
```

Proměnná NE je součástí deklarací (stejně jako souřadnice uzlů XX(i), YY(i) a vektor konektivity LUE(i)). N uvedeném textu jsou všechny systémové proměnné podtrženy. V cyklu přes všech NE elementů stanovíme souřadnice trojice uzlů trojúhelníkových elementů a vypočteme jejich plochu. Výsledek je v součtové proměnné A, která je součástí databáze.

Celou databázi (v níž byla změněna jediná proměnná, A) pak zapíšeme na disk - přepíšeme původní soubor PROBLEM.BIN. Jednoduchá proměnná ITYP určuje typ databáze (zkrácená, úplná), ponecháme původní hodnotu.

Soubor *PROBLEM.FOR* musíme přeložit a sestavit fortranským kompilátorem, čímž vznikne soubor *PROBLEM.EXE*. Teď teprve můžeme spustit program FEMINA

PROBLEM  
FILE THOLE3

Pro generování sítě elementů použijeme soubor THOLE3, který byl vytvořen při zadávání úlohy 2.2 (teplotní pole v desce, kde byly použity právě trojúhelníkové elementy).

WRITEBIN PROBLEM

Příkazem WRITEBIN exportujeme celou databázi do souboru PROBLEM.BIN (mohli jsme zvolit i jiné jméno než PROBLEM)

RUN PROBLEM.EXE

Spustíme náš program, který databázi přečte a po úpravě ji přepíše. Řízení se okamžitě vrací do programu FEMINA.

DISP A                   A=0  
READBIN PROBLEM  
DISP A                   A=0.861

Podíváme-li se do proměnné A je tam stále nula. Databáze není automaticky načtena, což musíme zajistit příkazem READBIN. Teprve pak se obsah databáze aktualizuje a vypočtenou plochu můžeme vypsát příkazem DISP.

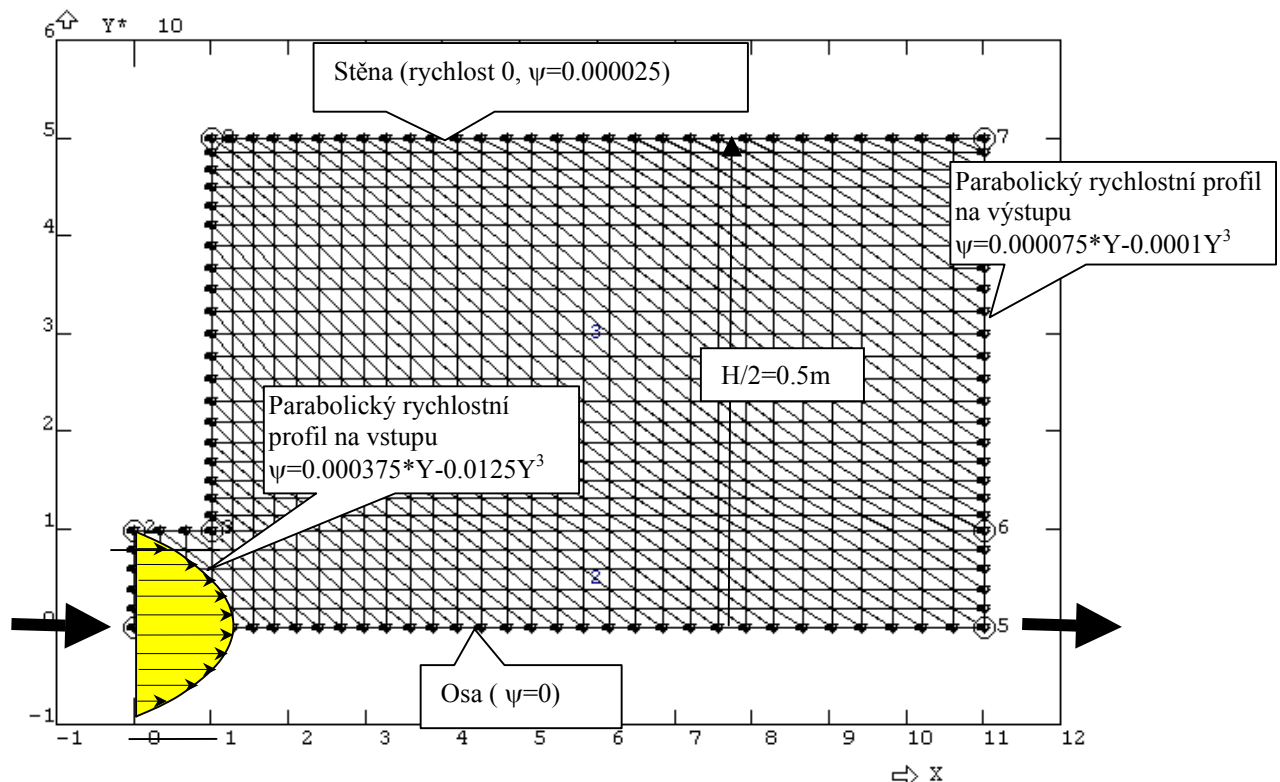
## 2.5. Laminární proudění řešené použitím proudové funkce (PSIN, CREE)

Pro řešení dvourozměrného proudového pole, tj. zjištění rychlostí a tlaků při laminárním toku nestlačitelné kapaliny nabízí FEMINA několik metod. Jedna skupina (CREE, PSIN, PSOM) vychází z popisu proudění proudovou funkcí  $\psi$ , což má tu výhodu, že rovnice kontinuity je vždy automaticky splněna. To vyplývá přímo z definice proudové funkce, která je svázána se složkami rychlostí následujícími vztahy:

Rovinné proudění	
$u_x = \frac{\partial \psi}{\partial y}$	$u_y = -\frac{\partial \psi}{\partial x}$
Rotačně symetrické proudění (osa z horizontální)	
$u_r = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z}$	$u_z = -\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r}$

Varianta označovaná CREE spočívá v řešení biharmonické rovnice pro proudovou funkci, a počítá stacionární plouživé proudění Newtonské (nebo i neneutonské) kapaliny minimalizující dissipovanou energii. Při řešení se uplatní pouze stupně volnosti PS, PSX, PSY (hodnoty proudové funkce a její první derivace), rychlosti VX, VY se dopočítají až ex post. Pokud je viskozita konstantní není třeba iterovat (plouživé proudění je popisováno *lineární* Stokesovou rovnicí) a varianta CREE je proto vhodná i jako počáteční podmínka pro řešení s vyššími hodnotami Reynoldsova čísla variantou PSIN. Varianta řešení PSIN používá stejné stupně volnosti (zadávají se tudíž i stejné okrajové podmínky), ale hledá nestacionární řešení a uvažuje i vliv setrvačných členů (je tedy použitelná i pro Re mírně větší než 0). CREE i PSIN jsou implementovány pouze pro trojúhelníkové elementy se třemi uzly – toto omezení se netýká varianty PSOM, která počítá současně proudovou funkci  $\psi$  i vířivost  $\omega$  a vystačí s jednoduššími básovými funkcemi (proto lze použít i čtyřúhelníkové elementy). Varianta  $\psi$ - $\omega$  je použitelná i pro vyšší hodnoty Reynoldsova čísla, protože je implementován upwind.

Ukázkou použití těchto metod je analýza laminárního proudění v rovinném kanálu s geometrií stěn uvedenou na následujícím obrázku (kartézský souřadný systém, kanál je symetrický vzhledem k ose  $x$ , geometrie je navržena pro Reynoldsovo číslo zhruba 100)



Při použití proudové funkce je třeba zadat hodnoty  $\psi$  i její první derivace ve vstupním průřezu, kde budeme uvažovat již plně vyvinutý parabolický rychlostní profil

$$u_x(y) = \frac{3}{2} \bar{u}_x \left[ 1 - \left( \frac{2y}{H} \right)^2 \right], \quad \psi(y) = \frac{3}{2} \bar{u} \left[ y - \frac{y^3}{3} \left( \frac{2}{H} \right)^2 \right].$$

Střední rychlost ve vstupním průřezu volíme 0.00025 m/s, a odpovídající střední rychlost v rozšířeném výstupním průřezu je 0.00005 m/s ( $H_{\text{vstup}}=0.2$  m,  $H_{\text{výstup}}=1$  m). Hydraulický průměr  $D_e$  měřený ve výstupním kanálu je dvojnásobkem šířky kanálu, tudíž 2 m. Použijeme-li jako modelovou kapalinu vodu (s viskozitou 1 mPa.s), bude Reynoldsovo číslo ve výstupním průřezu  $Re_{\text{výstup}}=100$  a ve vstupním průřezu rovněž  $Re_{\text{vstup}}=100$  (u rovinného kanálu je součin střední rychlosti a průměru konstantní). Délku kanálu volíme tak, aby modelovaná oblast zahrnovala vývoj rychlostního profilu za náhlým rozšířením dle vztahu

$$\frac{L}{D_e} = 0.05 Re.$$

C\* Opening test date:22.04.03 at 08:53

```

ANALYS 2;
SCALE -.500E-02,12,-.500E-02,.6;
PT 1,.000E+00,.000E+00;
PT 2,.000E+00,.100E+00;
PT 3,.100E+01,.100E+00;
PT 4,.100E+01,.000E+00;
PT 5,1.100E+01,.000E+00;
PT 6,1.100E+01,.100E+00;
PT 7,1.100E+01,.500E+00;
PT 8,.100E+01,.500E+00;
SF4PT 1,1,4,3,2;
SF4PT 2,4,5,6,3;
SF4PT 3,3,6,7,8;
EGROUP 1, FLOW2D, 0, 7, 0, CREE, 0;
MSF 1,3,5,1,1,3;
MSF 2,30,5,1.5,1,3;
MSF 3,30,20,1.5,-1.5,3;
NMERGE ;
FUNDEF -2,0.000375*YY-.0125*YY**3;
FUNDEF -3,0.000075*YY-0.0001*YY**3;
FUNDEF -4,0.000375*(1-0.01*YY**2);
NFCR 4,PS,-2,1,1;
NFCR 4,PSX,-1,0,0;
NFCR 4,PSY,-4,1,1;
NFCR 1,PS,-1,0,0;
NFCR 1,PSX,-1,0,0;
NFCR 5,PSX,-1,0,0;
NFCR 5,PS,-1,0,0;
NFCR 3,PSX,-1,0,0;
NFCR 3,PSY,-1,0,0;
NFCR 10,PSY,-1,0,0;
NFCR 10,PSX,-1,0,0;
NFCR 9,PSX,-1,0,0;
NFCR 9,PSY,-1,0,0;
NFCR 3,PS,-1,0.000025,0.000025;
NFCR 10,PS,-1,0.000025,0.000025;
NFCR 9,PS,-1,0.000025,0.000025;
NFCR 6,PSX,-1,0,0;
NFCR 8,PSX,-1,0,0;
NFCR 6,PS,-3,1,1;
NFCR 8,PS,-3,1,1;
SOLVE 0,1,1,0,0,1,0,0,0;

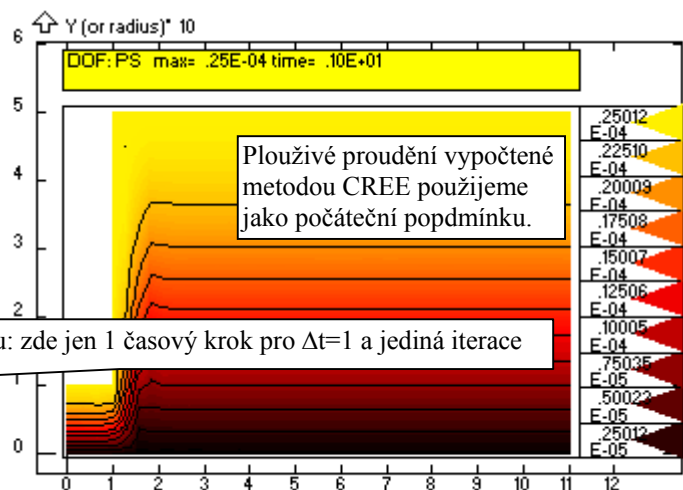
```

Elementy typu FLOW2D. Zvolíme metodu CREE (plouživé proudění), kterou použijeme pro výpočet počátečních podmínek: v tomto případě stačí jediná iterace (pokud není viskozita nebo hustota proměnná).

Funkce -2, -3, -4 popisují silné okrajové podmínky: průběhy proudové funkce ve vstupním a výstupním průřezu, resp. rychlostní profil na vstupu ( $\psi, y$ ).

Zadání rychlostních profilů na vstupu a výstupu kanálu. Ve skutečnosti se zadává průběh funkce  $\psi(y)$  spočítaná z rychlostních profilů.

Spuštění výpočtu: zde jen 1 časový krok pro  $\Delta t=1$  a jediná iterace



X (or axis)

```

EGROUP 1, FLOW2D, 0, 7, 0, PSIN, 0;
RELFAKT=.3
OPTION 0, 0, 0, 1, 0, 15, .100E-11, .1, .100E+08, 1, .100E-04, .100E-04, 0, 20, 0, 0, 0;

```

Varianta PSIN řeší Navierovy Stokesovy rovnice jako nestacionární problém (parametr *Steady/Transient* příkazu EGROUPO se ignoruje, výpočet je vždy typu *Transient*). I když je zpravidla naším cílem jen získání stacionárního řešení, je vždy třeba zadat časový krok a počty iterací v každém časovém kroku. Hrubou představu o časovém měřítku získáme jako podíl délky kanálu ( $L=10$  m) a střední rychlosti ( $0.00005$  m/s), tj.  $200000$  s. Časový krok volíme např. 20 krát menší, tj.  $10000$  s.

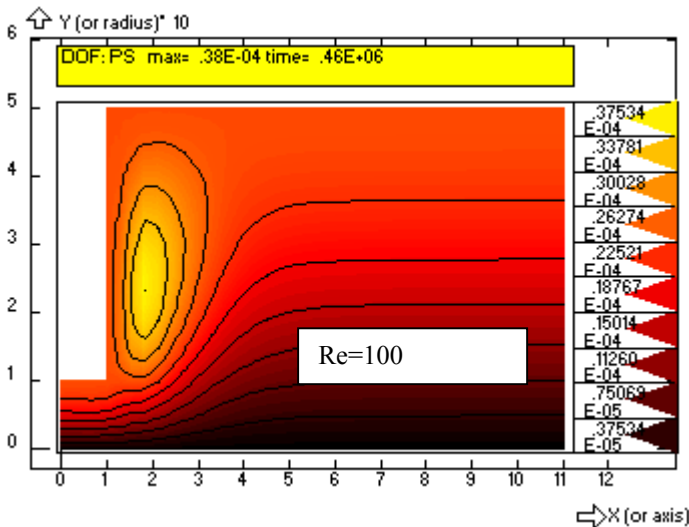
```
SOLVE 10, 3, 10000, 0, 0, 20, 0, 0, 0;
```

Poznámka: Při řešení Navierových Stokesových rovnic je hlavní problém konvergence, kterou lze ovlivnit především volbou časového kroku a eventuálně podrelaxačním faktorem (viz příkaz RELFAKT=0.3). Konečné řešení zpravidla získáváme postupným opakováním řešení s měnícím se časovým krokem. Podstatné je to, že operace SOLVE vychází z počátečních podmínek, které se v každém časovém kroku aktualizují, takže opakování příkazu SOLVE navazuje na poslední provedený časový krok. Pokud bychom chtěli opakovat celý výpočet od počátku, museli bychom explicitně přepsat počáteční podmínky (např. příkazem INI nebo jako v tomto případě vyřešením stacionárního řešení metodou CREE pro  $Re=0$ ).

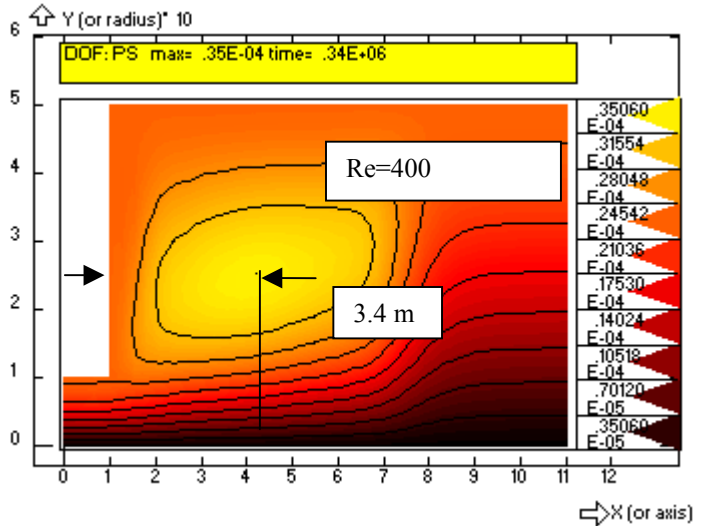
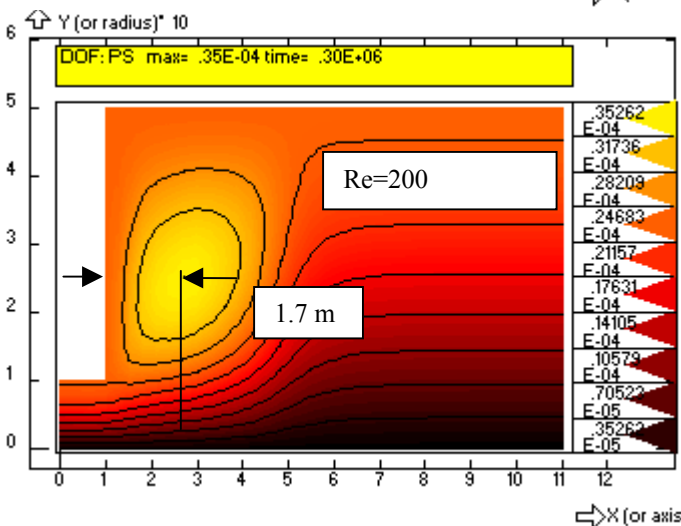
```

SOLVE .300E+05, 3, .100E+05, 2, 0, 20, 0, 0, 0;
VISC (1) = VISC (1) / 2
SOLVE .296E+06, 1, 3000, 2, 0, 20, 0, 0, 0;

```

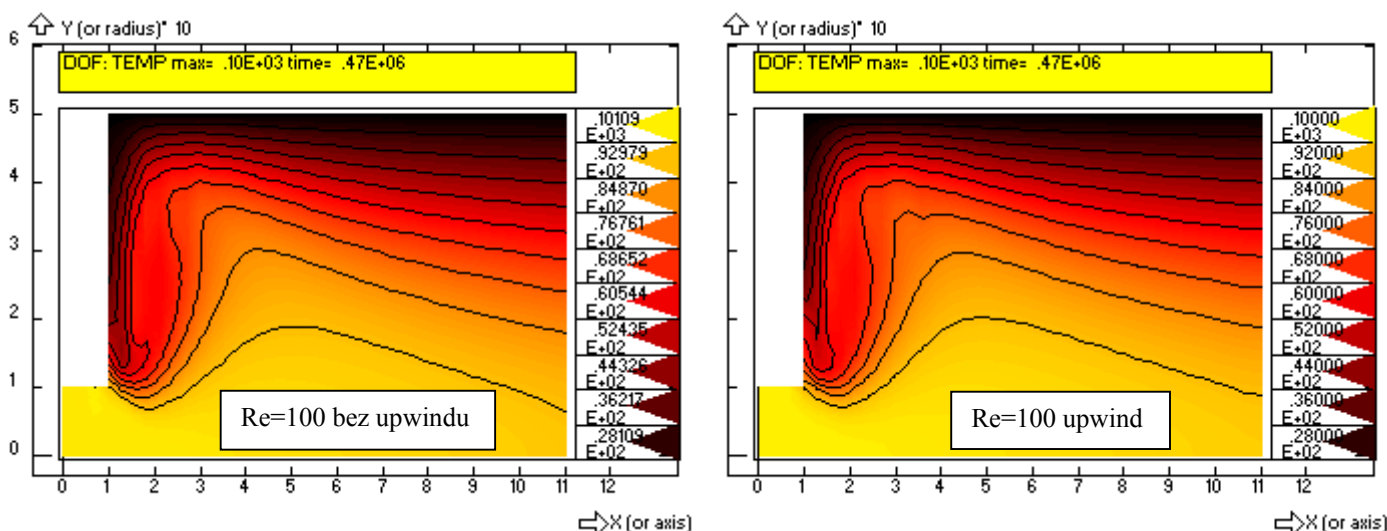


Varianta PSIN pro  $Re = 100$ .  
Vrstevnice  $\psi > 0.000025$  vymezují recirkulační zony.



Je-li již vypočteno rychlostní pole, je možné řešit i pole teplotní zcela stejným postupem jako v předchozím odstavci (tj. lze zadávat libovolné okrajové podmínky, časové a teplotní závislosti parametrů ap.). Budeme uvažovat jednoduchý případ, kdy přiváděná kapalina má teplotu 100 °C, a všechny stěny s výjimkou horní partie rozšířené části kanálu jsou tepelně izolované (horní stěna má teplotu 20 °C). Změníme parametr EGROUP na stacionární řešení (stacionární řešení to je totiž možné získat u teplotního polet v jediném „časovém“ kroku na jehož délce vůbec nezáleží) a vyzkoušíme dvě varianty řešení, jednou bez protiproudé modifikace („čistá“ Galerkinova metoda) a pak s ní (metoda Galerkin-Petroff). Protiproudá metoda se používá tehdy, jsou-li problémy se stabilitou řešení při vysokých hodnotách Péceletova čísla elementu, tj. při vysokých rychlostech proudění a hrubé síti konečných elementů, nevýhodou je ovšem numerická difuze (v našem případě spíše numerická teplotní vodivost) a zkreslení výsledků. Nastavení této modifikace a řady dalších operačních parametrů lze provést příkazem OPTION (ale stačilo také napsat UPW=1, proměnná UPW označuje „upwind“):

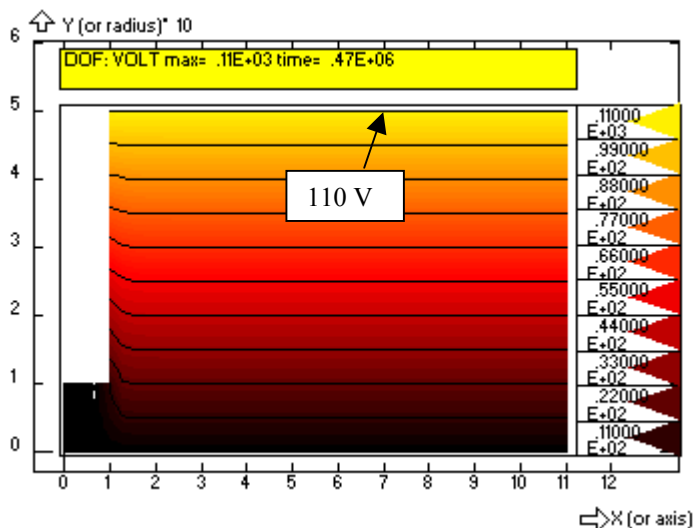
```
NFCR 4,TEMP,-1,100,100;
NFCR 9,TEMP,-1,20,20;
EGROUP 1,FLOW2D,0,7,0,6,0;
SOLVE .463E+06,1,2000,2,0,0,2,0,0;
OPTION 0,0,0,0,0,15,.100E-11,.100E+00,.100E+08,1,.100E-04,.100E-04,0,0,2,0,0;
SOLVE .465E+06,1,2000,2,0,0,2,0,0;
```



Teplotní profil evidentně není zcela vyvinutý a je jasně patrný vliv recirkulační zony. Z výsledků je zřejmé, že protiproudá metoda vůbec nebyla (naštěstí) nutná. Je to možná trochu překvapující, protože Pecletovo číslo elementu je velmi vysoké (i více než 100 u osy kanálu) a stabilita řešení bez umělého zvětšení teplotní vodivosti je zjevně zapříčiněna tím, že na výstupu kanálu jsou pouze přirozené okrajové podmínky.

Pokud bychom chtěli modelovat přímý ohmický ohřev je třeba nejprve vypočítat rozložení elektrického potenciálu. Budeme předpokládat, že elektrody jsou tvořeny protilehlými stranami rozšířené části kanálu a že rozdíl potenciálu je 220 V. Pro zadání okrajových podmínek využijeme antisymetrii potenciálu: na ose  $y=0$  zadáme nulový potenciál a na jedné elektrodě 110 V:

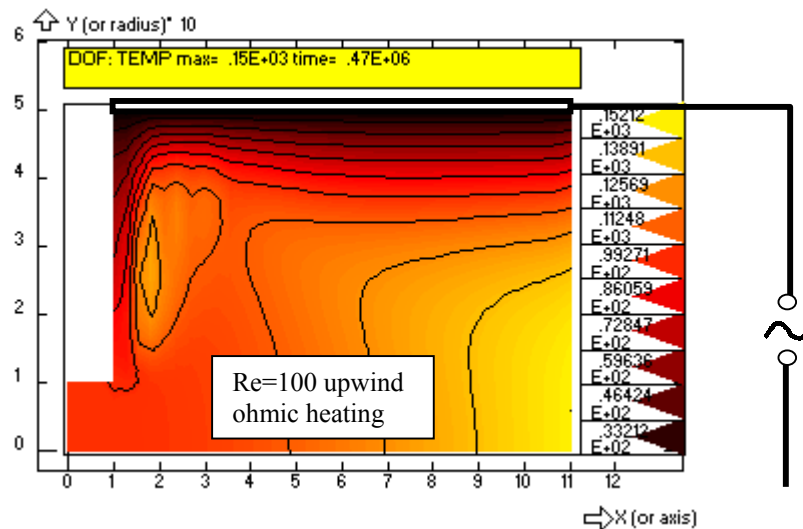
```
NFCR 9,VOLT,-1,110,110;
NFCR 1,VOLT,-1,0,0;
NFCR 5,VOLT,-1,0,0;
SOLVE .467E+06,1,2000,2,1,0,1,0,0;
```





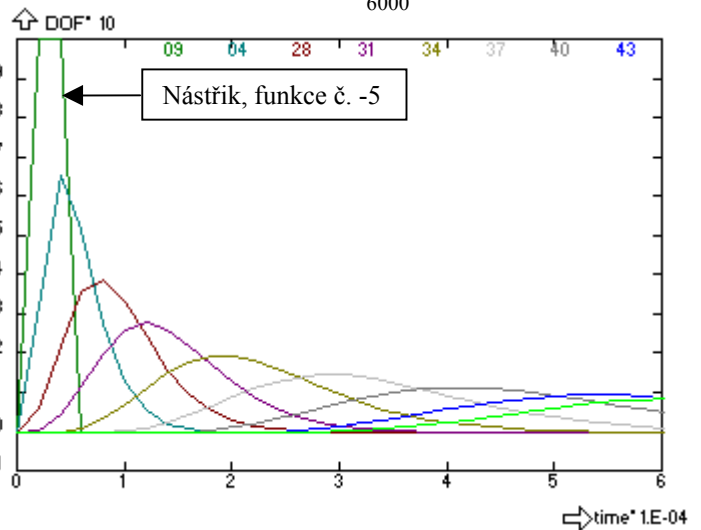
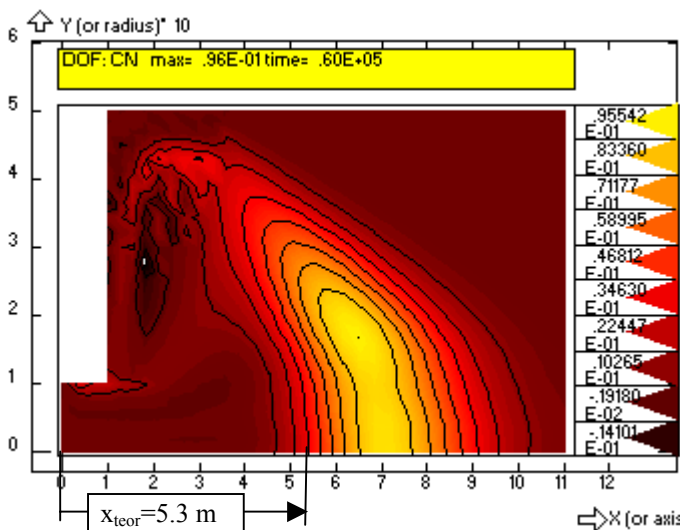
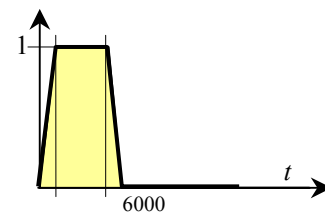
Pro takto vypočtené rozložení elektrického potenciálu stanovíme teplotní pole. Nejprve však musíme nastavit parametr, který zajistí výpočet a respektování objemových zdrojů tepla; použijeme opět příkaz OPTION

```
OPTION 0,0,1,1,0,15,.100E-11,.100E+00,.100E+08,1,.100E-04,.100E-04,1,0,1,0,0;
SOLVE .469E+06,1,2000,2,1,0,1,0,0;
```



Poslední problém, který lze použitím vypočteného rychlostního pole řešit, je přenos hmoty, např. stanovení koncentrace značkovací látky mžikově nastříknuté do vstupního průřezu. Tento případ budeme modelovat tak, že ve všech uzlech vstupního průřezu předepíšeme časový průběh koncentrace značkovací látky  $C_N$  následující tabulkou (tato tabulka představuje funkci číslo -5, kterou aplikujeme na křivce číslo 4 – to je právě vstupní průřez)

```
CURDEF -5,0,5,0,0,1000,1,5000,1,6000,0,1000000,0;
NFCR 4,CN,-5,1,1;
EGROUP 1, FLOW2D,1,7,0,6,0;
SOLVE 0,30,2000,0,0,0,0,1,0;
```



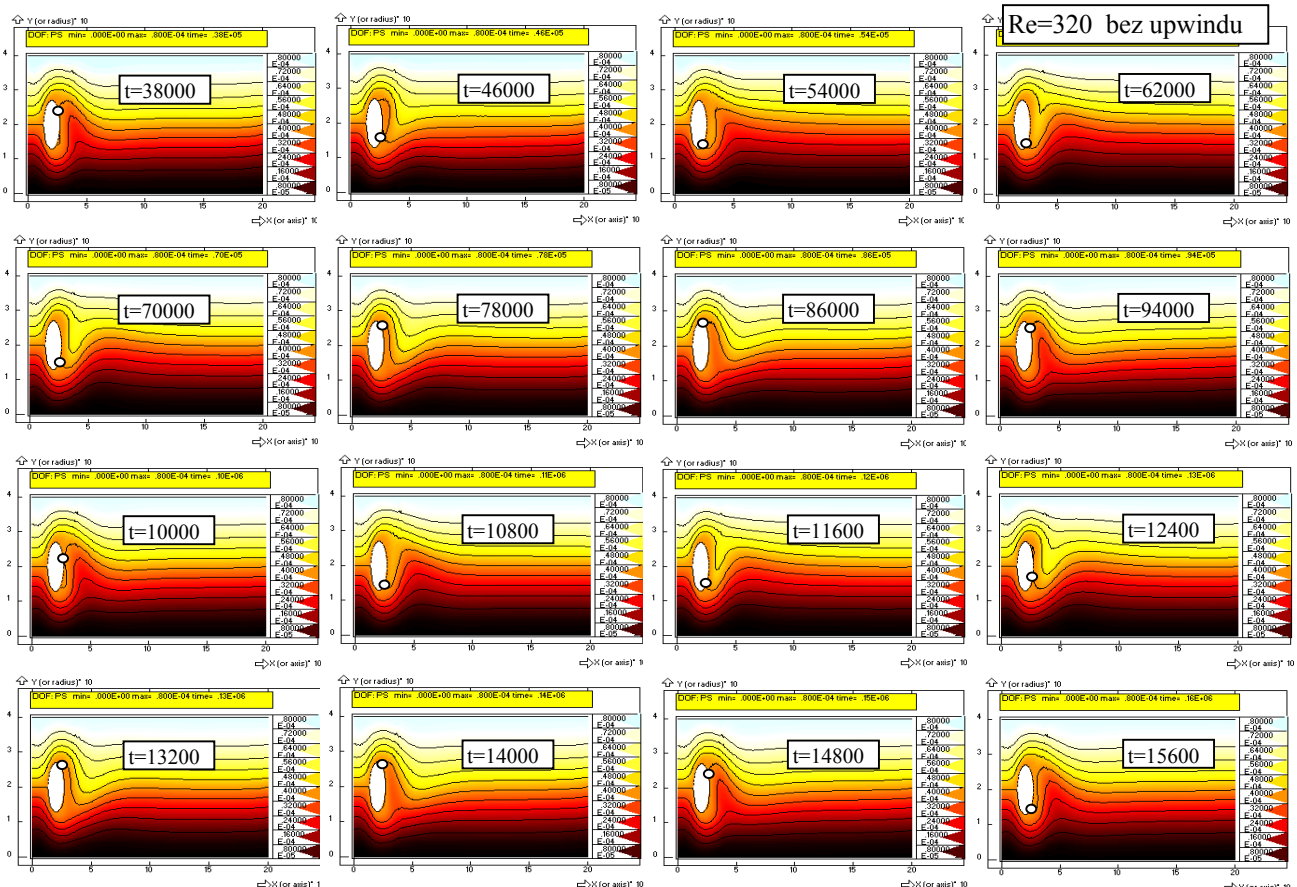
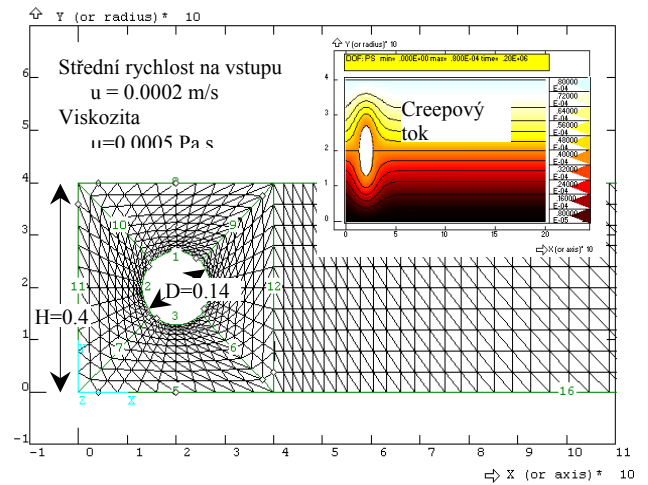
Na obrázku vlevo je rozložení koncentrace značkovací látky v čase 60000 s. Pokud by se kapalina podél celé osy kanálu pohybovala konstantní rychlostí (0.000075 m/s v rozšířené části) měla by značkovací látka dorazit do vzdálenosti 5.3 m. Z grafu je ale patrné, že těžiště částic je dále – zhruba ve vzdálenosti 7 m. To může být (a nepochybně je) způsobeno “seškrcením” průřezu za schodem, ale pochybnosti vyvolává rozložení koncentrace, které je zjevně zkreslené numerickou difuzí (difuzní součinitel  $D_N = 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$  a penetrační hloubka odpovídající času 60000 s je tedy zhruba jen 1.5 cm!).

Předchozí příklad byl zaměřen na stacionární řešení, i když bylo získáno metodou ustalování nestacionárního řešení, protože metoda PSIN to ani jinak neumí. Někdy ovšem stacionární řešení ani neexistuje, příkladem je Karmánova vírová stezka periodicky se odtrhávajících vírů za překážkou v proudu. Na následujících obrázcích je použita metoda PSIN pro vyšetřování toku v rovinném kanálu s příčně obtékaným válcem. Na vstupu do kanálu uvažujeme vyvinutý parabolický rychlostní profil

$$u(y) = \frac{6\bar{u}y}{H} \left(1 - \frac{y}{H}\right)$$

$$\psi(y) = \frac{\bar{u}y^2}{H} \left(3 - 2\frac{y}{H}\right)$$

a na povrchu válce konstantní hodnotu proudové funkce odpovídající průtoku polovinou kanálu. Tento předpoklad není zcela korektní a varianta řešení s proudovou funkcí není obecně řečeno příliš vhodná pro modelování toku kolem uzavřených profilů právě proto, že o hodnotě proudové funkce na povrchu je známo jen to, že musí být konstantní. Hodnota  $\psi$  na povrchu by správně neměla být fixována silnou okrajovou podmínkou a její konstantní hodnota by měla vyplynout z toho, že jsou nulové obě první derivace. Testy však ukázaly, že to tak nefunguje – důvodem může být snad i to, že nebyla použita optimální formulace problému (viz kapitola 4.1.2) a z ní vyplývající přirozené okrajové podmínky pro proudovou funkci.



Výše uvedené výsledky (soubor *karman.geo*) nevykazují při  $Re=320$  (vztáženém na hydraulický průměr kanálu) vznik a odplouvání izolovaných vírů, ale alespoň periodické oscilace proudu za přepážkou s periodou zhruba 50000 s. Této periodě odpovídá hodnota Strouhalova čísla

$$S = \frac{D}{\bar{u}T} = \frac{0.14}{0.0002 \cdot 50000} = 0.014$$

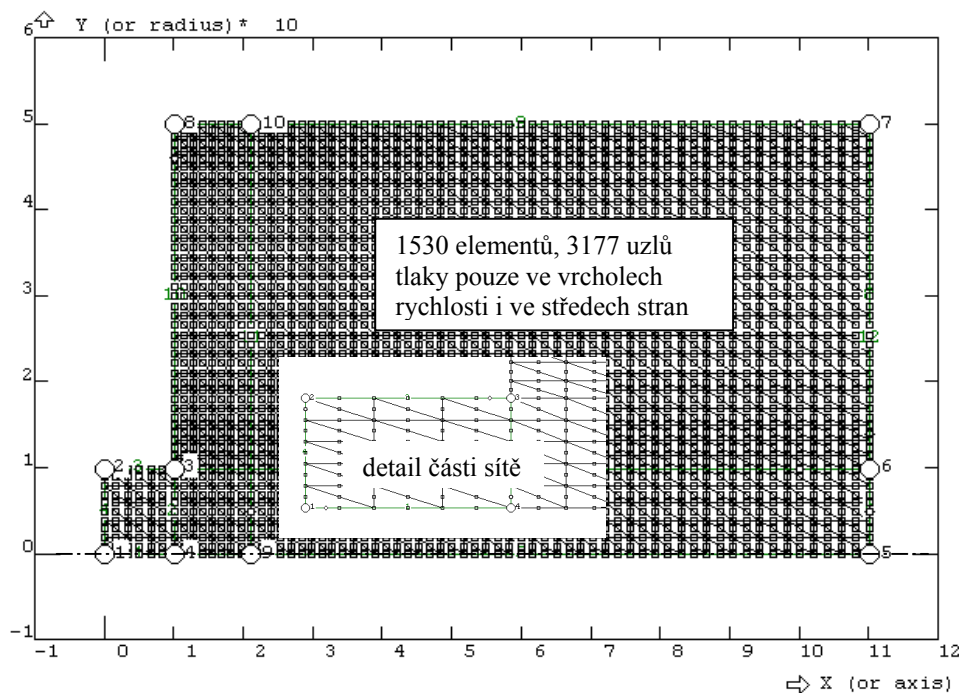
Výsledek numerické simulace je ovšem třeba považovat za neúspěch.



## 2.6. Laminární proudění přímý výpočet rychlostí a tlaku (UVP,UVPP)

Pro řešení dvourozměrného proudového pole, lze použít i skupinu metod (UVP,UVPP,PENS), které počítají přímo složky rychlostí a tlaky (a pro ně je třeba zadávat okrajové podmínky). Všechny tyto metody jsou implementovány pro trojúhelníkové elementy buď se 6ti uzly (ve vrcholech a středech stran v nichž se počítají rychlosti, tlaky se počítají jen ve vrcholech), případně se 4mi uzly (rychlosti se počítají ve vrcholech a tlak pouze ve čtvrtém uzlu, který je v těžišti elementu). U těchto metod lze použít upwind pro zlepšení konvergence při vyšších hodnotách Reynoldsova čísla.

Jako příklad použijeme tutéž úlohu jako v předchozí kapitole, tj. proudění v symetrickém rovinném kanálu s náhlým rozšířením průřezu. Zachováme geometrii i okrajové podmínky (parabolický rychlostní profil ve vstupním průřezu a  $Re=100$ ), ale musíme použít jiné elementy: trojúhelníky se šesti uzlovými body (ve vrcholech jsou počítány rychlosti a tlaky, zatímco ve středech stran pouze rychlosti). Počty elementů ponecháme stejné jako u modelu s proudovou funkcí, ale počet uzlů se pochopitelně zvýší.



C\* Opening TEST date:22.04.03 at 11:28

```

ANALYS 1;
SCALE -.500E-02,12,-.500E-02,.6;
PT 1,.000E+00,.000E+00;
PT 2,.000E+00,.100E+00;
PT 3,.100E+01,.100E+00;
PT 4,.100E+01,.000E+00;
PT 5,1.100E+01,.000E+00;
PT 6,1.100E+01,.100E+00;
PT 7,1.100E+01,.500E+00;
PT 8,.100E+01,.500E+00;
SF4PT 1,1,4,3,2;
SF4PT 2,4,5,6,3;
SF4PT 3,3,6,7,8;
EGROUP 1,FLOW2D,0,7,0,UVP,0;
MSF 1,3,5,1,1,6;
MSF 2,30,5,1.5,1,6;
MSF 3,30,20,1.5,-1.5,6;
NMERGE ;
FUNDEF -4,0.000375*(1-100*YY**2);
FUNDEF -3,0.75E-4*(1-(YY/.5)**2);
NFCR 4,VX,-4,1,1;
NFCR 4,VY,-1,0,0;
    
```

Volba typu elementu FLOW2D a metody řešení UVP (rychlosti a tlak jako primitivní proměnné)

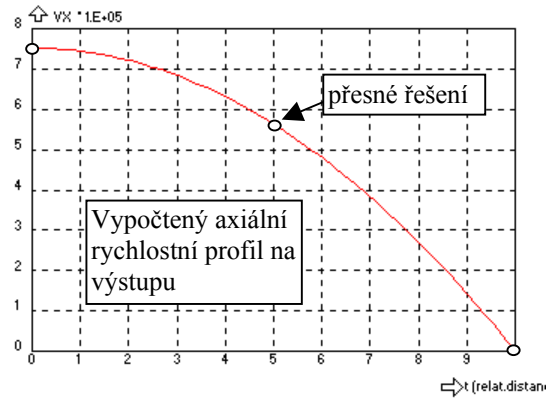
Varianty UVP, UVPP vyžadují trojúhelníkové elementy se 6 nebo 4mi uzly. Šestiuzlové elementy s kvadratickou aproximací rychlostí a lineární aproximací tlaku jsou považovány za lepší než 4uzlové.

Funkce číslo -4 definuje rychlostní profil na vstupu a funkce číslo -3 na výstupu (ve výstupním průřezu je ale vhodnější použít přirozenou okrajovou podmínku).

```

NFCR 1, VY, -1, 0, 0;
NFCR 5, VY, -1, 0, 0;
NFCR 3, VY, -1, 0, 0;
NFCR 10, VY, -1, 0, 0;
NFCR 9, VY, -1, 0, 0;
NFCR 3, VX, -1, 0, 0;
NFCR 10, VX, -1, 0, 0;
NFCR 9, VX, -1, 0, 0;
NFCR 8, VX, -3, 1, 1;
tol=tol*5
NFCR 6, VX, -3, 1, 1;
NFCR 6, VX, -3, 1, 1;
NFCR 6, VY, -1, 0, 0;

```



Poznámka: Pro tlaky nezadááme žádnou silnou okrajovou podmínku! Otevřeně řečeno s vlivem silných okrajových podmínek na výsledek řešení nemám žádné zkušenosti.

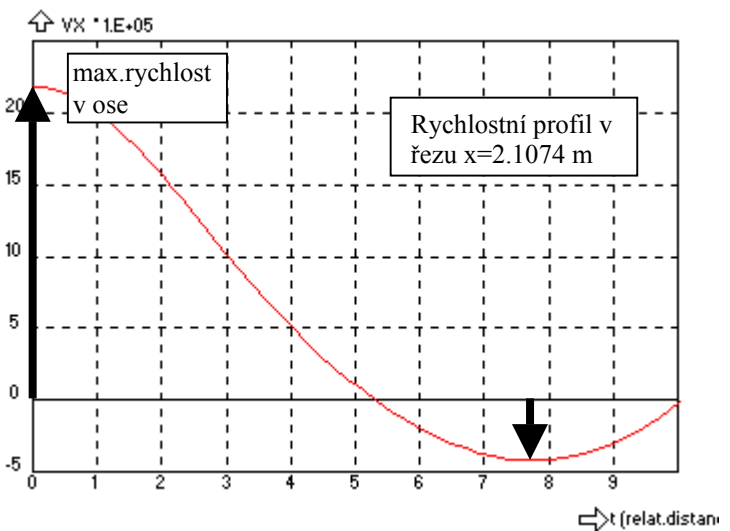
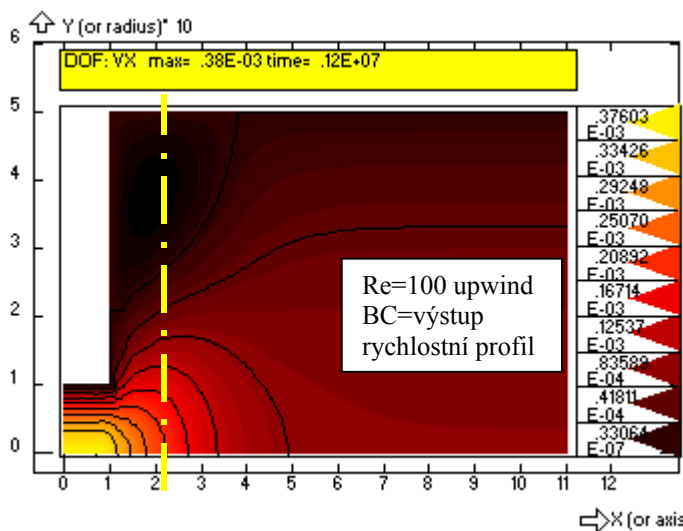
Poznámka: Příkazy NFCR byly zadávány silné okrajové podmínky pro rychlosti VX a VY. Příkaz NFCR funguje tak, že se hledají uzly, které mají od zvolené křivky vzdálenost menší než TOL a těm se pak přiřadí specifikované hodnoty. Někdy se stane (důsledkem zaokrouhlovacích chyb), že body, které by na křivce správně měly ležet, jsou vyhodnoceny jako body ležící mimo toleranci a pak nezůstává nic jiného než tuto toleranci zvětšit (viz. příkaz TOL=5\*TOL). To, že mezi uzly a křivkami není žádná přímá konektivita, má i své výhody. Je možné např. dodatečně definovat libovolnou křivku a vykreslit průběh řešení, které odpovídá uzlům, které jsou ve vzdálenosti menší než TOL (vykreslování průběhů v řezech).

```

OPTION 0,0,0,1,0,15, .100E-11,1, .100E+08,1, .100E-04, .100E-04,0,3,0,0,0,0;
SOLVE .604E+06,20, .300E+05,0,0,3,0,0,0;
PT 9, 2.1074, 0;
PT 10, 2.1074, .5;
CR2PT 11, 9, 10;
GCR 11
CR2PT 12, 5, 7;
GCR 12

```

Ukázka toho, jak vykreslit průběh axiální složky rychlosti ve zvoleném řezu, na dodatečně definované křivce číslo 11 (viz následující obr.), nebo v celém výstupním průřezu dodefinované křivkou 12 (viz předchozí obr.).

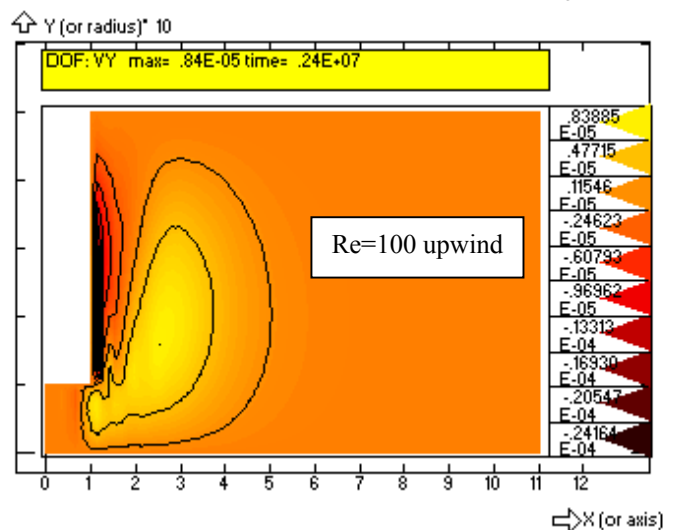
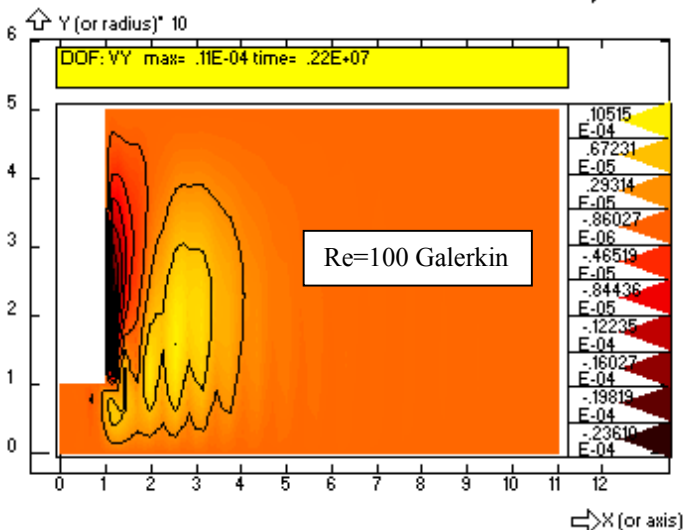
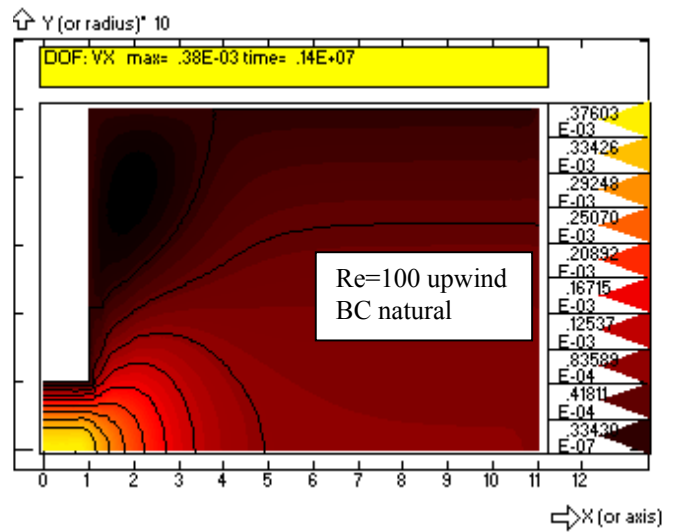
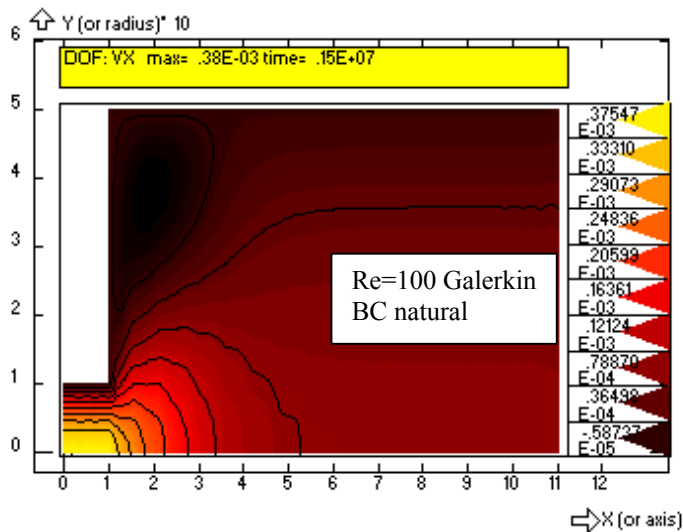


Na následujících obrázcích jsou uvedeny některé výsledky výpočtů, lišící se použitím silných a přirozených (natural BC) okrajových podmínek ve výstupním průřezu, metodou řešení (UVP nebo UVPP – metoda založená na konceptu pseudostlačitelnosti kapaliny, přičemž míra stlačitelnosti je dána parametrem LAMBDA) a tím, zda se použijí váhové funkce orientované dle směru proudění (upwind), či nikoliv, tj. zda se použije klasická Galerkinova metoda. Tyto podmínky a parametry lze nastavit příkazy OPTION a EGROUP, ale třeba i jednodušeji přiřazovacími příkazy.

```

EGROUP 1, FLOW2D, 0, 7, 0, UVPP, 0;
OPTION 0, 0, 0, 1, 0, 15, .100E-11, 1, .100E+08, 1, .100E-04, .100E-04, 0, 3, 0, 0, 0;
LAMBDA=1000
SOLVE .243E+07, 2, .300E+05, 0, 0, 3, 0, 0, 0;

```



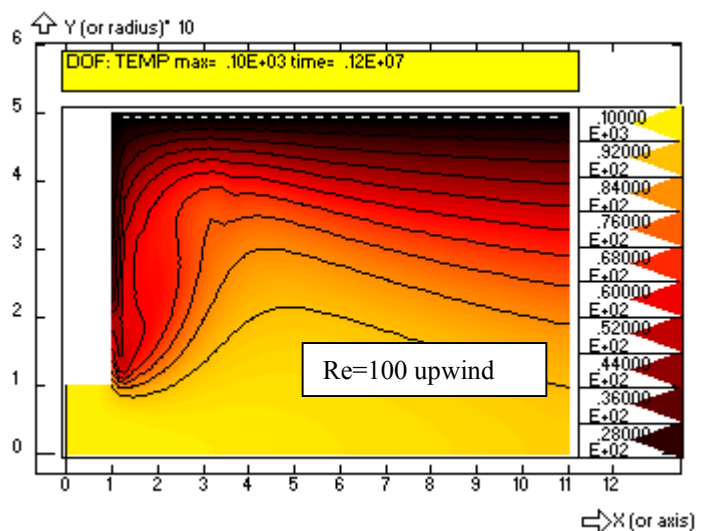
Na těchto výsledcích není nic překvapivého. Zvláště na průbězích příčné složky rychlosti VY je patrný vyhlazovací vliv protiproudé modifikace (upwind), ale zdá se, že zkreslení numerickou disperzí není příliš výrazné. Ukázalo se, že metoda UVPP (pseudostlačitelnost) výsledky prakticky neovlivní a to bez ohledu na hodnotu součinitele  $\lambda$  (grafy pro  $\lambda=10^3$ ,  $10^7$  jsou prakticky shodné s předchozími).

Stejně jako v předchozí kapitole použijeme vypočtené rychlostní pole pro stanovení pole teplotního, opět pro okrajové podmínky  $100^\circ\text{C}$  na vstupu a  $20^\circ\text{C}$  na horní straně rozšířené části průřezu. Stačí stacionární řešení (viz. EGROUP) a jediná iterace (viz. SOLVE)

```

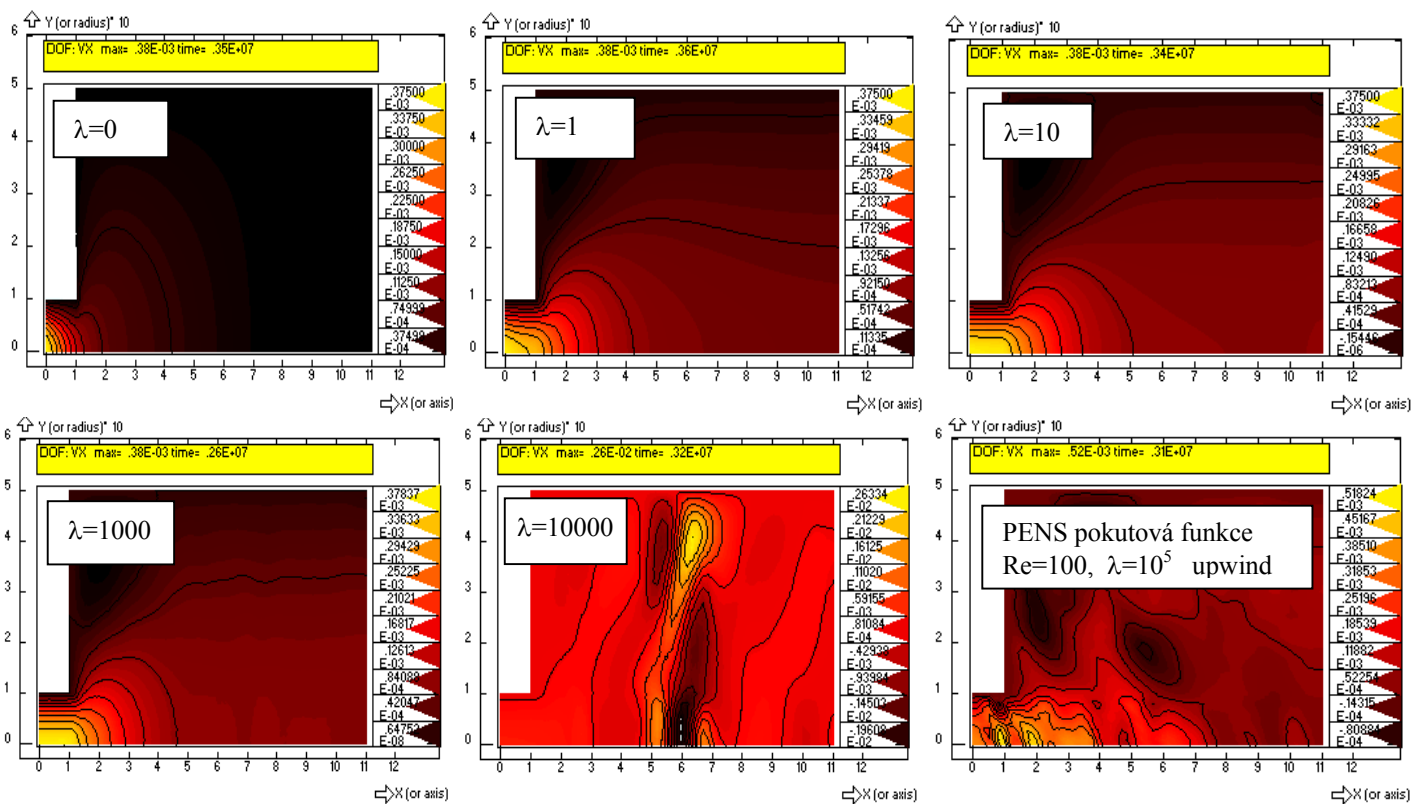
NFCR 4, TEMP, -1, 100, 100;
NFCR 9, TEMP, -1, 20, 20;
EGROUP 1, FLOW2D, 0, 7, 0, 1, 0;
SOLVE .120E+07, 1, .300E+05, 0, 0, 0, 1, 0, 0;

```



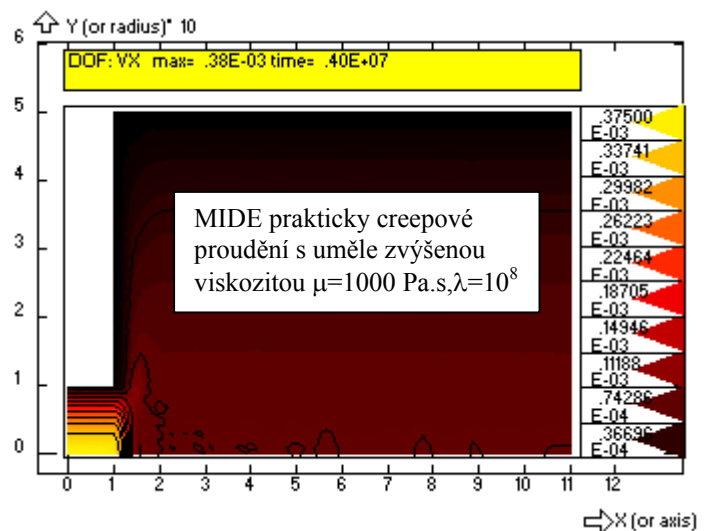
Metoda pokutové funkce (PENS) se od předchozích metod (UVP a UVPP) výrazně odlišuje. Především tím, že vůbec nepočítá tlaky a lze tedy použít víceméně libovolné elementy (trojúhelníky i čtyřúhelníky s libovolným počtem uzlů). Tlak je eliminován tím, že je považován za úměrný divergenci rychlosti a tato divergence (krát volitelný parametr  $\lambda$ ) je dosazena do Navierových Stokesových rovnic místo tlaku. Jednoduchost metody je ale vykoupena tím, že výsledky jsou poměrně značně ovlivněny volbou penalizačního parametru  $\lambda$  - pokud je příliš malý nebude respektována rovnice kontinuity a pokud je zase příliš velký zvrhnou se Navierovy Stokesovy rovnice vlastně jen na rovnici kontinuity, která sama o sobě nemá jednoznačné řešení. Je to snad dobře patrné z následujících obrázků, počítaných pro různé hodnoty  $\lambda$  od nuly až do  $10^8$  (ve všech případech byl použit upwind a přirozené okrajové podmínky ve výstupním průřezu)

```
EGROUP 1, FLOW2D, 0, 7, 0, PENS, 0;
SOLVE .249E+07, 2, .300E+05, 0, 0, 3, 0, 0, 0;
LAMBDA=1E8
SOLVE .261E+07, 5, .300E+05, 0, 0, 3, 0, 0, 0;
```



Kromě metod UVP, UVPP, PENS jsou ve Femíně implementovány i jednoduché lineární metody pro výpočet aproximace rychlostního pole založené na minimalizaci dissipované energie (MIDE), event. kinetické energie (MIKE); upřímně řečeno MIKE se ukazuje jako nepoužitelná a MIDE jen pro aproximaci plouživého proudění (velmi vysoká viskozita  $\mu=1000$  Pa.s). Stačí ovšem jediná iterace.

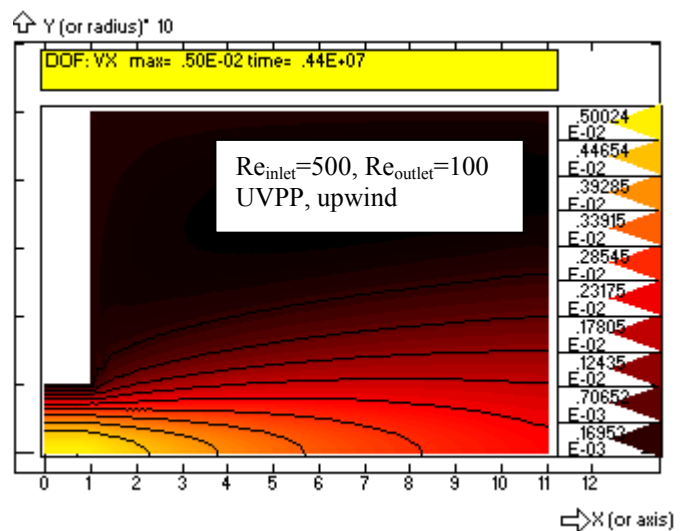
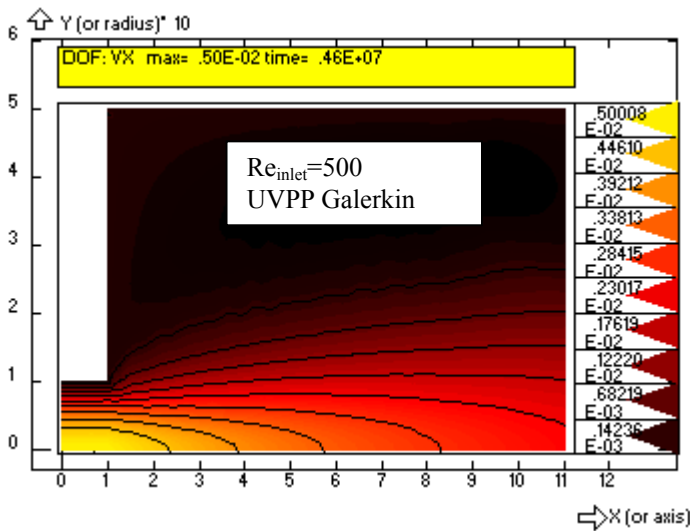
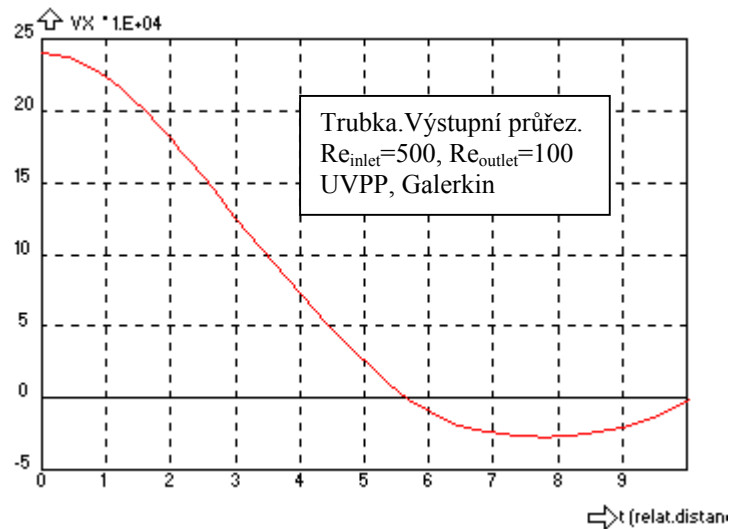
```
EGROUP 1, FLOW2D, 0, 7, 0, MIDE, 0;
LAMBDA=1E8
VISC (1) =1000
SOLVE .393E+07, 1, .300E+05, 0, 0, 1, 0, 0, 0;
```



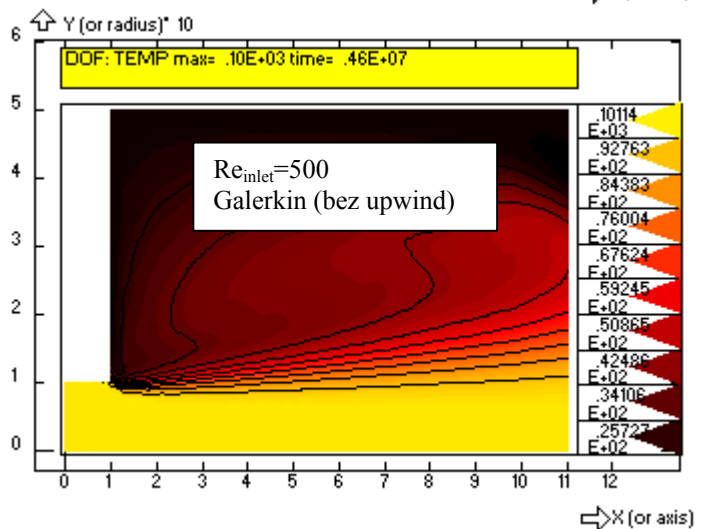
Celý postup použitý pro řešení rychlostního a teplotního pole v rovinném kanále je možné aplikovat i na proudění v kanále s kruhovým průřezem pouhou změnou souřadného systému na cylindrický (příkazem EGROU). Ukážeme jen některé výsledky řešení toku v trubce s náhlým rozšířením, se stejnou sítí elementů, ale změněným rychlostním profilem na vstupu, modifikovaným tak, aby Reynoldsovo číslo v rozšířené části průřezu bylo opět  $Re=100$  (v nátokové trubce je ale na rozdíl od rovinného kanálu Reynolds vyšší, 500).

```
FUNDEF -4,50E-4*(1-100*YY**2);
NFCR 4,VX,-4,1,1;
```

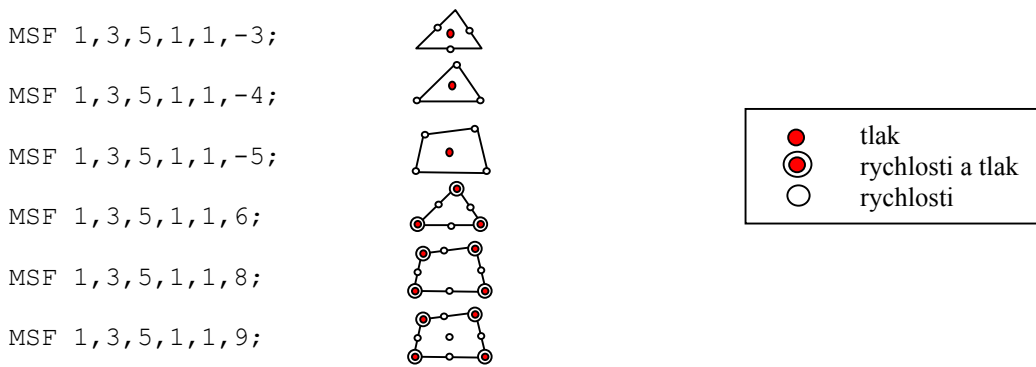
Z následujících obrázků je patrné, že vliv proudu vytékajícího z nátokové trubky se uplatní do podstatně větší vzdálenosti, a proudění ve výstupním průřezu není stabilizované. Nicméně přirozené okrajové podmínky zajistí to, že i ve výstupním průřezu jsou výsledky přijatelné i když až sem zasahuje recirkulační zóna a některé axiální rychlosti jsou záporné, viz radiální profil axiální složky rychlosti. Rozdíly mezi výsledky získanými použitím protiproudé modifikace (upwind) a Galerkinovou metodou jsou zanedbatelné:



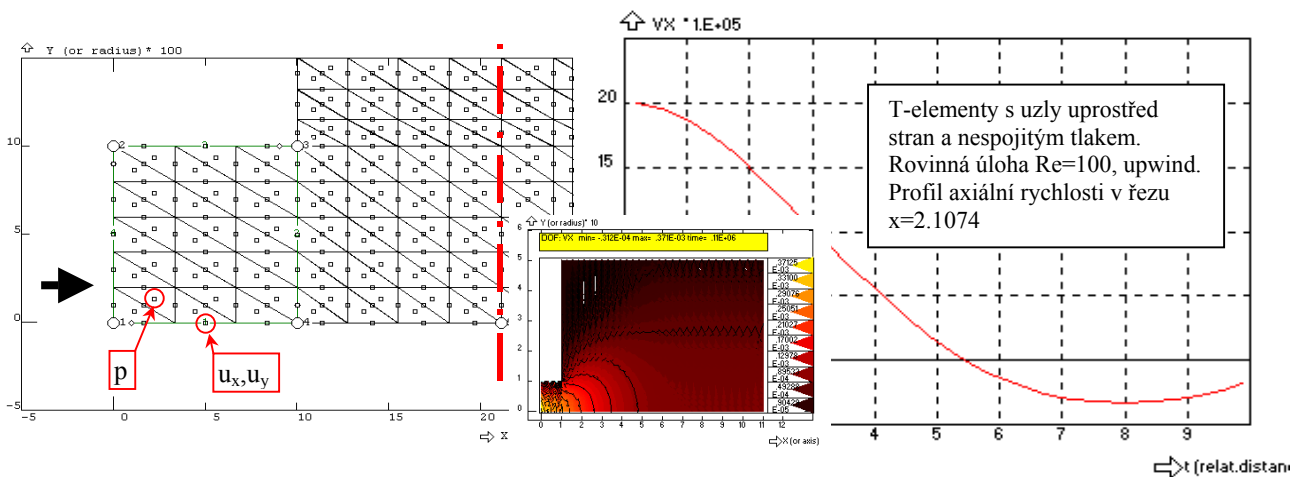
Spíše jen pro úplnost uvádíme i grafické znázornění vypočteného teplotního pole z něhož je dobře patrné to, jak výrazně se prodloužil dosah paprsku vytékající kapaliny. Okrajové podmínky byly stejné jako předchozího případu, tj.  $100^{\circ}\text{C}$  na vstupu a  $20^{\circ}\text{C}$  na povrchu rozšířené trubky.



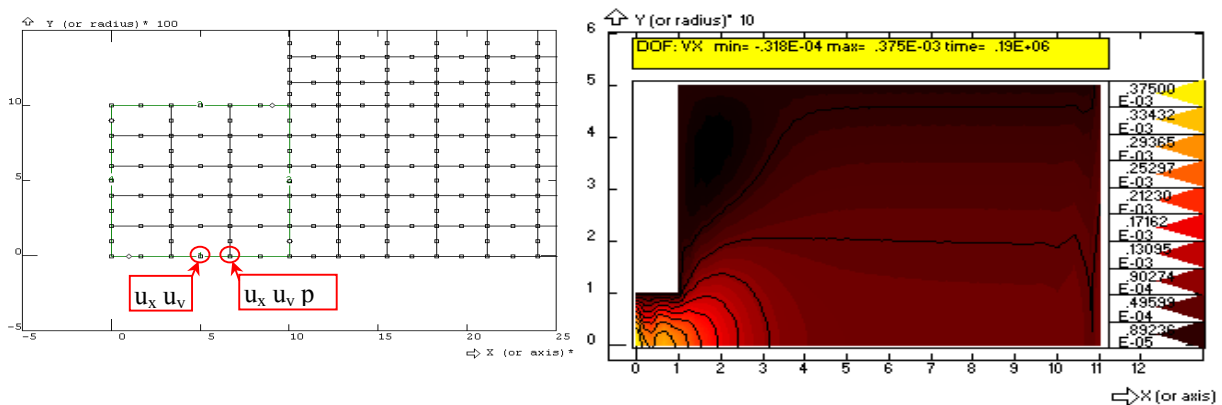
U metod UVP a UVPP lze použít i jiné typy elementů než šestiuzlové trojúhelníky, stačí použít jen jinou síť, tj. změnit parametry příkazů MSF. Přípustné alternativy jsou



Na následujících obrázcích je ukázka použití trojúhelníků se třemi uzly uprostřed stran (rychlosti) a tlakem v těžišti. Tento element je nekompatibilní v tom smyslu, že bázové funkce jsou nespojitě po obvodě elementů (rychlosti jsou spojité pouze v uzlech). Přesto tento element, na rozdíl od příbuzného trojúhelníkového elementu s uzly ve vrcholech, funguje. Problémy s elementem, kde rychlosti jsou lokalizovány ve vrcholech, je tendence k „locking“ - zablokování, daná tím, že počet stupňů volnosti rychlostí (tj. počet vrcholů krát 2) je ve srovnání s počtem elementů a tedy počtem stupňů volnosti pro tlaky, příliš malý. To znamená, že rychlostí je příliš málo na to, aby zajistily splnění rovnice kontinuity a ještě Navierovy Stokesovy rovnice.



Ukázka použití čtyřúhelníkového osmiuzlového elementu na následujícím obrázku ukazuje, že s jeho implementací asi není něco v pořádku, i když tento typ elementů by měl být jeden z nejlepších.





## 2.7. Potrubní síť (PIPE)

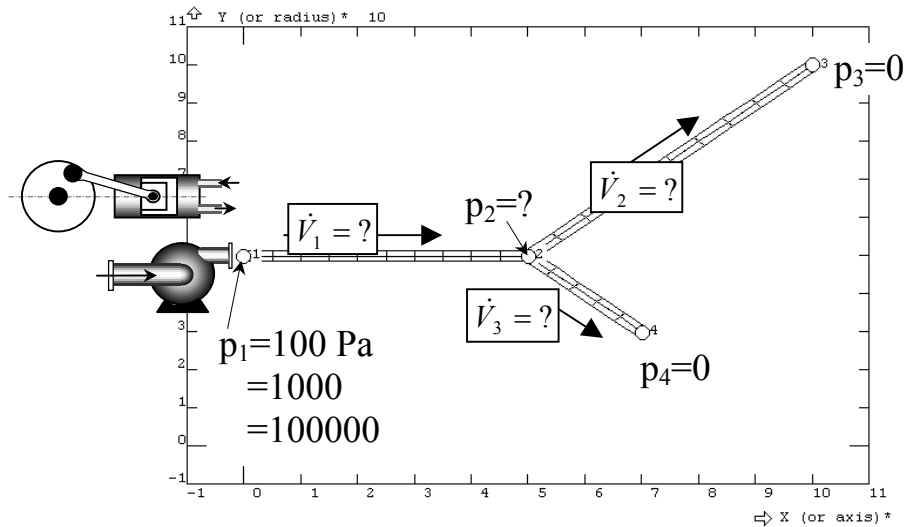
V programu FEMINA jsou implementovány operace umožňující stanovit rozložení tlaků a průtoků při toku kapaliny v potrubní síti, tvořené dvouuzlovými elementy (pipe) nebo čtyřuzlovými elementy výměníků tepla. Uvažuje se laminární i turbulentní režim proudění, vliv vztlaku a řešení lze rozšířit i na reologicky komplikovanější kapaliny (co nelze řešit je dynamika stlačitelných tekutin – hydraulický ráz). Kromě hydraulických poměrů lze vypočítat i rozložení teplot v kapalině a koncentrací značkovací látky (ve stacionárním i nestacionárním režimu). Součástí potrubní sítě mohou být nejenom přímé úseky potrubí, ale i výměníky tepla, ideální mísiče nebo aparáty s hydraulickou charakteristikou zadanou uživatelem programu (např. čerpadla). Na základě vypočtených tlaků a teplot je možné řešit i problém dimenzování potrubí s ohledem na dilatační a tlakové zatížení.

Jako úvodní příklad uvedeme výpočet tlakových ztrát v jednoduché potrubní síti, tvořené třemi úseky s rozvětvením proudu. Vnitřní průměr všech trubek je stejný ( $D=5$  mm) a kapalina, která jimi protéká, je voda. Ve všech koncových bodech sítě zadáme tlaky (na výstupu nulové, tlak na vstupu budeme měnit).

```
PT 1, .000E+00, .500E+00;
PT 2, .500E+00, .500E+00;
PT 3, .100E+01, .100E+01;
PT 4, .700E+00, .300E+00;
CR2PT 1, 1, 2;
CR2PT 2, 2, 3;
CR2PT 3, 2, 4;
```

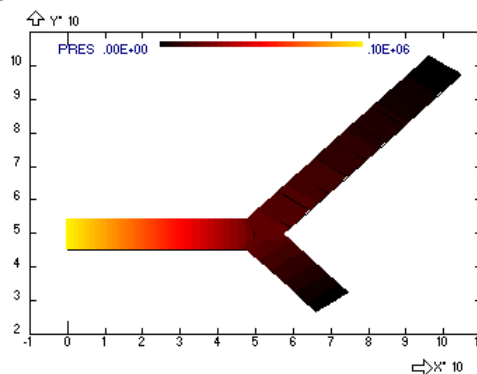
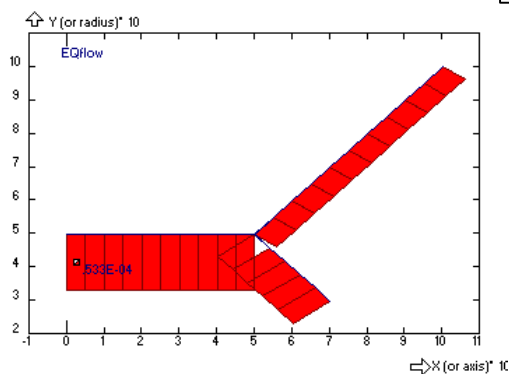
```
EGROUP 1, PIPE2D, 0, 0, 0;
RCONST 1, PIPE2D, 0.005;
MPROP 1, PIPE2D, .600E+00, 0, 4200, 0, 998, 0, .400E-01, 0, .210E+12, 0, .280E+00, 0, .100E-02, 0, .500E-03, 0, .100E-08, 0, 0;
MCR 1, 10, 1, 2;
MCR 2, 10, 1, 2;
MCR 3, 5, 1, 2;
NMERGE ;
```

```
NFPT 1, PRES, -1, 100000;
NFPT 3, PRES, -1, 0;
NFPT 4, PRES, -1, 0;
SOLVE 0, 1, 0, 0, 0, 20, 0, 0, 0;
NFPT 1, PRES, -1, 1000;
SOLVE 0, 1, 0, 0, 0, 10, 0, 0, 0;
```



Generování sítě na křivkách 1 až 3. Druhý parametr je počet elementů, třetí parametr (1) určuje ekvidistantní dělení, a poslední parametr (2) počet uzlů elementu.

Zobrazení výsledků příkazy GE1 (parametry elementů EQ-objemový průtok, ERE-Reynoldsovo číslo, ETAU-smykové napětí na stěně) a GD1 (PRES – rozložení tlaků).



Výsledky těchto výpočtů jsou tlaky v uzlových bodech a z nich dopočítávané průtoky ukládané jako parametry jednotlivých elementů (pro rychlou inspekci výsledků lze použít NID, EID – identifikace parametrů myši). Třem různým zadávaným tlakům  $10^2$ ,  $10^3$ ,  $10^5$  na vstupu odpovídají různé režimy proudění: laminární, smíšený a turbulentní – v následující tabulce jsou uvedeny výsledky, které na všechny platné cifry souhlasí s přesným analytickým řešením

$p_1$ [Pa]	$p_2$ [Pa]	$\dot{V}_1$ [ml/s]	$\dot{V}_2$ [ml/s]	$\dot{V}_3$ [ml/s]
100	28.8	2.18 (Re=555)	0.624 (Re=159)	1.56 (Re=397)
1000	288	21.8 (Re=5550)	6.24 (Re=1590)	15.6 (Re=3170)
100000	20000	53.3 (Re=13500)	19.8 (Re=5040)	33.5 (Re=8500)

V případě, že na vstupu nebude zadáván tlak, nýbrž objemový průtok (tj. když např. místo odstředivého čerpadla nebo tlakového zásobníku bude pístové čerpadlo), nezadává se jako uzlový parametr tlak, ale intenzita zdroje, tj. průtok ( $m^3/s$ ),

```
NFPT 1, PRES, 2, 0.5e-4;
SOLVE 0, 1, 0, 0, 0, 10, 0, 0, 0;
```

Změna statusu uzlového parametru PRESS na 2, a zadání hodnoty průtoku  $\dot{V}_1 = 50 \text{ ml/s}$  (status 2 je kladné číslo, takže parametr 0.5E-4 definuje zdrojový člen - kdyby byl status záporný, určoval by parametr hodnotu tlaku).

$p_1$ [Pa]	$p_2$ [Pa]	$\dot{V}_1$ [ml/s]	$\dot{V}_2$ [ml/s]	$\dot{V}_3$ [ml/s]
89500	17900	50	18.6	31.4

Poněkud komplikovanější je výpočet tlakových ztrát a průtoků nenewtonských kapalin. Jsou dvě možnosti: buď se pro každý element zadá jeho předpočítaná nenewtonská průtoková charakteristika  $\dot{V}(\Delta p)$ , nebo, což je jednodušší a elegantnější, se zadá jen konstitutivní rovnice reologického modelu použité kapaliny (FEMINA v tomto případě numericky integruje v každém elementu Rabinowitsch, Mooney Weissenbergovu rovnici, viz Steffe 1996). Reologický model definujeme jako funkci  $\dot{\gamma}(\tau)$ , kde  $\dot{\gamma}$  je rychlost deformace (1/s) a  $\tau$  je odpovídající smykové napětí. Příklad: Pro patrně nejpoužívanější mocninový model použijeme konstitutivní rovnici

$$\dot{\gamma} = \left(\frac{\tau}{K}\right)^{1/n} \quad (\text{při toku v trubce jde o prostý smykový tok, pročež nebylo nutné zavádět tenzory}),$$

kde  $K$  je koeficient konzistence a  $n$  je index toku. Pokud by bylo vypočteno i teplotní pole (viz dále) je do reologického modelu možné zahrnout i teplotní závislost, např. jako teplotní závislost koeficientu konzistence  $K$ . Parametry modelu mohou být konstanty, ale zpravidla je výhodnější použít proměnné (použijeme např. proměnnou  $A$  v roli koeficientu konzistence a proměnnou  $B$  jako index toku). Smykové napětí je předdefinovaná proměnná  $TAU$ .

```
FUNDEF 1, (TAU/A) ** (1/B);
A=1
B=.8
```

To, že takto definovaná funkce číslo 1 má nahradit reologický model Newtonské kapaliny se zadá jako materiálový parametr, jako nenulový index funkce u parametru viskozita (připomeňme, že každá materiálová vlastnost je charakterizována dvěma čísly: hodnotou parametru a indexem funkce). V případě, že je index viskozitní funkce nenulový a když tato viskozitní funkce závisí na smykovém napětí  $TAU$ , zadávaná hodnota viskozity u elementu PIPE2D se vůbec neuplatní (tento materiálový parametr může mít význam jen u nestandardních elementů typu ventil nebo čerpadlo, kde nelze použít Rabinowitschovu rovnici).

```
MPROP 1, PIPE2D, .600E+00, 0, 4200, 0, 998, 0, .400E-01, 0, .210E+12, 0, .280E+00, 0, .100E-
02, 1, .500E-03, 0, 0, 0, 0, 0, 0;
SOLVE 0, 1, 0, 0, 0, 20, 0, 0, 0;
```



Výpočet lze opakovat pro různé hodnoty indexu toku  $n$  ( $K=1 \text{ Pa}\cdot\text{s}^n$ ,  $p_1=1000 \text{ Pa}$ ) a získat tak následující tabulku – výsledky opět naprosto přesně souhlasí s analytickým řešením (v laminárním režimu)

n (index toku)	$p_2$ [Pa]	$\dot{V}_1$ [ml/s]	$\dot{V}_2$ [ml/s]	$\dot{V}_3$ [ml/s]
0.8	312	0.0227	0.00549	0.0173
0.6	335	0.0246	0.00438	0.0202
0.4	352	0.0298	0.00273	0.0270
0.2	361	0.0639	0.000648	0.0633

Poznamenejme, že čím menší je index toku, tím silnější je nelinearita modelu a tím více je třeba iterací k dosažení konvergence. Například při hodnotách indexu toku  $n < 0.5$  iterace nekonvergují a bylo třeba snížit relaxační faktor (systémová proměnná RELFAKT):<sup>4</sup>

```
B=.4
RELFAKT=.2
SOLVE 0,10,0,0,0,20,0,0,0;
B=0.2
SOLVE 0,10,0,0,0,20,0,0,0;
```

Zcela analogickým způsobem je možné modelovat i tok Binghamské kapaliny

$$\dot{\gamma} = \max\left(0, \frac{\tau - \tau_0}{\mu_p}\right) \quad \text{FUNDEF 2, max(0, (TAU-A)/B);}$$

kde  $\tau_0$  je mez toku a  $\mu_p$  je plastická viskozita nebo kapaliny Herschel Bulkey

$$\dot{\gamma} = \left[\max\left(0, \frac{\tau - \tau_0}{K_p}\right)\right]^{1/n} \quad \text{FUNDEF 3, (max(0, (TAU-A)/B))**(1/C);}$$

kde  $\tau_0$  je mez toku (parametr modelu A),  $K_p$  je koeficient platické konzistence (proměnná B) a  $n$  je index toku (proměnná C).

V předchozí ukázce byl použit základní typ elementů PIPE2D. Tyto elementy se mohou použít i pro modelování singulárních prvků s atypickými hydraulickými charakteristikami (třeba ventily). Hydraulická charakteristika je zadávána jako funkce  $\varphi(\Delta p, \text{Re})$ , která je rovna poměru průtoku elementem  $\dot{V}$  a rozdílu tlaků  $\Delta p = p_1 - p_2$  (s odpočtem hydrostatické výšky, rozdíl tlaků  $\Delta p$  charakterizuje pouze třecí ztráty). Index takto definované charakteristiky se zadá jako parametr příslušné skupiny elementů EGROUP. Pokud je funkce  $\varphi$  kladná, popisuje hydraulickou charakteristiku „pasivního“ prvku, u něhož kladný průtok (směrem z prvního do druhého uzlu elementu) odpovídá poklesu tlaku (kladné  $\Delta p$ ). Něco jiného je čerpadlo, kde kladnému průtoku odpovídá protitlak, tj.  $\Delta p < 0$ , a charakteristika  $\varphi = \dot{V} / \Delta p$  je tudíž záporná. Tento postup je technicky vzato možné použít vždy, ale u čerpadel není příliš praktický, protože je třeba z hydraulické charakteristiky čerpadla  $\dot{V}(\Delta p)$  přepočítávat charakteristiku  $\varphi(\Delta p, \text{Re}) < 0$ . A nejenom to, při řešení se často objevují potíže s konvergencí. Proto je ve FEMINě naprogramován speciální konečný element typu čerpadlo (název elementu PUMP), u kterého se místo funkce  $\varphi = \dot{V} / \Delta p$  zadává přímo hydraulická charakteristika čerpadla  $\dot{V}(\Delta p)$ , což budeme demonstrovat na následující ukázce dvou potrubních úseků s vřazeným čerpadlem, které má lineární hydraulickou charakteristiku

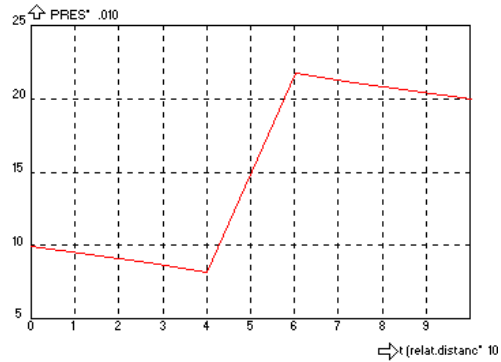
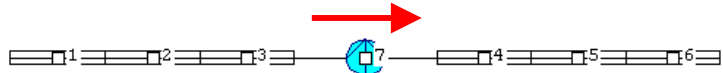
$$\dot{V} = 2 \cdot 10^{-7} \left(1 - \min\left(0.9, \frac{|\Delta p|}{2000}\right)\right)$$

<sup>4</sup> To, že je něco v nepořádku, lze poznat kontrolou, zda součet průtoků ve styčných uzlech potrubních větví je nula. V našem případě průtok první větví (měl by být stejný ve všech elementech 1 až 10) se musí rovnat součtu průtoků ve větvích 2 a 3. Pokud to nesouhlasí, je třeba zvýšit počet iterací a eventuálně snížit RELFAKT.

C\* Opening test date:02.06.03 at 15:53

```
PT 1, .000E+00, .500E+00;
PT 2, .400E+00, .500E+00;
PT 3, .600E+00, .500E+00;
PT 4, .100E+01, .500E+00;
CR2PT 1, 1, 2;
CR2PT 2, 3, 4;
CR2PT 3, 2, 3;
MCR 1, 3, 1, 2;
MCR 2, 3, 1, 2;
EGROUP 2, PUMP, 0, 1, 0;
MCR 3, 1, 1, 2;
NMERGE ;
RCONST 1, PIPE2D, .005;
NFPT 1, PRES, -1, 1000;
NFPT 4, PRES, -1, 2000;
VISC (1)=1
FUNDEF 1, 2E-7*(1-MIN(.9, ABS(DP)/2000));
SOLVE 4, 3, 1, 0, 0, 2, 0, 0, 0;
```

Funkce č.1 popisuje charakteristiku čerpadla  $\dot{V} = f(\Delta p)$



Čerpadla lze vybírat i z katalogu (soubor PUMPS.TXT), kde jsou uloženy základní charakteristiky čerpadel (vesměs firmy SIGMA). Každý záznam obsahuje typové označení čerpadla, oblast aplikací, obrázek čerpadla, průměr sacího a výtlačného hrdla, počet stupňů, rozsah průtoků, rozsah výtlačných výšek a především čerpací charakteristiku, tj. závislost výtlačné výšky na průtoku (pro vodu). Element typu čerpadlo z katalogu se od čerpadla s uživatelsky zadanou charakteristikou liší parametrem METODA ve skupině EGROUPE. Je-li totiž tento parametr větší než nula, určuje pořadí čerpadla v katalogu. Pro speciální případ „katalogového“ čerpadla je význam parametrů RCONST odlišný od ostatních typů elementů a tyto parametry se zadávají příkazy RCPUMP nebo RCEPUM (v těchto příkazech se vlastně specifikují všeobecné požadavky, na jejichž základě se vybere z katalogu to čerpadlo, které jim nejlépe vyhovuje):

Červeně vybarvené šipky označují turbulentní, a modré laminární proudění.

Při identifikaci elementu myší (příkaz EID) se zobrazí v okně PUMP tyto informace:

Pracovní bod – výsledek výpočtu

AVAILABLE COMMANDS:  
 NEWPROB[clear database] FILE[read and interpret ses control: #LABEL xxx, #GOTO xxx, #LOOP xxx N [rep windows: SCALE[range of model window] CLS[clear model export/import: WRITE [or W, text files] WRITEB, READB groups: EGROUPE[or EG, element group] MPROP [or M

```

C* Opening TEST date:10.06.03 at 17:10
SCALE -.500E-02,100,-.500E-02,200;
PT 1,.000E+00,.000E+00;
PT 2,.500E+02,.000E+00;
PT 3,.600E+02,.000E+00;
PT 4,.100E+03,.000E+00;
PT 5,.100E+03,.150E+03;
CR2PT 1,1,2;
CR2PT 2,3,4;
CR2PT 3,4,5;
CR2PT 4,2,3;
RCONST 1,PIPE2D,0.05;
MCR 1,5,1,2;
MCR 2,5,1,2;
MCR 3,5,1,2;
RCPUMP 2,2,0,0.05,10E-3,30;
MCR 4,1,1,2;
NMERGE ;
RCPUMP 2,2,0,.500E-01,.100E-01,30;
NFPT 1,PRES,-1,1000;
NFPT 5,PRES,-1,50000;
SOLVE 0,5,1,0,0,5,0,0,0;

```

Výběr čerpadla z katalogu (databáze PUMPS.TXT). Parametry 2,2 jsou indexy skupiny EGROUPOU a RCONST, další parametry určují kategorii čerpadla (0-libovolné), průměr navazujícího potrubí (0.05 m), odhadovaný průtok (10 l/s) a odhadovanou výtlačnou výšku (30 m).

Ukázka tvorby složitějších modelů potrubních sítí, které jsou trojrozměrné a obsahují velké počty armatur, kolen, ventilů, čerpadel apod. Výchozí data jsou zpravidla výkresy, z nichž je třeba odečíst souřadnice X,Y,Z bodů, které lokalizují začátky a konce každého úseku nebo armatury. Tato data je třeba upravit do formátu, kterému Femina rozumí a vytvořený soubor načíst příkazem FILE:

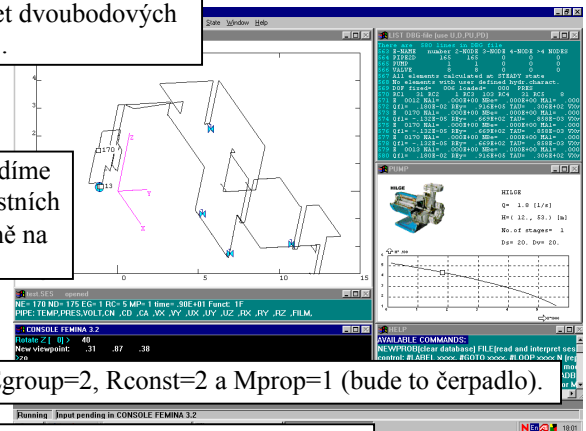
```

PT 1,-.450,-2.100,1.500;
...
PT 11,-.315,-1.453,.050;
CRNPT 0,1,11
PT 12,-.240,-1.453,.130;
CR2PT 0,9,12
PT 13,.000,-1.453,.175
...
PT 20,.000,-1.278,.925
CRNPT 0,12,20
...
RCONST 1,PIPE2D,0.025,0.8E-6,0,0,0,0,0,0,0,0;
MCR 1,1,1,2,0,35,1;

```

CRNPT 0,9,11 vygeneruje deset dvoubodových křivek spojujících body 1 až 11.

Definice RCONST pro trubky (uvádíme drsnost stěny Ra 0.8 i součinitel místních ztrát  $\zeta=0$ ) a generování sítě současně na křivkách 1 až 35 příkazem MCR.



ERMEL změní čísla skupin elementu číslo 12 na Egroup=2, Rconst=2 a Mprop=1 (bude to čerpadlo).

```

...
NMERGE ;
ERMEL 12,2,2,1;
RCPUMP 2,2,0,0.02,2E-3,50;
NFPT 1,PRES,-1,1E5;
OPTION 0,0,-9.81,0,1,0,0,15,.100E-11,1,.100E+08,1,.100E-04,.100E-04,0,1,1,0,0;
RCONST 4,PIPE2D,0.025,0.8E-6,0.066,0,0,0,0,0,0,0;
RCONST 5,VALVE,6,0.025,0,0,0,0;
ERMEL 135,3,5,1;
...
ERMEL 65,1,4,1;
NFPT 1,PRES,-1,1E5;
...
RELFAKT=0.1
SOLVE 0,3,1,0,0,20,0,0,0;
FUNDEF 1,A;
A=0
NFPT 47,PRES,1,1;
...
SOLVE 3,3,1,0,0,20,0,0,0;

```

RCPUMP prohledá databázi čerpadel a parametry optimálního čerpadla uloží do zon EGROUPOU=2 a RCONST=2.

Kolena definujeme jako elementy PIPE2D, ale s nenulovou hodnotou součinitele místních ztrát  $\zeta=0.066$  a tyto parametry přiřadíme skupině RCONST=4. Skupina RCONST=5 budou ventily, elementy VALVE. Tyto skupiny pak můžeme přiřazovat již vygenerovaných elementům příkazy ERMEL (tím měníme původní elementy PIPE2D na kolena a ventily).

Je užitečné definovat některé okrajové podmínky (např. odběry nebo tlaky) jako funkce, zde např. funkci číslo 1, která předává hodnotu proměnné A. Nastavením proměnné A pak snadno měníme odběry a např. NFPT 47,PRES,1,... nenastaví tlak, nýbrž zdrojový člen (pokud je A záporné tak odběr) v uzlu číslo 47.

Kromě rozložení tlaků se dá počítat i rozložení koncentrací a teplot media v potrubní síti, popřípadě i přenos tepla mezi jednotlivými větvemi potrubní sítě. Poznamenejme, že tento typ analýzy je i z hlediska uživatele komplikovaný, protože FEMINA nabízí řadu variant, které se koncepčně liší. Především je to volba matematické metody řešení prostřednictvím systémové proměnné HEPI.

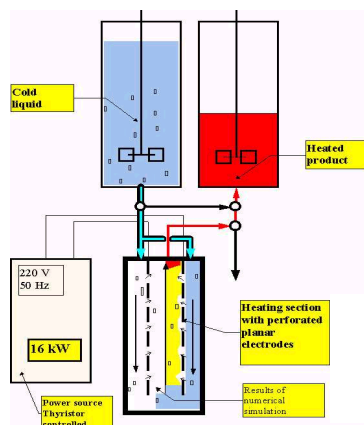
Default hodnota HEPI=0 označuje klasickou metodu vážených residuí, která předpokládá lineární teplotní nebo koncentrační profily v elementech PIPE2D i HEXC a nesymetrické váhové funkce – v principu je to totéž jako metoda, používaná v předchozích příkladech pro řešení dvou nebo trojrozměrného teplotního pole.

Varianta HEPI=1 není metodou vážených residuí, ale jen metodou entalpických bilancí jednotlivých uzlových bodů. Tato varianta se používá tehdy, když jsou součástí potrubní sítě výměníky tepla, které nelze považovat za čistě souproudé nebo protiproudé výměníky. Příkladem jsou deskové výměníky tepla CHEVRON a trubkové výměníky, pro něž jsou vytvořeny speciální algoritmy týkající se výpočtu tlakových ztrát (průtoků) a přenosu tepla. Protože v metodě entalpických bilancí nejsou přirozené okrajové podmínky, je třeba explicitně označovat koncové body sítě, kde neplatí, že by součet entalpických toků musel být nulový (na vstupu zadáváme silnou okrajovou podmínku se zápornou hodnotou STATUS<0 stejně jako u metody vážených residuí, ale ve výstupních uzlech musíme specifikovat kladný status uzlového parametru teploty STATUS>20).

Varianta HEPI=2 má stejná omezení jako varianta HEPI=0 (nelze tudíž počítat s komplikovanějšími výměníky tepla), průtoky a tlakové ztráty se dokonce počítají úplně stejně, jenomže teplotní a koncentrační profily metodou, která se snaží potlačit nepříznivý vliv numerické difuze. Každý časový krok rozkládá do dvou fází: Nejprve se počítají profily, které by odpovídaly čistě konvektivnímu přenosu tepla a hmoty, přesněji řečeno při pístovém toku (je to vlastně jen „posun“ teplotních a koncentračních profilů ve směru toku v trubkách, dokonce včetně nespojitostí profilů). Teprve v druhé fázi se metodou vážených residuí zjišťuje změna profilů vlivem difuze, ale bez uvažování konvektivních členů (vliv toku se projeví jen zvýšenou hodnotou disperzních součinitelů).

Další specifika se týkají přenosu tepla, přesněji způsobu výpočtu součinitelů prostupu tepla z trubek do okolního prostředí, resp. mezi trubkami souproudých nebo protiproudých výměníků tepla. Různé varianty řešení jsou určovány systémovou proměnnou RT (termický odpor). Default hodnotě RT=0 odpovídá jen explicitně zadávaný součinitel prostupu tepla (parametr RCONST elementu), do něhož je třeba zahrnout všechny typy termických odporů, protože FEMINA k nim již nic nepřidá. V případě, že RT>0 počítají se součinitele přenosu tepla uvnitř trubek na základě vypočtených průtoků z korelací typu Nu(Re,Pr). Když je v některých trubkách laminární režim toku, počítá se vždy po proběhnutí výpočtu průtoků tloušťka teplotní mezní vrstvy a dle této tloušťky se pak při teplotním nebo koncentračním výpočtu stanovuje termický nebo difuzní odpor kapaliny v trubce. Konkrétním kladným hodnotám parametru RT odpovídají i některé speciální případy časově proměnných termických odporů, především vliv foulingu. Hodnotě RT=1 např. odpovídá Ebert Panchalův model tvorby úsad, popisovaný v kapitole 4.

Následující příklad je ukázkou reálné aplikace: modelování přímého elektrického ohřevu v průtočném ohřivači.

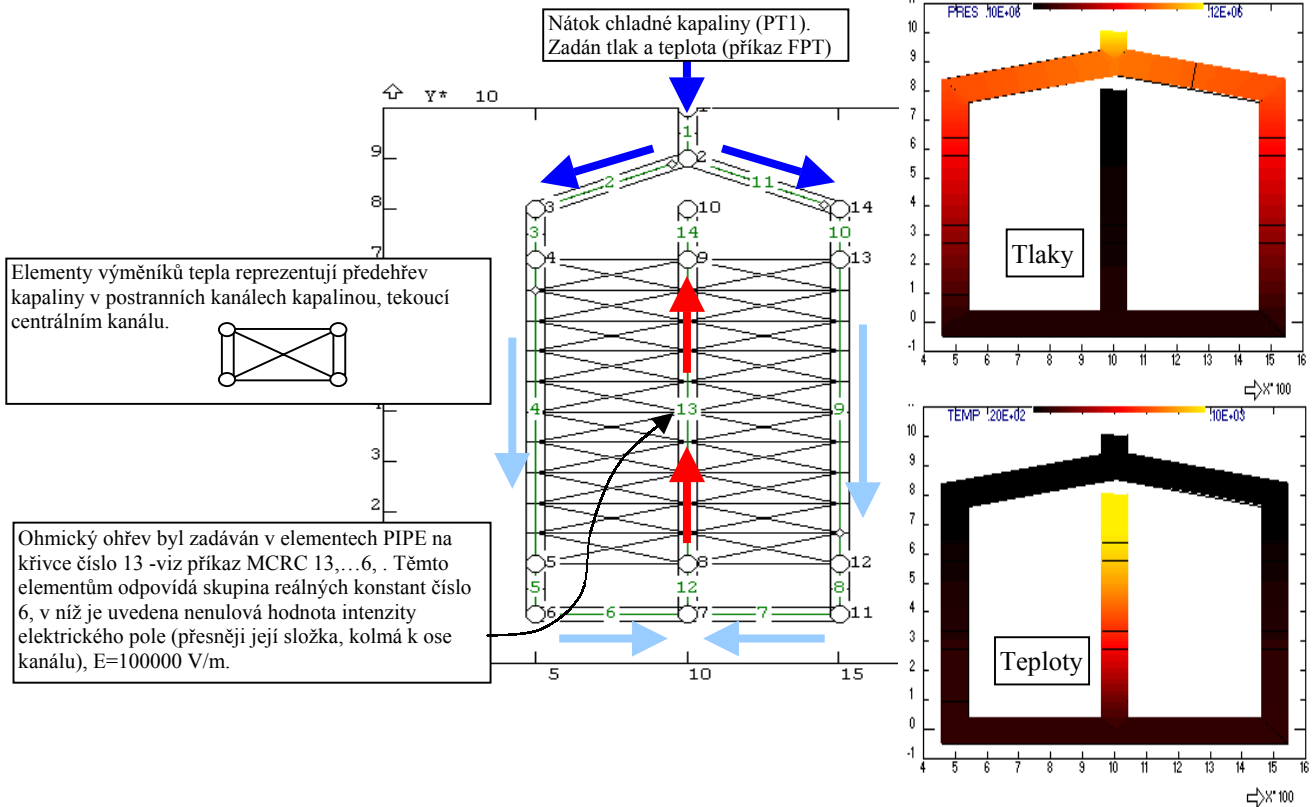


```

ANALYS 1
SCALE 0, .3, -.1, 1;
PT 1, .100E+00, .100E+01;
PT 2, .100E+00, .900E+00;
PT 3, .500E-01, .800E+00;
PT 4, .500E-01, .700E+00;
PT 5, .500E-01, .100E+00;
PT 6, .500E-01, .000E+00;
PT 7, .100E+00, .000E+00;
PT 8, .100E+00, .100E+00;
PT 9, .100E+00, .700E+00;
PT 10, .100E+00, .800E+00;
PT 11, .150E+00, .000E+00;
PT 12, .150E+00, .100E+00;
PT 13, .150E+00, .700E+00;
PT 14, .150E+00, .800E+00;

```

Význačné body  
1. vstup kapaliny do rozváděcí hlavy  
2. rozvětvení do postranních kanálů  
7. smísení proudů u dna  
8-9. ohřevná sekce (napříč kanálem působí elektrické pole)  
10. výstupní kanál



```

CR2PT 1, 1, 2;
CR2PT 2, 2, 3;
CR2PT 3, 3, 4;
CR2PT 4, 4, 5;
CR2PT 5, 5, 6;
CR2PT 6, 6, 7;
CR2PT 7, 7, 11;
CR2PT 8, 11, 12;
CR2PT 9, 12, 13;
CR2PT 10, 13, 14;
CR2PT 11, 14, 2;
CR2PT 12, 7, 8;
CR2PT 13, 8, 9;
CR2PT 14, 9, 10;
MCRC 1, 2, 1, 2, 1, 1;
ACTSET 3, 2;
MCRC 2, 2, 1, 2, 2, 1;
MCRC 3, 2, 1, 2, 3, 1;

```

MCRC – generování elementů na křivce. Zde se používají pouze dvouuzlové elementy PIPE (poslední parametr, 1), které se liší různými skupinami RC-Real Constants (předposlední parametr), tj. různými průměry kanálů, součiniteli prostupu tepla, ... apod.

```

MCRC 4, 10, 1, 2, 3, 1;
MCRC 5, 2, 1, 2, 3, 1;
MCRC 6, 2, 1, 2, 4, 1;
MCRC 7, 2, 1, 2, 4, 1;
MCRC 8, 2, 1, 2, 3, 1;
MCRC 9, 10, 1, 2, 3, 1;
MCRC 10, 2, 1, 2, 3, 1;
MCRC 11, 2, 1, 2, 2, 1;
MCRC 12, 2, 1, 2, 5, 1;
MCRC 13, 10, 1, 2, 6, 1;
MCRC 14, 2, 1, 2, 5, 1;
NMERGE ;
EGROUP 1, PIPE2D, 1, 0;
EGROUP 2, HEXC, 1;
MCR4 4, 13, 7, 2;
MCR4 13, 9, 7, 2;
RCONST 1, PIPE2D, 0.02, 0, 0, 0, 10, 20;
RCONST 2, PIPE2D, 0.02, 0, 0, 0, 10, 20;

```

MCR4 – generování čtyřuzlových elementů, které reprezentují výměník tepla – modelují přenos tepla mezi dvojicemi elementů PIPE, které již musely být nadefinovány na dvojici křivek příkazy MCRC.

```


RCONST 3, PIPE2D,0.02,0,0,0,10,20;
RCONST 4, PIPE2D,0.03,0,0,0,10,20;
RCONST 5, PIPE2D,0.04;
RCONST 6, PIPE2D,.04,0,0,0,0,0,0,1E5;
RCHEX 7,.1,5000;
NFPT 1,PRES,-1,1.2E5;
NFPT 10,PRES,-1,1E5;

NFPT 1,TEMP,-1,20;
NFPT 1,CN,-2,1;
CURDEF -2,0,4,0,0,1,1,2,0,3,0;
OHMI=1
VISC(1)=0.01
SOLVE 0,30,1,0,0,3,1,1,0;

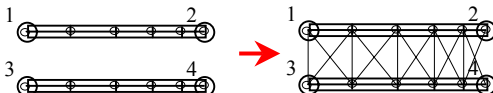
```

Počet a význam parametrů RCONST závisí na hodnotě druhého parametru, který určuje typ elementu. Pro trubku (PIPE2D) jsou následující parametry D (průměr trubky), Ra (drsnost stěny), ζ (součinitel místních ztrát), H (tloušťka stěny), α (součinitel prostupu tepla do okolí), T<sub>e</sub> teplota okolí, Area (plocha průřezu – když je zadána 0, dopočítá se z průměru D), Perimeter (obvod), E<sub>y</sub> (intenzita příčného elektrického pole (V/m), p<sub>e</sub> (vnější tlak).

Zvláštní pozornost je třeba věnovat generování sítě (elementů PIPE2D, HEXC), tj. operaci

MCR *Ic, Nx, Last/First, Nodes* 

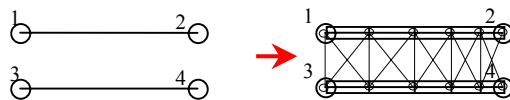
která generuje *Nx* elementů (zpravidla dvouuzlových elementů) na křivce číslo *Ic*. Elementům jsou přiřazeny aktivní skupiny EGROUPE, MPROP i RCONST.

MCR4 'CR pipe 1', 'CR pipe 2', 'RC-HEXC', 'EC-HEX' 

generuje speciální 4 uzlové elementy HEXC (výměníky tepla), které propojují dříve již definované elementy PIPE2D na křivkách CR pipe 1, a CR pipe 2 (počet těchto elementů musel být na obou křivkách stejný, jinak by operace MCR4 neproběhla).

MCR2, 'CR1', 'CR2', 'N', 'MP1', 'MP2', 'RC1', 'RC2', 'RC-HEX', 'EG-PIPE', 'EG-HEX'

Operace MCR2 sdružuje operace MCR a MCR4, tj. na zadané dvojici křivek vytvoří N dvojic elementů typu PIPE2D a současně jim přiřadí čtyřuzlové elementy výměníku tepla.



Pozn.: Někdy nelze sekvenci MCR a MCR4 nahradit jednodušší operací MCR2, která generuje na dvojici křivek elementy PIPE2D, a současně čtyřuzlové elementy typu výměník tepla HEXC, které tyto trubky propojují (v uvedeném příkladě ohmického ohříváče to nešlo proto, že elementy PIPE2D v centrálním kanálu jsou prostřednictvím elementů HEXC propojeny vždy s dvojicí paralelních kanálů).

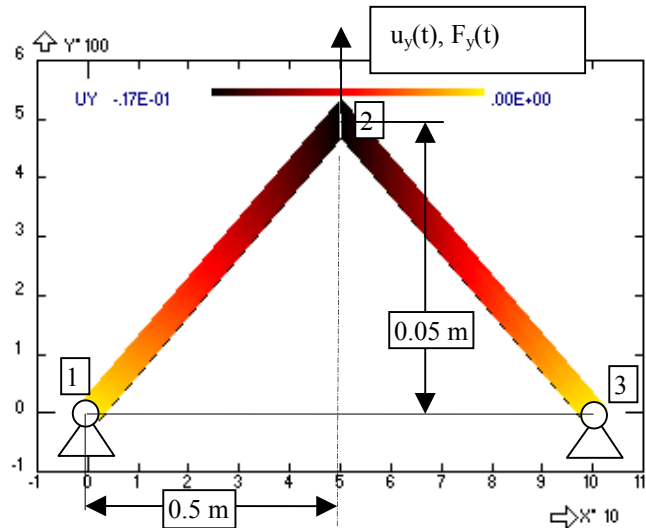
## 2.8. Táhla - nelineární statika

Nejjednodušší statický element je táhlo – jednorozměrný prvek spojený kloubově třeba i s elementy BEAM, PLANE,... Je to zatím jediný element FEMINY použitelný pro *nelineární* statiku, tj. pro velké deformace a velká posunutí, což ukážeme na příkladu vzpěradla, tvořeného dvěma táhly s relativně velkým úhlem rozevření. U této konfigurace se výrazně projevuje změna tuhosti soustavy se zatížením a může dojít k „procvaknutí“ vzpěradla po překročení kritického zatížení.

```
PT 1, .000E+00, .000E+00;
PT 2, .500E+00, .0500E+00;
PT 3, .100E+01, .000E+00;
CR2PT 1, 1, 2;
CR2PT 2, 2, 3;
EGROUP 1, TRUSS2D, 0, 0;
RCONST 1, TRUSS2D, 0, 0, 1E-4, 0;
MCR 1, 1, 1, 2;
MCR 2, 1, 1, 2;
NMERGE ;
NFPT 1, UX, -1, 0;
NFPT 3, UX, -1, 0;
NFPT 3, UY, -1, 0;
NFPT 1, UY, -1, 0;
NFPT 2, UY, 1, -1;
SOLVE 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 3;
```

Plocha 1 cm<sup>2</sup>

Zatížení styčnicku silou  
F = -1 N

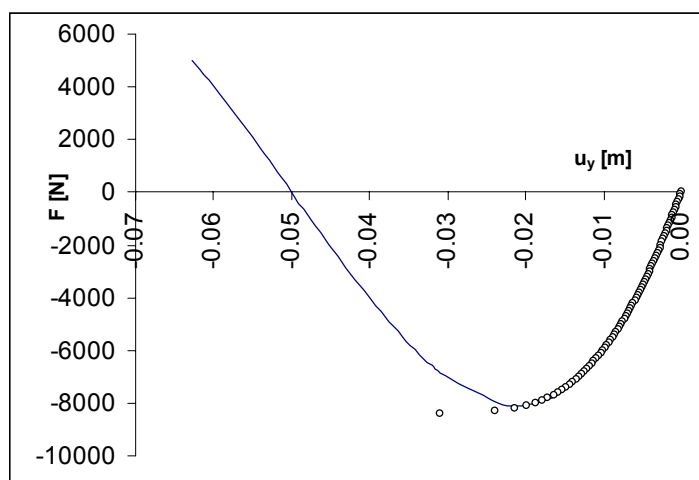


Ztrátu stability je třeba vyšetřovat postupným zatěžováním soustavy a sledováním průhybu styčnicku. Úlohu lze řešit jako kvazistacionární, kdy síla je funkcí času, ale čas nehraje vůbec žádnou roli z hlediska dynamiky (setrvačnosti systému) – to zatím Femina řešit neumí. Budeme uvažovat lineární časovou závislost působící síly  $F_y$  (definovanou jako funkce číslo 1) měnící se od 0 do 8500 N v 85-ti výpočtových krocích, přičemž v každém kroku se iteruje (3 iterace). Výsledky FEMINY jsou uvedeny jako body v následujícím grafu, kde jsou porovnány s analytickým řešením

$$F_y = \frac{EA}{L^3} u_y (H - u_y)(2H - u_y)$$

kde  $A$  je průřez táhla,  $L$  je jeho délka a  $H$  je počáteční výška styčnicku. Řešení FEMINOU funguje jen do zatížení, při kterém dojde ke ztrátě stability (procvaknutí) – při vyšších zatíženích výpočet nekonverguje. Až do tohoto bodu je řešení získané FEMINOU pozoruhodně přesné.

```
FUNDEF 1, TIME;
NFPT 2, UY, 1, -1;
SOLVE 0, 100, 85, 0, 0, 0, 0, 0, 5;
```





## 2.9. Nosníky a trubky

Potrubní síť, v níž byly počítány tlaky, průtoky a teploty, je možné podrobit i výpočtu statického namáhání a stanovit tak průběhy sil a ohybových momentů. Trubka (element PIPE2D) je totiž počítána jako nosníkový prvek s momentem setrvačnosti průřezu

$$J_z = \frac{\pi D_e^4}{64} \left[ 1 - \left( \frac{D_i}{D_e} \right)^4 \right], \text{ který je dopočítáván na základě údajů } D_i \text{ a } h \text{ z zony RCONST}$$

Lze ovšem počítat i nosníky s libovolným průřezem; v tom případě je třeba zadávat plochu průřezu  $A$  i moment setrvačnosti  $J_z$  explicitně (opět příkazem RCONST). Nosníkové elementy (PIPE2D, BEAM2D) lze zatěžovat čtyřmi různými způsoby

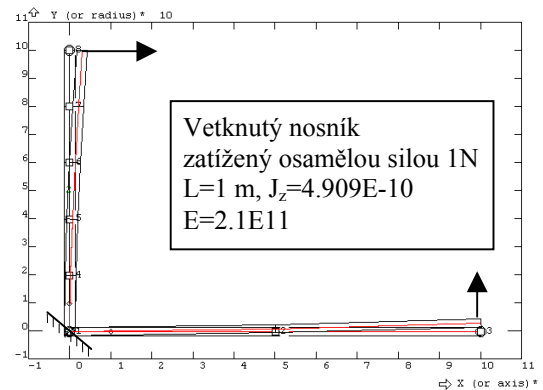
- 1) Osamělými silami  $F_x, F_y$  (N) nebo momentem  $M_z$  (N.m) v libovolných uzlech.
- 2) Spojitým zatížením, které je zadáváno jako tlak  $p$  v parametrech RCONST. Není to ale tlak, nýbrž síla, působící na jednotku délky nosníku nebo trubky, jejíž směr je kolmý k ose nosníku.
- 3) Dilatačními silami, vyvolanými rozdílem teploty stěny (uzlové parametry, počítané v předchozí fázi jako teplota kapaliny) a referenční, montážní teploty  $T_e$ , která je rovněž parametrem RCONST.
- 4) Pokud je elementem PIPE2D, tj. trubka zatížená vnitřním přetlakem (který je stejně jako teploty vypočteným uzlovým parametrem), projeví se kontrakce trubky, podobně jako při teplotní dilataci.

Výsledkem řešení jsou uzlové parametry – posuvy a natočení uzlových bodů, a v bezprostředně poté následujícím postprocessingu se počítají i vnitřní síly ukládané do zony parametrů elementů. Axiální síla (N) je pod jménem ENA ( $N_\alpha$ ), příčná posouvající síla ENB ( $N_\beta$ ), a ohybový moment EMA ( $M_\alpha$ ).

Následující příklad je jednoduchý test vetknutého nosníku, zatíženého na konci osamělou silou. Budeme modelovat dva identické nosníky – cílem je ukázat to, že výsledek nezávisí na počtu použitých elementů (2 a 5 elementů), ani na směru nosníku:

```
PT 1,0,0;
PT 2,1,0;
PT 3,0,1;
CR2PT 1,1,2;
CR2PT 2,1,3;
EGROUP 1,BEAM2D,0,0;
RCONST 1,BEAM2D,0,0,0.0000785,0,4.909E-10;
MCR 1,2,1,2;
MCR 2,5,1,2;
NMERGE ;
NFPT 3,UX,1,1;
NFPT 1,UX,-1,0;
NFPT 1,UY,-1,0;
NFPT 1,RZ,-1,0;
NFPT 2,UY,1,1;
SOLVE 0,1,1,0,0,0,0,0,1;
```

Plocha průřezu a moment setrvačnosti



Vypočtené průhyby a natočení lze porovnat s přesným řešením (souhlasí na všechny platné cifry)

$$u_y = \frac{F_y L^3}{3EJ_z} = 0.003233 \text{ m}, \quad \varphi_z = -\frac{F_y L^2}{2EJ_z} = 0.00485.$$

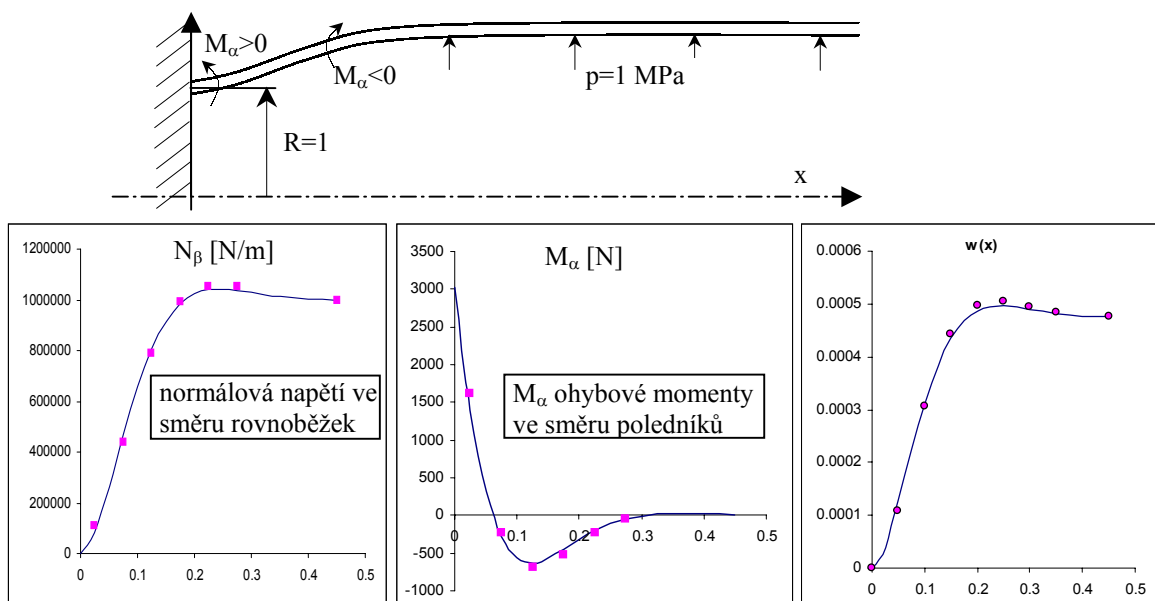


## 2.10. Rotační skořepiny

Pro dimenzování tlakových nádob jsou k dispozici skořepinové elementy SHELLAX, které umožňují výpočet deformace a rozložení vnitřních sil a ohybových momentů v rotačně symetrické skořepině s osou symetrie  $x$  (souřadnice  $y$  je poloměr). Skořepinu je možné zatížit vnitřním přetlakem (zadávaným jako parametr elementu) nebo lokálně silami či okrajovými momenty. Používají se Vykutilovy konečné prvky (v každém uzlu jsou 3 stupně volnosti, posuvy  $UX,UY$  a natočení  $RZ$ ).

Nejprve uvedeme příklady, u nichž je dobře známé analytické řešení: Analyzujeme horizontální trubku zatíženou vnitřním přetlakem, jejíž jeden konec je vetknutý a druhý konec volný (poloměr trubky  $R=1\text{m}$ , tloušťka stěny  $h=0.01\text{m}$ , přetlak  $p=1\text{MPa}$ , materiál ocel  $E=2.1\text{E}11\text{Pa}$ ,  $\mu=0.3$ ).

Na následujícím obrázku jsou uvedeny průběhy obvodového napětí  $N_\beta$  (kladné, protože poloměr trubky se působícím přetlakem zvětšuje), ohybových momentů  $M_\alpha$  (jejich znaménko se mění, v místě vetknutí je velký kladný moment natahující vnitřní vlákna) a rovněž vypočtené průběhy posunutí ve směru poloměru.



Hladké křivky odpovídají analytickému řešení (Křupka 1986), body byly získány následujícím programem

```

PT 1, .000E+00, .100E+01;
PT 2, .100E+01, .100E+01;
CR2PT 1, 1, 2;
EGROUP 1, SHELLAX, 0;
RCONST 1, SHELLAX, 0.01, 1E6;
MPROP 1, SHELLAX, .210E+12, 0, .3, 0;
MCR 1, 20, 1, 2;
NFPT 1, UX, -1, 0;
NFPT 1, UY, -1, 0;
NFPT 1, RZ, -1, 0;
SOLVE 0, 1, 0, 0, 0, 1, 1, 0, 1;

NDLIST 1, 2, 1;
NIDENT;
EIDENT;
WRITE 1;
WRITE 2;
WRITE 4;

```

Typ elementů SHELLAX, stacionární případ (0)

Tloušťka stěny H a přetlak

Modul pružnosti a Poissonova konstanta

20 elementů, rovnoměrné dělení (1), dva uzly

Fixování posuvů  $U_x, U_y$  a pootočení  $R_z$  v bodě 1 (okrajová podmínka č.-1, s hodnotou 0).

Výpočet : na hodnotách parametrů téměř nezáleží. Předepisuje se sice výpočet proudění i teplotního pole a nestacionární řešení (jeden časový krok) jenomže tyto operace element typu SHELLAX neumí a tudíž se stejně neprovedou. Důležitá je pouze jednička na konci – požadavek na provedení analýzu typu STRESS (napětí).

výpis vypočtených uzlových na displeji

Inspekce vypočtených uzlových parametrů ( $UX, UY, RZ$ ) – výběr uzlů myší

Inspekce vypočtených parametrů elementů ( $ENA, \dots$ ) – výběr uzlů myší

Zápis informací o uzlech, elementech a parametrech elementů do souboru (\*.NOD, \*.ELE, \*.EPA)

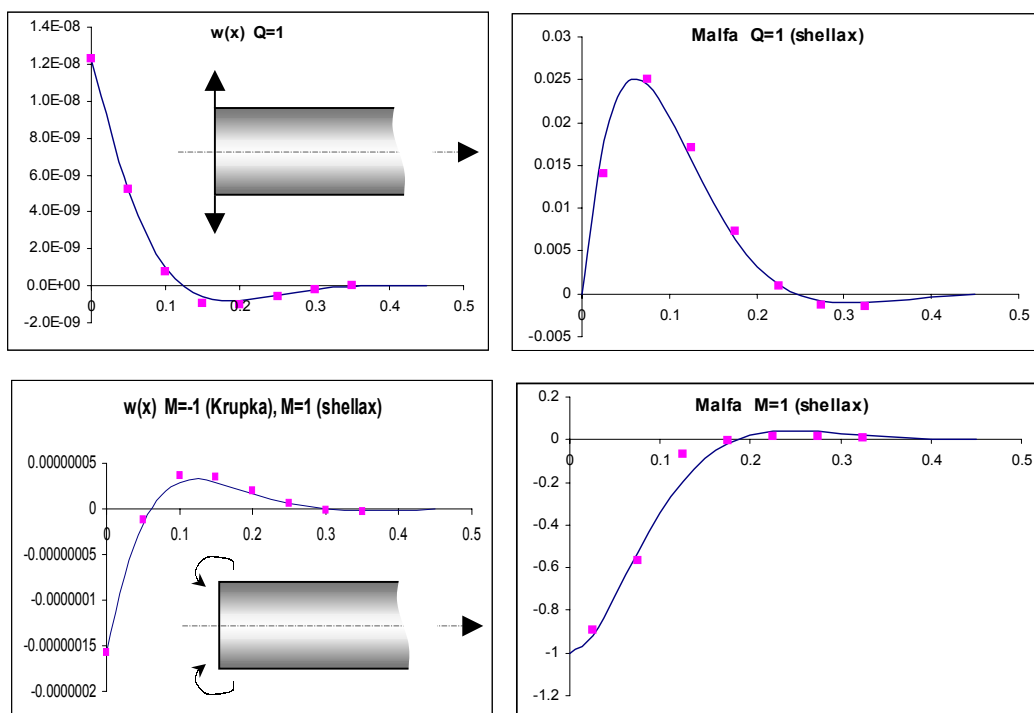
Pro grafické znázornění vypočtených průběhů lze použít příkazy GD1,GE1,GC.

Prakticky stejným programem je možné provést výpočty trubky zatížené pouze okrajovým momentem a okrajovou radiální silou (vztaženými ne jednotku délky obvodu)

```
RCONST 1, SHELLAX, 0.01, 0;
NFPT 1, RZ, 1, 1;
SOLVE 0, 1, 0, 0, 0, 1, 1, 0, 1;
NFPT 1, UY, 1, 1;
SOLVE 0, 1, 0, 0, 0, 1, 1, 0, 1;
```

V bodě 1 (původně vetknutí) měníme status parametru natočení RZ na kladnou hodnotu (v intervalu 1 až 20). V tomto případě je zadávaná hodnota stupně volnosti interpretována jako odpovídající zatížení (pootočení RZ odpovídá moment  $M_\alpha$ ). Stejně se to provede se silovým zatížením (parametr odpovídající síle působící ve směru  $v$  je UY).

Na následujících obrázcích je opět uvedeno porovnání výsledků s analytickým řešením: i když je použito pouze 20 elementů stejné délky, je přesnost numerického řešení poměrně dobrá.

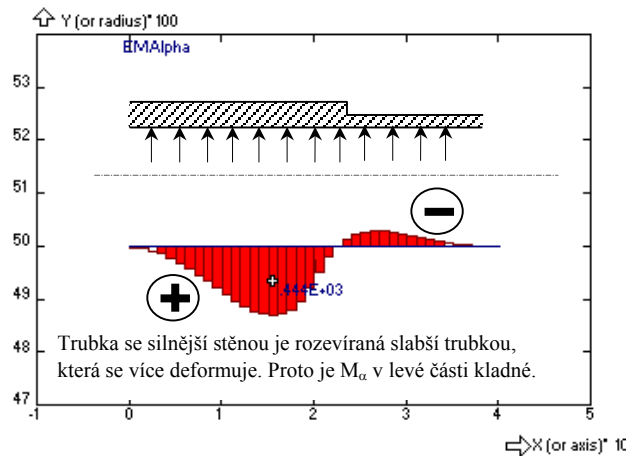


Poznámka: Vypočtené veličiny jsou posuvy  $UX, UY$ , natočení uzlových bodů RZ (v radiánech) a dále jednotkové síly, počítané z deformací jednotlivých elementů (jsou to parametry elementů, nazývané  $ENA-N_\alpha, ENB-N_\beta, EMA-M_\alpha, EMB-M_\beta, EQ-Q$ ). Všechny tyto jednotkové síly jsou vztaženy na jednotku délky řezu skořepiny:  $N_\alpha, N_\beta$  (rozměr  $N/m$ ) jsou normálové síly působící ve směru tečny meridiánu respektive ve směru obvodovém,  $M_\alpha, M_\beta$  (rozměr  $N$ ) jsou ohybové momenty vyvolávající ohybová napětí ve směru meridiánu resp. rovnoběžky a  $Q$  ( $N/m$ ) je posouvající síla působící ve směru normály k povrchu skořepiny. Znaménkové konvence se liší při zadávání a při interpretaci těchto zobecněných sil (síly se zadávají v globálním souřadném systému  $x, r$ , zatímco výsledky jsou v souřadném systému elementu): Kladným vypočteným hodnotám  $N_\alpha, N_\beta$  odpovídají tahová napětí působící v elementech a podobně je to u momentů kde kladné vypočtené hodnoty  $M_\alpha, M_\beta$  odpovídají tahovým napětím na vnitřních vlákních (kladné hodnoty momentů skořepinu „rozevívají“). Kladná zadávaná hodnota ohybového momentu  $M_z$  odpovídá orientaci zátěžovému momentu vždy proti směru pohybu hodinových ručiček (kladná hodnota  $M_z=1$  zadávaná na levém kraji trubky způsobila sevření okrajů – kdybychom tutéž kladnou hodnotu umístili na pravý okraj, tj. do bodu 2, způsobila by rozevření trubky).

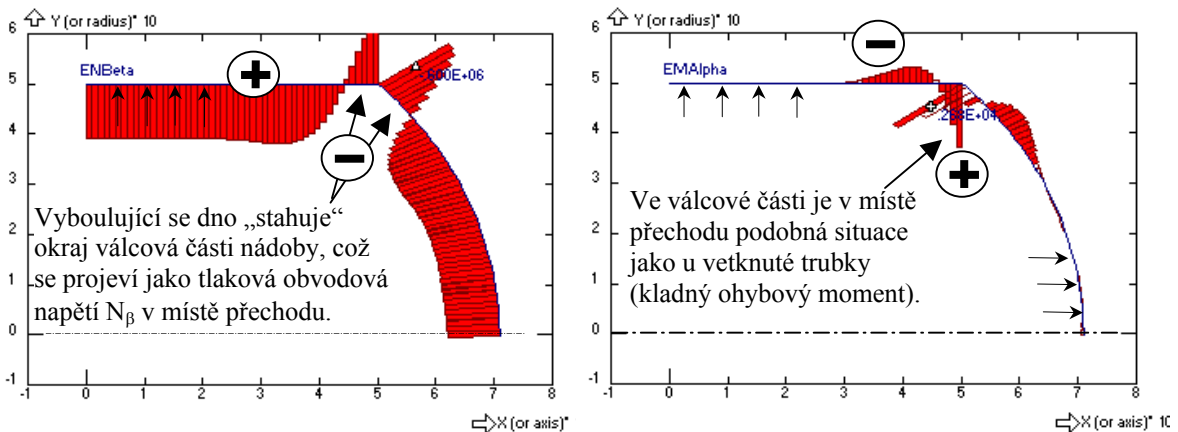
Následující příklad je model spojení dvou trubek s různou tloušťkou stěny (poloměr obou ocelových trubek je stejný  $R=0.5$  m, ale jedna trubka má tloušťku stěny  $0.02$  m a druhá jen  $0.01$  m). Ve spoji těchto trubek dojde při zatížení vnitřním přetlakem  $p=1$  MPa k poruše membránové napjatosti,

která se projeví např. vlnami ohybového napětí  $M_\alpha$ , které jsou uvedeny na následujícím obrázku (dosah poruchy závisí na tloušťce stěny  $\approx 3.12\sqrt{Rh}$ )

```
PT 1, .000E+00, .500E+00;
PT 2, .200E+00, .500E+00;
PT 3, .400E+00, .500E+00;
CR2PT 1,1,2;
CR2PT 2,2,3;
EGROUP 1, SHELLAX, 0;
MPROP 1, SHELLAX, .210E+12, 0, 0.333, 0;
RCONST 1, SHELLAX, .02, 1E6;
MCR 1, 20, 1, 2;
RCONST 2, SHELLAX, .01, 1E6;
MCR 2, 20, 1, 2;
NMERGE ;
NFPT 1, UX, -1, 0;
SOLVE 0, 1, 0, 0, 0, 1, 1, 0, 1;
```



Nejdůležitější aplikací elementů SHELLAX jsou výpočty symetrických a symetricky zatížených tlakových nádob, nádrží, vlnovcových kompenzátorů apod. Následující příklad je ukázkou modelu části válcové tlakové nádoby se sférickým dnem (materiál ocel, tloušťka stěny všude stejná 0.01 m, vnitřní přetlak 1 MPa). Úhel meridiánu na okraji kulové části je  $45^\circ$ , takže přechod z válcové části do dna není hladký (to by ten úhel musel být  $90^\circ$ ), čemuž odpovídají vlny ohybových napětí  $M_\alpha$  a obvodových napětí  $N_\beta$  znázorněné na následujících obrázcích (operace GE1):



```
PT 1, .000E+00, .500E+00;
PT 2, .400E+00, .500E+00;
PT 3, .500E+00, .500E+00;
PT 3, .000E+00, .000E+00;
CR2PT 1,1,2;
ARC 2, 3, 2, -45, 1;
EGROUP 1, SHELLAX, 0;
RCONST 1, SHELLAX, 0.01, 1E6;
MPROP 1, SHELLAX, .210E+12, 0, .3, 0;
MCR 1, 50, 1, 2;
MCR 2, 50, 1, 2;
NMERGE ;
NFPT 1, UX, -1, 0;
SOLVE 0, 1, 0, 0, 0, 1, 1, 0, 1;
```

Jediný nový příkaz ARC – vytvoří přibližně kruhový oblouk z jedné nebo více kvadratických křivek. Zadává se střed (PT 3), počáteční bod (PT 2), úhel ( $-45^\circ$  znamená pootočení ve směru hodinových ručiček) a počet segmentů (1). Je to obdoba příkazu CIRCLE, vztažné body lze lokalizovat myší.

Ve všech předchozích příkladech lze napětí membránová i ohybová snadno stanovit z vypočtených jednotkových sil a momentů na základě vztahů

$$\sigma_{ohybová} = \frac{6M}{h^2}, \quad \sigma_{membránová} = \frac{N}{h}.$$

## 2.11. Rovinná napjatost, rovinná deformace

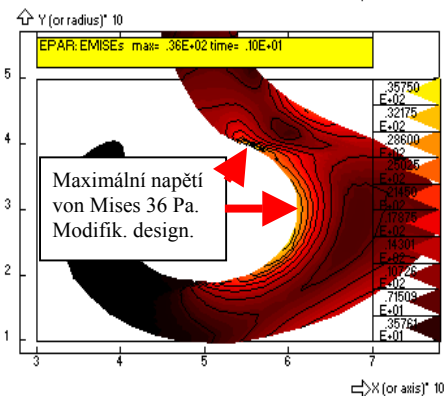
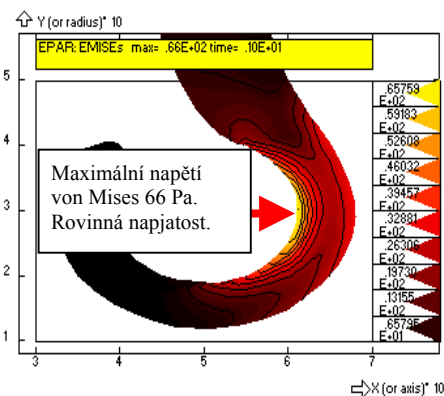
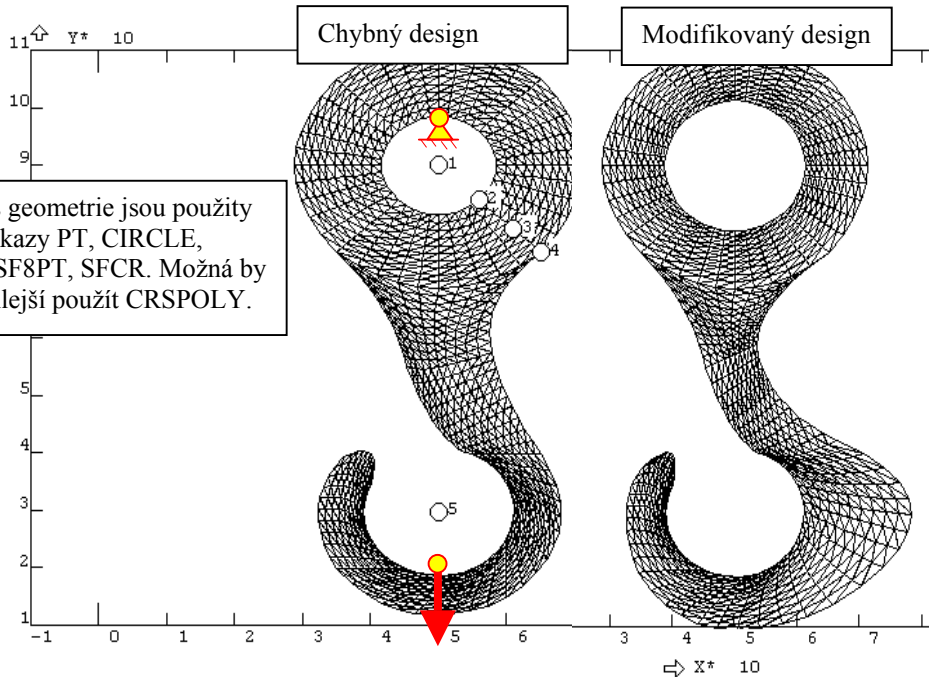
Programy pro analýzu rovinné napjatosti a rovinné deformace jsou víceméně standardní, model lze konstruovat použitím trojúhelníkových nebo čtyřúhelníkových elementů. Výsledkem post-processingu jsou napětí  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$ ,  $\tau_{xy}$ ,  $\sigma_{Mises}$  (střední hodnoty v elementech).

```

PT 1, .500E+00, .900E+00;
PT 2, .550E+00, .850E+00;
PT 3, .600E+00, .800E+00;
PT 4, .650E+00, .750E+00;
PT 5, .500E+00, .300E+00;
CIRCLE 1,1,2,4;
CIRCLE 5,1,3,4;
CIRCLE 9,1,4,4;
CR3PT 13,2,4,3;
CR3PT 14,7,21,14;
CR3PT 15,9,23,16;
CR3PT 16,11,25,18;
PT 27, .400E+00, .650E+00
PT 28, .450E+00, .550E+00
PT 29, .600E+00, .650E+00
PT 30, .579E+00, .577E+00
PT 31, .500E+00, .550E+00
PT 32, .500E+00, .450E+00
PT 33, .550E+00, .400E+00
PT 34, .600E+00, .400E+00
PT 35, .600E+00, .500E+00
PT 36, .650E+00, .400E+00
CIRCLE 17,5,33,4;
CIRCLE 21,5,34,4;
CIRCLE 25,5,36,4;
SFCR 1,11,16;
SFCR 2,12,13;
SFCR 3,9,14;
SFCR 4,10,15;
SF8PT 5,28,30,4,25,31,29,26,27;
CR3PT 32,33,36,34;
CR3PT 33,42,56,49;
CR3PT 34,41,55,48;
SF8PT 6,28,33,36,30,44,34,35,31;
SFCR 7,32,28;
CR3PT 37,40,54,47;
CR3PT 38,38,52,45;
SFCR 8,33,27;
SFCR 9,37,26;
EGROUP 1,PLANE2D,0,3,0,0,0;
MSF 1,10,10,1,1,3;
MSF 2,10,10,1,1,3;
MSF 3,10,10,1,1,3;
MSF 4,10,10,1,1,3;
MSF 5,10,10,1,1,3;
MSF 6,10,10,1,1,3;
MSF 7,10,10,1,1,3;
MSF 8,10,10,1,1,3;
MSF 9,10,10,1,1,3;
NMERGE ;
NF 436,UY,-1,0;
NF 436,UX,-1,0;
NF 847,UY,1,-1;
NF 847,UX,-1,0;
OPTION 0,0,0,1,0,30,.100E-11,1,.100E+08,1,.100E-04,.100E-04,0,1,1,0,0;
SOLVE 0,1,1,0,0,0,0,0,1;
    
```

Pro popis geometrie jsou použity pouze příkazy PT, CIRCLE, CR3PT, SF8PT, SFCR. Možná by bylo rychlejší použít CRSPOLY.

Parametr příkazu EGROUP, STRESS=0 – rovinná napjatost, =1 – rovinná deformace. Průběhy napětí vypočtené pro oba tyto případy jsou prakticky totožné.



## 2.12. Serie mísičů se zpětným promícháváním – integrální model

Ukázka použití předdefinovaných modelů se soustředěnými parametry (typická aplikace pro RTD – integrální modely rozložení dob prodlení). Výpočet impulsní odezvy systému numerickou integrací soustavy obyčejných diferenciálních rovnic. Zpracování časových závislostí.

Tyto modely neoperují nad konečněprvkovými datovými strukturami (uzly, elementy, maticí konektivity apod), nýbrž nad maticí bodů pozorování, v níž jsou uloženy časové závislosti: První sloupec matice je interpretován jako čas, jemuž odpovídají data v následujících sloupcích (2,3,...,10). Matice bodů pozorování tedy popisuje až 9 různých funkcí času reprezentovaných tabulkou funkčních hodnot se společnou časovou základnou (matice pozorování má 1024 řádků – bodů pozorování). Každému sloupci matice bodů pozorování je přiřazena dvojice parametrů: TYP a INDEX, které určují typ veličiny, kterou funkce (sloupec) reprezentuje

- TYP=0 Nedefinovaný (prázdný) sloupec
- TYP=1 Hodnoty času
- TYP=2 Časový průběh vybraného uzlového parametru (INDEX je index uzlu)
- TYP=3 Experimentální data (zpravidla importovaná příkazem READ)
- TYP=4 Vzruchová funkce modelu (INDEX je index této funkce u modelů s více vstupy)
- TYP=5 Odezva modelu (INDEX je index funkce u modelů s více výstupy)
- TYP=6 Predikce regresního modelu
- TYP=7 Směrodatná odchylka bodu pozorování

Tato typologie není příliš závazná a má význam spíše jen u hlaviček výstupních souborů.

Základní operace týkající se matice bodů pozorování TC

READ 6 čtení celé matice bodů pozorování ze souboru, který byl vytvořen operací WRITE 6  
READ 7 import jednoho sloupce matice bodů pozorování  
READ 8 import jednoho sloupce matice bodů pozorování na základě dat tabulky (t,c) přičemž hodnoty času nemusí odpovídat časové základně (prvnímu sloupci matice bodů pozorování). V tomto případě se provádí kvadratická regresní interpolace tabulkových dat. Tato metoda je popsána detailněji v odstavci 4.3.2.

TCEDIT (TCE) editace bodů vybrané křivky myši (lze zvolit několik různých režimů editace)

TCINPUT (TCI) zadávání hodnot vybraného sloupce přímo z klávesnice

TCSET (TCS) specifikace typu sloupců matice bodů pozorování

TCLIST (TCL) zobrazení matice bodů pozorování

TCF přiřazovací příkaz tímto způsobem je možné definovat celý sloupec jako algebraický výraz.

Pro označení sloupce jsou vyhrazeny proměnné C1,C2,...,C10 a součástí příkazu může být i proměnná I – index bodu pozorování (index řádku matice bodů pozorování). Příklady: C1=0.1\*I definuje ekvidistantní časy (první sloupec 0.1, 0.2, 0.3,...), C2=EXP(-0.05\*C1),...

TCSM vyhlazení funkce (regresní spliny), blíže viz 4.3.3

TAIL aproximace chvostu křivky (vymezeného lokátorem-myši) buď funkcí  $A+B \exp(-Ct)$ ,  $A+B t \exp(-Ct)$ , nebo  $A+B/t^3$ . Koeficienty A,B,C jsou stanoveny regresí; A je limitní hodnota funkce pro velmi dlouhé časy, interpretovaná jako velikost pozadí, které se od funkčního průběhu automaticky odečítá.

TCBGR korekce na pozvolné stoupání pozadí.

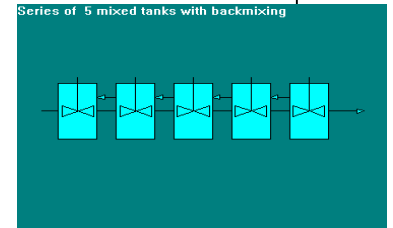
Kromě těchto víceméně editačních operací, je možné generovat odezvy na základě řešení soustav diferenciálních rovnic, které popisují vyšetřovaný systém (lumped parameter model, compartment model). A o tom je následující příklad

RMODEL B00;

Aktivace modelu B00 (serie mísičů se zpětným promícháváním). Ve skutečnosti se přečte textový soubor :

```

Ideal mixers series with backmixing
PM1-backmixing ratio
PM2-mean residence time
PM3-number of mixers (integer)
\\ini
real tm
neq=pm(3) f=pm(1)
tm=pm(2)/neq
cm(1)=1/tm
\\mod
dcm(1)=(xv(1)+f*cm(2)-(1+f)*cm(1))/tm
for i=2,neq-1 do
dcm(i)=((1+f)*cm(i-1)+f*cm(i+1)-(1+2*f)*cm(i))/tm
dcm(neq)=((1+f)*(cm(neq-1)-cm(neq)))/tm
yv(1)=cm(neq)
\\par
idenum=3000003 method=1 inp=1 out=1 npar=3 NEQ=5
x1=2 y1=3
Backmixing ratio f: pm(1) default=0.5 min=0.001 max=10 relafakt=0.2
Mean residence time: pm(2) default=1 min=0.01 max=50 relFAKT=0.2
No.of mixers: pm(3) default=5 min=1 max=100 relFAKT=0.1
    
```



IMPULS -2,5,500,0.01;

Výpočet impulsní odezvy (odezvy na delta-funkci) řešením soustavy NEQ=5 diferenciálních rovnic metodou Runge Kutta, s rel. přesností 10\*\*(-2). Ukládá se 500 kroků s časovým krokem 0.01. Jsou použity hodnoty parametrů modelu f=0.5, N=5 a střední doba prodlení 1 tak, jak jsou uvedeny v definičním souboru (tyto hodnoty parametrů lze samozřejmě měnit). Výsledek, odezva y<sub>1</sub>(t), je uložen do sloupce 3 matice bodů pozorování (sloupec číslo 1 je čas společný pro všechny křivky, číslo 2 vzruch. funkce).

TCRND 3,4,1,0.05;

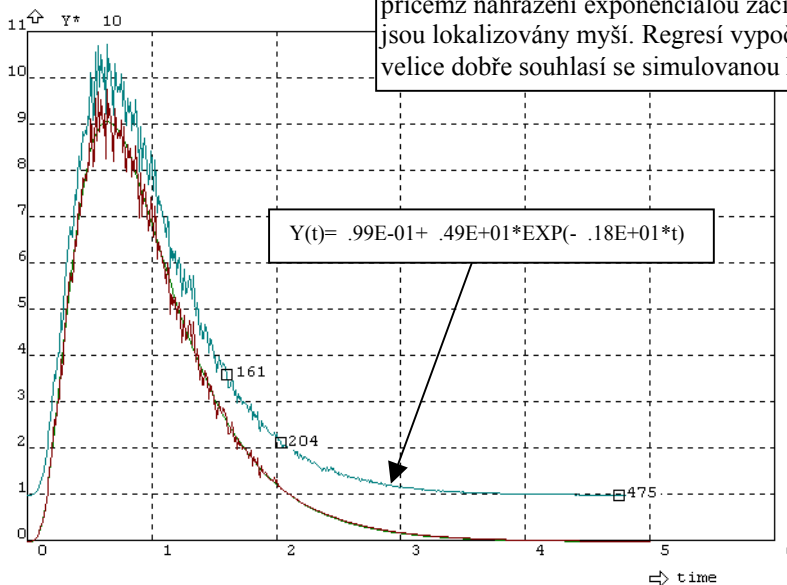
Superpozice šumu (původní křivka č.3, zašuměná křivka č.4, šum úměrný amplitudě signálu (1), se střední hodnotou 0.05

TCYSHF 4,4,.1;

Posunutí křivky číslo 4 o 0.1. Tím simulujeme zvýšení pozadí.

TAIL 4,5,0,161,475,204;

Aproximace chvostu křivky číslo 4, výsledkem je křivka č.5. Použije se exponenciální aproximace (0) identifikovaná regresí bodů 161 až 475, přičemž nahrazení exponenciálou začíná bodem 204 (viz obr.). Tyto body jsou lokalizovány myší. Regresí vypočtená hodnota pozadí 0.099 poměrně velice dobře souhlasí se simulovanou hodnotou 0.1.





### 2.13. FFT konvoluce, dekonvoluce, korelace

Časové průběhy v matici bodů pozorování mohou být zpracovány víceméně klasickými technikami zpracování signálů, které jsou založeny na rychlé Fourierově transformaci (FFT). To umožňuje snadný výpočet konvolučních integrálů (odezvy známého systému na specifikovanou vzruchovou funkci), dekonvoluci, tj. výpočet impulsní odezvy systému ze známé vzruchové a odezvové funkce, popřípadě výpočet korelačních funkcí. Obecným rysem těchto operací je i možnost filtrace šumu, spočívající v potlačení vyšších harmonických složek spektra upravované funkce.

Aplikace FFT ukážeme na příkladu identifikace systému, který je tvořený dvěma paralelními seriemi mísičů (3+9), střední doba prodlení je 1. Jako vzruchovou funkci použijeme impulsní odezvu serie 3 mísičů se střední dobou 3. Odezvu vypočítáme konvolucí (to by měla být „přesná“ odezva) a přičteme k ní náhodný šum, stejně jako ke vstupní funkci. Operací dekonvoluce se potom pokusíme získat impulsní odezvu systému.

C\* Opening TEST date:12.11.02 at 11:43  
TSTEP 500,0.02;  
PASERI 3,3,9,.500E+00,3,1;

Impulsní odezva teoretického modelu (funkce číslo 3)  
 $N_1=3, N_2=9, f=0.5, \alpha=3$

IDMSER 2,3,3;

Vzruchová funkce číslo 2.  
Použit model serie  $N_1=3$  mísičů se střední dobou 3.

TCFFT 2,2,3,4,1;

Výpočet odezvy systému operací konvoluce (2) mezi dvojicí funkcí číslo 2 (vzruch) a 3 (impulsní odezva). Výsledkem je funkce číslo 4. Poslední parametr (0 až 1) určuje míru filtrace: když je 1 zobrazí se graf výkonové spektrální hustoty (PSD=Power Spectral Density) a myši se vybere mezní frekvence.

TCRND 2,2,1,.05;  
TCRND 4,4,1,0.05;

Superpozice šumu ke vzruchové a odezvové funkci.

TCFFT 1,2,4,5,1,4,.100E-03;

Výpočet impulsní odezvy systému (funkce číslo 5) ze zadané vzruchové funkce (2) a odezvy (4). Využívá se stejně jako u konvoluce FFT s filtrací vyšších harmonických výsledku (parametr 1 opět aktivuje graf PSD). Je použit regularizační model 4 mísičů s vahou  $w=10^{-4}$ .

IDMSER 2,3,1;

TCFFT 2,2,3,4,1;

TCRND 2,2,1,0.05;

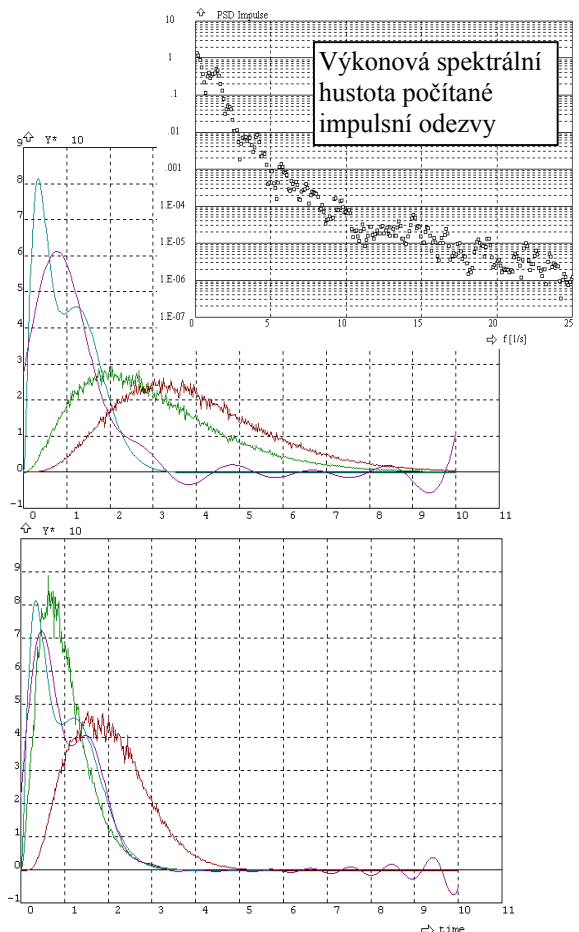
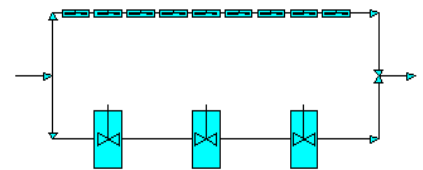
TCRND 4,4,1,0.05;

TCFFT 1,2,4,5,1,4,.100E-03;

Opakování celé sekvence, ale pro kratší vzruchovou funkci (střední doba 1). Tím se zlepšila stabilita a přesnost řešení.

Two parallel series of 3 and 9 mixed tanks

Volume ratio= 3.000



## 2.14. Regresní analýza

Průběhy veličin (např. časové závislosti teplot), vypočtené metodou konečných prvků nebo stanovené experimentálně, je možné aproximovat buď modelem soustavy obyčejných diferenciálních rovnic (viz předchozí příklad 2.11) nebo ještě jednodušeji nějakými algebraickými vztahy, např. polynomy. Tento příklad je právě ukázkou regrese dat, která jsou uložena v souboru, jehož každý řádek popisuje jeden bod pozorování, tj. hodnoty nezávisle i závisle proměnných (měřených dat). V našem případě budeme zpracovávat soubor TC.TXT, jehož druhý sloupec je nezávisle proměnná (čas) a třetí sloupec jsou naměřené hodnoty. Femina může načítat matici bodů pozorování najednou nebo postupně, sloupec po sloupci – použijeme tuto druhou možnost.

```
READ 7, Tc.txt, 2, 1, 2;
```

```
READ 7, Tc.txt, 3, 2, 2;
```

READ import dat z ASCII souboru. První parametr (7) je typ operace READ (čtení sloupce matice bodů pozorování), TC.TXT jméno souboru v němž jsou data, 2-druhý sloupec dat z tohoto souboru, 1-bude umístěn do prvního sloupce matice bodů pozorování. Poslední parametr (2) říká, od kterého řádku souboru dat se začínají načítat data (první řádek je hlavička a musí se přeskočit).

Data	TC.TXT
1	0 0
2	1 .3
3	2 .6
4	3 .8
...	
10	20 .6
11	30 .3
12	40 .24

```
TCFUN C4=0.06;
```

Příkazem TCF (nebo TCFUN) můžeme definovat najednou celý sloupec matice bodů pozorování. I-tý prvek čtvrtého sloupce je C4(i) (stačí napsat jen C4) a proměnná I se mění od jedné do maximálního počtu bodů pozorování. V tomto případě nadefinujeme celý čtvrtý sloupec jako konstantu 0.06 – směrodatnou odchylku naměřených dat.

```
LINREG 3, 1, 2, 3, 4;
```

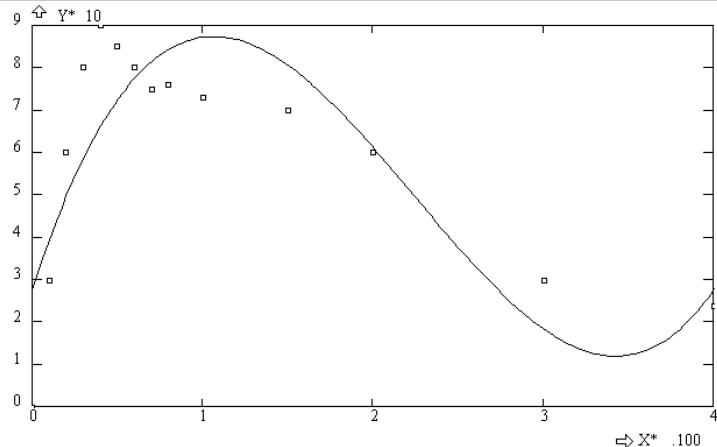
Linární regrese kubickým polynomem (první parametr je stupeň polynomu). Další parametry udávají sloupce matice bodů pozorování, kde jsou uloženy nezávisle proměnné (x), odpovídající naměřené hodnoty (y), predikce regresního modelu (polynom) a směrodatná odchylka (poslední čtvrtý sloupec)

```
TCLIST 1
```

1	2	3	4	5
EXPER.	EXPER.	EMPTY	EMPTY	EMPTY
1	.00E+00	.00E+00	.28E+00	.60E-01
2	.10E+01	.30E+00	.39E+00	.60E-01
3	.20E+01	.60E+00	.50E+00	.60E-01
4	.30E+01	.80E+00	.59E+00	.60E-01
5	.40E+01	.90E+00	.66E+00	.60E-01
6	.50E+01	.85E+00	.72E+00	.60E-01
7	.60E+01	.80E+00	.78E+00	.60E-01
8	.70E+01	.75E+00	.81E+00	.60E-01
9	.80E+01	.76E+00	.84E+00	.60E-01
10	.10E+02	.73E+00	.87E+00	.60E-01
11	.15E+02	.70E+00	.81E+00	.60E-01
12	.20E+02	.60E+00	.61E+00	.60E-01
13	.30E+02	.30E+00	.19E+00	.60E-01
14	.40E+02	.24E+00	.28E+00	.60E-01

LINEAR REGRESSION  
4 coefficients B0+B1.x+...  
277E+00 .125E+00 -.772E-02 .115E-03  
14 data points CHISQ= .7570E+02 Probability Q= .348E-11

Vypočtené koeficienty B<sub>0</sub>,...,B<sub>3</sub>



Regresní analýzy neprovádí program FEMINA.EXE, ale pomocné programy (pro lineární regresi LINREG.EXE), které lze spouštět samostatně. Vzhledem k tomu, že jejich vstupní i výstupní data nejsou v binárním, ale textovém tvaru (LINREG.DAT) mohou být vstupní data připravena nezávisle na FEMINě libovolným textovým editorem.

Velmi podobným způsobem jako lineární regrese se provádí nelineární regrese některým předem připraveným regresním modelem (zatím je to 12 dvou až sedmiparametrových modelů, jejichž počet lze bez zásahů do Feminy libovolně a poměrně snadno rozšiřovat doplněním do programu RANNREG.FOR):

$$\text{Exponenciální funkce } y = a_1 + a_2 e^{-a_3 x} \quad y = a_1 + a_2 e^{-a_4 x} + a_3 e^{-a_5 x}$$

$$\text{Gaussova distribuce } y = a_1 + a_2 e^{-\frac{(x-a_3)^2}{a_4}}$$



Racionální funkce	$y = \frac{a_1 + a_2x}{1 + a_3x}$
Logistika	$y = \frac{a_1}{1 + a_2e^{-a_3x}}$
Impulsní odezvy serie mísičů	$y = a_1x^{a_3-1}e^{-a_2x}$
Modely axiální disperze	$y = \frac{a_1}{\sqrt{x}}e^{-a_2\frac{(x-a_3)^2}{x}}$ , $y = \frac{a_1}{x\sqrt{x}}e^{-a_2\frac{(x-a_3)^2}{x}}$
Harmonické funkce	$y = a_1 + a_2 \sin(a_3x + a_4)$ , $y = a_1 + a_2x + a_3 \sin(a_4x + a_5)$ $y = a_1 + a_2 \sin(a_4x + a_5) + a_3 \sin(a_6x + a_7)$
Mocninová funkce	$y = a_1x^{a_2}$

Regresní model není nutné specifikovat – pak jsou automaticky propočítány všechny modely a vybrán ten nejlepší (s nejmenší hodnotou  $\chi^2$ ). Výsledky řešení jsou vždy v textovém souboru RANNREG.OUT, např.

```
NONLINEAR REGRESSION A1+A2*EXP(-(X-A3)/A4)**2
4 -parameters:
.100E+01 .997E+00 .300E+02 .446E+02
100 points Stdev= .2774E-02 R=1.0000 CHISQ= .7389E-03 Probability= .100E+01
Covariance matrix
.429E+00 -.379E+00 -.878E-01 -.196E+02
-.379E+00 .365E+00 .346E+00 .159E+02
-.878E-01 .346E+00 .765E+02 -.619E+02
-.196E+02 .159E+02 -.619E+02 .109E+04
PREDICTION (X,Ydata,Ymodel)
.0000E+00 .1640E+01 .1638E+01
.1000E+01 .1660E+01 .1657E+01
.2000E+01 .1680E+01 .1676E+01
```

Za pozornost stojí základní statistiky: Stdev je směrodatná odchylka, R-korelační index,  $\chi^2$  a pravděpodobnost, že naměřená data odpovídají identifikovanému modelu. Všechny tyto statistiky jsou založeny na předpokladu normálního (Gaussovského) rozložení chyb a závisí velmi silně na odhadu variance jednotlivých bodů  $\sigma^2$ .

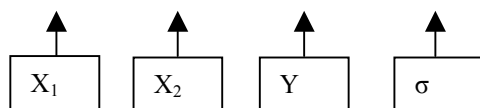
Nelineární regresí lze aplikovat i na modely se dvěma nezávislými proměnnými, příkazy jsou podobné, ale výpočetem je pověřen jiný specializovaný program RANNRE2.EXE, který lze opět používat nezávisle. K dispozici jsou následující modely ( $x_1, x_2$  jsou nezávisle proměnné např. Re,Pr...)

Lineární polynom	$y = a_1 + a_2x_1 + a_3x_2$
Bilineární polynom	$y = a_1 + a_2x_1 + a_3x_2 + a_4x_1x_2$
Kvadratický polynom	$y = a_1 + a_2x_1 + a_3x_2 + a_4x_1x_2 + a_5x_1^2 + a_6x_2^2$
Exponenciální model	$y = a_1 + (a_2 + a_3x_1 + a_4x_2) \exp(a_5x_1 + a_6x_2)$
Mocninový model	$y = a_1x_1^{a_2}x_2^{a_3}$ , $y = a_1 + a_2x_1^{a_3}x_2^{a_4}$
Racionální mocninový	$y = a_1 + a_2 \frac{x_1^{a_3}x_2^{a_4}}{1 + a_5x_1^{a_6}x_2^{a_7}}$

Práci s nelineární regresí ukážeme na příkladu zpracování dat, uložených v souboru NELR2F.DAT

Row	data	data	data	data	EMPTY	EMPTY	EMPTY	EMPTY	EMPTY	EMPTY
	10	11	12	13	0	0	0	0	0	0
1	.1000E+00	.1000E+01	.9679E-01	.1000E+01	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00
2	.5000E+00	.1000E+01	.2438E+00	.1000E+01	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00
3	.1000E+01	.1000E+01	.4429E+00	.1000E+01	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00
4	.2000E+01	.1000E+01	.8115E+00	.1000E+01	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00	.0000E+00

... Další řádky ...

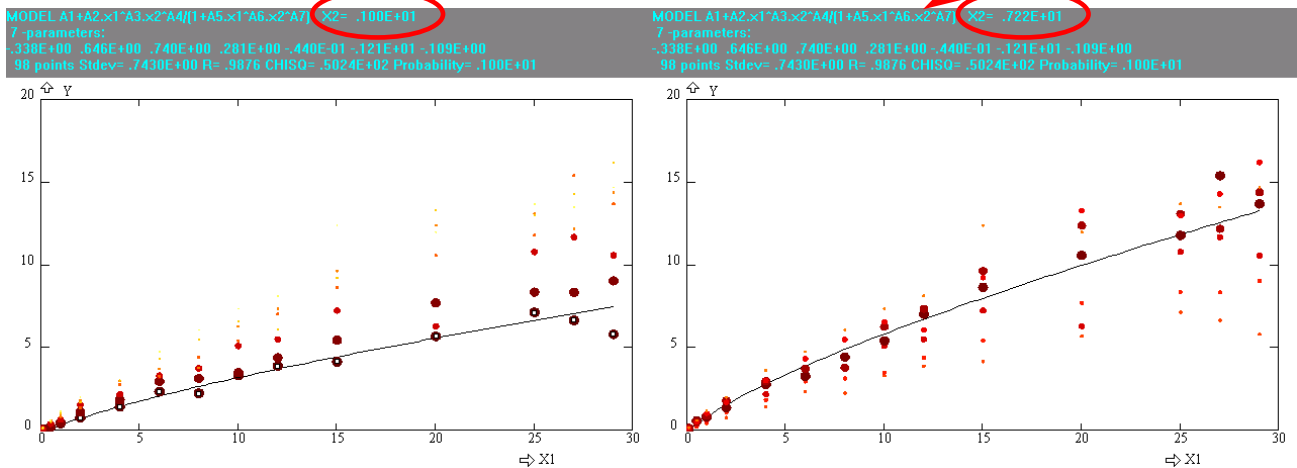


Formát dat v tomto souboru odpovídá způsobu ukládání celé matice bodů pozorování (proto je zde plný počet deseti sloupců, z nichž využijeme jen první čtyři). Tato data vyhodnotíme následujícím programem

```
READ 6, Nelr2f.dat;
NLR2 0, 1, 2, 3, 5, 4;
```

NLR2 spouští program nelineární regrese pro 2 nezávisle proměnné. První parametr 0 určuje, že bude vybírán nejlepší z implementovaných modelů a následující parametry určují indexy sloupců matice bodů pozorování, kde jsou nezávisle proměnné  $x$ , závisle proměnná  $y$ , predikce modelu (sloupec 5) a sloupec směrodatných odchylek jednotlivých bodů pozorování  $\sigma$ .

Poté proběhne výpočet, jehož výsledkem je soubor RANNREG2.OUT, který má podobnou strukturu jako dříve uvedený soubor RANNREG.OUT pro jednonásobnou nelineární regresi. Tento soubor je bezprostředně poté načten Feminou a výsledky jsou zobrazeny v grafech, které se trochu liší od standardního způsobu znázorňování funkcí se dvěma nezávislými proměnnými. Všechny body pozorování jsou totiž v grafu  $x_1 - y$  znázorněny jako značky, jejich velikost a barva závisí na tom, jak moc se liší souřadnice  $x_2$  od specifikované hodnoty, pro niž je také křivkou vykreslena predikce modelu.



## 2.15. Optimalizace a identifikace matematického modelu

Předchozí příklady se zabývaly popisem matematického modelu vyšetřovaného systému a jeho řešením – od nejjednoduššího způsobu (regresní funkce), přes popis systému soustavou obyčejných diferenciálních rovnic (integrální modely) až po modely založené na metodě konečných prvků. Všechny tyto modely jsou parametrizované v tom smyslu, že predikce modelu závisí na proměnných, které určují geometrii (souřadnice PT, parametry sítě konečných prvků), materiálové vlastnosti (MPROP), počáteční i okrajové podmínky (které mohou být funkcí času), zatížení nebo obecněji zdrojové členy. Pokud jsou k dispozici i referenční data (např. experimentální data), lze vybrané parametry matematického modelu optimalizovat tak, aby bylo dosaženo co nejlepší shody predikce a referenčních dat (viz operace OPTIMA nebo SOMA). Uvedme některé typické příklady

### Identifikace a optimalizace modelů průtočných systémů

- Identifikace matematického modelu průtočného systému, který je založen na popisu soustavou obyčejných diferenciálních rovnic. Jeho parametry jsou obvykle průtoky v jednotlivých větvích, objemy ideálně míchaných nádob, ale třeba i charakteristiky detekčního systému (např. zesílení detektorů). Predikcí modelu jsou časové závislosti odezvy detektorů na simulovaný nástřik značkovací látky a tyto odezvy jsou automaticky ukládány do vybraných sloupců matice bodů pozorování.
  - Jako referenční data mohou být použity výsledky experimentů – odezvy reálných detektorů, které jsou načteny do matice bodů pozorování příkazem READ.
  - Referenčními daty mohou být i odezvy, počítané konečněprvkovým modelem FEMINY založeným na jednorozměrných elementech typu trubka a míchaná nádoba (PIPE2D a CSTR). Nástřik se simuluje zadáním časového průběhu koncentrace v určitém uzlu, časové průběhy odezvy detektorů se zaznamenají do matice bodů pozorování operací GTIME.
  - Referenční data lze získat i z dvourozměrného konečněprvkového modelu FEMINY řešením Navierových Stokesových rovnic a z rovnic transportu hmoty se simulovaným nástřikem. Pokud lze předpokládat, že detektory snímají bodové hodnoty koncentrací, lze tato data přenést do matice bodů pozorování opět příkazem GTIME. Když ne, je třeba aplikovat algoritmy kolimovaných detektorů (zatím neimplementováno).
  - Referenční data mohou vycházet z dvou nebo trojrozměrného proudového pole vypočteného nějakým cizím programem (např. FLUENT, COSMOS). Tato data, tj. stacionární rychlostní pole, je třeba importovat do FEMINY (příkaz IMPORT zatím není implementován) a použít konečněprvkový řešič FEMINY pro simulaci experimentu s nástřikem značkovací látky. Odezvy jsou potom do matice bodů pozorování zaznamenány stejně jako v předchozím případě (tj. aplikací algoritmu kolimovaných detektorů).
  - Externí programy (FLUENT, COSMOS) mohou být použity nejen pro výpočet proudového pole, ale i pro simulaci experimentu s nástřikem značkovací. Jejich výsledkem jsou v tomto případě koncentrační pole v jednotlivých časových krocích, které je třeba importovat do FEMINY a ta pak na ně jen aplikuje algoritmy kolimovaných detektorů.
- Optimalizace jednorozměrného konečněprvkového modelu FEMINY, jehož základními optimalizovanými parametry budou zpravidla průměry trubek a objemy míchaných nádob (což jsou parametry RCONST). Predikce modelu se v tomto případě zaznamenává do matice bodů pozorování zatím neimplementovanou operací POST (která je totožná s operací GTIME, jenomže se neprovádí interaktivně). Jako referenční data mohou být použity všechny výše popsané metody, zpravidla to asi budou odezvy reálných detektorů.
- Optimalizace dvourozměrného konečněprvkového modelu FEMINY, jehož základními optimalizovanými parametry mohou být materiálové vlastnosti (MPROP) nebo parametry sítě (např. zhuštění), eventuálně okrajové podmínky (rychlostní profil na vstupu). FEMINA musí

řešit Navierovy Stokesovy rovnice, rovnice přenosu hmoty a aplikovat algoritmy kolimovaných detektorů na vypočtené koncentrační pole. V některých případech by stačilo zaznamenávat jen bodové hodnoty koncentrací.

### Optimalizace modelů teplotního pole

- Jednorozměrný model např. potrubní sítě FEMINY jehož základní parametry mohou být součinitele prostupu tepla (parametry RCONST), materiálové vlastnosti (MPROP) nebo dokonce i parametry modelů foulingu. Jako referenční data musí být k dispozici měřené teploty v některých bodech, ale je možné použít i dvourozměrný konečněprvkový model a referenční data získat integrací teplot na křivce nebo vymezeném objemu (operace INTGCR, INTGSF).
- Asi nejjednodušší aplikací je dvourozměrný model (např. tuhého tělesa při nestacionárním ohřevu nebo chlazení), přičemž jsou k dispozici referenční data časových průběhů teplot v některých bodech. Cílem optimalizace pak může být hodnota součinitele přenosu  $\alpha$  na povrchu tělesa.

Poznámka: Analogickým způsobem lze optimalizovat i pružnostní modely, např. na základě tenzometrických dat. Podstatné je to, že umístění termočlánků nebo tenzometrů nemusí být vázané na uzlové body sítě, protože lze použít standardní interpolační funkce  $DOF(\text{typ uzlového parametru}, \text{číslo zony } 1 \text{ až } 4, x, y, z)$  a  $EPA(\text{typ parametru elementu}, x, y, z)$  pro zjištění hodnoty vypočteného uzlového parametru (teploty, koncentrace, tlaku, rychlosti, ...) nebo parametru elementu (napětí) v libovolném bodě  $x, y, z$ . Tyto hodnoty pak můžeme přímo přenést do matice bodů pozorování. Předpokládejme, že např. v prvních třech sloupcích matice bodů pozorování jsou souřadnice termočlánků  $x, y, z$ , ve čtvrtém sloupci je naměřená teplota a do pátého sloupce chceme přenést vypočtenou teplotu. Pak stačí napsat příkaz (c1,c2,c3,c5 reprezentují celé sloupce matice bodů pozorování):

```
tcf c5=dof(temp,2,c1,c2,c3)
```

Pokud bychom ovšem porovnávali s referenční hodnotou nějakou *integrální* veličinu, museli bychom využít integrační operace INTGCR nebo INTGSF, jejichž výsledek je v proměnné INTEGRAL, např.

fundef 1,temp	definice funkce 1 – např. teplota, nebo i nějaká funkce teploty, souřadnic...
intgr 4,1	výpočet integrálu funkce číslo 1 na křivce 4
c5(1)=integral	uložení vypočteného integrálu do pátého sloupce matice bodů pozorování (do 1.řádku)

#### 2.15.1. Identifikace funkce (regresní analýza)

Pro objasnění postupu provádění optimalizace použijeme jednoduchý model, definovaný přímo funkčním předpisem (v souboru např. s názvem FUNKCE, který obsahuje jediný interpretovaný řádek)

```
TCFUN C3=A+B*C1**D*EXP(-C*C1);
```

```
n=50
TSTEP n, .1;
TCFUN C2=1+c1*exp(-c1);
TCRND 2, 2, 1, .1;
TCFUN C4=1;
```

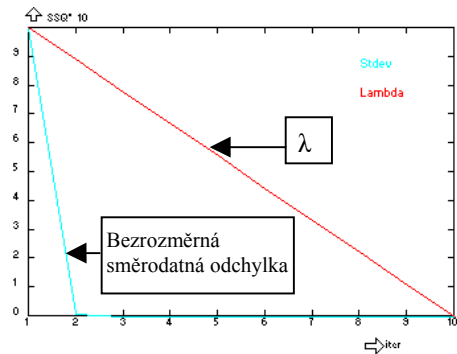
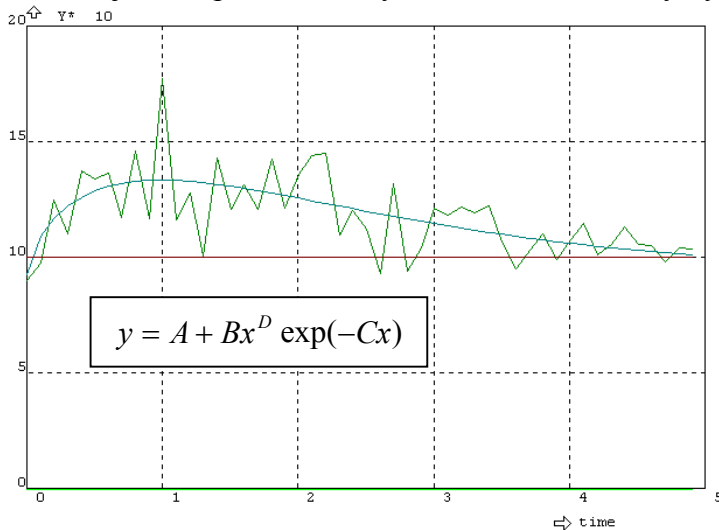
Vytvoření referenčních dat, 50 bodů pozorování, ekvidistantní krok nezávisle proměnné  $x \in (0, 5)$  v prvním sloupci a funkce  $y=1+x \cdot \exp(-x)$  se superponovaným šumem v druhém sloupci. Směrodatné odchylky všech bodů pozorování volíme 1 (čtvrtý sloupec). Pozn.: Skutečná experimentální data bychom asi zadávali po bodech příkazem TCI nebo načtením dat ze souboru příkazem READ.

```
OPEN 7, FUNKCE;
PARDEF 4, A, B, C, D;
PARFIT .5E+00, 1, 1, .5E+00, 1, 1, 1.0, 2, 1, 1.0, 2, 1;
PARLIM 0, 10, 0, 10, 0, 10, 0, 3;
COMPAR 1, 1, N, 3, 2, 4;
OPTIMA 7, 10;
```

Na zařízení UNIT=7 otevíráme příkazový soubor FUNKCE, definující model, který má být optimalizován. Predikce modelu je umístěna do třetího sloupce matice bodů pozorování a závisí na čtyřech parametrech, uživatelských proměnných A,B,C,D.

PARDEF určuje počet a pozice parametrů v databázi FEMINY (jak patrně stačí napsat identifikátor proměnné). PARFIT definuje implicitní hodnoty a vybírá ty parametry, které mají být optimalizovány.

Příkazem OPTIMA je odstartován optimalizační algoritmus, který provede 10 iteračních kroků s modelem připraveným na zařízení 7. Algoritmus je založen na metodě Marquardt Levenbergově, jejímž klíčovým a dynamicky se měnícím parametrem je  $\lambda$ : Nulové hodnotě  $\lambda$  odpovídá klasická Gaussova metoda (charakterizovaná vysokou rychlostí konvergence), zatímco při  $\lambda \rightarrow \infty$  se algoritmus blíží metodě gradientní (pomalé, ale bezpečnější). Když se hledání optima jeví jako úspěšné, hodnota  $\lambda$  se zmenšuje a naopak – hodnoty  $\lambda$  i směrodatné odchylky jsou průběžně zobrazovány v grafu .



### 2.15.2. Identifikace modelů RTD

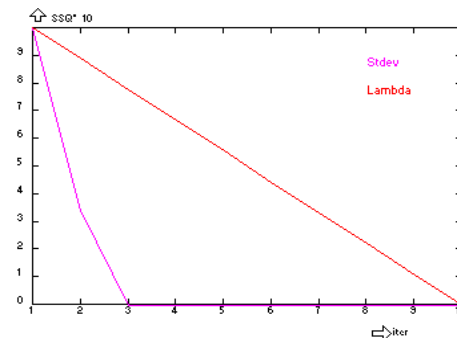
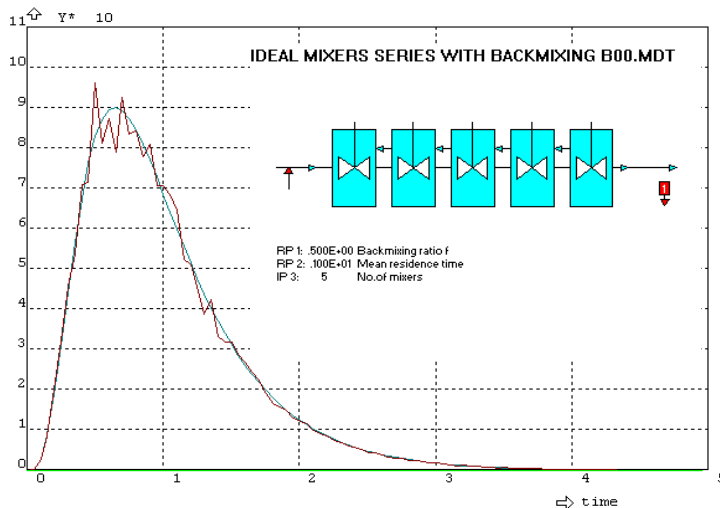
Podobným způsobem lze identifikovat parametry modelu, popisovaného soustavou obyčejných diferenciálních rovnic, např. modelu kaskády ideálních míšičů se zpětným promícháváním (jméno modelu B00). Hledanými parametry modelu jsou koeficient zpětného promíchávání ( $RP_1$ ), střední doba prodlení ( $RP_2$ ) a počet členů kaskády ( $IP_3$ ). Predikce tohoto modelu je ve třetím sloupci matice bodů pozorování, referenční dat umístíme do čtvrtého sloupce.

```
TSTEP 100, .05;
RMODEL B00;
IMPULS -2, 5, 100, .500E-01;
TCRND 3, 4, 1, .05;
```

Impulsní odezva integrovaná metodou Runge Kutta s relativní přesností 0.01. K této teoretické odezvě je superponován náhodný šum. To jsou referenční data umístěná do sloupce číslo 4.

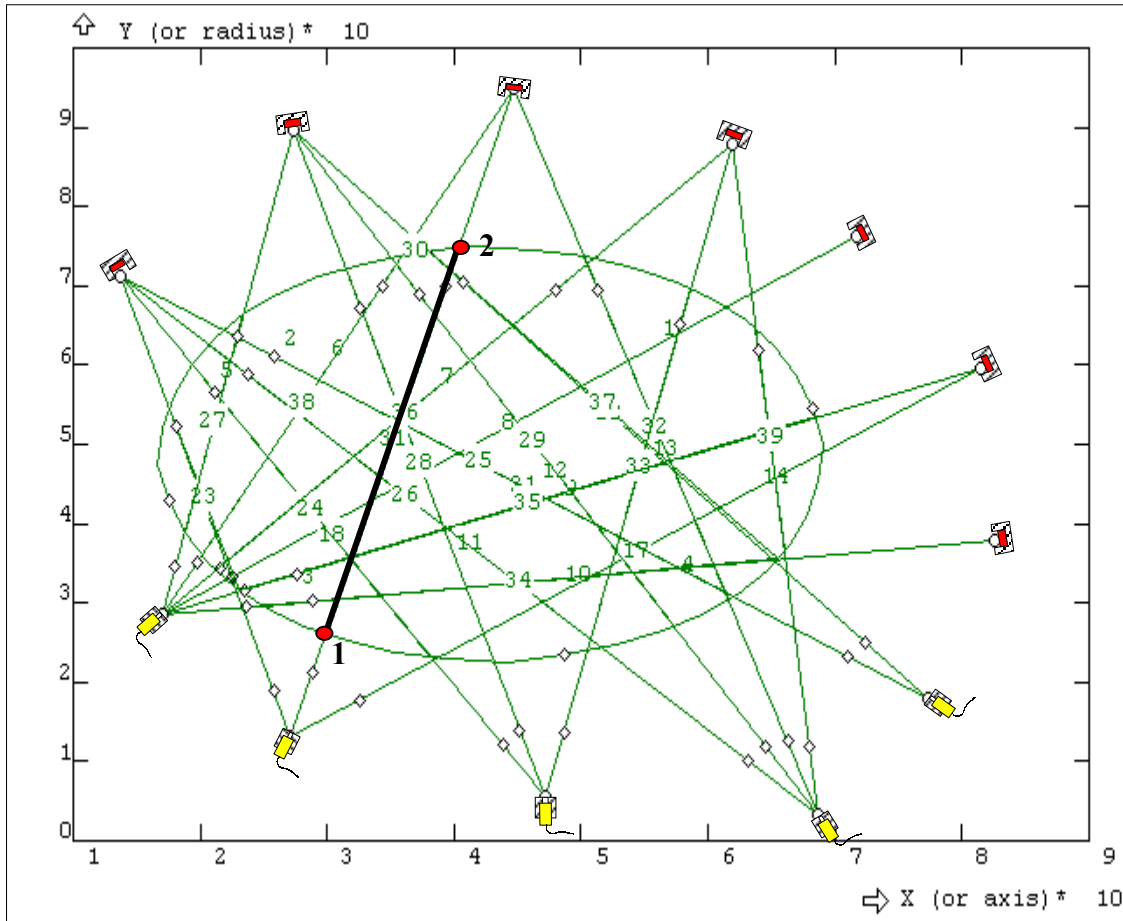
```
PARDEF 3, RP(1), RP(2), IP(3);
COMPAR 1, 1, 100, 3, 4, 0;
PARLIM 1E-6, 10, .100E-01, 50, 1, 10;
PARFIT .526E+00, 2, 1, .101E+01, 2, 1, 3, 2, 1;
PARSET .01, .106E+01, 3;
OPTIMA 0, 10
```

Všechny 3 parametry jsou vybrány pro optimalizaci, dokonce i celočíselný parametr  $IP_3$  (parametry jsou klasifikovány jako nelineární a relaxační faktor je 1). Příkazem PARSET jsou úmyslně zkráceny výchozí parametry modelu:  $RP_1=0.01$  (původně 0.5),  $RP_2=1.06$  (původně 1) a  $IP_3=3$  (původně 5 míšičů).



### 2.15.3. Transmisní tomografie

Optimalizační algoritmy lze použít i v aplikacích počítačové tomografie, např. transmisní absorpční tomografie, snažící se identifikovat např. rozložení hustoty materiálu (nebo koncentrace nějaké látky) v průřezu aparátu. Nejjednodušší uspořádání experimentu spočívá v použití jednoho či více uzavřených  $\gamma$ -zářičů a úzce kolimovaných detektorů záření, které zaznamenávají zeslabení vyslaného paprsku absorpcí látkou, která se nachází ve vyšetřovaném průřezu. Situace je naznačena na následujícím obrázku (kruhový průřez obklopený 7mi zářiči a 5ti detektory).



Předpokládejme, že měřený signál libovolné dvojice zářič-detektor lze vyjádřit jako střední hodnotu hledané funkce  $\rho(x,y)$  podél paprsku (např. úsečky 1-2 na obrázku), tj.

$$\rho_m = \frac{1}{L_{12}} \int_1^2 \rho(x,y) dl \quad (1)$$

Experimentální data tudíž reprezentuje  $M$  hodnot  $\rho_{m1}, \rho_{m2}, \dots, \rho_{mM}$ , které umožňují identifikovat aproximační model funkce  $\rho(x,y)$ , např.

$$\rho(x,y) = A + B((x - 0.5)^2 + (y - 0.5)^2) + C(x - 0.4)(y - 0.4) \quad (2)$$

Poznamenejme, že výše uvedená funkce byla zvolena zcela náhodně, a má pouze 3 neznámé koeficienty, které je třeba optimalizovat.

Při řešení programem FEMINA budeme postupovat následovně:

Především vygenerujeme proměřované úsečky, např. tak, že nejprve definujeme obrys vyšetřovaného průřezu (zde je to kružnice), pak nadefinujeme umístění zdrojů záření a detektorů jako body PT (např. myši), vytvoříme spojnice zářič-detektor jako úsečky (operací CR2PT), určíme průsečíky těchto paprsků s obvodem průřezu (operací PTCR2) a konečně z takto vygenerovaných bodů vytvoříme

úsečky, přes které je třeba počítat integrály hledané funkce  $\rho(x,y)$ . Tím je vytvořena základní geometrie modelu (soubor *tomo.geo*)

```

C* Opening TEST
date:02.06.03 at 10:27
PT 1, .428E+00, .489E+00;
PT 2, .690E+00, .502E+00;
PT 3, .170E+00, .287E+00;
PT 4, .446E+00, .949E+00;
PT 5, .618E+00, .879E+00;
PT 6, .716E+00, .764E+00;
PT 7, .813E+00, .598E+00;
PT 8, .824E+00, .381E+00;
PT 9, .772E+00, .181E+00;
PT 10, .686E+00, .360E-01;
CIRCLE 1, 1, 2, 4;
PT 18, .271E+00, .133E+00;
PT 19, .471E+00, .572E-01;
PT 20, .137E+00, .713E+00;
PT 21, .273E+00, .897E+00;
CR2PT 5, 3, 21;
CR2PT 6, 3, 4;
CR2PT 7, 3, 5;
CR2PT 8, 3, 6;
CR2PT 9, 3, 7;
CR2PT 10, 3, 8;
CR2PT 11, 10, 20;
CR2PT 12, 10, 21;
CR2PT 13, 10, 4;
CR2PT 14, 10, 5;
CR2PT 15, 18, 20;
CR2PT 16, 18, 4;
CR2PT 17, 18, 7;
CR2PT 18, 19, 20;

CR2PT 19, 19, 21;
CR2PT 20, 19, 5;
CR2PT 21, 9, 20;
CR2PT 22, 9, 21;
PTCR2 1, 22;
PTCR2 1, 20;
PTCR2 1, 21;
PTCR2 1, 19;
PTCR2 1, 13;
PTCR2 1, 7;
PTCR2 1, 8;
PTCR2 1, 9;
PTCR2 1, 14;
PTCR2 2, 6;
PTCR2 2, 16;
PTCR2 2, 19;
PTCR2 2, 21;
PTCR2 2, 15;
PTCR2 2, 12;
PTCR2 3, 8;
PTCR2 3, 9;
PTCR2 3, 10;
PTCR2 3, 16;
PTCR2 3, 18;
PTCR2 3, 19;
PTCR2 4, 20;
PTCR2 4, 11;
PTCR2 4, 12;
PTCR2 4, 13;
PTCR2 4, 21;
PTCR2 4, 22;

PTCR2 4, 10;
PTCR2 4, 17;
PTCR2 3, 5;
PTCR2 2, 18;
PTCR2 2, 11;
PTCR2 2, 22;
PTCR2 3, 6;
PTCR2 3, 7;
PTCR2 4, 14;
PTCR2 34, 3;
CR2PT 23, 32, 35;
CR2PT 24, 49, 38;
CR2PT 25, 31, 44;
CR2PT 26, 50, 41;
CR2PT 27, 13, 48;
CR2PT 28, 30, 39;
CR2PT 29, 33, 42;
CR2PT 30, 51, 28;
CR2PT 31, 52, 45;
CR2PT 32, 29, 37;
CR2PT 33, 23, 43;
CR2PT 34, 22, 40;
CR2PT 35, 27, 53;
CR2PT 36, 54, 24;
CR2PT 37, 36, 46;
CR2PT 38, 35, 26;
CR2PT 39, 24, 53;
CR2PT 40, 51, 46;
CR2PT 41, 28, 52;
CR2PT 42, 27, 54;

```

V dalším kroku definujeme funkci  $\rho(x,y)$  s parametry  $A, B, C$ , dle vztahu (2)<sup>5</sup>

```
FUNDEF 1, A+B*((XX-.5)**2+(YY-.5)**2)+C*(XX-.4)*(YY-.4);
```

Délku úsečky, kterou je normalizován integrál (1), bychom mohli stanovit ze souřadnic koncových bodů PT, nebo (z pohodlnosti) jako křivkový integrál funkce, která je identicky rovna jedné

```
FUNDEF 2, 1;
```

V geometrickém modelu jsou „proměřované“ úsečky křivky, začínající indexem 23. Jako matematický model nyní navrhne proceduru, která vypočítá integrály (1) přes osmnáct úseček s indexy křivek 23,24,...40 a těchto 18 hodnot umístí do druhého sloupce matice bodů pozorování (předpokládáme, že ve třetím sloupci bude 18 naměřených hodnot, které se budou porovnávat). Pro výpočet integrálu po křivce je k dispozici operace INTGCR a abychom ji nemuseli mechanicky opisovat 18-krát, použijeme příkaz cyklu #LOOP. Výpočet těchto integrálů zaznamenáme jako posloupnost následujících příkazů do souboru *tomof.geo* (můžeme použít třeba operaci RECORD *tomof.geo*)

```

I=22
#LOOP Lab1, 18;
I=I+1
INTGCR I, 1;
R=INTEGRAL

```

<sup>5</sup> Pokud je funkce  $\rho(x,y)$  příliš komplikovaná takže nestačí jediný příkaz na jediném řádku, lze ji definovat jako víceřádkovou externí funkci způsobem, který byl popsán v kapitole 2.2 (teplotní pole).



```

INTGCR I, 2
C2 (I-22) =R/ INTEGRAL
#LABEL Lab1;

```

Simulovaná experimentální data vytvoříme právě pomocí tohoto modelu pro zvolené hodnoty parametrů  $A, B, C$  a výsledek (který je ve druhém sloupci) překopírujeme do třetího sloupce matice bodů pozorování

```

A=0.01
B=.5
C=.5
TSTEP 18, 1;
F tomof.geo
TCFUN C3=C2;

```

Nyní je třeba zadat parametry, které se mají optimalizovat (PARDEF a PARFIT), jejich meze (PARLIM), určit co se má porovnávat s čím (COMPAR) a otevřít soubor v němž je definován matematický model *tomof.geo* (použijeme např. neobsazené zařízení číslo 7)

```

PARDEF 3, A, B, C;
PARFIT .02, 1, 1, .45, 1, 1, .6, 1, 1;
PARLIM 0, 1, 0, 1, 0, 1;
COMPAR 1, 1, 20, 2, 3, 0;
OPEN 7, Tomof.geo;

```

Teď už je možné spustit optimalizační algoritmus buď OPTIMA nebo SOMA. Použijeme-li operaci OPTIMA stačí zadat jen číslo modelu (je na jednotce číslo 7) a počet iterací (např. 3)

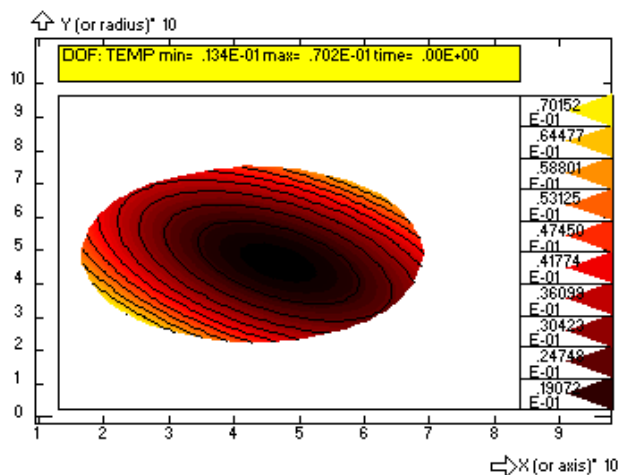
```
OPTIMA 7, 3
```

Grafické zobrazení výsledku (tj. funkce číslo 1 s vypočtenými hodnotami parametrů  $A, B, C$ ) je možné zajistit tak, že zkoumaný průřez pokryjeme sítí konečných elementů – průřez definujeme v tomto případě jako jedinou plochu definovanou 4mi křivkami kružnice a vysílujeme ji operací MSF. Hodnoty funkce č.1 pak přeneseme do zony počátečních podmínek jako uzlové parametry např. typu teplota (operace INI) a zobrazíme je operací GD2.

```

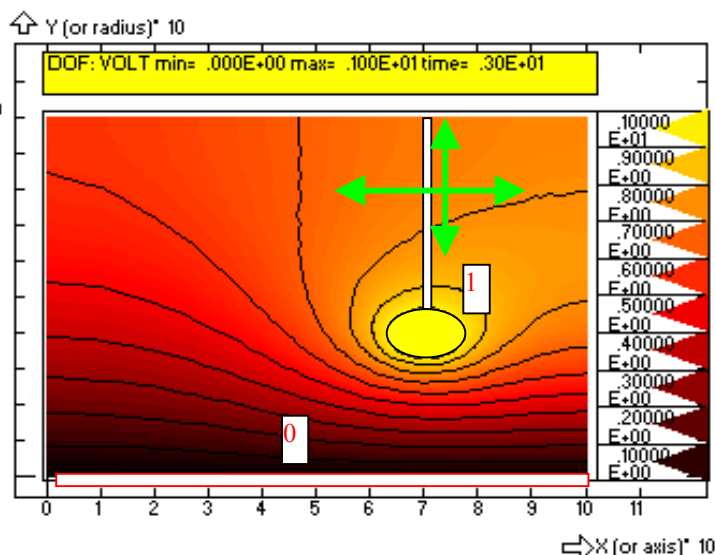
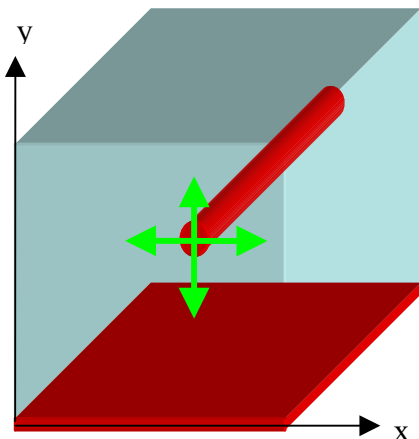
SFCR 1, 1, 2;
EGROUP 1, PLANE2D, 0, 0, 0, 0, 0;
MSF 1, 30, 30, 1, 1, 4;
INITIA TEMP, 1;
GD2 TEMP, 3

```



#### 2.15.4. Elektrotomografie

Podstatně náročnější na řešení je zpracování dat z elektrotomografie, založené na měření efektivní elektrické vodivosti objemu materiálu, který je v kontaktu s měřícími elektrodami. Výsledkem experimentů tohoto typu je informace o prostorovém rozložení měřné elektrické vodivosti z něhož lze usuzovat např. na rozložení hustoty materiálu (pokud existuje jednoznačný vztah mezi hustotou a vodivostí). Existuje řada alternativ uspořádání elektrod, v tomto příkladu budeme uvažovat jednu ponořenou pohyblivou elektrodu a druhou fixní elektrodu představující dno nádoby, jak je schematicky naznačeno na následujícím obrázku



Těžiště řešení problému spočívá ve výpočtu rozložení elektrického potenciálu pro konkrétní geometrii (polohu sondy) a v následujícím výpočtu elektrického proudu, který elektrodami protéká. Pro každý bod pozorování je tedy nutné spočítat metodou konečných prvků elektrické pole, integrací stanovit celkový elektrický proud a jeho hodnotu uložit do matice bodů pozorování pro porovnání s naměřenými hodnotami proudů. Místo integrace hustoty elektrického proudu na povrchu elektrod je výhodnější (a přesnější) počítat celkový dissipovaný výkon v proměřovaném objemu

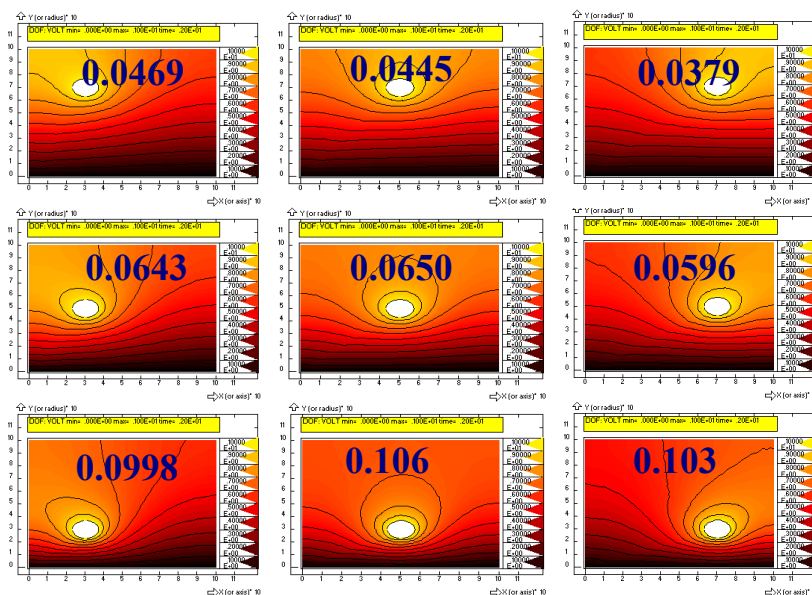
$$P = U \cdot I = \int_{\Omega} \kappa (\nabla U)^2 d\Omega \quad (3)$$

kde  $\kappa$  je měrná elektrická vodivost v místě  $x, y, z$ .

Hledanou distribuci měrné elektrické vodivosti budeme definovat jako funkci souřadnic  $x, y$  a neznámých koeficientů modelu, např. jako polynom

$$\kappa(x, y) = A + Bx + Cy + Dxy. \quad (4)$$

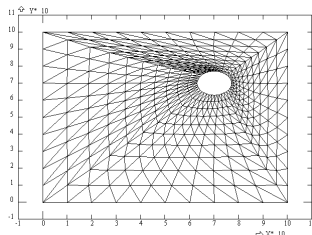
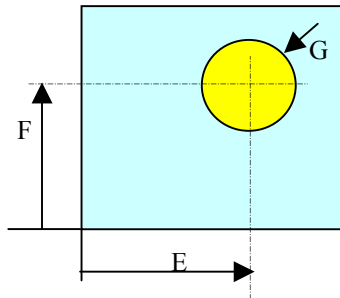
Předpokládejme, že pro identifikaci čtyř koeficientů A, B, C, D stačí proměřit elektrický proud pro 9 různých poloh válcové sondy



Matematický model bude reprezentován session-filem (nazveme ho třeba TOMODEL.GEO), který zajistí vytvoření geometrického modelu, generování sítě, okrajových podmínek (nulový elektrický potenciál na dně a jednotkový potenciál na elektrodě) a řešení distribuce potenciálu metodou

konečných prvků (např. s trojúhelníkovými elementy), přičemž materiálový parametr  $\kappa(x,y)$  je definován funkcí (4). Operace SOLVE zajistí nejen řešení, ale i postprocessing, jehož výsledkem je mimo jiné dissipovaný výkon (3) uložený do systémové proměnné POWERE (to se děje automaticky i při jiných typech analýz, např. při výpočtu proudění se dopočítává dissipovaný výkon POWERF, u pružnostních výpočtů se dopočítává deformační energie). Hodnotu výkonu POWERE umístíme do příslušného řádku matice bodů pozorování. Session file musí zahrnovat opakování celého výpočtu pro všechny proměřované konfigurace, v našem případě pro 9 poloh válcové elektrody a stejně jako v předchozím příkladě použijeme příkazy cyklu #LOOP:

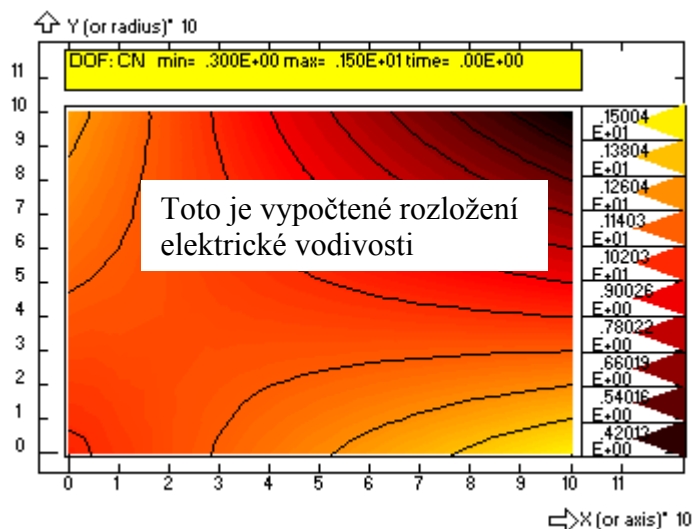
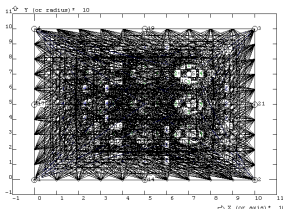
```
G=0.05
E=.1
I=0
#LOOP E,3
E=E+.2
F=.1
#LOOP F,3
F=F+.2
NPT=0
NCR=0
NSF=0
PT 1, .000E+00, .000E+00;
PT 2, .100E+01, .000E+00;
PT 3, .100E+01, .100E+01;
PT 4, .000E+00, .100E+01;
PT 5, E, F;
PT 6, E+G, F+G;
CIRCLE 5,5,6,4;
PT 14, .5, 0;
PT 15, E/2, F/2;
PT 16, (E+1)/2, F/2;
PT 17, 0, 0.5;
PT 18, E/2, (F+1)/2;
PT 19, .5, 1;
```



```
PT 20, (E+1)/2, (F+1)/2;
PT 21, 1, .5;
SF8PT 1, 1, 2, 12, 10, 14, 16, 11, 15;
SF8PT 2, 2, 3, 6, 12, 21, 20, 13, 16;
SF8PT 3, 3, 4, 8, 6, 19, 18, 7, 20;
SF8PT 4, 4, 1, 10, 8, 17, 15, 9, 18;
NE=0
ND=0
MSF 1, 10, 10, 1, .5, 3;
MSF 2, 10, 10, 1, .500E+00, 3;
MSF 3, 10, 10, 1, .500E+00, 3;
MSF 4, 10, 10, 1, .500E+00, 3;
NMERGE ;
NFCR 5, VOLT, -1, 0, 0, 0;
NFCR 1, VOLT, -1, 1, 1, 1;
NFCR 2, VOLT, -1, 1, 1, 1;
NFCR 3, VOLT, -1, 1, 1, 1;
NFCR 4, VOLT, -1, 1, 1, 1;
SOLVE 1, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 0, 0;
I=I+1
C2(I)=POWERE
#LABEL F
#LABEL E
```

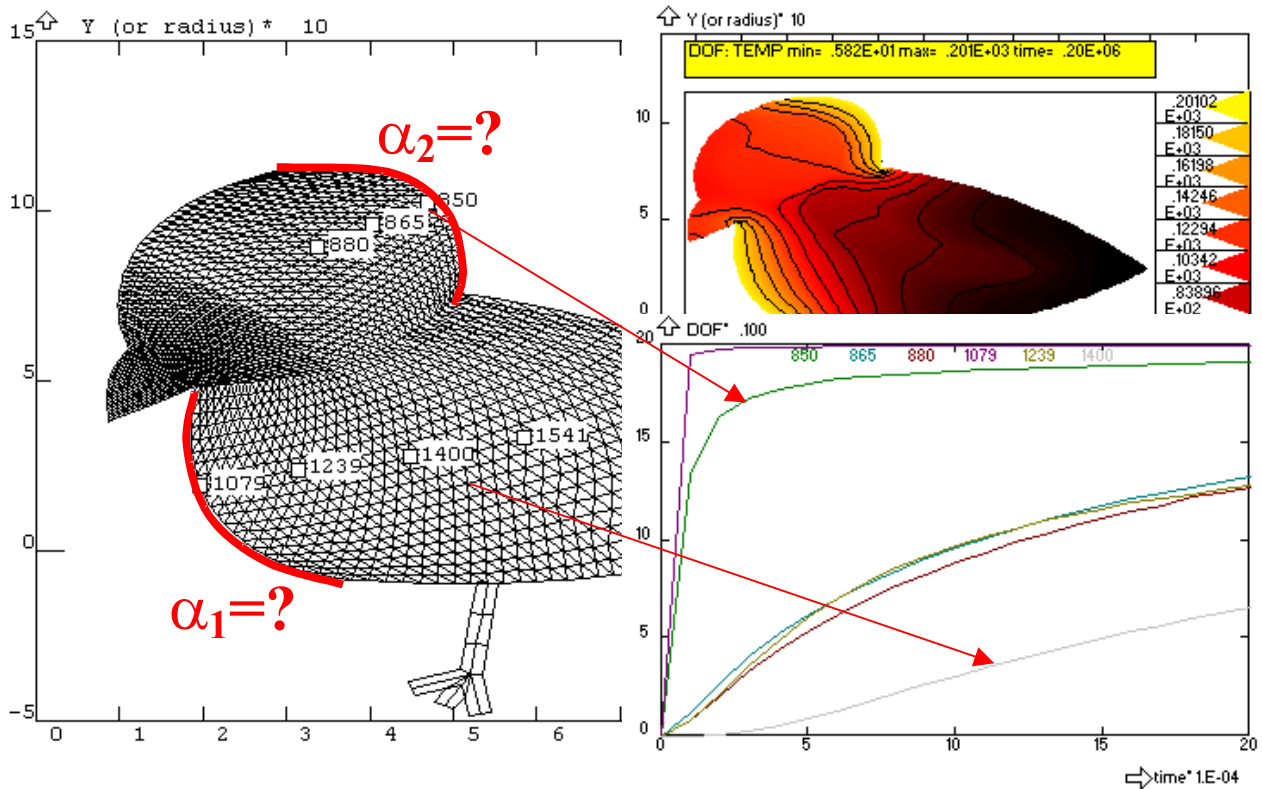
Tento soubor definice modelu pak použijeme pro hledání optimálních parametrů A,B,C,D distribuční funkce elektrické vodivosti (použijeme simulovaná data pro A=1, B=0.5, C=0.3, D=-1.5, která umístíme do třetího sloupce matice bodů pozorování a optimalizaci zahájíme se zkráslými hodnotami parametrů):

```
ANALYS 2;
EGROUP 1, PLANE2D, 0, 1, 0, 0, 0;
MPROP 1, PLANE2D, .600E+00, 0, 4200, 0, 998, 0, .400E-01, 1, .210E+12, 0, .280E+00, 0, .120E-04, 0;
FUNDEF 1, A+B*XX+C*YY+D*XX*YY;
A=1
B=.5
C=.3
D=-1.5
F TOMODEL.GEO
TSTEP 9, 1;
TCFUN C3=c2;
PARDEF 4, A, B, C, D;
PARFIT .7, 2, 1, .7, 2, 1, .5, 2, 1, -1.3, 2, 1;
PARLIM 0, 2, 0, 1, 0, 1, -2, 2;
COMPAR 1, 1, 9, 2, 3, 0;
OPEN 7, Tomodel.geo;
OPTIMA 7, 3
INITIA CN, 1;
GD2 CN, 3;
```



### 2.15.5. Identifikace součinitele přenosu tepla

V úvodu této kapitoly byla zmíněna inverzní úloha spočívající ve stanovení součinitele přenosu tepla na základě naměřených časových průběhů teplot ve vybraných bodech tělesa. Postup řešení budeme ilustrovat na modelu ohřevu nebo chlazení „dvourozměrného“ kuřete schematicky znázorněného na následujícím obrázku



Geometrický a konečněprvkový model kuřete vytvoříme následující sekvencí příkazů (soubor *kure.geo*). Upozorníme na některé aspekty, které zatím v dřívějších příkladech nebyly použity: je to především kombinace různých typů konečných elementů, dvourozměrného elementu „PLANE2D“ a jednorozměrných táhel „TRUSS2D“ (modelujících pařáty kuřete). Dále je to použití ploch SF s topologií trojúhelníka (zobáček kuřete) a s tím související generování sítě, a konečně způsob, kterým byly modelovány „vnitřnosti“ kuřete, které mají odlišné termofyzikální vlastnosti (operace ERMSF).

```

EGROUP 1, PLANE2D, 1, 1, 0, 0, 0;
PT 1, .876E-01, .384E+00;
PT 2, .143E+00, .438E+00;
PT 3, .191E+00, .486E+00;
PT 4, .152E+00, .541E+00;
PT 5, .112E+00, .598E+00;
PT 6, .876E-01, .505E+00;
PT 7, .979E-01, .725E+00;
PT 8, .114E+00, .867E+00;
PT 9, .261E+00, .704E+00;
PT 10, .354E+00, .535E+00;
PT 11, .265E+00, .502E+00;
PT 12, .188E+00, .103E+01;
PT 13, .313E+00, .113E+01;
PT 14, .470E+00, .106E+01;
PT 15, .504E+00, .761E+00;
PT 16, .444E+00, .638E+00;
PT 17, .209E+00, .136E+00;
PT 18, .335E+00, -.728E-01;
PT 19, .540E+00, -.909E-01;
PT 20, .726E+00, -.547E-01;
PT 21, .527E+00, .296E+00;
PT 22, .679E+00, .922E+00;
PT 23, .936E+00, .103E+01;
PT 24, .104E+01, .734E+00;
PT 25, .109E+01, .242E+00;
PT 26, .943E+00, .904E-01;
PT 27, .819E+00, .574E+00;
PT 28, .520E+00, -.359E+00;
PT 29, .450E+00, -.399E+00;
PT 30, .488E+00, -.450E+00;
PT 31, .531E+00, -.475E+00;
SF6PT 1, 1, 3, 5, 2, 4, 6;
SF8PT 2, 3, 10, 8, 5, 11, 9, 7, 4;
SF8PT 3, 10, 15, 13, 8, 16, 14, 12, 9;
SF8PT 4, 3, 18, 20, 10, 17, 19, 21, 11;
SF8PT 5, 10, 20, 25, 15, 21, 26, 27, 16;
PT 32, .168E+00, .801E+00;
PT 33, .261E+00, .619E+00;
PT 34, .422E+00, .831E+00;

```

```

PT 35, .316E+00, .104E+01;
PT 36, .185E+00, .689E+00;
PT 37, .362E+00, .692E+00;
PT 38, .395E+00, .970E+00;
PT 39, .236E+00, .943E+00;
PT 40, .789E+00, .211E+00;
PT 41, .840E+00, .293E+00;
PT 42, .613E+00, .378E+00;
PT 43, .370E+00, .641E+00;
PT 44, .921E+00, .263E+00;
MSF 1, 20, 1, 3;
MSF 2, 20, 20, 1, 1, 3;
MSF 3, 20, 20, 1, 1, 3;
MSF 4, 20, 20, 1, 1, 3;
MSF 5, 20, 20, 1, 1, 3;
EGROUP 2, TRUSS2D, 1, 0;
RCONST 2, TRUSS2D, 0, 0, .1, .1;

MPROP 2, TRUSS2D,
2, 0, 2000, 0, 1500, 0, 0, 0, 0, 0, 0;
CR2PT 15, 19, 28;
CR2PT 16, 28, 29;
CR2PT 17, 28, 30;
CR2PT 18, 28, 31;
MCR 15, 3, 1, 2;
MCR 16, 1, 1, 2;
MCR 17, 1, 1, 2;
MCR 18, 1, 1, 2;
MPROP 3, PLANE2D,
10, 0, 2000, 0, 800, 0, 0, 0, 0, 0, 0;
SF8PT 6, 33, 34, 35, 32, 37, 38, 39, 36;
SF8PT 7, 10, 40, 41, 16, 21, 44, 42, 43;
ERMSF 6, 1, 1, 3;
ERMSF 7, 1, 1, 3;
NMERGE ;

```

Matematický model spočívá v řešení nestacionárního ohřevu kuřete z konstantní počáteční teploty, přičemž teplota vnějšího prostředí je také konstantní (ale jiná) a na různých částech povrchu jsou různé součinitele přenosu tepla  $\alpha$  - v našem případě  $\alpha_1=A$ ,  $\alpha_2=B$  na křivkách 10, resp.8. Výsledky řešení, tj. teploty ve všech uzlech a ve všech časových krocích, jsou po provedení výpočtu uloženy v souboru, z něhož lze importovat vybranou časovou hladinu do zóny počátečních podmínek, nějakým způsobem data zpracovat, a výsledek (např. predikovaný signál termočlánku) uložit do matice bodů pozorování. Sekvenci příkazů, definujících tento model pro dva termočlánky umístěné na souřadnicích (0.4,0.9) a (0.4,0.5), 20 časových kroků a hodnoty součinitelů přenosu tepla v proměnných A,B můžeme zapsat do souboru *kurmodel.geo*

```

RECORD KURMODEL.GEO
NFCR 10, TEMP, 21, A, A, A;
NFCR 8, TEMP, 21, B, B, B;
INITIA TEMP, 0;
SOLVE 0, 20, .100E+05, 0, 0, 0, 1, 0, 0;
T=0
I=0
#LOOP T, 20;
I=I+1
T=T+10000
LOADT T
C1 (I) =T
C2 (I) =DOF (TEMP, 3, .4, .9, 0.)
C3 (I) =DOF (TEMP, 3, .4, .5, 0.)
#LABEL T;
ENDREC

```

Funkce DOF použitá k zjištění predikovaných teplot v obecném bodě  $x,y$  (který není totožný s uzlovým bodem) vyžaduje provedení operace BOX, jejímž výsledkem je soubor, který něco takového umožňuje. Stejně jako v předchozích případech budeme simulovat experimentální data a umístíme je do sloupců 4 a 5, zatímco predikce modelu je ve sloupcích 2 a 3 (sloupec 1 je čas).

```

TE (1) =200
BOX .5
TSTEP 20, .100E+05;
PARDEF 2, A, B;
PARLIM 100, 3000, 100, 3000;
PARFIT 1000, 2, 1, 1500, 2, 1;
COMPAR 2, 1, 20, 2, 4, 0, 3, 5, 0;
OPEN 7, KURMODEL.GEO
OPTIMA 7, 3

```

### 3. Seznam příkazů programu FEMINA

#### 3.1. Entity

Definice konkrétního problému zahrnuje definici entit popisujících geometrii, konečné elementy, uzlové body a vlastnosti materiálu. Používají se podobné názvy entit (např. PT) a z nich odvozených operací (např. PTLIST) jako u programu COSMOS:

- PT bod (jako základní geometrická entita, není to uzlový bod)
- CR křivka (definovaná výčtem 2 nebo 3 bodů PT)
- SF plocha (čtyřúhelník určený výčtem 4 nebo 8 bodů)
- VL objem (šestistěn určený výčtem 8 nebo 20 bodů)
- EL element (definovaný výčtem uzlových bodů)
- ND uzlový bod.

Každému uzlovému bodu jsou přiřazeny stupně volnosti DOF (Degree Of Freedom), které mají svá jména a ta lze použít jako parametr příkazů:

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
TEMP	UX	UY	UZ	RX	RY	RZ	VOLT	VX	VY	VZ	PRES
teplota	posuvy			natočení			napětí	rychlosti			tlak

13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
OMG	PS	PSX	PSY	PSXX	PSYY	PSXY	CN	CD	CA	KT	EPS
vířivost	$\Psi$	$\Psi_x$	$\Psi_y$	$\Psi_{xx}$	$\Psi_{yy}$	$\Psi_{xy}$	koncentrace			k	$\epsilon$

Stejně jako jsou každému uzlovému bodu přiřazeny uzlové parametry, musí být i elementům přiřazeny informace o tom, z jakého jsou materiálu, jaké jsou jejich rozměry (pokud se nedají odvodit přímo ze souřadnic uzlů, které konkrétní element definují) apod. Všechny tyto informace jsou rozříděny do tří skupin a každá skupina je popisována tabulkou: tabulkou materiálových parametrů (řádek je materiál, a sloupec určitá vlastnost, např. první sloupec je tepelná vodivost), dále tabulkou reálných konstant (např. první sloupec je tloušťka elementu, druhý jeho průměr, třetí vnitřní přetlak,...) a konečně tabulkou, která upřesňuje o jaký druh elementu se jedná a použitý algoritmus výpočtu (např. zda se má vyčíslovat matice hmot, kolik bodů Gaussovy integrace se má použít atd).

EGROUP – charakteristiky elementů							
1	2	3	4	5	6	7	8
typ elementu	Static/transient	Gauss points	cartesian/cylindr.	stress/strain	metoda řešení	hydraul. charact.	zdroj tepla
1-PIPE2D, 3-TRUSS2D, 7-CSTR, 8-PUMP, 10-SHELLAX, 11-HEXC, 12-PLANE2D, 12-FLOW2D							

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	18
tepelná vodivost	tepelná kapacita	hustota	elektr. vodivost	modul pružnosti	Poisson. konst.	dynam. viskozita	objem. roztaž.	difuzní součinit.	aktivační energie	frekven. faktor	délková roztaž.
k	$c_p$	$\rho$	$\kappa$	E	$\mu$	$\mu$	$\beta$	$D_N$	$E_N$	$A_N$	$\alpha$
W/m/K	J/kg/K	kg/m <sup>3</sup>	S/m	Pa	-	Pa.s	1/K	m <sup>2</sup> /s	J/mol		1/K
KX	CP	DENS	KAPA	EX	MI	VISC	BETA	DN	EN	AN	ALEX

MPROP-materiálové vlastnosti (sloupce 12 až 17 jsou hodnoty D,E,A pro další složky)

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
tloušťka stěny	ekvival. průměr	vnější tlak	přestup tepla	vnější teplota	plocha průřezu	obvod kanálu	vniřní objem	zpětné promích.	intenzita el. pole	moment setrvačn.
H	$D_e$	$p_e$	$\alpha$	$T_e$	A	O	V	f	dU/dy	$J_z$
m	m	Pa	W/m <sup>2</sup> /K	K	m <sup>2</sup>	m	m <sup>3</sup>	-	V/m	m <sup>4</sup>
HE	DE	PE	ALFA	TE	AREA	PERIM	VOL			JZ

RCONST-charakteristiky elementů

### 3.2. Zahájení a ukončení úlohy (řízení běhu úlohy je uvedeno až na konci tohoto odstavce)

NEWPROB	name	otevření souborů name.SES,name.OUT,name.DBG
FILE	filename	interpretace příkazů (typu *.SES)
UNDO	'no. of backsteps'	návrat o specifikovaný počet kroků zpět
EXIT		ukončení činnosti programu

### 3.3. Nastavení kreslicího okna MODEL

SCALE	'xmin','xmax','ymin','ymax'	při zadání nulových hodnot $x_{min}, \dots$ se nastaví automatické měřítko)
VIEW	'rot x','rot y','rot z'	definice pohledu používaná pro zobrazení 3D objektů. Úhly rot $x, \dots$ se zadávají ve stupních a označují natočení souřadného systému postupně kolem os $x, y, z$ . To, co vidíme v okně model, je rovina X,Y pootočeného souřadného systému.
CLS		vymazání obrazovky
ZOOMI (ZI)		nastavení rozsahu souřadnic lokátorem
ZOOMOUT (ZO) <sup>6</sup>		
GRIDON	'x0','y0','dx','dy'	zapnutí mřížky (týká se zadávání souřadnic myši)
GRIDOF		vypnutí mřížky

### 3.4. Definice geometrie

PT	'PT index',x,y,z	definice bodu
		Jsou dvě možnosti: buď na příkazovém řádku vypíšeme všechny parametry (index a souřadnice) nebo zadáme z klávesnice jen počáteční index a souřadnice určíme myši. Tímto druhým způsobem můžeme v jediné operaci zadat libovolný počet bodů s rostoucími indexy (nový bod se vytvoří po stisknutí L-Click) a sekvence se ukončí pravým tlačítkem myši. Do protokolu (souboru *.SES) se ovšem u každého vytvářeného bodu zapisuje jeden příkaz PT. Pokud není uveden poslední parametr (zetová souřadnice) doplní se implicitní hodnotou ZD.
ZD 'Z-coordinate'	z-souřadnice, která bude přiřazována k souřadnicím X,Y definovaným příkazem PT nebo ND.	
CR2PT (C2P)	'CR index','PT1','PT2'	definice úsečky z již existujících bodů
CR3PT (C3P)	'CR index','PT1(left)','PT2(right)','PT3(mid)'	definice křivky z již existujících bodů
CRNPT (CNP)	'CR index','PTfirst','PTlast'	definice sekvence křivek z existujících bodů
CRSPOLY (CRS)	'PT index','CR index'	definice bodů a křivek myši současně
CIRCLE (CIR)	'CR first','PT-center','PT-zero degree line','n-segments'	kružnice z kvadratických křivek
ARC	'CR first','PT-center','PT-zero degree line','angle','n-segments'	kruhový oblouk
PTCR2	'CR first','CR-second'	průsečíky dvou křivek (0,1, nebo 2 body)
SF3PT (S3P)	'SF index','PT1','PT2','PT3'	definice plochy ze 3 bodů (trojúhelník)
SF6PT (S6P)	'SF index','PT1','PT2','PT3','pt4','pt5','pt6'	definice plochy ze 6ti bodů (zakřivené)
SF4PT (S4P)	'SF index','PT1','PT2','PT3','PT4'	definice plochy ze 4 bodů
SF8PT (S8P)	'SF index','PT1','PT2','PT3','PT4','pt5','pt6','pt7','pt8'	definice plochy z 8 bodů (zakřivené)
SFCR (SC)	'SF index','CR1','CR2'	definice plochy ze dvou libovolných křivek (protilehlých či přilehlých stran)
SFEXTR	'VL index','SF index','dx','dy','dz'	objem translaci plochy
VL8PT (V8P)	'VL index','PT1','PT2',..., 'PT8'	objem ze osmi bod (vrcholů)
VLCR (VC)	'VL index','CR1','CR2','CR3'	objem ze tří libovolných křivek (hran)
VLSF (VS)	'VL index','SF1','SF2'	objem ze dvou protilehlých ploch (stran)
PTDEL,CRDEL,SFDEL,VLDEL,NDEL,EDEL		zrušení již definovaných entit (bod, křivka, plocha, objem, uzel, element)

### 3.5. Definice vlastností elementů

<sup>6</sup> Slova v závorce jsou synonyma – zpravidla zkrácené názvy příkazů



- MPROP (MP) 'Mprop group no.', 'Element type', seznam termofyzikálních parametrů dle typu elementu. U každého materiálového parametru se zadává dvojice čísel: hodnota parametru a číslo funkce času, teploty, invariantu rychlosti deformace nebo souřadnic, kterým se tato hodnota násobí (funkce číslo 0 znamená identitu – příslušný parametr je konstantní)
- EGROUP (EG) 'Egroup no.', 'Element type', seznam celočíselných parametrů dle typu elementu
- RCONST (RC) 'RC group no.', 'Element type', seznam reálných parametrů dle typu elementu

Poznámka: U některých typů elementů (výměníky tepla, čerpadla) je význam parametrů EGROUP a RCONST specifický, a proto je vhodnější používat speciální příkazy RCHEX, RCHEV, RCPUMP, RCEPUM popisované v odstavci generování elementů.

- ERMSF 'SF index', 'EGROUP', 'RCONST', 'MPROP' Změna čísel skupin EGROUP, RCONST, MPROP u elementů ležících uvnitř plochy.
- ERMOD 'Sphere-Cube', 'radius', 'EGROUP', 'RCONST', 'MPROP' Změna čísel skupin EGROUP, RCONST, MPROP u elementů ležících uvnitř kulové plochy nebo uvnitř krychle (parametr RADIUS určuje poloměr koule, resp. poloviční hranu krychle).
- ERMEL 'Element', 'EGROUP', 'RCONST', 'MPROP' Změna čísel skupin EGROUP, RCONST, MPROP u vybraného elementu.

### 3.6. Definice funkčních závislostí

- FUNDEF (FDEF,FD) 'Index of Function (-10:50)', 'f(TIME,TEMP,XX,YY,UX,UY,SINV,...)'  
Takto definované funkce slouží k definici počátečních podmínek (argumenty jsou zpravidla XX,YY ale i teplota TEMP), okrajových podmínek (např. závislosti hraniční teploty na čase TIME), pro popis termofyzikálních vlastností (v závislosti na TEMP a druhém invariantu deformace nebo rychlosti deformace SINV), a konečně pro definici hydraulické charakteristiky prvku potrubní sítě (DP-tlak,ztráta, RE-Reynolds, DE-ekvivalentní průměr, HE-délka elementu).
- CURDEF (CDEF,CD,TABLE,TAB) 'Index of table (-10:50)', '0-time,1-x,2-y,3-z,4-temp,5-ux,6-uy,7-uz,8-sinv', 'No of points (max 8)', 'x1','y1','x2','y2','x3','y3','x4','y4','x5','y5','x6','y6','x7','y7','x8','y8'  
Poznámka: Pro popis jakékoliv závislosti lze použít obě z těchto možností, buď interpretovanou funkci nebo tabulku. Omezení tabulky je v tom, že může mít pouze jeden argument. Interpretovaná funkce je ale jen jeden výraz, takže se nedá použít pro popis komplikovanějších, např. nespojitých, průběhů.
- INTGCR (ICR,IC) 'Index of CR', 'Index of function'
- INTGSF (ISF,IS) 'Index of SF', 'Index of function'  
Výpočet integrálu funkce podél křivky CR nebo na ploše SF. Křivka může být určena dvěma nebo třemi vztažnými body, integrovaná funkce může být definovaná buď jako výraz (FUNDEF, zvláště upozorněme na možnost použít ve výrazu funkce *DOF* (typ uzlového parametru, číslo zony 1 až 4, x,y,z), a *EPA* (typ parametru elementu, x,y,z)), tabulka (CURDEF) nebo dokonce i jako program. Výsledek integrace se zapíše do výstupního souboru a je i uložen do proměnné INTEGRAL. Integrace se provádí numericky, počet integračních uzlů je v proměnné NINTG.

### 3.7. Příkazy pro výpis na displeji (všechny výstupy jsou směřovány do souboru \*.DBG a zobrazovány v okně LIST)

- |              |  |  |  |
|--------------|--|--|--|
| U            | 'n-lines up'                               | posun v okně LIST o specifikovaný počet řádek nahoru |  |
| D            | 'n-lines down'                             | posun v okně LIST o specifikovaný počet řádek dolů   |  |
| PU           |  | posun v okně LIST o jednu stránku nahoru             |  |
| PD           |  | posun v okně LIST o jednu stránku dolů               |  |
| REM          |  | zapis poznámky do výstupního souboru *.DBG           |  |
| PTLIST (PTL) | 'first point','last point','increment'     |  | výpis souřadnic bodů                   |
| CRLIST (CRL) | 'first curve','last curve','increment'     |  | výpis tvořících bodů křivek            |
| SFLIST (SFL) | 'first surface','last surface','increment' |  | výpis tvořících bodů ploch             |
| VLLIST (VLL) | 'first volume','last volume','increment'   |  | výpis tvořících bodů objemů            |
| NDLIST (NDL) | 'first node','last node','increment','DOF' |  | souřadnice uzlů a uzlové parametry     |
| NFLIST (NFL) | 'first node','last node','increment','DOF' |  | uzly s IPU≠0 (okraj.podmínky,zatížení) |
| ELIST (EL)   | 'first element','last element','increment' |  | matice konektivity a čísla skupin      |

EPLIST (EPL)	'first element','last element','increment','index EPAR'	výsledky postprocessingu jsou v matici parametrů elementů EPAR. Konkrétní parametr je určen indexem sloupce (např. napětí $N_\alpha$ v prvním sloupci).
MPLIST (MPL)	'group of material properties'	materiálové vlastnosti
RCLIST (RCL)	'group of real constants'	další charakteristiky elementů
EGLIST (EGL)	'group of elements'	upřesnění algoritmu zpracování elementu
CLIST (CL)		vypíše nastavení přepínačů (blokování upwind,...)
CURLIST (CURL)		vypíše seznam všech definovaných tabulek
FUNLIST (FUNL)		vypíše seznam všech definovaných funkcí
DOFLIST (RANGE)	'Zone 1-BC,2-res,3-IC'	vypíše min/max hodnoty všech DOF (BC-okrajové podmínky, RES-výsledek výpočtu, IC-počáteční podmínky)
VARLIST (VARL)	'List of variables=0, with comments=1'	info o všech proměnných interpretu výrazů
LOC	'Výraz'	výpis informací o hodnotě proměnné (nebo výrazu)
MODLIST (MODL)		vypíše info o aktivním modelu soustavy obyčejných dif.rovnic

### 3.8. Příkazy pro export / import do souboru se jménem aktivní databáze (name)

**WRITE (W)** 'Write 1-Nod,2-Ele,3-Groups,4-Epar,5-DBs,6-Dat,7-TC'  
zápis do souborů name.NOD (uzly a uzlové parametry), name.ELE (matice konektivity), name.GRP (vlastnosti elementů a materiálové parametry), name.EPA (parametry elementů jako výsledek postprocessingu), name.DBS (výpis kompletní databáze ve znakovém tvaru), name.DAT (výpis matice bodů pozorování), name.TC (výpis části matice „bodů pozorování“).

Formát souborů NOD – uzlové body

```
test
441      1 (Number of nodes, DOF-active)
Node    X      Y      Z      Kind MPU      IPU JPU TEMP      IPU JPU UX
      1 -.103E-02 -.630E-02 .000E+00 1 17      -1 1 .000E+00 0 2 .000E+00
...
      441 .101E+01 .997E+00 .000E+00 1 17      -2 1 .847E+02 0 2 .000E+00
```

Formát souboru ELE – matice konektivity

```
test
400 (Number of elements)
Elem. Eg Mp Rc Nue N1 N2 N3 N4 N5 N6 N7 N8
      1 1 1 1 4 -1 2 23 22
...
      400 1 1 1 4 -419 -420 -441 -440
```

Formát souboru DAT – matice bodů pozorování

```
EMPTY XINPUT YOUTPU EMPTY EMPTY EMPTY EMPTY EMPTY EMPTY
      0 4 5 0 0 0 0 0 0 0 0 0
      1 .000E+00 .000E+00 .000E+00 .000E+00 .000E+00 .000E+00 .000E+00 .000E+00 .000E+00 .000E+00 .000E+00
      2 .100E+00 .000E+00 .275E-01 .000E+00 .000E+00 .000E+00 .000E+00 .000E+00 .000E+00 .000E+00 .000E+00
...
      20 .190E+01 .000E+00 .148E+00 .000E+00 .000E+00 .000E+00 .000E+00 .000E+00 .000E+00 .000E+00 .000E+00
```

**READ (R)** 'Read 1-Nod,2-Ele,3-Groups,4-Epar,5-DBs,6-Dat,7-txt,8-txt,9-COSMOS'

Import dat v tom tvaru jak byly zapisovány do souborů příkazem WRITE. To se týká matice uzlů, elementů, skupin vlastností a parametrů elementů, rovněž pak formátu matice bodů pozorování. Zvláštní význam mají varianty 7 a 8, které importují data \*.txt ve víceméně volném formátu do matice bodů pozorování a to buď jako jednotlivé sloupce (varianta 7) nebo dokonce s interpolací z tabulky (přepočtení dat zadávaných s jinými hodnotami časů než odpovídá časové základně matice bodů pozorování). Varianta 9 umožňuje import konečněprvkové sítě vytvořené programem COSMOS (uzlové body a matice konektivity).

**READBI (RB) name** čtení databáze ze souboru name.BIN (binární tvar)

**WRITEB (WB) name,typ** zápis databáze do souboru name.BIN. Parametru typ =0 odpovídá zápis zkrácené databáze (vypouští se jen některé dočasné hodnoty), pro typ=1 se ukládá kompletní zóna databáze (včetně prvků, které nejsou vůbec využity).


Následující operace nezapisuje výsledky, ale vytvoří soubor s přímým přístupem RUNBOX.BIN, který obsahuje informace o korespondenci libovolných souřadnic  $x,y,z$  a použitými elementy (jednoduše řečeno libovolnému bodu  $x,y,z$  přiřadí index elementu v němž se bod nachází,

nebo hodnotu —999, pokud bod leží mimo). Tento soubor je nezbytně nutný pro následující operace jako je výpočet integrálu řešení, zpracování odezev kolimovaných detektorů apod. Poznamenejme, že i jednorozměrné elementy např. typu PIPE (trubka) jsou chápány jako trojrozměrné objekty, trubka tedy není úsečka, nýbrž válec, jehož průměr je dán příslušným parametrem v zoně RCONST.

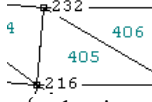
### BOX size

Parametr *size* (default hodnota 0.3) určuje relativní rozměr elementárních kvádrů, kterými je pokryta celá modelovaná oblast. Hodnotě 1 odpovídá velikost nejmenšího použitého elementu. Čím menší je hodnota *size*, tím přesnější budou operace vyžadující interpolaci řešení (interpolaci uzlových parametrů v libovolném bodě  $x,y,z$ ).

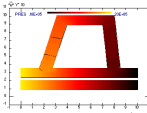
## 3.9. Vykreslování a identifikace entit v okně MODEL

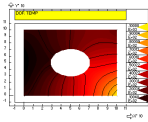
PTPLOT (PTP)	,first point‘,‘last point‘,‘increment‘
CRPLOT (CRP)	,first curve‘,‘last curve‘,‘increment‘
SFLOT (SFP)	,first surface‘,‘last surface‘,‘increment‘
VLLOT (VLP)	,first volume‘,‘last volume‘,‘increment‘
NDPLOT (NDP)	,first node‘,‘last node‘,‘increment‘
NFLOT (NFP)	,first node‘,‘last node‘,‘increment‘, ,DOF:TEMP,UX,..RX,..PS, PSX,..‘
PFLOT (PFP)	,Zone 1-BC,2-res,3-IC‘, ,DOF:TEMP,UX,..‘, ,Size‘
	Zatímco příkaz NFLOT zobrazuje jen příslušné značky DOF v uzlech s předepsanou okrajovou podmínkou pro specifikovaný DOF, zobrazuje PFLOT <i>hodnoty</i> DOF v bodech PT (pro každý bod PT se vyhledá nejbližší uzel a znázorní se jemu odpovídající hodnota DOF na analogovém ukazateli s velikostí Size (0-malý,1-středně velký,2-...))
ELOT (EP)	,first element‘,‘last element‘,‘increment‘,‘EG,RC,MP‘,‘group number‘
	Vykreslení elementů (1D,2D i 3D) s možností barevného odlišení elementů s různými skupinami EGROUP,RCONST,MPROP. Pokud se zadá nenulová hodnota <i>group number</i> zobrazují se pouze elementy s tímto číslem skupiny.
DEFLOT	vykreslení deformované sítě
NIDENT (NID)	,Zone 1-BC,2-res,3-IC‘, ,DOF:TEMP,UX,..‘
	výběr uzlu myší v okně MODEL (L-click výběr nejbližšího uzlu, R-click ukončení příkazu), zobrazení souřadnic a parametrů ve stavovém řádku. Prvním parametrem je zona z níž se vybírají zobrazované hodnoty BC-okrajové podmínky, RES-výsledky, IC-počáteční podmínky. Vždy se zobrazují hodnoty prvních pěti DOF uzlu a kromě toho i explicitně specifikovaný stupeň volnosti DOF.
PIDENT (PID)	výběr vztažného bodu myší, zobrazení souřadnic.
CIDENT (CID)	výběr křivky myší, výpis tvořící bodů a informací o síťování křivky.
EIDENT (EID)	, 1-Egroup,2-Rconst,3-Mprop,4-EPAR‘
	výběr elementu myší (L-click výběr, R-click ukončení operace). Informace zaměřené buď na parametry EGROUP, RCONST, MPROP nebo výsledky postprocessingu jsou zobrazovány ve stavovém okně.
TIDENT (TID)	výběr časového průběhu (Time Curve) myší, výpis charakteristik (momentů),... křivky.

### ▪ Aktivace číslování entit při jejich vykreslování

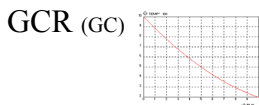
ACTNUM	, 1-nd,2-el,3-pt,4-cr,5-sf‘	
INACTNUM	, 1-nd,2-el,3-pt,4-cr,5-sf‘	
ACTSET	, 1-egroup,2-mprop,3-rconst‘,‘group no.‘	

### ▪ Grafické znázornění výsledků uložených v zonách uzlových parametrů

GD1 (G1)	,DOF:TEMP,UX,..RX,..PS, PSX,..‘,‘[1-BC,2-result,3-init]‘
	Znázornění hodnot specifikovaného uzlového parametru u jednorozměrného modelu (např. potrubní síť). Dvouuzlové elementy se vykreslují jako obdélníky vyplněné barvou, přičemž barevná škála odpovídá hodnotě uzlového parametru (černá min., zářivě žlutá max.). Druhý parametr příkazu specifikuje zónu v níž jsou uzlové parametry ukládány: 1-BC znamená okrajové podmínky (to slouží spíše jen pro kontrolu zadání), 2-aktuální výsledky, 3-jsou počáteční podmínky.
GD2 (G2,GRAPH)	,DOF:TEMP,UX,..RX,..PS, PSX,..‘,‘[1-BC,2-result,3-init]‘,‘Xmin‘,..,‘Ymax‘



Znázornění hodnot specifikovaného uzlového parametru u dvourozměrného modelu (s trojúhelníkovými nebo čtyřúhelníkovými elementy). Elementy se vyplňují barvou, která odpovídá hodnotě uzlového parametru (černá min., zářivě žlutá max.) a současně se čarami vykreslují hodnoty vrstevnic.



GCR (GC)

,index of curve', 'DOF:TEMP,UX,..RX,..PS, PSX,..', '[1-BC,2-result,3-init]'

Průběh specifikovaného uzlového parametru podél vybrané křivky. Je to XY graf, kde na horizontální ose je parametr  $t$  parametricky definované křivky (0 až 1). Výběr uzlových bodů je dán maximální vzdáleností od této křivky (tuto hodnotu lze nastavit parametrem TOL).

GFCR (GFC)

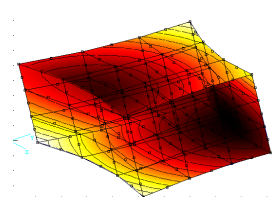
,index of curve', 'index of function'

Graf průběhu funkce definované výrazem využívající zpravidla funkce  $DOF(typ\ uzlového\ parametru, číslo\ zony\ 1\ až\ 4, x,y,z)$ , nebo  $EPA(typ\ parametru\ elementu, x,y,z)$ , podél specifikované křivky.

GFSF (GD3)

,index of surface', 'index of function', 'minimum', 'maximum'

Vrstevnice průběhu funkce definované výrazem využívající zpravidla funkce  $DOF(typ\ uzlového\ parametru, číslo\ zony\ 1\ až\ 4, x,y,z)$ , nebo  $EPA(typ\ parametru\ elementu, x,y,z)$ , na specifikované ploše. Vybarvují se plochy přímo v kreslicím okně. Tato operace je základním nástrojem pro grafické znázornění výsledků 3D modelů.



Grafická znázornění výsledků postprocessingu uložených v zónách parametrů elementů

GE1 (GRAPS)

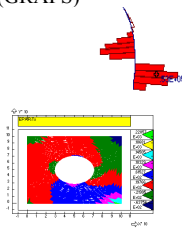
'ENalfa,ENbeta,EMalfa,EMbeta,EQz,EQ,ERe,ETau,..'

Tato varianta se uplatní při vykreslování výsledků jednodimenzionálních problémů (rotačně symetrické skořepiny, nebo potrubní sítě). Jako parametr se zadává název.

GE2

,ESXX, ESYY, ESXY, ETX, ETY, EDiss,..', 'Xmin', ..., 'Ymax'

Stejná operace jako GE1, ale pro dvourozměrné problémy s trojúhelníkovými nebo čtyřúhelníkovými prvky. Každý element je vyplněn barvou, která odpovídá hodnotě ve specifikovaném sloupci matice EPAR (vybírání se dle názvu parametru). Nulové hodnoty Xmin,... znamenají, že se bude kreslit celý objekt, nenulové hodnoty umožní specifikovat výřez.



Grafické znázornění výsledků z předchozích časových kroků uložených v souboru \*.OUT

GRATIM (GT)

,Recorded parameter DOF' ... a následuje výběr uzlů myší, podobně jako u operace PT.

Vykreslí časové průběhy specifikovaného uzlového parametru v uzlech vybraných lokátorem (čtení souboru výsledků řešení všech časových kroků \*.OUT). Během načítání časových kroků probíhá animace stejným způsobem jako u předchozí operace GD2 (kreslí se vrstevnice) a teprve poté se okno GRAPH přepne do zobrazení X-Y a vykreslí se časové průběhy vybraného DOF.

LOADT (LT)

,Results from time [s]'

Tato operace čte soubor \*.OUT a vyhledává výsledky (uzlové parametry), které odpovídají specifikovanému času. Ty pak přeneše do zony počátečních podmínek. Lze použít pro restart výpočtu nebo tehdy, když chceme vykreslit výsledky v určitém časovém kroku operací GD2.

Grafické znázornění průběhů předdefinovaných funkcí nebo tabulek

GRAFUN

,Function (-10:50)', 'from', 'to' slouží spíše jen pro kontrolu správné definice CURDEF a FUNDEF

WINDOW číslo okna Grafické výstupy jsou standardně zobrazovány v okně číslo 21 (VIEW). Velikost tohoto okna je poměrně malá, proto je možné tyto výstupy přesměrovat do jiných a již otevřených oken (např. MODEL nebo HELP).

### 3.10. Vytvoření sítě elementů a uzlových bodů

NMERGE

úprava matice konektivity spočívající ve ztotožnění odkazů na uzly, které mají stejné souřadnice (za totožné jsou považovány uzly, jejich relativní vzdálenost je dána parametrem TOL). V nové úpravě bezprostředně po modifikaci matice konektivity následuje ZRUŠENÍ nevyužitých uzlů (NCOMPRESS v Cosmosu)

Pokud není řečeno jinak, přiřazují se nově generovaným elementům čísla aktivních skupin EGROUP, RCONST i MPROP (o tom, která skupina je právě aktivní, je uživatel informován v okénku STATUS, sleduj EG=..., RC=..., MP=...). Aktivní je vždy posledně definovaná skupina nebo ta, která byla aktivována explicitně příkazem ACTSET.

Generování uzlů a elementů nezávisle na geometrických entitách (PT,CR,SF,VL)

ND ,Kind (1-vertex,2-mid,3-center)‘, ,X‘, ,Y‘ nový uzel, definovaný podobně jako bod PT (možnost zadávat souřadnice myši): generují se stejné DOF jako v uzlech typu vrchol, strana nebo těžiště, tak jak je definováno u zvoleného typu analýzy (STR,...). Podobná operace jako PT.

E ,No of nodes‘, ,ND1‘, ,ND2‘, ,ND3‘,... generuje se nový element na základě již vytvořených uzlů a přiřadí se mu indexy aktivních skupin EGROUP,RCONST,MPROP.

Generování sítě elementů na křivce nebo ploše.

MSF ,SF index‘, ,Nx‘, ,Ny‘, ,Lx/Fx(+/-)‘, ,Ly/Fy(+/-)‘, ,NUE(3,4,5,6,7,8,9/-center/)‘  
Vytvoří se elementy a uzly na specifikované ploše. Parametr Last/First ovlivňuje zhušťování elementů k jedné straně (kladná hodnota) nebo symetricky na obě strany (záporná hodnota). NUE je počet uzlů elementu, což většinou už samo o sobě určuje zda jde o trojúhelník nebo čtyřúhelník; případná nejednoznačnost se řeší znaménkem NUE – záporná hodnota znamená, že poslední uzel je uprostřed elementu (NUE=-4 tedy označuje trojúhelník se čtvrtým uzlem v těžišti). Operace MSF funguje i pro trojúhelníkové plochy, ale s omezením-lze generovat pouze trojúhelníkové elementy.

MCR ,CR index‘, ,Nx‘, ,Last/First(+/-)‘, ,NUE(2,3)‘, ,RC‘, ,CR last‘, ,CR step‘  
Vytvoří se elementy a uzly na specifikované křivce. Význam parametrů je shodný jako u MSF. Parametr RC je index skupiny reálných konstant (default hodnotě 0 odpovídá index aktivní skupiny RCONST). Jedním příkazem lze vygenerovat síť na více křivkách – index té poslední je CRlast a CRstep je krok (zpracovávají se křivky CRindex,...,CRlast s krokem CRstep).

MCR2 ,CR pipe 1‘, ,CR pipe 2‘, ,Nx‘,  
,MPROP-pipe 1‘, ,MPROP-pipe 2‘,  
,RC-pipe 1‘, ,RC-pipe 2‘, ,RC-HEXC‘,  
elementy typu VÝMĚNÍK – generuje se Nx dvojic stejně dlouhých dvouuzlových elementů typu PIPE na křivkách 1 a 2 (s explicitně zadanými skupinami reálných konstant a materiálových vlastností) a současně se vytvoří Nx čtyřuzlových elementů, které spojují dvojice odpovídajících elementů PIPE (explicitně se uvádí jen skupina reálných konstant v níž je specifikována mj. teplosměnná plocha). Pro každý 4-uzlový element se ukládají do zóny parametrů elementů IEPAR indexy elementů PIPE z nichž je element výměníku tvořen (využívá se poslední a předposlední sloupec matice IEPAR) – toto opatření slouží ke zrychlení výpočtu.

MCR4 ,CR pipe 1‘, ,CR pipe 2‘, ,RC-HEXC‘,  
slouží k vytvoření stejných elementů typu VÝMĚNÍK jako operace MCR2. Jediný rozdíl je v tom, že se generují pouze 4 uzlové elementy vyjadřující propojení dvouuzlových elementů PIPE, které již musely být vygenerovány dříve (operací MCRC).

Definici parametrů RCONST a EGROUP u elementů typu výměník tepla ulehčují příkazy

RCHEX pro výměníky tepla definované příkazem MCR4.  
RCHEV pro deskové výměníky tepla (chevron) definované příkazem E (element ze 4 uzlů)  
RCEHEV totéž co RCHEV jenomže příslušné skupiny RCONST a EGROUP se nespécifikují explicitně, ale zadává se index elementu, který již musel být předtím vytvořen (příkaz se používá spíše jen při změně již definovaných parametrů výměníku)

Podobně při výběru elementů typu čerpadlo z katalogu (dvouuzlové elementy PUMP) je třeba požadavky na čerpadlo (oblast použití, odhadovaný průtok a výtlačnou výšku) zadávat v příkazech

RCPUMP (RCP) 'Pump 0-any,1-milk,2-waterworks,...','Nozzle diameter [m]','Estimated flowrate [m^3/s]','Estimated discharge height [m]'

RCEPUM (RCEP)

MVL ,VL index‘, ,Nx‘, ,Ny‘, ,Nz‘, ,Lx/Fx(+/-)‘, ,Ly/Fy(+/-)‘, ,Lz/Fz(+/-)‘, ,NUE(8,20)‘

Generuje se síť elementů a uzlů uvnitř specifikovaného objemu. Stejný význam parametrů jako u operace MSF.

**3.11. Zadávání hodnoty a atributu zvoleného uzlového parametru** v uzlech na křivce nebo na ploše (uvnitř plochy, ne na její hranici). Tímto způsobem se definují silné okrajové podmínky (status parametru  $IPU < 0$ ) i zatížení (status  $IPU > 0$ ) nebo slabé okrajové podmínky 3.druhu ( $IPU > 20$ ).

NFCR (FCR)	,CR index', ,DOF:TEMP,UX,..RX,..PS, PSX,..', 'status (BC)', ,P1(left)', 'P2(right)', 'P3(midpoint)'
	Příklad, definice rychlostního profilu funkcí FUNDEF -2,1.5*(1-YY**2) (funkce č.-2, např.parabola) NFCR 17,VX,-2,1,1,1 (rychlost $u_y$ na křivce 17)
	Příklad okrajové podmínky přestupu tepla TE(1)=20 (vnější teplota jako RC konstanta elementů) NFCR 10,TEMP,21,200,200,200 ( $\alpha=200$ na křivce 10)
NFSF (FSF)	,SF index', ,DOF:TEMP,UX,..RX,..PS, PSX,..', 'status (BC)', ,P1', 'P2', 'P3', 'P4', 'P5m', 'P6m', ,P7m', 'P8m'
NF (F)	,ND index', ,DOF:TEMP,UX,..RX,..PS, PSX,..', 'status (BC)', 'Value'
NFPT (FPT)	,PT index', ,DOF:TEMP,UX,..RX,..PS, PSX,..', 'status (BC)', 'Value'

Pro zjednodušení postupu zadávání okrajových podmínek pro složky rychlostí, proudové funkce a jejich derivací jsou k dispozici příkazy

WALL	,CR index', ,PSI'
INLETA	,CR index', ,u-mean', ,Cyl.-1' (centrální kanál, Cyl=0 rovinné, =1 osově symetrické proudění)
INLET	,CR index', ,u1', ,u2', ,Cyl.-1' (zadány hodnoty rychlostí v koncových bodech křivky)

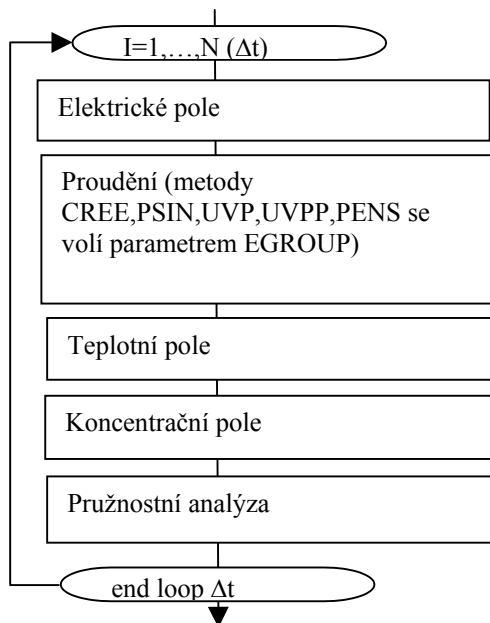
Přiřazení počátečních podmínek (implicitně jsou to nuly)

INITIA (INI)	,DOF:TEMP,UX,..RX,..PS, PSX,..', ,Function (-10:50)'
	Poznámka: Pokud chceme jen vynulovat počáteční podmínky, stačí zadat funkci číslo 0 (i když není definovaná)
MOFE	,DOF', ,Index of EPAR(1:5)' Move degree of Freedom to Element parameters
	Tato operace vypočítá aritmetický průměr specifikovaného DOF v každém elementu a uloží do zony parametrů elementu (do zvoleného sloupce matice EPAR).

### 3.12. Výpočet (OPERACE)

Následující příkazy spouští řešení vybraných problémů. Až na výjimky je pro řešení použita frontální metoda, opakovaná u nestacionárních nebo nelineárních problémů v několika časových/ iteračních krocích. Specifikum problému (operace) je ukryto v procedurách, které definují element (tj. lokální matici soustavy a vektor pravé strany), přičemž jméno procedury je totožné se jménem operace. Operace implementované v programu RUNFEM.exe zahrnují řešení rovnic dvourozměrného proudění, teplotního, koncentračního a elektrického pole, potrubní sítě, statickou analýzu pružných konstrukcí. Program RUNFEM je vlastně implementací metody konečných prvků, na rozdíl od programu RUNMOD.exe, který je určen pro modely diskretních průtočných systémů popisovaných soustavami obyčejných diferenciálních rovnic. Bližší popis jednotlivých operací a příslušných procedur je uveden v kapitole 4.

**3.12.1. RUNFEM** řeší problémy nestacionárního proudění se současným přenosem tepla i hmoty, chemickou reakcí a objemovým zdrojem tepla. V každém časovém kroku se řeší posloupnost dílčích problémů, přičemž je možné na každé časové hladině iterovat až do té doby, než je dosaženo zvolené přesnosti. Zadání nulového počtu iterací znamená vyřazení příslušné operace z celé sekvence.



SOLVE ,Initial Time‘, ‘No. of time steps‘, ‘dt [s]‘, ,Append EPA‘, ‘iter electric‘, ‘iter flow‘, ‘iter thermal‘, ,, ‘iter concentration‘, ‘iter static‘

Pro správné pochopení funkce řešiče je třeba vědět, odkud se berou počáteční hodnoty rychlostí a proudové funkce používané pro řešení jednoho časového kroku, resp. jedné iterace a kam se ukládají výsledky. Obecně mohou být ve hře uzlové parametry pro něž jsou v paměti rezervovány tyto zony: zona číslo 2 (aktuální hodnoty okrajových podmínek a zatížení, nahrazované aktuálním řešením), zona číslo 3 obsahuje počáteční podmínky a zona číslo 4 hodnoty z předchozí iterace. Kromě uzlových parametrů se při postprocessingu zpravidla počítají parametry elementů (EQ-průtok, ETAU-smykové napětí, ERE-Reynoldsovo číslo, EFOUL-vrstva úsad, EDISS-dissipovaný výkon, ETX-gradient teploty, ENA-normálové síly, EMA-ohybové momenty, a řada dalších). Po odeslání příkazu SOLVE se odehrává toto:

- Pokud je parametr Append 0 nebo 1, otevírají se nové soubory *problem.OUT* a *problem.EPA* do nichž budou ukládány výsledky řešení (stupně volnosti do souboru OUT a parametry elementů do souboru EPA). Pokud je ale parametr Apend=2, otevírají se již existující soubory a výsledky budou zapisovány až za výsledky předchozích časových kroků.
- Pokud je parametr Append=0 vynuluje se celá zona parametrů elementu (vynuluje se např. tloušťka úsad).

- Překopírují se počáteční podmínky (zona 3) do iterační zony (zona 4).
- Cyklus časových kroků. V každém časovém kroku se provádí následující činnosti:
  - Inkrementuje se čas TIME o hodnotu DT
  - Cyklus operací (ELEC, FLOW, THER, CONC, STAT):
    - pro každý typ operace se stanoví počet a typ počítaných uzlových parametrů (NDOF).
    - PREFRONT (inicializace frontální metody pro typ operace)
  - Cyklus interací. Každá iterace zahrnuje tuto posloupnost činností:
    - Inicializace okrajových podmínek a zatížení do výpočtové zony řešiče (zona 2). Pod pojmem inicializace máme na mysli toto: Prochází se seznam všech uzlů, jejich NDOF uzlových parametrů vybraných pro danou operaci a zjistí se status parametru IPU. Pokud je IPU -10, ..., -1, zadávají se silné okrajové podmínky, pro IPU 1, 2, ..., 10 pak bodová zatížení (nebo třeba bodový zdroj tepla). Tyto hodnoty se vypočtou jako součin uživatelem zadané konstantní hodnoty uzlového parametru (zona 1) a funkce číslo IPU – pokud není tato funkce nebo tabulka definovaná, uvažuje se rovna jedné (identita). Pro vyšší hodnoty statusu IPU se vstupní hodnota parametru v zóně 2 vynuluje. Poznamenejme, že tato inicializace vůbec neoperuje se zónou počátečních podmínek 3.
    - Souběžně se sestavuje a řeší soustava lineárních algebraických rovnic frontální metodou. Jako vektor pravé strany (zatížení) se použije zona 2, která je poté přepsána vektorem výsledku. Při sestavení je probírán seznam všech elementů a v případě, že umožňují provést danou operaci a když vyhovuje počet uzlů, počítá se matice elementu procedurami, které odpovídají dané operaci a typu elementu. Pokud je problém nelineární, použijí se hodnoty uzlových parametrů z předchozí iterace (zona 4, ale někdy též zona 3), při řešení nestacionární úlohy se využívají počáteční hodnoty v zóně 3. U nestacionárních problémů je pro řešení použita Eulerova metoda s možností nastavení parametru  $\theta=1$  (Euler implicitní) až  $\theta=0$  (Euler explicitní),  $\theta=0.5$  (při řešení nestacionárního teplotního pole je to varianta Crank Nicholson).
    - Jen v případě, že se řeší iterace typu FLOW, provede se postprocessing typu 2 (obvykle slouží k výpočtu průtoků z právě vyřešeného rozložení tlaků).
    - Vypočtený vektor řešení je ze zony 2 překopírován do iterační zony 4 s podrelaxací ( $x_4 \leftarrow (1-\omega) x_4 + \omega x_2$ ). Současně se počítá norma odchylky řešení.
    - Pokud je vypočtená hodnota odchylky menší než předepsaná mez (zadávaná příkazem OPTION) iterační cyklus se předčasně ukončí.
  - Po skončení iterační cyklu je výsledek přenesen ze zony 2 do zony počátečních podmínek.
    - Postprocessing výsledků časového kroku (postprocessing typu 1). Zpravidla se jedná o výpočet napětí z vypočtených posuvů, ale někdy i integrace, jejímž výsledkem je např. změněná hodnota termického odporu vrstvy úsad, která se mění v čase.
  - Po skončení cyklu operací se zapiší hodnoty všech uzlových parametrů do souboru .OUT a parametrů elementů do souboru .EPA.
    - Testuje se to, zda během řešení časového kroku nebyla stisknuta některá klávesa, pokud ano, cyklus časových kroků se ukončí, pokud ne pokračuje se dalším časovým krokem.
- Po skončení všech časových kroků se aktualizuje databáze (binární soubor) a činnost řešiče se ukončí.

Při výpočtu dvourozměrného proudění se může v různých elementech používat různá metoda řešení: nastavuje se pro každou skupinu zvlášť příkazem EGROUP

CREE (CREEP)	plouživé proudění – proudová funkce $\psi$ , $\psi_x$ , $\psi_y$ (uzlové parametry typu PSI, element T3)
PSIN	Navier Stokes, proudová funkce $\psi$ , $\psi_x$ , $\psi_y$ (uzlové parametry typu PSI, element T3)
PSOM, CARE	Navier Stokes, proudová funkce $\psi$ , vířivost $\omega$ (uzlové parametry typu PSI, element T3, T6, Q4, Q8)
UVP	Navier Stokes, rychlosti $u_x$ , $u_y$ , tlak $p$ , nestlačitelná kapalina (uzlové parametry typu UVP, element T6)
UVPP	Navier Stokes, rychlosti $u_x$ , $u_y$ , tlak $p$ , pseudostlačitelnost (uzlové parametry typu UVP, element T6)
PENS	Navier Stokes, rychlosti $u_x$ , $u_y$ , eliminace tlaku metodou pokutové funkce (uzlové parametry typu UVP, element T3, T6, Q4, Q8)
MIKE	rychlostní pole $u_x$ , $u_y$ s minimální kinetickou energií, tlak $p$ je stanoven metodou Lagrangeových multiplikátorů. Uzlové parametry typu PSI nebo UVP, elementy T3, T6, Q4, Q8.
MIDE	rychlostní pole $u_x$ , $u_y$ s minimální dissipovanou a kinetickou energií, a minimálním kvadrátem rezidua rovnice kontinuity (metoda nejmenších čtverců). Uzlové parametry PSI/UVP, elementy T3, T6, Q4, Q8.

**3.12.2. RUNMOD** je program zaměřený na modelování časových průběhů, především koncentračních odezev systémů, popisovaných soustavami obyčejných diferenciálních rovnic (jde o modely, nazývané někdy kompartmentové, nebo „lumped parameter“ modely). Tato skupina operací není založena na metodě konečných prvků, ale na numerické integraci soustavy obyčejných diferenciálních rovnic metodami typu Runge Kutta. Výsledkem jsou časové průběhy predikované matematickým modelem a ty je možné porovnávat s experimentálně stanovenými časovými průběhy



odezev systému s čímž souvisí řada operací pro výpočet charakteristik (momentů) časových průběhů, jejich vyhlazování, interaktivní editace atd. Všechny tyto operace lze ale využít i pro zpracování výsledků nestacionárního řešení předchozích problémů. Časové průběhy jsou v databázi FEMINA uloženy jako tabulka  $t_i, y_i$  nazývaná matice bodů pozorování. První sloupec tabulky je čas, který tvoří společnou časovou základnu pro všechny funkční průběhy. Maximální počet bodů tabulky je 1024 a maximální počet sloupců 10 – jednotlivé časové průběhy jsou označovány indexem 2 až 10.

Základní operace s maticí bodů pozorování byly popsány v kap. 2.8:

TCEDIT (TCE) editace bodů vybrané křivky myši (lze zvolit několik různých režimů editace)

TCINPUT (TCI) zadávání hodnot vybraného sloupce přímo z klávesnice

TCSET (TCS) specifikace typu sloupců matice bodů pozorování

TCLIST (TCL) zobrazení matice bodů pozorování

TCF přiřazovací příkaz Pro označení sloupce jsou vyhrazeny proměnné C1,C2,...,C10 a součástí příkazu může být i proměnná I – index bodu pozorování (index řádku matice bodů pozorování). Příklady: C1=0.1\*I definuje ekvidistantní časy (první sloupec 0.1, 0.2, 0.3,...), C2=EXP(-0.05\*C1),...

TCFR row1,row2,přiřazovací příkaz

Totéž co TCF, ale přiřazovací příkaz je aplikován jen na specifikovaný interval řádků matice bodů pozorování.

TSTEP 'No. of time steps','Time step dt [s]'

RMODEL 'Model name'

Čtení modelu popisujícího soustavu obyčejných diferenciálních rovnic z textového souboru. Model je definován jednoduchým jazykem se stejnou syntaxí jako jazyk používaný pro zápis parametrů (výrazů) příkazů programu FEMINA (dokonce lze používat stejné předdefinované systémové proměnné).

Příklad:

```

Ideal mixers series
PM1-number of mixers
PM2-mean residence time
\\ini
real tm
neq=pm(1)
tm=pm(2)/neq
cm(1)=1/tm
\\mod
dcm(1)=(xv(1)-cm(1))/tm
for i=2,neq do
[ dcm(i)=(cm(i-1)-cm(i))/tm ]
yv(1)=cm(neq)
\\par
idenum=1000001 method=1 inp=1 out=1 npar=2 NEQ=5
x1=1 y1=2
No.of mixers: pm(1) default=5 min=1 max=100 relFAKT=0.1
Mean residence time: pm(2) default=1 min=0.01 max=50 relFAKT=0.2

```

Toto je jen úvodní text, slovní popis modelu (v tomto případě jde o model serie ideálních mísičů se dvěma parametry, počtem mísičů a celkovou střední dobu prodlení)

Sekce programu, která se provádí jen jednou, před začátkem numerického řešení. Deklarace, definované v této sekci, mají platnost i v sekci následující (např. proměnná TM-časová konstanta jednoho mísiče). V INI sekci se ale především definují počáteční podmínky (např. počáteční koncentrace v prvním mísiči).

Teprve v sekci MOD je definován vlastní model: pod definicí se rozumí předpis výpočtu prvních derivací počítaných veličin (zde např. koncentrací CM(1),CM(2),...,CM(NEQ) jejichž derivace jsou označeny DCM(1),...,DCM(NEQ)).

Definice parametrů (default). IDENUM je číslo určující grafické zobrazení modelu, METHOD způsob řešení soustavy rovnic, INP,OUT počet vstupů/výstupů, NPAR-počet parametrů modelu, NEQ-rovnic, X1,Y1 indexy vstupních a výstupních průběhů. Pro každý parametr modelu je pak rezervován jeden řádek dat.

Řádek začíná textem dialogu zadávání parametru, zakončeným dvojtečkou. Pak následuje jméno parametru – pro potřeby těchto modelů byl vyhrazen vektor PM, nicméně jako parametr může být použit libovolný prvek databáze specifikovaný jménem systémové proměnné. Pro definici modelu tedy lze použít třeba souřadnici vztahného bodu XPT(20). Následující položky jsou již identifikovány klíčovými slovy, takže na jejich pořadí nezáleží a mohou být vynechány.

Poznámka: Syntaxe jazyka použitého pro definici modelu spolu s výčtem předdefinovaných proměnných databáze jsou uvedeny až v následujícím odstavci.

Poznámka týkající se konvencí tvorby názvů souborů a kódování schematu parametrem IDENUM.

IDENUM: *gsrrnnmm*

g – číslice, která identifikuje „vnější“ systém (dodatečně připojený pístový tok nebo recykl)

s – číslice, která identifikuje základní subsystém

rr – index parametru modelu (pořadové číslo parametru), který udává poměr objemu aparátů v první větvi k celkovému objemu

nn – index parametru modelu, který udává počet mísičů v druhé větvi

mm – index parametru modelu, který udává počet mísičů v první větvi



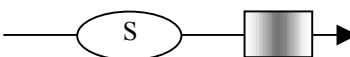
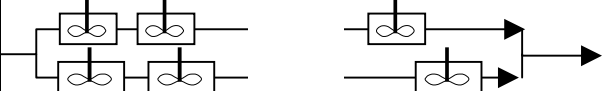
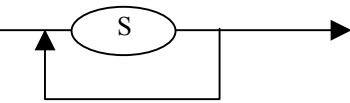

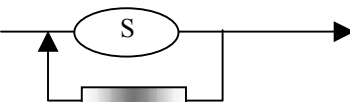
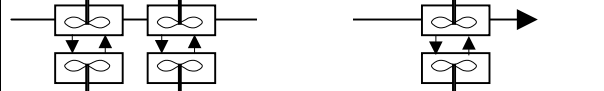
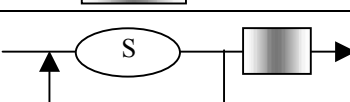

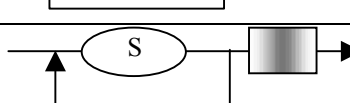
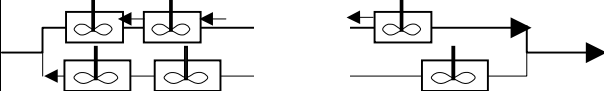
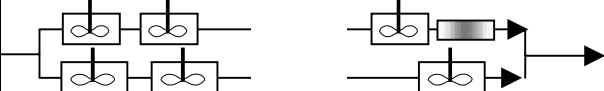
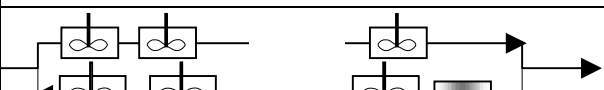
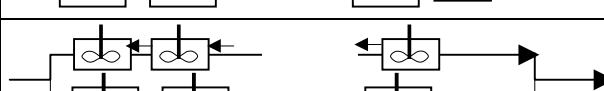
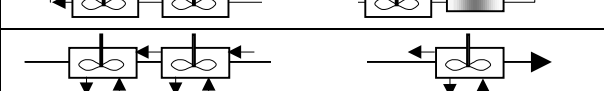
Název souboru, který model popisuje, je maximálně na 4 znaky: *SGC.mdt*

S – identifikace základního systému (na 1 až dva znaky)

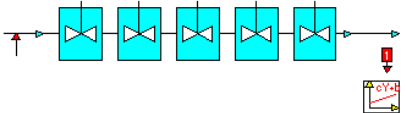
G – identifikace „vnějšího“ systému (1 znak)

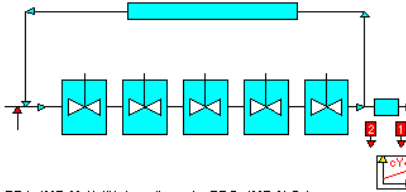
C – určuje použití korekce na zisk detektoru a na zvýšení pozadí (0-bez korekce, A-zisk,B-pozadí,L-kombinace korekcí na zisk detektoru i zvýšení pozadí)

-

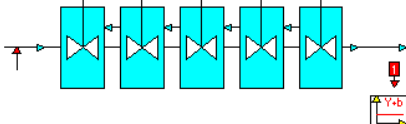
Schema vnějšího systému	g	G	Schema základních subsystémů	s	S
	0	0		0	S
	1	P		1	SS
	2	R		2	B
	3	U		3	D
	4	V		4	SR
	5	W		5	BR
				6	SP
				7	RP
				8	BP
				9	BD

## Vybrané příklady modelů

<p><b>IDEAL MIXERS SERIES SOL.MDT</b></p>  <p>RP 1: .000E+00 Background level          RP 2: .100E+01 Gain          IP 3: 5 No.of mixers          RP 4: .100E+01 Mean residence time</p> <p>Ideal mixers series SOL.mdt          PM1-a1 background level          PM2-a2 scale (detector gain)          PM3-number of mixers          PM4-mean residence time</p>	<pre> \\ini real tm neq=ip(3) tm=rp(4)/neq cm(1)=1/tm \\mod dcm(1)=(xv(1)-cm(1))/tm for i=2,neq do dcm(i)=(cm(i-1)-cm(i))/tm yv(1)=rp(1)+rp(2)*cm(neq) \\par idenum=0000003 method=1 inp=1 out=1 npar=4 NEQ=5 x1=2 y1=3 Background level: rp(1) default=0 min=-1000 max=1000 relfakt=1 Gain: rp(2) default=1 min=0.001 max=1000 relfakt=1 No.of mixers: ip(3) default=5 min=1 max=100 relFAKT=1 Mean residence time: rp(4) default=1 min=0.01 max=50 relFAKT=1         </pre>
--	---

<p><b>IDEAL MIXERS SERIES+PF+RECYCLE PF SWL.MDT</b></p>  <p>RP 1: .100E+00 Vp1/V piston flow volume          RP 2: .100E+00 Vp2/V PF in recycle          RP 3: .100E+00 Recycle ratio          IP 4: 5 No.of mixers          RP 5: .100E+01 Mean residence time          RP 6: .000E+00 Background          RP 7: .100E+01 Gain</p> <p>Ideal mixers series+PF+recycle PF SWL.mdt          RP1- Vp1/V piston flow volume          RP2- Vp2/V piston flow volume          RP3- recirculation          IP4- number of mixers          RP5- mean residence time          RP7- background          RP8- gain</p>	<pre> \\ini real tm,pf1,pf2,r,tmean,del1,del2 int i pf1=rp(1) pf2=rp(2) r=rp(3) tmean=rp(5) neq=ip(4) del1=pf1*tmean del2=pf2*tmean tm=tmean/neq*(1-pf1-pf2) cm(1)=1/tm \\mod dcm(1)=(xv(1)+r*yvt(2,time-del2)-(1+r)*cm(1))/tm for i=2,neq do dcm(i)=(1+r)*(cm(i-1)-cm(i))/tm yv(2)=cm(neq) yv(1)=yvt(2,time-del1)*rp(7)+rp(6) \\par idenum=50000004 method=-2 inp=1 out=2 npar=7 NEQ=5 x1=2 y1=3 y2=4 Vp1/V piston flow volume: rp(1) default=0.1 min=0 max=100 relfakt=1 Vp2/V PF in recycle: rp(2) default=0.1 min=0 max=100 relfakt=1 Recycle ratio: rp(3) default=0.1 min=0 max=100 relfakt=1 No.of mixers: ip(4) default=5 min=1 max=100 relFAKT=0.1 Mean residence time: rp(5) default=1 min=0.01 max=50 relFAKT=1 Background: rp(6) default=0 min=0.0 max=50 relFAKT=1 Gain: rp(7) default=1 min=0.1 max=50 relFAKT=1         </pre>
--	--

**IDEAL MIXERS SERIES WITH BACKMIXING B0B.MDT**



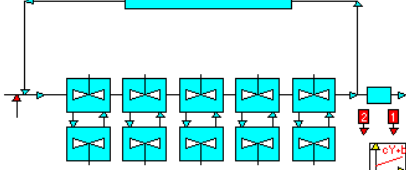
RP 1: .500E+00 Backmixing ratio f  
 RP 2: .100E+01 Mean residence time  
 IP 3: 5 No. of mixers  
 RP 4: .000E+00 Background

Ideal mixers series with  
 backmixing B0B.mdt  
 RP1-backmixing ratio  
 RP2-mean residence time  
 IP3-number of mixers (integer)  
 RP4-background

```

\\ini
real tm
neq=ip(3) f=rp(1)
tm=rp(2)/neq
cm(1)=1/tm
\\mod
dcm(1)=(xv(1)+f*cm(2)-(1+f)*cm(1))/tm
for i=2,neq-1 do dcm(i)=(1+f)*cm(i-1)+f*cm(i+1)-(1+2*f)*cm(i)/tm
dcm(neq)=(1+f)*(cm(neq-1)-cm(neq))/tm
yv(1)=cm(neq)+rp(4)
\\par
idenum=2000003 method=1 inp=1 out=1 npar=4 NEQ=5
x1=2 y1=3
Backmixing ratio f: rp(1) default=0.5 min=0.001 max=10 relafakt=1
Mean residence time: rp(2) default=1 min=0.01 max=50 relFAKT=1
No. of mixers: ip(3) default=5 min=1 max=100 relFAKT=1
Background: rp(4) default=0 min=0.0 max=50 relFAKT=1
  
```

**STAGNANT REGIONS+PF+RECYCLE PF DWL.MDT**



RP 1: .100E+00 Vp1/V piston flow volume  
 RP 2: .100E+00 Vp2/V PF in recycle  
 RP 3: .100E+00 Recycle ratio  
 IP 4: 5 No. of mixers  
 RP 5: .100E+01 Mean residence time  
 RP 6: .100E+00 Exchange coef.  
 RP 7: .500E+00 Vstagnant/V  
 RP 8: .000E+00 Background  
 RP 9: .100E+01 Gain

Stagnant regions+PF+recycle PF  
 DWL.mdt  
 RP1- Vp1/V piston flow volume  
 RP2- Vp2/V piston flow volume  
 RP3- recirculation  
 IP4- number of mixers  
 RP5- mean residence time  
 RP6- q exchange coef.  
 RP7- alpha Vstagnant/Vmixed  
 RP8- background  
 RP9- gain

```

\\ini
real tm,pf1,pf2,r,tmean,del1,del2,v1,v2,alf,q,y2
int m,i
pf1=rp(1) pf2=rp(2) r=rp(3) tmean=rp(5) q=rp(6) alf=rp(7)
neq=ip(4)*2 m=ip(4)
del1=pf1*tmean del2=pf2*tmean
tm=tmean/neq*(1-pf1-pf2) v1=tm/(a+alf) v2=tm*alf/(1+alf)
cm(1)=1/v1
\\mod
y2=yvt(2,time-del2)
dcm(1)=(xv(1)+r*y2+q*cm(m+1)-(1+r+q)*cm(1))/v1
for i=2,neq do
[ dcm(i)=(1+r)*cm(i-1)+q*cm(m+i)-(1+r+q)*cm(i) ] /v1
dcm(m+i)=q*(cm(i)-cm(m+i))/v2 ]
yv(2)=cm(m)
yv(1)=yvt(2,time-del1)*rp(9)+rp(8)
\\par
idenum=53070004 method=-2 inp=1 out=2 npar=9 NEQ=10
x1=2 y1=3 y2=4
Vp1/V piston flow vol.: rp(1) default=0.1 min=0 max=100 relfakt=1
Vp2/V PF in recycle: rp(2) default=0.1 min=0 max=100 relfakt=1
Recycle ratio: rp(3) default=0.1 min=0 max=100 relfakt=1
No. of mixers: ip(4) default=5 min=1 max=100 relFAKT=0.1
Mean residence time: rp(5) default=1 min=0.01 max=50 relFAKT=1
Exchange coef.: rp(6) default=.1 min=0.01 max=50 relFAKT=1
Vstagnant/V: rp(7) default=.5 min=0.01 max=.9 relFAKT=1
Background: rp(8) default=0 min=0.0 max=50 relFAKT=1
Gain: rp(9) default=1 min=0.1 max=50 relFAKT=1
  
```

**TWO SERIES IN RECYCLE (PF IN BRANCH 2) RP0B.MDT**

RP 1: .100E+01 Recirculation (0-infin) RP 7: .000E+00 Background  
RP 2: .500E+00 Alpha Vrecirc/V  
RP 3: .100E+00 Vpiston/Vtotal  
RP 4: .100E+01 Mean residence time  
IP 5: 5 No. of mixers branch 1  
IP 6: 5 No. of mixers in recycle

Two series in recycle (PF in branch 2) RP0B.MDT  
[RP1]- r  
[RP2]- r= V2.N/V  
[RP3]- V3/V  
[RP4]- V/Q mean residence time  
[IP5]- No. of units in 1 serie  
[IP6]- in 2 serie  
[RP7]- background

```

\\INIT
real alfa,beta,tm,tp,t1,t2,ydel,aux,bcgr
integer i,m,n
r=rp(1) alfa=rp(2) beta=rp(3) tm=rp(4) m=ip(5) n=ip(6) bcgr=rp(7)
neq=n+m
t1=tm*(1-alfa-beta)/m t2=tm*alfa/n tp=beta*tm/r
cm(1)=1/t1
\\MODEL
ydel=yvt(1,time-tp)-bcgr
dcm(1)=(xv(1)+r*cm(neq)-cm(1)*(1+r))/t1
for i=2,m do dcm(i)=(cm(i-1)-cm(i))*(1+r)/t1
  dcm(m+1)=(ydel-cm(m+1))*r/t2
for i=m+2,m+n do dcm(i)=(cm(i-1)-cm(i))*r/t2
yv(1)=cm(m)+bcgr
\\PARAM
idenum=07020605 method=1 inp=1 out=1 npar=7 NEQ=5
x1=2 y1=3
Recirculation (0-infin): rp(1) default=1 min=0 max=1e10 relfakt=1
Alpha Vrecirc/V: rp(2) default=0.5 min=0.001 max=10 relfakt=1
Vpiston/Vtotal: rp(3) default=0.1 min=0 max=1 relfakt=1
Mean residence time: rp(4) default=1 min=0.01 max=50 relFAKT=1
No. of mixers branch 1: ip(5) default=5 min=1 max=100 relFAKT=1
No. of mixers in recycle: ip(6) default=5 min=1 max=100 relFAKT=1
Background: rp(7) default=0 min=0. max=1e10 relfakt=1

```

- PARDEF** 'No. of parameters', 'P1-name', 'P2-name', ... definice (lokalizace) parametrů modelu. Parametr může být jakákoliv proměnná databáze FEMINY, určená svým pořadím od začátku databáze (COMMON /\$FEM/). Databázi je třeba chápat jako vektor 4bytových proměnných a parametr modelu je tedy určen indexem tohoto vektoru. Zadávat přímo tento index by bylo nepraktické, a proto ho FEMINA počítá na základě zadaného jména libovolné systémové proměnné. Jako parametr volíme buď přímo nějakou jednoduchou proměnnou (např. A,B,...) nebo i prvek nějakého systémového vektoru, např. RP(2). Po provedení příkazu se vypočtené hodnoty indexů parametrů zobrazí v příkazovém okně.
- PARLIM** 'MIN P1', 'MAX P1', 'MIN P2', 'MAX P2', ... určení mezi parametru modelu
- PARFIT** 'P1', '0-supressed,1-linear,2-nonlin,3-search', 'relax P1', 'P2', '0-supressed,...', ...  
Počáteční nastavení hodnot parametrů a určení toho, které parametry modelu se mají počítat regresí – porovnáním predikce modelu s experimentálními nebo numericky vypočtenými daty (časovými průběhy). Označení parametru jako LINEAR značí, že predikce modelu je vůči tomuto parametru lineární nebo alespoň přibližně lineární – této skutečnosti je využíváno pro zlepšení konvergence regresní analýzy. Hodnotou NONLIN označujeme nelineární parametr, pro jehož vyhodnocení bude používána Marquardtova Levenbergova metoda. Označení SEARCH se týká parametru, který bude stanoven jednorozměrným hledáním (jednorozměrnou minimalizací odchylek mezi modelem a daty). Parametry RELAX jsou podrelaxační faktory jednotlivých parametrů. Implicitně jsou rovny jedné, menší hodnotu je třeba zadávat tehdy, když jsou problémy s konvergencí.
- PARSET** 'P1', 'P2', ... je vlastně speciální případ příkazu PARFIT, omezující se jen na změny výchozích parametrů modelu. Identifikace modelu zpravidla probíhá tak, že nejprve nastavíme všechny parametry příkazem PARFIT, provedeme několik iterací optimalizace a pokud neproběhnou úspěšně volíme jiné výchozí hodnoty příkazem PARSET tak dlouho, až se podaří dosáhnout konvergence.
- METHOD** 'M: 0-Euler,>0-RK fix.dt,<0-variab.step', 'no. of equat', 'no. basic steps', 'basic time step'  
Metoda integrace dif. rovnic: Eulerova nebo 4-bodová Runge Kutta. V případě metody Runge Kutta lze zvolit fixní integrační krok (M-krát menší než tiskový krok /basic time step/) nebo proměnný integrační krok, upravovaný tak, aby bylo dosaženo požadované přesnosti 10\*\*M.
- INPUT** 'Number of stimulus functions X', 'Index of TC as input X1', 'Index... X2', ...

OUTPUT	Počet vstupních funkcí (časových průběhů definovaných tabulkami dat t-c) 'Number of response functions Y', 'Index of TC as response Y' Počet výstupních funkcí – zaznamenaných odezev (časových průběhů definovaných tabulkami)
COMPAR	'Number of TC pairs', 'Index of the first TC in the pair', 'Index of the second', ... Určení dvojic odezev (predikce – experiment) a vah, které jsou použity pro vyčíslení odchylky mezi predikcí modelu a naměřenými průběhy odezev.
CRITER	'Criterion for TC comparison' Volba normy odchylky dvou křivek – časových průběhů (tato norma je pak použita i pro charakterizaci odchylek několika párů odezev, viz. COMPAR). 0: $\sum_{i=1}^N  y_1(t_i) - y_2(t_i)  / N$ , 1: $\sum_{i=1}^N  (y_1(t_i) - y_2(t_i)) / \max(y_1(t_i), y_2(t_i))  / N$ 2: $\sqrt{\sum_{i=1}^N (y_1(t_i) - y_2(t_i))^2 / N}$ , 3: $\sqrt{\sum_{i=1}^N ((y_1(t_i) - y_2(t_i)) / \max(y_1(t_i) - y_2(t_i)))^2 / N}$ 4: $(\int_0^T  y_1(t) - y_2(t)  dt) / T$ , 5: $(\int_0^T  (y_1(t) - y_2(t)) / \max(y_1(t), y_2(t))  dt) / T$ 6: $\sqrt{(\int_0^T (y_1(t) - y_2(t))^2 dt) / T}$ , 7:
COPYTO (CTO)	'Copy from (curve index)', 'to (curve index)'
MOMENT	'Index of curve' Výpočet plochy, prvního a druhého momentu (těžiště a variance)
NORM	'Index of source curve', 'Index of normalised curve', '0-unit area, 1-unit mean time' Normalizace časového průběhu na jednotkovou plochu nebo dokonce i na jednotkový první moment – těžiště.
TCINTG	'Index of source curve', 'Index of F- curve' Integrace časového průběhu (např. výpočet integrální distribuční křivky)
IDMSER	'Index of new curve', 'No. of mixers (real!)', 'Mean residence time' Generování funkčního průběhu odpovídajícího impulsní odezvě N-ideálních mísičů se zadanou střední dobou prodlení celého systému. Parametr specifikující počet mísičů nemusí být celé číslo.
PASERI	'Index of new curve', '1.serie', '2.serie', 'f=Q1/Q', 'alfa=V1/V', 'Mean residence time' Generování funkčního průběhu odpovídajícího impulsní odezvě dvou paralelních serií N1 a N2-ideálních mísičů se zadanou střední dobou prodlení celého systému. Parametr f je relativní průtok a parametr $\alpha$ relativní objem paralelní větve číslo 1.
SMOOTH	'Source curve', 'Smoothed curve index', 'Method 0-linear, >0-quadratic, <0-median' Vyhazení časového průběhu, založené na lokálním nahrazení funkčního průběhu lineární či kvadratickou funkcí. Koeficienty aproximačních polynomů jsou stanoveny z požadavku nejmenšího součtu čtverců odchylek ve specifikovaném počtu bodů, a dále požadavkem spojitosti aproximační funkce v navazujících úsecích (tj. v bodech $t_i$ ). Pro záporné hodnoty parametru <i>Method</i> se k vyhlazení používá medián 2N+1 bodů (N-bodů za a N-bodů před i-tým bodem tabulky).
TCRND	'Index of source curve', 'NOISED curve', 'Noise 0-absolute, 1-relative', 'mean amplitude' Generování umělého bílého šumu generátorem pseudonáhodných čísel s Gaussovskou distribucí (parametr „mean amplitude“ je variací Gaussovy distribuce).
TAIL	'Index of source curve', 'Corrected curve index', 'Tail: 0-exp(t), 1-t.exp(t), 2-A/t^3' Nahrazení chvostu zvoleného časového průběhu funkcemi exponenciálního nebo hyperbolickeho typu (což odpovídá difuznímu, resp. konvektivnímu modelu systému). Interval bodů, které jsou použity v regresní analýze pro identifikaci chvostu se specifikuje myší, stejně tak jako bod, od kterého se má nahrazení chvostu provést. Protože aproximační funkce je typu Konstanta + asymptoticky doznívající funkce, je výsledkem regrese i stanovení této konstanty a operaci TAIL lze využít i pro stanovení vertikálního posuvu odezvové funkce, který odpovídá vlivu pozadí.
TCLIP	'Index of curve' odříznutí záporných hodnot odezvy (nahrazení nulou)
TCBGR	'Source curve (curve index)', 'corrected curve (index)' Korekce časového průběhu, která kompenzuje změnu (zvyšování) pozadí v průběhu experimentu.
TCYSHF(CS)	'Index of curve (source)', 'Index of modified curve', 'Shift vertically by increment'

Posunutí časového průběhu ve vertikálním směru o zadanou (kladnou či zápornou) hodnotu.  
Pokud je zadaná hodnota posunutí nulová (default), aktivuje se myš.

TCXSHF<sub>(TS)</sub> 'Index of curve (source)', 'Index of modified curve', 'Shift horizontally by increment'  
Časové posunutí průběhu o zadanou (kladnou či zápornou) hodnotu.

TCOSHF<sub>(TCS)</sub> 'Index of curve (source)', 'Index of modified curve', 'Shift horizontally by increment',  
'Shift vertically by increment'

Posunutí průběhu do nového počátku (posun v horizontálním i vertikálním směru).

TCFFT<sub>(FFT)</sub> 'Deconvolution E=Y/X (1), convolution (2), cross-correlation (3), filter (4)',  
'Column X', 'Column Y', 'Col. E', 'Smoothing'

Lineární a nelineární regrese dat v matici bodů pozorování – předdefinované regresní funkce

LINREG 'Degree of polynomial', 'Column X', 'Column Y', 'Column prediction', 'Column sigma'

NELREG 'Model (0-unknown, 1-exp, 2-dexp, 3-Gauss)',  
'Column X', 'Column Y', 'Col. prediction', 'Col. sigma'

### 3.13. Interpretace příkazového souboru

Příkazem FILE *soubor* je možné načíst příkazy v tom tvaru, v jakém byly zadávány z příkazové řádky a okamžitě je provést (tím je pověřen modul COMFIL, o němž bude hovořeno i v následujícím textu). Kromě výše uvedených příkazů je možné zapsat i pokyny k provádění skoků nebo cyklů, dle naprosto stejné syntaxe, jaká je použita v programu COSMOS

```
#LOOP návěští N      opakování příkazů až k návěští N-krát (N může být výraz)
#LABEL návěští
#GOTO návěští       nepodmíněný skok na návěští
#IF relace THEN     podmíněný příkaz (relace může být libovolný výraz, jeho hodnota různá od 0 je true)
#ELSE
#ENDIF
```

Jako návěští může být použit libovolný znakový řetězec o délce maximálně 4 znaků. Nelze používat jedno návěští pro více vnořených cyklů (každý cyklus #LOOP je třeba ukončit jiným návěštím).

Příklad:

```
i=0
#loop alfa 10
i=i+1
#if i<5 then
disp i
#endif
#label alfa
```

### 3.14. Optimalizace parametrů modelu

V předchozích odstavcích (3.12.4. - RTD) byl uveden matematický model, popisující analyzovaný systém soustavou obyčejných diferenciálních rovnic. Soustava rovnic byla napsána jako text, který byl při řešení soustavy interpretován. Vstupem byl vektor parametrů, které bylo třeba před integrací soustavy definovat, a výstupem vektory, popisující odezvy systému jako funkce času (obecně N-odezev s ekvidistantním krokem, ukládané do matice bodů pozorování). Koncept matematického modelu lze rozšířit a chápat ho jako proceduru, která pro zadaný vektor parametrů vypočítá vektory odezev v matici bodů pozorování. Modelem může být tedy i uživatelský příkazový soubor zpracovávaný modulem COMFIL, viz.3.13. Příkazový soubor ale musí být napsán tak, aby jeho výstupem byly vektory v matici bodů pozorování. To lze zajistit např. operací POST, která zpracovává soubor výsledků nestacionárního řešení (\*.OUT) a předává vypočtené hodnoty integrálů do specifikovaných sloupců matice bodů pozorování (do této kategorie patří i postprocessing CFD výpočtů algoritmy kolimovaných detektorů). Triviální, i když docela praktickou, možností je použít operaci TCF pro definici sloupce matice bodů pozorování algebraickým výrazem s libovolnými parametry modelu. Zobecněný model je v programu FEMINA implementován jako procedura

```
subroutine GMODEL(ITYP-typ modelu,POPT-NOPTimalizovaných parametrů,IOPT-lokalizace parametrů,NOPT)
```

která provádí následující operace

při ITYP=0 řeší soustavu diferenciálních rovnic popisovanou aktivním interpretovaným modelem, jako vzruchové funkce jsou použity delta funkce (jde tedy o model impulsní odezvy),



při ITYP=1 se opět řeší soustava diferenciálních rovnic aktivního modelu, ale jako vzruchové funkce jsou použity obecné průběhy specifikované jako sloupce dat v matici bodů pozorování,

při ITYP>1 se interpretuje soubor, který je otevřen na zařízení číslo ITYP (výpočet zajišťuje procedura COMFIL stejně, jako při operaci FILE *soubor*, popsané v předchozím odstavci). Soubor musí být nejprve otevřen příkazem OPEN.

POPT(i) jsou vstupní hodnoty vybraných parametrů modelu (týká se jen těch parametrů, které mají být optimalizovány),  
 IOPT(i) výběr optimalizovaných parametrů: indexy parametrů, kterým se při volání procedury GMODEL přiřazují hodnoty POPT(i).

Pod pojmem parametry modelu máme na mysli datové struktury, použité již při definici RTD modelu soustavou obyčejných diferenciálních rovnic, konkrétně

NUMODP počet parametrů (musí být větší než počet *optimalizovaných* parametrů NOPT)  
 LMODEL(i) lokalizace i-tého parametru (pořadí parametru v zóně COMMON /FEM/)  
 JMODEL(i) typ parametru (=1 real, =2 integer)  
 Například pozice prvního optimalizovaného parametru v zóně /FEM/ je tedy LMODEL(IOPT(1)) a typ prvního optimalizovaného parametru určuje JMODEL(IOPT(1)).  
 KMODEL(i) jakou metodou má být parametr modelu optimalizován  
 (=0 nijak, =1 lineární regresí, =2 nelineární regresí, =3 nederivačními algoritmy)  
 RMODEL(i) relaxační faktor využitý při iteračním výpočtu optimalizovaného parametru  
 ZMINP(i), ZMAX(i) minální a maximální přípustné hodnoty parametru

Výstupem modelu jsou přímo sloupce dat (odezvy) v matici bodů pozorování, opět v souladu s konvencemi modelu soustavy obyčejných diferenciálních rovnic

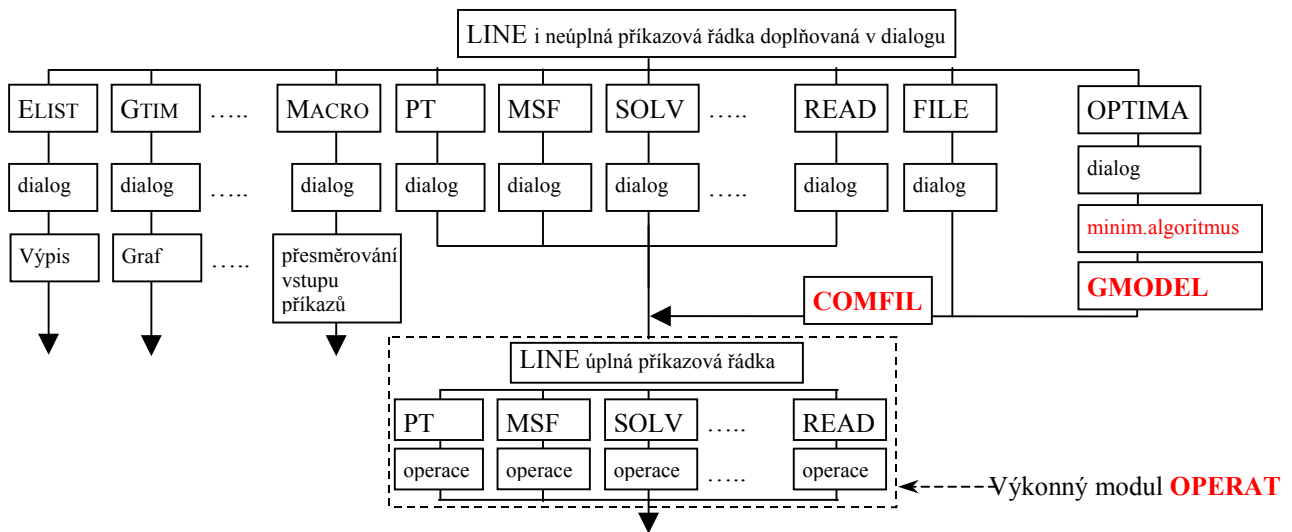
NOUTPUTS počet odezev  
 MOUTPUTS(i) index sloupce matice bodů pozorování odpovídající i-té odezvě.

Každé výstupní funkci (každému modelovému výstupu) je možné přiřadit funkci získanou experimentálně (načtenou jako tabulku dat ze souboru), nebo třeba numerickým experimentem  
 NCOMPAR počet porovnávaných odezev (musí být menší nebo roven NOUTPUTS)  
 ICOMPAR(1,j) m<sub>j</sub> index sloupce j-té predikce modelu (některý ze sloupců MOUTPUTS)  
 ICOMPAR(2,j) e<sub>j</sub> index sloupce porovnávaných experimentálních dat  
 ICOMPAR(3,j) w<sub>j</sub> index sloupce váhových koeficientů (je-li 0, uvažují se jednotkové váhy)

Označíme-li L počet porovnávaných dvojic odezev, N počet bodů pozorování (časových kroků) a y<sub>i,j</sub> prvek matice bodů pozorování, můžeme odchylku predikce modelu a experimentálních dat charakterizovat váženým součtem čtverců

$$s^2(p_1, p_2, \dots, p_{NOPT}) = \sum_{j=1}^L \sum_{i=1}^N (y_{i,e_j} - y_{i,m_j})^2 y_{i,w_j}$$

Nyní lze hledat takové hodnoty parametrů modelu  $p_1, \dots, p_{NOPT}$ , které minimalizují odchylku  $s^2$ . Pro takto definovanou účelovou funkci lze pro řešení tohoto problému použít Marquardtovu metodu s tím omezením, že první derivace modelu dle optimalizovaných parametrů se musí aproximovat numericky (viz. teoretický manuál, kapitola 4). Operace, které zajišťují optimalizaci parametrů modelu, se od ostatních operací liší tím, že jsou realizovány na vyšší hladině (optimalizační algoritmus nemůže nebo prostě neumí optimalizovat sám sebe), což je patrné z následujícího schématu zpracování příkazů v programu FEMINA



Popis modelu, jehož parametry mají být optimalizovány, může tedy zahrnovat jen operace, které jsou uvedeny v čárkovaném bloku OPERAT.

Poznamenejme, že pro výběr, zadávání počátečních hodnot a mezí parametru modelu platí stejné příkazy jako u modelů RTD, tj

PARDEF  
 PARFIT  
 PARLIM  
 COMPAR

Základní operaci, která optimalizuje parametry modelu, které mají buď specifikaci 1 (lineární regresní parametr) nebo 2 (nelineární regresní parametr), zajišťuje operace

- OPTIMA 'MODEL 0,1 dif.eq., >1 file','Number of iteration'  
 Optimalizační algoritmus Marquardtova typu. Model je buď interpretovaná soustava obyčejných diferenciálních rovnic, nebo model zcela obecný. V prvním případě (MODEL=0 nebo 1) již model musel být načten ze souboru příkazem RMODEL, ostatní modely (MODEL>1) musí být připraveny v souboru, který je otevřen příkazem OPEN na vstupním zařízení číslo MODEL.
- SOMA 'Model 0,1 dif.eq., >1 file','Number of iteration','Specimen','PRT','step','mass'  
 Memetický optimalizační algoritmus SOMA, Specimen je počet jedinců pohybujících se po hyperploše, PRT perturbace, STEP velikost kroku, MASS délka testovaného vektoru (viz kap.4).

Typická sekvence příkazů je následující

- OPEN - otevření souboru, který popisuje operace, jejichž výsledkem je např. druhý sloupec matice bodů pozorování, jehož hodnoty závisí na nějakých parametrech, např. A,B.
- T - počet a velikost časových kroků, použitých pro simulaci
- READ - přečtení experimentálních dat, která mají být porovnána s predikcí modelu (např. sloupec 3)
- COMPAR - definice toho, jak se počítá odchylka mezi predikcí modelu a experimentálními daty
- PARDEF - definice parametrů modelu
- PARLIM - zadání minimálních a maximálních hodnot regresních parametrů,
- PARFIT - výchozí hodnoty parametrů a specifikace požadavků na jejich optimalizaci
- OPTIMA - provedení optimalizace.
- PARSET - nové počáteční hodnoty parametrů modelu (použij, když OPTIMA nekonverguje)

### 3.15. Způsoby zpracování příkazů

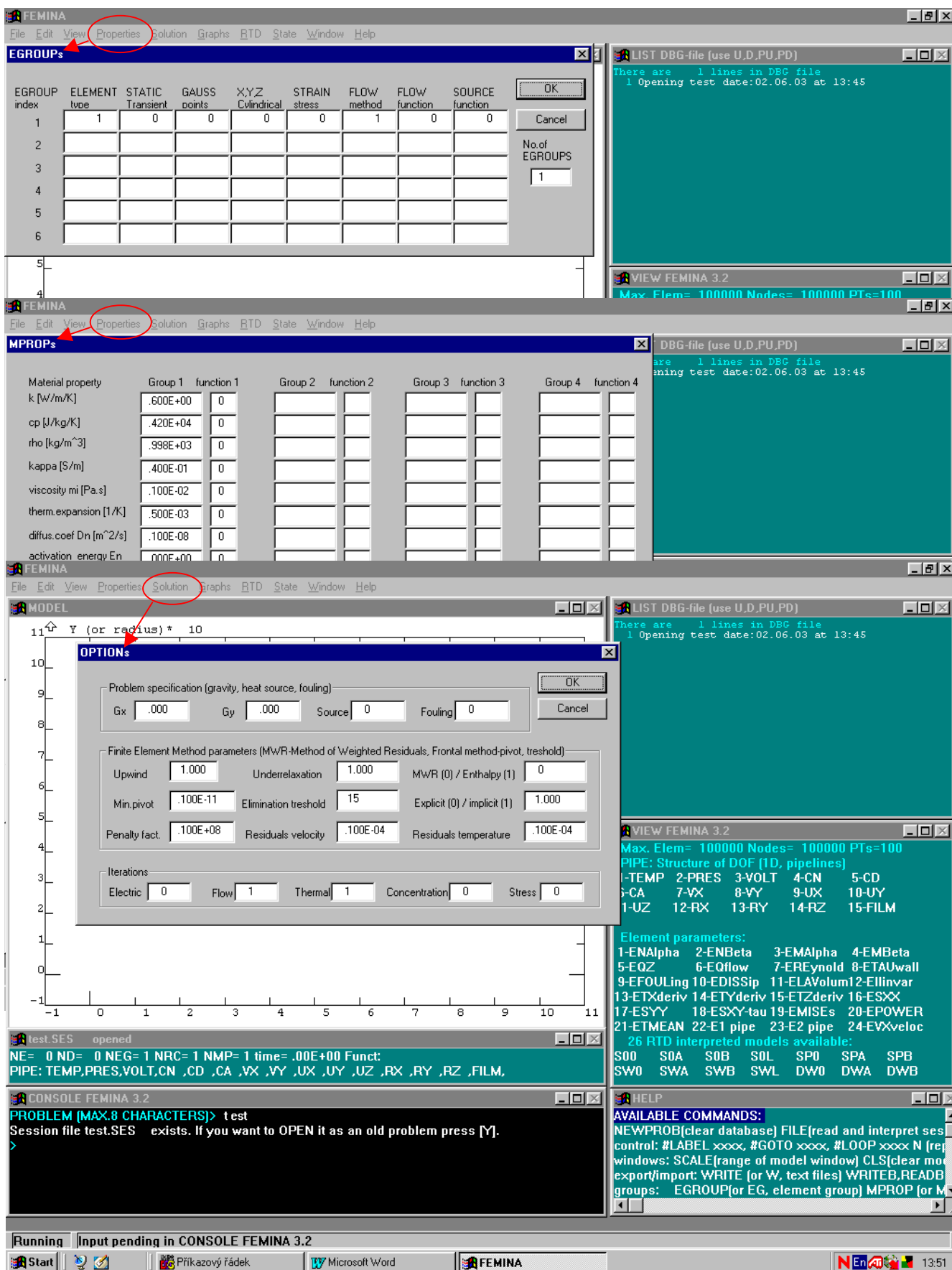
V zásadě existují čtyři poněkud odlišné způsoby, kterými se zadávají jednotlivé příkazy programu FEMINA. O všech již byla zmínka v předchozích odstavcích, proto uvedme jen souhrnné charakteristiky a porovnání:

- Interpretace příkazového souboru jmeno.SES bez jakékoliv možnosti interakce (zpracování souboru je aktivováno příkazem FILE): Každý řádek souboru \*.SES představuje jeden příkaz, interpretovatelný procedurou OPERAT – příkazy, které nejsou v jejím repertoáru se přeskočí. Každý příkaz je třeba uvést se všemi potřebnými parametry (chybějící parametry totiž nelze dodatečně doplňovat, a zadávat např. souřadnice bodu myši nebo z klávesnice). Do repertoáru procedury OPERAT nepatří např. příkazy typu LIST, PLOT, GRAF určené pro interaktivní práci, ale patří sem příkazy pro řízení sekvence zpracování, např. #GOTO, #LOOP, ..., a pochopitelně všechny výkonné příkazy (definice entit, generování sítě, vlastní výpočty a dokonce i volání externích programů). Zpracováním souboru \*.SES je pověřen modul COMFIL, jehož zavolání vyřeší konkrétní úlohu popsanou příkazy v tomto souboru, automaticky, bez zásahu operátora a tedy třeba opakovaně při hledání optima zvolených parametrů modelu (cílem optimalizace může být např. minimalizace odchylky mezi experimentálními daty a predikcí konečněprvkového modelu).
- Režim MACRO (příkaz MACRO jmeno) je zdánlivě podobný: opět se interpretují příkazy zapsané v textovém souboru, jenomže tentokrát soubor není zpracován modulem COMFIL jako uzavřená a předem plně definovaná úloha, nýbrž se pouze přepne vstup zadávání textu příkazů z klávesnice na zvolený soubor. To znamená, že nelze provádět příkazy skoků nebo cyklů #GOTO, #LOOP, ale zase na druhé straně je možné doplňovat chybějící parametry v navazujícím dialogu: Soubor tudíž může představovat jen obecný předpis pro řešení určitého typu problému (může obsahovat třeba jen názvy jednotlivých příkazů, které je třeba provést) a konkrétní hodnoty parametrů se doplňují až během dialogu. Součástí makra mohou být všechny příkazy, používané v interaktivním režimu, tj. příkazy typu LIST, PLOT, GRAF... Zvláštní význam mají řádky začínající na C\* (celý řádek je jen poznámka), Q\* (zpracování makra se předčasně ukončí a přechází se do normálního interaktivního režimu) a R\* (nabídka možnosti zopakování předchozího příkazu, ale patrně s jinými parametry).

Poznámka: V režimu MACRO je možné zadávat (měnit) hodnoty proměnných v databázi nejen použitím přiřazovacího příkazu (např. A=1.234), ale i příkazem  
VALUE název\_zadávaného\_parametru      název\_proměnné (výraz). První parametr se zobrazuje jako text dialogu a z klávesnice zadaná hodnota se přiřadí pozici v databázi, odpovídající specifikované proměnné.

- Interaktivní režim, v němž se příkazy zadávají z klávesnice a parametry příkazů během dialogu. Pokud není nalezeno klíčové slovo příkazu z taxativního seznamu jmen, zjišťuje se, zda by nemohlo být jménem externího programu (seznam těchto jmen je v inicializačním souboru FEMINA.CMD, který se čte vždy při spouštění programu FEMINA.EXE). Pokud tomu tak je, rozvine se standardní dialog zadávání parametrů potřebných pro spouštění programu (popis dialogu je uveden v souboru FEMINA.CMD) a teprve pak se externí program spustí. Když první slovo příkazového řádku není klíčovým slovem je učiněn pokus interpretovat ho jako příkaz interního programu (např. A=1.234) – to je koneckonců asi nejjednodušší a nejrychlejší způsob zadávání parametrů. Pokud je interpretem zjištěna chyba, zkouší se ještě další možnost – chápat klíčové slovo jako příkaz operačního systému MS-DOS. Poslední možností je případ, kdy klíčové slovo je jménem souboru, který obsahuje nějaké makro: pokud takový soubor v aktuálním adresáři existuje, bude interpretován. Teprve tehdy, když ani tento pokus nekončí úspěšně, zobrazí se text „unrecognized command“ a volá se procedura HELP, která se snaží nalézt podobně znějící příkazy (obvykle nabízí několik variant).
- Použití dialogových oken je zatím jen v omezeném rozsahu, tj. jen pro některé příkazy FEMINY – vyvolávají se z menu na horní liště programu FEMINA a jsou určeny spíš jen pro kontrolu

nastavení parametrů jako ekvivalent parametrů typu LIST. Příkazy se většinou ani neprotokolují do session file



### 3.16. Předdefinované proměnné interpretu výrazů

Všechny proměnné a funkce jsou označovány identifikátory o délce maximálně 8 znaků. Seznam předdefinovaných proměnných i s vysvětlením jejich významu lze získat příkazem VARLIST.

#### a) Jednoduché proměnné

Proměnné TIME,XX,YY,ZZ,TEMP,UX,UY,II,DP,RE,DE,TAU lze používat jako argumenty funkcí při definici okrajových nebo počátečních podmínek. Proměnným TEMP, UX,...,EPS jsou přiřazovány hodnoty 1,2,...,24, takže je lze použít v dialogu zadávání parametrů k identifikaci uzlových parametrů (DOF) jménem nebo číslem (např. na otázku: „Který uzlový parametr chceš zobrazit?“ můžeme odpovědět buď číslem 1 nebo slovem TEMP – výsledek je tentýž).

TIME, XX, YY, ZZ, II, DP, RE, DE, HE,TAU, TEMP, UX, UY, UZ, RX, RY, RZ, VOLT, VX, VY, VZ, PRES, OMG, PS, PSX, PSY, PSXX, PSYY, PSXY, CN, CD, CA, KT, EPS, FILM

Poznámka: II-druhý invariant rychlosti deformace, TAU-smykové napětí (II i TAU jsou používány při definici reologického modelu), DP-tlaková ztráta, OMG-vířivost, PS-proudová funkce,...

Jednoduché proměnné (REAL A,B,..., INTEGER I,J,...,N) jsou k dispozici pro volné použití:

A, B, C, D, E, F, G, H, I, J, K, L, M, N, O, P, Q, R, S, T, U, V, W, X, Y, Z

Názvy elementů (používají se podobně jako názvy DOF)

PIPE2D, PIPE3D, TRUSS2D, TRUSS3D, BEAM2D, BEAM3D, CSTR, PUMP, VALVE, HEXC, SHELLAX, PLANE2D, FLOW2D, FLOW3D, FLOWT2D, FLOWT3D, SOLID, PLINK, MASS

Názvy parametrů elementů (používané pro jejich identifikaci v příkazech pro výpis nebo grafy)

ENA, ENB, EMA, EMB, EQZ, EQ, ERE, ETAU, EFOUL, EDISS, ELAV, EII, ETX, ETY, ETZ, ESXX, ESYY, ESXY, EMISE, EPOWER, ETMEAN, EVX, EVY, EVZ, EALPHA, ENU

$N_\alpha, N_\beta, M_\alpha, M_\beta, Q_z, Q\text{-flowrate}, Re, \tau_w, k_{foul}, \Delta, \Delta, \text{Length-Area-Volume}, II, T_{,x}, T_{,y}, T_{,z}, \sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{xy}, \sigma_{Mises}, \dots$

Systémové proměnné (INTEGER) pro metodu konečných prvků

NPT, NCR, NSF, NVL, NE, ND, NEG, NRC, NMP

počty bodů, křivek, ploch, objemů, elementů, uzlů, počty skupin EGROU, RCONST a MPROP.

Poznámka: Častou chybou je to, že když chcete vygenerovat novou síť elementů (třeba hustší) zapomenete zrušit tu starou. Stačilo napsat NE=0 a ND=0, tj. vynulovat počet elementů a uzlových bodů)

STEP, DT (REAL)

počet časových nebo iteračních kroků, velikost časového kroku,

Příklad: DISP DT zobrazení hodnoty časového kroku

GX, GY, RUPW, SCL, LAMBDA, PIVOT, TOL, RELFAKT, POWERE, POWERF, SUMDEV, INTEGRAL (parametry REAL)

zrychlení ve směrech x,y, korekce standardně vypočteného koeficientu upwindu (RUPW), nastavení zvětšení pro vykreslování deformované konstrukce (SCL=0 automatický scale), penalizační parametr  $\lambda$  (LAMB) používaný při řešení Navierových Stokesových rovnic metodou pseudo-stlačitelnosti, minimální přípustná velikost pivotačního prvku (PIVOT), maximální vzdálenost dvou uzlů nebo bodů, které mohou být ztotožněny při operaci slučování uzlů (TOL), podrelaxační faktor (RELFAKT), elektrický výkon (POWERE) nebo dissipovaný výkon (POWERF), výsledný součet odchylek po provedené optimalizaci (SUMDEV), hodnota integrálu jako výsledek operace INTGCR nebo INTGSF.

Příklad: SCL=0.1 deformovaná konstrukce se bude vykreslovat s přírůstky UX,UY násobenými 0.1.

CONV, BUOY, OHMI, UPW, RT, HEPI (přepínače INTEGER)

respektování konvektivních členů (CONV), vztlakových sil, tj. přirozené konvekce (BUOY), vnitřního ohmického ohřevu (OHMI), protiproudé modifikace (UPW), způsob výpočtu součinitelů prostupu tepla (RT), speciální metody výpočtu potrubních sítí (HEPI=0 metoda vážených residuí, HEPI=1 entalpické bilance, HEPI=2 rozštěpení časového kroku na fázi konvektivního a difuzního přenosu).

Příklad: VELO=0 potlačuji výpočet konvektivních členů  
UPW=1 aktivace upwindu

Celočíselné parametry udávající počet iterací určitého typu operace, prováděných v každém časovém kroku řešení metodou konečných prvků

ELEC, THER, FLOW, CONC, STATIC

Příklad: ELEC=1 bude se počítat elektrické pole

Parametry INTEGER, které souvisí s modely popisovanými soustavou obyčejných diferenciálních rovnic (lumped parameters):

NP

počet parametrů modelu, který má být optimalizován (viz též vektory parametrů RP,IP)

METH, NEQ, NMOD

metoda řešení soustavy diferenciálních rovnic (Euler, Runge Kutta), NEQ jpočet rovnic řešené soustavy, NMOD počet předdefinovaných interaktivních modelů.

NINP,NOUT

počty vztahových funkcí a počty odezev modelu (viz. vektory XV,YV, VINP,VOUT),

b) Vektory

XPT(i), YPT(i), ZPT(i)

souřadnice vztažných bodů,

Příklad:  $XPT(3)=(XPT(1)+XPT(2))/2$

XND(i), YND(i), ZND(i)

souřadnice uzlů

IALG(i), RALG(i)

IALG a RALG jsou parametry specifikující algoritmus (každý z těchto vektorů má 30 prvků). Nejdůležitější prvky těchto vektorů jsou ekvivalenci ztotožněny s dříve uvedenými jednoduchými proměnnými, např.  $IALG(2)\equiv VELO$ ,  $IALG(3)\equiv BUOY$ ,...  $IALG(11)\equiv ELEC$ ,  $IALG(12)\equiv THER$ ,  $IALG(13)\equiv CONC$ ,... Nulová hodnota přepínačů IALG zpravidla znamená blokování určité části výpočtu:  $IALG(1)$ -výpočet matice hmotnosti,  $IALG(2)$ -respektování nucené konvekce,  $IALG(3)$ -respektování přirozené konvekce,  $IALG(4)$ -výpočet zdroje tepla,  $IALG(5)$ -upwind. Prvky  $IALG(11)$ ,  $IALG(12)$ , ...  $IALG(15)$  jsou povolené počty iterací v rámci jednoho časového kroku u operací ELEC, FLOW, THER, CONC, STATIC. Další hodnoty IALG jsou zatím nevyužity.

Příklad:  $IALG(2)=0$  ignorování konvektivních členů

RALG jsou parametry společné pro všechny elementy:  $RALG(1)$  je ekvivalentní jednoduché proměnné  $G_X-g_x$  zrychlení ve směru  $x$ ,  $RALG(2)$  ekvivalentní  $G_Y-g_y$ ,  $RALG(3)-\alpha$  součinitel přenosu tepla (není to jediná alternativa zadávání součinitele přenosu tepla, tento parametr je definován i v zónách RC různých skupin elementů, a může být dokonce zadáván individuálně v jednotlivých uzlech jako uzlový parametr),  $RALG(4)-T_c$  okolní teplota,  $RALG(5)$  ekvivalentní s proměnnou RUPW-koeficient, kterým se násobí součinitel asymetrických testovacích funkcí, vypočtený dle Pecletova čísla elementu (nulová hodnota znamená potlačení asymetrie testovacích funkcí - upwindu),  $RALG(6)$ -požadovaná tolerance pivotačního prvku,  $RALG(7)$ -relaxační faktor,  $RALG(8)$  měřítko zvětšení přírůstků při kresbě deformované konstrukce,  $RALG(9)$  penalizační parametr  $\lambda$ , další hodnoty zatím nevyužity.

Příklad:  $RALG(1)=9.81$  nastavení hodnoty zrychlení  
 $G_X=9.81$  naprosto totéž.

Uzlové parametry  $V1, V2, V3$  i status uzlových parametrů IPU jsou v paměti uloženy jako matice, jejichž řádky odpovídají indexům uzlů a sloupce odpovídají typu uzlového parametru. Pozici a tedy i přístup k určitému uzlovému parametru určuje vektor LPU

IPU(i), LPU(i), JPU(i)

status uzlového parametru indexovaný pointerem LPU, typ uzlového parametru /teplota, ux,.../

Příklad: DISP IPU(LPU(temp)+6) zobrazí status teploty v uzlu 6.

DISP JPU(2) typ parametru, který je ve sloupci 2

V1(i), V2(i), V3(i)

vektory uzlových parametrů indexované pointerem LPU. V1 je vektor zadávaných hodnot, V2 vstup i výstup frontální metody, V3 zona počátečních hodnot.

Příklad: V2(LPU(pres)+I) je hodnota tlaku v uzlu I.

E1(i), E2(i), E3(i), E4(i), E5(i)

vektory parametrů elementů (pouze prvních pěti sloupců).

Příklad: E1(I) je hodnota prvního parametru elementu I. Jeho význam závisí na typu elementu.

HH(i), DD(i), PRESS(i), ALPHA(i), TE(i), AREA(i), PERIM(i), JZ(i)

reálné konstanty  $H$ ,  $D$ ,  $p$  (tlak),  $\alpha$  (přenos tepla),  $T_c$  (teplota),  $Area$  (plocha průřezu nebo teplosměnná plocha),  $O$  (smočený obvod průřezu),  $V$  (objem mísiče/reaktoru),  $\chi$  (dělicí poměr),  $kS$  (teplosměnná plocha),  $J_z$  (moment). Index  $i$  označuje skupinu RCONST.

KX(i), CP(i), DENS(i), KAPPA(i), EX(i), MI(i), VISC(i), BETA(i), DN(i), EN(i), AN(i)

termofyzikální parametry  $\lambda$  (tepelná vodivost),  $c_p$ ,  $\rho$ ,  $\kappa$  (měrná elektrická vodivost),  $E$  (modul pružnosti),  $\mu$  (Poissonova konstanta),  $\mu$  (viskozita),  $\beta$  (teplotní roztažnost),  $D_N$  (difuzní součinitel),  $E_N$  (aktivační energie),  $A_N$  (frekvenční faktor),

Příklad: VISC(2)=VISC(1) nastavení stejné viskozity ve skupině materiálových parametrů 2 jako ve skupině 1.

ENAME(i), TRANS(i), GAUSS(i), AXIS(i), STRESS(i)

celočíselné parametry elementů skupin EGROU (ENAME-typ elementu, TRANS-static 0/transient 1, GAUSS-počet integračních uzlů, AXIS-osová symetrie 1, STRESS-rovinná napjatost 1/rovinná deformace 0)

Příklad: GAUSS(1)=3 nastavení počtu Gaussových integ. uzlů skupiny 1

Ta část FEMINY, která řeší soustavy obyčejných diferenciálních rovnic, popisujících systém s diskretními parametry (lumped parameter models) používá vektory CM a DCM k popisu soustavy diferenciálních rovnic pro koncentrace značkovací látky v základních jednotkách modelu – ideálně promíchávaných nádobách:

CM(i), DCM(i)

koncentrace a první derivace koncentrace dle času v  $i$ -tém mísiči.

Model soustavy obyčejných diferenciálních rovnic bude mít zcela nepochybně nějaké parametry, které je třeba identifikovat na základě experimentálně stanovených odezev systému na určité vzruchové funkce. Tyto parametry modelu mohou být libovolné proměnné, popisované v této kapitole (třeba uživatelské proměnné A,B,...), ale u předdefinovaných modelů se zpravidla používá vektor RP:

RP(i), IP(i), PMIN(i), PMAX(i), PLOC(i), REGR(i),

parametry modelu RP a IP jsou vektory, ztotožněné ekvivalencí, přičemž RP je chápán jako *real*, IP jako *integer* (parametry modelu mohou být reálné i celočíselné). PMIN a PMAX jsou předepsané dolní a horní meze parametrů, PLOC(i) je pozice  $i$ -tého parametru modelu v zóně COMMON /FEM/ a vektor REGR určuje, které parametry mají být optimalizovány.

VINP(i), VOUT(i), XV(i), YV(i)

celočíselné vektory VINP a VOUT jsou indexy vzruchových a odezvvých funkcí. Pod pojmem index se rozumí sloupec matice bodů pozorování do něhož je časový průběh ukládán. XV(i) a YV(i) jsou vektory aktuálních hodnot vzruchových a odezvvých funkcí – během integrace diferenciálních rovnic se tyto vektory mění.

C1(i), C2(i), C3(i), C4(i), C5(i), C6(i), C7(i), C8(i), C9(i), C10(i)

vektory sloupců matice bodů pozorování, první sloupec C1(i) obsahuje časy a další sloupce C2(i)... pak odpovídající hodnoty tabelárně zadaných časových průběhů (což mohou být vzruchové funkce, odezvy modelu, experimentální data, ale i časové průběhy zaznamenaných hodnot uzlových parametrů při nestacionárním řešení metodou konečných prvků).

ITC(i), QTC(i)

vektory dodatečných informací o sloupcích matice bodů pozorování (ITC-např. index uzlu, QTC-typ sloupce, např. čas, experiment,...)

ICOMP(i)

indexy porovnávaných odezev, vybraných sloupců matice bodů pozorování (počet porovnávaných dvojic je NCOMP, vypočtená hodnota odchylky dle nastaveného kritéria KCOMP je v proměnné SCOMP).

c) Funkce

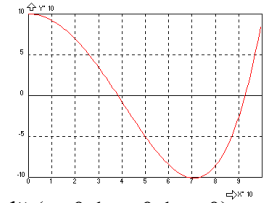
SIN(x), COS(x), EXP(x), SQR(x), LOG(x), LGT(x), ABS(x),  
MIN(a,b,c,...), MAX(a,b,c,...), ATN(x), ERF(x), PLE(n,x), PLG(n,x), PTC(n,x), RND(x),

CVT(i,time), XVT(i,time), YVT(i,time),

DOF(typ uzlového parametru, číslo zony 1 až 4, x,y,z)

EPA(typ parametru elementu, x,y,z)

Příklad: DISP min(10,5,12)      výsledek 5 (funkce s proměnným počtem parametrů)  
DISP LOG(EXP(1))      výsledek 1 (LOG je přirozený logaritmus)  
DISP LGT(10)      výsledek 1 (tato jména logaritmu kdysi používala firma HP)  
DISP ATN(1e20)      výsledek 1.57  
for i=1,4 do disp RND(0)      výsledek 0.515, 0.398, 0.263, 0.744 (náhodná čísla)  
PLE(n,x)      Legendreův polynom n-tého stupně  
PLG(n,x)      Laguerreův polynom n-tého stupně  
PLT(n,x)      Čebyševův polynom,  
FUNDEF 1,PLT(4,XX)      a zobrazení GRAFUN 1  
DISP DOF(TEMP,2,0.1,0.1,0.)      teplota interpolovaná v zoně výsledků 2 v bodě (x=0.1,y=0.1,z=0)  
DISP EPA(ETX,0.1,0.1,0.)      gradient teploty jako parametr elementu v bodě (x=0.1,y=0.1,z=0).



Funkce CVT,XVT,YVT interpolují data z matice bodů pozorování. CVT vybraného sloupce, XVT vybraného vstupního signálu, YVT vybraného výstupního signálu (pořadí sloupce nebo signálu určuje první parametr funkce i).

Funkce DOF je jedna z nejdůležitějších: předává hodnotu libovolného uzlového parametru v libovolném bodě x,y,z přičemž tento bod nemusí být uzlovým bodem (používá se speciální typ interpolace založené na vzdálenostech bodu x,y,z od všech uzlů elementu, v němž se bod nachází). Když leží bod x,y,z mimo, je výsledkem číslo -999. Analogicky funguje i funkce EPA, předávající hodnotu zvoleného parametru elementu (na rozdíl od DOF jsou ale parametry v rámci elementu konstantní, takže se neinterpoluje a celý problém se zužuje na nalezení elementu v němž se nachází bod x,y,z). Poznamenejme, že funkce DOF i EPA lze použít jen když byl předchozí operací BOX vytvořen soubor RUNBOX.BIN.

d) Základní řídicí příkazy interpretu identifikované klíčovými slovy

INT list, REAL list,      Příklad: REAL ALFA,BETA(10)

WHILE podmínka DO blok      Příklad: WHILE I<10 DO [i=i+1 disp i]

Poznámka: Pod pojmem blok se rozumí posloupnost příkazů uzavřených do lomených závorek [ ] nebo mezi klíčovými slovy *begin ... end*.

IF podmínka THEN blok      Příklad: IF IPU(LPU(i)+1)>30 THEN V2(LPU(i)+1)=1

FOR i=i1,i2 DO blok      Příklad:  
FOR i=1,nd DO a=max(a,xnd(i))





### 3.17. Abecední seznam klíčových slov a jejich synonym v programu FEMINA

#ELSE	GRIDON, GRID	PTPLOT, PTP
#ENDIF	GTC, GXY	PU
#GOTO	H, HELP	Q, CLIST, CL, SETTIN, ENABLE
#IF	I, INITIA, INI	RCEHEV
#LABEL	IF	RCEPUM, RCEP
#LOOP	IMPULS, IMP	RCLIST, RCL
A, ACTNUM, NUMIN, NUM	INIMOD, IMOD, IM	RCONST, RC
ARC	INPUT, INP, STIMUL	RCPUMP, RCP
B, INACTN, NUMOUT	INTGCR, ICR, IC	READ, R, RTC, RNOD, READTC, READCO
BKCOLO	INTGSF, ISF, IS	READBI, READB, RB
BOX, BOXING	K, ANALYS, ANAL, AN	RECORD, REC
C, CR2PT, C2P, CRLINE, CURVE	L, LOC, WHERE, VAR, VARIAB	REM
CIDENT, CID, PICKC	LINREG, LR	RCHEV, RCHEVR
CIRCLE, CIR	LOADT, LT	RCHEX, RCHE
CLOSE	M, MACRO, MAC	RMODEL, RM, MODEL
CLS	MCR, MCRC, M_CR, MESHCR	RUN
CONVOL, CON	MCR2, MCRPH, MCR24	S, STATUS, SHOW
CR3PT, C3P	MCR4, MCRHEX, MCH	SAVE
CRDEL	METHOD, MET, RUNGE	SEARCH
CRLIST, CRL	MODLIS, MODL, ML	SF3PT, S3P
CRPLOT, CRP	MOFE	SF4PT, S4P, SURFAC
CRSPOL, CRS, POLYLI, CRPOLY	MPLIST, MPL	SF6PT, S6P
CURDEF, CDEF, CD, DC, TABLE, TAB	MPROP, MP, MATERI	SF8PT, S8P
CURLIS, CURL	MSF, M_SF, MESHSF	SFCR
D	MVL, M_VL	SFDEL
DEFPLO	N, NEWPRO, NEW, RESET, START	SFEXTR, SFEX
DETDEF	ND, NODE	SFLIST, SFL, SLIST
DISP	NDEL, NDDEL	SFPLOT, SFP
DOFLIS, DOFL, RANGE	NDLIST, NDL, NLIST, Y	SOLVE, THERMA, CREEP, PIPE, HEXC, CONC,
E, ELEMEN	NDPLOT, NDP	SHELLA, TRANEQ, TRANEC, CONTHE
EDEL	NELREG, NLR	SOMA
EGLIST, EGL	NF, FN, NDF	T, TIMES, TSTEP, DT
EGROUP, EG	NFCR, FCR, BOUND	TCPLOT, TCP
EIDENT, EID, PICKE	NFLIST, NFL, FLIST	TCPXY, XY
ELIST, EL	NFPLOT, NFP	TIDENT, TID, PICKT
ENDREC	NFPT, FPT, FP, PF, PTF	TRUSS, TRUS
EPLIST, EPL	NFSF, FSF, SOURCE	U
EPLLOT, EP	NIDENT, NID, PICKN	UNDO, BACK
ERMOD	NLR2	V, VARLIS, VARL
ERMSF	NMERGE, NM	VALUE, ASSIGN
EXIT, QUIT	O, OUTPUT, OUT, OUTLET, RESPON	VIEW, V3D
F, FILE	OPEN	VL8PT, V8P
FOR	OPTIMA, OPT, MINSSQ	VLLIST, VLL, VLIST
FUNDEF, FDEF, FD, DF	OPTION, ATRANE, APIPE	VLPLLOT, VLP
FUNLIS, FUNL	P, PT, POINT	VLSF
G, ACTSET, SETGRP, ACTGRP, GROUP	PALIS, PL	WHILE
GCR, GC, GDCR, GDC	PARDEF, PARD, PADEF, PAD, PDEF	WINDOW
GD1, G1, D1	PARFIT, PARREG, PARF, PAF	WRITE, W
GD3, GFSF	PARLIM, PARL, PALIM, PLIM	WRITEB, WB
GE2, E2	PARSET, PARS, PASET, PAS, PSET	WS
GFCR, GCF, GFC	PD	X, SCALE
GRAFUN, GF	PFPLLOT, PFP, DIAL, METER	Z, ZD, ZDEF
GRAPH, GD2, G2, D2	PIDENT, PID, PICKP	ZOOMI, ZI
GRAPS, GE1, E1	PTCRIN, PTCR2, PCI	ZOOMOU, ZOOMO, ZO
GRATIM, GT, GTIM, GTIME	PTDEL	
GRIDOF	PTLIST, PTL, PLIST	

Některé často se opakující příkazy (operace) mají jako jedno ze synonym pouze jediné písmeno:

A-actnum (číslování entit v grafech)	J-TCLIST (matice bodů pozorování)	S-show (stavové okénko)
B-iactnum (inaktivace číslování)	K-ANALYSIS	T-time steps
C-CR2PT (úsečka)	L-LOCate (proměnná)	U-Up (posun výpisu)
D-Down (posun výpisu)	M-MACRO	V-varlist (výpis proměnných)
E-Element	N-NEW	W-write
F-File (interpret)	O-Output	X-výpis uzlů a DOF
G-group (aktivace skupiny)	P-PT (definice bodu)	Y-výpis parametrů elementů
H-Help	Q-výpis nastavení	Z-definice z-souřadnice
I-Initia (počáteční podmínky)	R-read	

## Abecední seznam systémových proměnných

A	CVT	EPOWER	HEPI	N	PMAX	RZ	V2
ALPHA	D	EPS	HEXC	NCOMP	PMIN	S	
AN	DCM	EQ	HH	NCR	POWERF	SCL	V3
AREA	DD	EQZ	CHEV	ND	POWERF	SCOMP	VALVE
ATN	DE	ERE	I	NE	PRES	SHELLAX	VINP
AXIS	DENS	ERF	IALG	NEG	PRESS	STATIC	VISC
B	DEV	ESXX	ICOMP	NEQ	PS	STEP	VOLT
BEAM2D	DN	ESXY	II	NINP	PSBL	STRESS	VOUT
BEAM3D	DOF	ESYY	INTEGRAL	NINTG	PSIN	STUB	VX
BETA	DP	ETAU	IP	NMOD	PSIN	SUMDEV	VY
BUOY	DT	ETMEAN	IPU	NMP	PSOM	T	VZ
C	E	ETX	ITC	NOUT	PSX	T1	W
C1	E1	ETY	J	NP	PSXX	TAU	X
C2	E2	ETZ	JPU	NPT	PSXY	TE	XND
C3	E3	EVX	JZ	NRC	PSY	TEMP	XPT
C4	E4	EVY	K	NSF	PSYY	THER	XV
C5	E5	EVZ	KAPPA	NTC	PTC	THETA	XVT
C6	EALPHA	EX	KCOMP	NVL	PUMP	TIME	XX
C7	EDISS	F	KT	O	Q	TOL	Y
C8	EFOUL	FILM	KX	OHMI	QTC	TRANS	YND
C9	EII	FLOW	L	OMG	R	TRUSS2D	YPT
C10	ELAV	FLOW2D	LAMBDA	P	RALG	TRUSS3D	YV
CA	ELEC	FLOW3D	LPU	PENS	RE	U	YVT
CARE	EMA	FLOWT2D	M	PERIM	REGR	UPW	YY
CD	EMB	FLOWT3D	MASS	PIPE2D	RELFAKT	UVP	Z
CM	EMISE	G	MAX	PIPE3D	RND	UVPP	ZND
CN	EN	GAUSS	MEAN	PIVOT	RNG	UX	ZPT
CONC	ENA	GX	METH	PLANE2D	RP	UY	ZZ
CONV	ENAME	GY	MI	PLE	RUPW	UZ	
CP	ENB	H	MIDE	PLG	RT	V	
CREE	ENDC	HAIR	MIKE	PLINK	RX	V1	
CSTR	EPA	HE	MIN	PLOC	RY		

## Výběr nejfrekventovanějších systémových proměnných

Proměnné používané při definici funkcí

TIME, XX, YY, TEMP, II čas, souřadnice, teplota a druhý invariant

Názvy stupňů volnosti (používané pro jejich identifikaci)

UX,UY,UZ-posuvy, VX,VY,VZ-rychlosti, RX,RY,RZ-natočení, PRES-tlak,TEMP-teplota,VOLT-napětí

Názvy parametrů elementů (používané pro jejich identifikaci)

ENA,ENB-síly,EMA,EMB-momenty,EQZ-posouvající síly (skořepiny), EQ-průtok, ERE-Reynolds, ETAU-smykové napětí, ESXX,ESYY,ESXY-složky tenzoru napětí, EMISE-ekvivalentní napětí von Mises, ETX,ETY,ETZ derivace teploty.

Názvy konečných elementů (opět používané pro jejich identifikaci)

PIPE2D,TRUSS2D,BEAM2D,PLANE2D,FLOW3D,HEXC,SHELLAX

Uzlové parametry jsou ve vektorech V1(),V2(),V3() (okrajové podmínky, výsledky řešení, počáteční podmínky).

Pro lokalizaci uzlového parametru určitého typu (TEMP,PRES,VX,...) využíváme vektor LPU(), např.

V2(LPU(TEMP)+5) je vypočtená teplota v uzlu číslo 5.

Pro zjištění hodnoty uzlového parametru v libovolném bodě X,Y,Z použijeme funkci DOF a např.

DOF(PRES,2,X,Y,Z) předává hodnotu tlaku ze zony výsledků interpolovanou do bodu X,Y,Z.

Pro zjištění hodnoty parametru elementu v libovolném bodě X,Y,Z použijeme funkci EPA a např.

EPA(ETX,X,Y,Z) předává hodnotu derivace teploty ve směru X interpolovanou do bodu X,Y,Z.

Sloupce matice bodů pozorování (to jsou vektory)

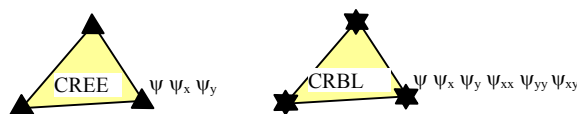
C0(i), C1(i),...,C10(i)

## 4. Základy teorie vybraných problémů

V následujících odstavcích jsou uváděny vztahy použité při implementaci algoritmů konkrétních úloh z problematiky proudění (řešení Navierových Stokesových rovnic) a statické strukturní analýzy. Každý z těchto odstavců je soběstačný a odkazy na jiné odstavce jsou minimalizovány. I číslování rovnic začíná vždy od jedné. V záhlaví je uváděno jméno proměnné, která identifikuje příslušnou metodu řešení Navierových Stokesových a je současně názvem procedury, pověřené výpočtem lokálních matic elementů.

### 4.1. Proudění, transportní rovnice

#### 4.1.1. Plouživé proudění newtonské kapaliny (CREE, CRBL)



Řešení plouživého proudění, tj. proudění při  $Re < 1$ , má jen omezené možnosti aplikací (zpravidla jen tok velmi viskózních kapalin). Vypočtené rychlostní pole má poměrně jednoduchou strukturu a např. v oblasti za náhlým rozšířením průřezu kanálu se nevytvoří recirkulační zony. Použitá formulace s proudovou funkcí  $\psi$  má nespornou výhodu v tom, že je naprosto přesně splněna rovnice kontinuity (v každém bodě a to při libovolně velkých elementech), ale na druhé straně např. neumožňuje jednoduše řešit tokové situace s několika výstupními proudy, pokud je dělicí poměr průtoků dán poměrem tlaků – tlaky se ve formulaci problému vůbec neobjeví. Když je ale viskozita konstantní, jde o lineární a tedy poměrně snadno řešitelný problém, který může sloužit jako výchozí aproximace rychlostního pole při řešení složitějších problémů nelineárních. Dvě implementované varianty (CREE, CRBL) se liší jen bázovými funkcemi, CRBL používá Bellovy kvintické polynomy, které mají spojité druhé derivace všude, i na rozhraní elementů. CREE používá jednodušší kubické polynomy se spojitými druhými derivacemi toliko v uzlech a ne podél styčných stran trojúhelníkových elementů. CRBL zaručuje vynikající přesnost řešení, pokud ovšem nedochází ke skokovým změnám viskozity nebo okrajových podmínek; za těchto okolností by pak byla vhodnější varianta CREE.

Příklad je ukázkou využití principu minima energie (rychlostní pole se vytvoří tak, aby minimalizovalo dissipovanou energii), kdy vůbec není nutné znát diferenciální rovnice, popisující rovnice rovnováhy sil.

#### Cylindrický souřadný systém

Budeme uvažovat osově symetrický tok kapaliny v cylindrickém souřadném systému  $r, x$  (osa  $x$  je v souřadném systému FEMINx horizontální  $/x/$ , radiální souřadnice vertikální  $/y/$ ). Složky rychlostí vyjádříme prostřednictvím proudové funkce<sup>7</sup>

$$u_x = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \quad u_r = -\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial x} \quad \left[ \psi = \frac{m^3}{s} \right] \text{ objemový průtok} \quad (1)$$

Tím je zaručeno identické splnění rovnice kontinuity

<sup>7</sup> Zvláštní pozornost je třeba věnovat ose symetrie ( $r=0$ ). Radiální složka rychlosti  $u_r$  je zde nulová, ale axiální složku rychlosti  $u_x$  je třeba počítat limitním přechodem, tj. jako druhou derivaci proudové funkce ve směru  $r$ .

$$\frac{1}{r} \frac{\partial r u_r}{\partial r} + \frac{\partial u_x}{\partial x} = 0. \quad (2)$$

Dissipovanou energii můžeme vyjádřit integrálem, Bird str.107 (úprava pro nestlačitelné kapaliny)

$$F(u_r, u_x) = \iint \mu r \left[ 2 \left( \left( \frac{\partial u_r}{\partial r} \right)^2 + \left( \frac{\partial u_x}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{u_r}{r} \right)^2 \right) + \left( \frac{\partial u_r}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial r} \right)^2 \right] dr dx, \quad [\text{W}] \quad (3)$$

což po dosazení za složky rychlostí dává toto funkcionální vyjádření dissipované energie (o.k.):

$$F(\psi) = \iint \frac{\mu}{r} \left[ 4 \left( \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial r \partial x} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 - \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r \partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right)^2 \right] dr dz \quad (4)$$

Variací dissipované energie vzhledem k proudové funkci a dosazením aproximace

$$\psi(x, r) = N_j(x, r) \psi_j, \quad \delta \psi(x, r) = N_i(x, r) \delta \psi_i \quad (5)$$

získáme soustavu lineárních algebraických rovnic

$$A_{ij} \psi_j = 0 \quad (6)$$

kde

$$A_{ij} = \iint \frac{\mu}{r} \left[ 4 \left( \frac{\partial^2 N_j}{\partial r \partial x} \frac{\partial^2 N_i}{\partial r \partial x} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial N_j}{\partial x} \frac{\partial N_i}{\partial x} \right) - \frac{2}{r} \left( \frac{\partial N_j}{\partial x} \frac{\partial^2 N_i}{\partial r \partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial^2 N_j}{\partial r \partial x} \right) + \right. \\ \left. + \left( \frac{\partial^2 N_j}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 N_j}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial N_j}{\partial r} \right) \left( \frac{\partial^2 N_i}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 N_i}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial N_i}{\partial r} \right) \right] dr dx \quad (7)$$

### Kartézský souřadný systém

Pro rovinné proudění (kartézský souřadný systém) se celý problém zjednoduší

$$u_x = \frac{\partial \psi}{\partial y} \quad u_y = -\frac{\partial \psi}{\partial x} \quad \left[ \psi = \frac{m^2}{s} \right] \text{ objemový průtok na 1 m šířky kanálu} \quad (8)$$

$$A_{ij} = \iint \mu \left[ \left( \frac{\partial^2 N_j}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 N_j}{\partial y^2} \right) \left( \frac{\partial^2 N_i}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 N_i}{\partial y^2} \right) + 4 \frac{\partial^2 N_j}{\partial x \partial y} \frac{\partial^2 N_i}{\partial x \partial y} \right] dr dz \quad (9)$$

### Teplotní závislosti

V uvedené formulaci problému se jako jediný termofyzikální parametr objevuje viskozita. Kdyby byla konstantní, výsledek řešení by na její hodnotě dokonce ani nezávisel. Z předchozích kroků řešení je ale možné použít teplotní pole a vektory rychlostí, které umožní buď funkcí nebo tabulkou předepsat závislost viskozity na teplotě a na druhém invariantu tenzoru rychlosti deformace. Pro kartézský souřadný systém je tento invariant dán vztahem

$$II = \left(\frac{\partial u_x}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial y}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x}\right)^2 \quad (10)$$

Podobně vyhlíží vyjádření druhého invariantu v cylindrickém souřadném systému, Bird str. 107

$$II = \left(\frac{\partial u_x}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial u_r}{\partial r}\right)^2 + \left(\frac{u_r}{r}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_x}{\partial r} + \frac{\partial u_r}{\partial x}\right)^2 \quad (11)$$

Z hodnoty invariantu lze například stanovit charakteristickou smykovou rychlost

$$\dot{\gamma} = \sqrt{2II} \quad (12)$$

a použít ji pro definici zdánlivé viskozity dle zvoleného reologického modelu.

Sekce výpočtu proměnné viskozity vypadá v programu FEMINA takto

```

C MPROP (1-K,2-C,3-RHO,4-KAPPA,5-E,6-MU,7-VISC,8-beta)
  VISC=RMAT(LPROP,7)
  IF(JMAT(LPROP,7).NE.0) THEN
C Vypocet invariantu rychlosti deformace a teploty jen v pripade, ze je uvazovana promenna viskozita.
C Pro aproximaci teploty a rychlosti se pouziji linearni bazove funkce
  CALL FDFE(3,X,Y,GL1(IG),GL2(IG),FL,FLX,FLY,S)
  DVXDX=0
  DVYDY=0
  DVXDY=0
  DVYDX=0
  TEMP=0
  DO I=1,3
    DVXDX=DVXDX+VX(I)*FLX(I)
    DVYDY=DVYDY+VY(I)*FLY(I)
    DVXDY=DVXDY+VX(I)*FLY(I)
    DVYDX=DVYDX+VY(I)*FLX(I)
    TEMP=TEMP+T(I)*F(I)
  ENDDO
C Druhy invariant je AUX(5), teplota AUX(11)
  AUX(5)=DVXDX**2+DVYDY**2+0.5*(DVXDY+DVYDX)**2
  AUX(11)=TEMP
  VISC=VISC*CURFUN(JMAT(LPROP,7))
ENDIF

```

### Implementace:

Vzhledem k tomu, že se v integrandu (7), resp. (9) objevují druhé derivace básových funkcí, nelze použít lineární nebo kvadratické polynomy, nýbrž alespoň polynomy kubické, zajišťující spojitost i prvních derivací proudové funkce alespoň ve vrcholech. Lokální matice  $A_{ij}$  mají pro trojúhelníkové elementy rozměr 9 x 9, což odpovídá 3 uzlům s uzlovými parametry  $\{\psi_1 \ \psi_{1,x} \ \psi_{1,y} \ \psi_2 \ \psi_{2,x} \ \psi_{2,y} \ \psi_3 \ \psi_{3,x} \ \psi_{3,y}\}$

```

IF(NAXIS.EQ.1) THEN
  DA=4*(FXY(I)*FXY(J)+FX(I)*FX(J)/RR**2)
  /
  -2/RR*(FXY(I)*FX(J)+FXY(J)*FX(I))
  /
  +(FYY(J)-FXX(J)+FX(J)/RR)*(FYY(I)-FXX(I)+FX(I)/RR)
  AK(I,J)=AK(I,J)+DA*S*W(IG)/RR
ELSE
  DA=FXX(I)*FXX(J)+2*FXY(I)*FXY(J)+FYY(I)*FYY(J)
  AK(I,J)=AK(I,J)+DA*S*W(IG)
ENDIF

```

Varianta CREE používá neúplné kubické polynomy s 9 DOF (Bazeley 1965), varianta CRBL Bellovy elementy s 18 DOF (popis viz kapitola 5.3, Básově funkce).

## Výsledky a postprocessing

Bezprostředním výsledkem výpočtu jsou uzlové hodnoty  $\{\psi_i \psi_{i,x} \psi_{i,y}\}$  z nichž jsou v závěrečné fázi operace stanoveny

- rychlosti  $u_x, u_y$
- rozložení hustoty dissipované energie v jednotlivých elementech na základě vztahu (4)
- 

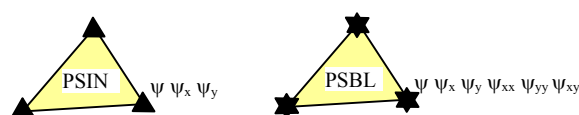
$$F_e = \iint_{\Omega_e} \frac{\mu}{r} \left[ 4 \left( \frac{\partial^2 N_i}{\partial r \partial x} \frac{\partial^2 N_j}{\partial r \partial x} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} - \frac{1}{r} \frac{\partial^2 N_i}{\partial r \partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} \right) + \left( \frac{\partial^2 N_i}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 N_i}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial N_i}{\partial r} \right) \left( \frac{\partial^2 N_j}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 N_j}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial N_j}{\partial r} \right) \right] dr dz \psi_i \psi_j$$

i celkový dissipovaný výkon  $F = \sum_e F_e$  [W]

- rozložení druhého invariantu rychlosti deformace po jednotlivých elementech dle vztahů (10-11).



4.1.2. Navierovy Stokesovy rovnice, formulace s proudovou funkcí (metody PSIN, resp. PSBL, názvy odvozeny od PSI Navier Stokes, resp. PSi BeLI)



Tato varianta řešení je přímým rozšířením předchozího případu, opět se řeší jediná rovnice pro proudovou funkcí  $\psi$ , a používají se i stejné báze funkce. Platí tedy i stejná omezení daná tím, že velmi hladké báze funkce (kubické, resp. kvintické polynomy) sice zajišťují velmi hladké řešení, ale mají problémy při popisu proudového pole se skokovými změnami viskozity, které způsobují ztrátu hladkosti řešení. Ani tentokrát není formulace vhodná pro případy s dělením výstupních proudů i když se rozložení tlaků počítá, ale jen ex post, až po stanovení rychlostního pole (proudové funkce). Metodicky se vychází z diferenciálních rovnic Navierových Stokesových, přičemž jsou respektovány zrychlující síly (tzn. že se uvažuje nestacionární proudění i konvektivní zrychlení) i síly vztlakové, což umožňuje řešit i problémy přirozené konvekce (eliminace tlaku z NS rovnic vede na biharmonickou diferenciální rovnici čtvrtého řádu pro jedinou neznámou veličinu, proudovou funkci). Soustava obyčejných diferenciálních rovnic pro uzlové hodnoty proudové funkce  $\psi$  se získá Galerkinovou metodou vážených residuí, důsledkem čehož je omezení velikosti lokálního Reynoldsova čísla elementu  $Re_h < 1$  a nutnost používat velmi jemnou síť elementů při vyšších hodnotách  $Re$ .

Kartézský souřadný systém

Navierovy Stokesovy rovnice pro nestacionární tok nestlačitelné Newtonské kapaliny, mají v primitivních proměnných (rychlosti – tlak) a v kartézském souřadném systému (rovinné proudění) tvar, Bird str.101

$$\rho \left( \frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left( \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right) + \rho g_x (1 - \beta T) \quad \left[ \frac{N}{m^3} \right] \text{ objemová síla} \quad (1)$$

$$\rho \left( \frac{\partial u_y}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left( \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} \right) + \rho g_y (1 - \beta T). \quad (2)$$

Poznamenejme, že tyto rovnice vznikly úpravou původních rovnic bilance hybnosti (v konzervativním tvaru) použitím rovnice kontinuity pro nestlačitelnou kapalinu,

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} = 0. \quad (3)$$

Tlak  $p$  můžeme z Navierových Stokesových rovnic eliminovat tím, že první rovnici bilance hybnosti ve směru  $x$  derivujeme dle  $y$ , druhou dle  $x$  a odečteme, čímž získáme rovnici pro vířivost

$$\omega = \frac{\partial u_x}{\partial y} - \frac{\partial u_y}{\partial x} \quad \left[ \frac{1}{s} \right] \quad \text{počet otáček víru za sekundu} \quad (4)$$

$$\rho \left( \frac{\partial \omega}{\partial t} + u_x \frac{\partial \omega}{\partial x} + u_y \frac{\partial \omega}{\partial y} \right) = \mu \left( \frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} \right) + \rho \beta \left( g_y \frac{\partial T}{\partial x} - g_x \frac{\partial T}{\partial y} \right) \quad \left[ \frac{N}{m^4} \right] \quad (5)$$

Aplikujme na tuto transportní rovnici vířivosti metodu vážených residuí, s testovací funkcí  $W(x,y)$

$$\iint_{\Omega} W \left[ \rho \left( \frac{\partial \omega}{\partial t} + u_x \frac{\partial \omega}{\partial x} + u_y \frac{\partial \omega}{\partial y} \right) - \mu \left( \frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} \right) + \rho \beta \left( g_x \frac{\partial T}{\partial y} - g_y \frac{\partial T}{\partial x} \right) \right] dx dy = 0, \quad (6)$$

a snižme řád derivací vířivosti dvojným použitím Greenovy věty a rovnice kontinuity

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega} \rho \left[ W \frac{\partial \omega}{\partial t} - \omega \left( u_x \frac{\partial W}{\partial x} + u_y \frac{\partial W}{\partial y} \right) - \frac{\mu}{\rho} \omega \left( \frac{\partial^2 W}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial y^2} \right) + \beta W \left( g_x \frac{\partial T}{\partial y} - g_y \frac{\partial T}{\partial x} \right) \right] dx dy + \\ + \int_{\Gamma=\Gamma_{\omega}+\Gamma_w+\Gamma_0} \left[ \rho W \omega (u_x n_x + u_y n_y) + \mu \left[ \left( \omega \frac{\partial W}{\partial x} - W \frac{\partial \omega}{\partial x} \right) n_x + \left( \omega \frac{\partial W}{\partial y} - W \frac{\partial \omega}{\partial y} \right) n_y \right] \right] d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad (7)$$

Hranice oblasti  $\Gamma$  se skládá z úseku  $\Gamma_{\omega}$  kde je známa vířivost (osa symetrie, vstup), stěny  $\Gamma_w$  a výstupního průřezu  $\Gamma_0$  s nevyvinutým rychlostním profilem. První člen křivkového integrálu ( $W\omega u_n$ ) vymizí na stěně  $\Gamma_w$  ( $u=0$ ) a na hranici  $\Gamma_{\omega}$ , kde je vířivost zadávaná jako silná okrajová podmínka ( $W=0$ ). Pokud tento člen zanedbáme, předchozí integrál se poněkud zjednoduší

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega} \rho \left[ W \frac{\partial \omega}{\partial t} - \omega \left( u_x \frac{\partial W}{\partial x} + u_y \frac{\partial W}{\partial y} \right) - \frac{\mu}{\rho} \omega \left( \frac{\partial^2 W}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial y^2} \right) + \beta W \left( g_x \frac{\partial T}{\partial y} - g_y \frac{\partial T}{\partial x} \right) \right] dx dy + \\ + \int_{\Gamma=\Gamma_{\omega}+\Gamma_w+\Gamma_0} \mu \left( \omega \frac{\partial W}{\partial n} - W \frac{\partial \omega}{\partial n} \right) d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad (8)$$

Vířivost  $\omega$  i složky rychlosti vyjádříme prostřednictvím proudové funkce  $\psi$  (která automaticky zajistí splnění rovnice kontinuity)

$$u_x = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad u_y = -\frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad \omega = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2}. \quad (9)$$

Proudovou funkci  $\psi$  lze aproximovat bázovými funkcemi, které mají druhé derivace integrovatelné s kvadrátem (v programu jsou použity kubické polynomy na trojúhelníkových elementech)

$$\psi(x, y) = N_j(x, y) \psi_j. \quad (10)$$

Poznamenejme, že koeficienty  $\psi_j$  v aproximaci (10) nejsou jen uzlové hodnoty proudové funkce, nýbrž i její první či dokonce druhé derivace, což je nutné pro zajištění spojitosti prvních derivací  $\psi$  i na rozhraní elementů. Pokud se jako bázové funkce  $N_j$  použijí kubické polynomy v trojúhelníkových elementech lze zajistit jen spojitost prvních derivací v uzlech a ne podél styčných stran (Bazeley 1965, 9 DOF  $\psi$   $\psi_{,x}$   $\psi_{,y}$ ), a korektní bázové funkce se spojitými prvními derivacemi musí být polynomy pátého stupně (Bell 1969, 18 DOF  $\psi$   $\psi_{,x}$   $\psi_{,y}$   $\psi_{,xx}$   $\psi_{,xy}$   $\psi_{,yy}$ ).

Použijeme-li na integrální rovnici přenosu vířivosti (8) Galerkinovu metodu, tj. když jako testovací funkce použijeme funkce bázové,  $W(x, y) = N_i(x, y)$ , získáme soustavu obyčejných diferenciálních rovnic pro uzlové parametry  $\psi_j$

$$M_{ij} \frac{\partial \psi_j}{\partial t} + A_{ij} \psi_j = b_i. \quad (11)$$

Matice hmot  $M$  je vyjádřena integrály

$$M_{ij} = \iint_{\Omega} \rho \left( \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} \right) d\Omega - \int_{\Gamma} \rho N_i \frac{\partial N_j}{\partial n} d\Gamma \quad (12)$$

a matice konvektivních i vazkých členů  $A$  závisí na rychlostech  $u_x, u_y$ , které je třeba vyčíslovat z výsledků předchozí iterace

$$A_{ij} = \iint_{\Omega} \left( \frac{\partial^2 N_j}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 N_j}{\partial y^2} \right) \left[ \rho \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \right) + \mu \left( \frac{\partial^2 N_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 N_i}{\partial y^2} \right) \right] d\Omega + \\ - \int_{\Gamma} \mu \left[ \left( \frac{\partial^2 N_j}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 N_j}{\partial y^2} \right) \left( n_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + n_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \right) - N_i \left( \frac{\partial^3 N_j}{\partial x^3} n_x + \frac{\partial^3 N_j}{\partial x \partial y^2} n_x + \frac{\partial^3 N_j}{\partial x^2 \partial y} n_y + \frac{\partial^3 N_j}{\partial y^3} n_y \right) \right] d\Gamma \quad (13)$$

Křivkový integrál přes celou hranici  $\Gamma$  je v programu FEMINA vynechán; což odpovídá zadání silných okrajových podmínek ( $\psi, \psi_{,x}, \psi_{,y}$ ) na celé hranici, nebo uplatnění přirozených slabých okrajových podmínek (na ose sice není známa axiální složka rychlosti  $\psi_{,y}$  jenomže  $n_y=0$  a i vířivost je nulová). Problémem zůstávají části hranice s neznámou hodnotou derivací proudové funkce (tj. neznámých složek rychlostí  $u_x, u_y$ ) ale i povrch tělesa, které je vnořené do proudu kapaliny (to je stěna s nulovými složkami rychlosti  $\psi_{,x} = \psi_{,y} = 0$ , ale s neznámou hodnotou proudové funkce). V tomto případě by u každého elementu, který je částí této hranice, měl být doplněn požadavek na shodnost hodnot proudové funkce.

Vektor pravé strany  $b_i$  reprezentuje zdrojový člen – přirozenou konvekci

$$b_i = \iint_{\Omega} \rho \beta N_i \left( g_x \frac{\partial T}{\partial y} - g_y \frac{\partial T}{\partial x} \right) d\Omega \quad (14)$$

Aproximujeme-li teplotní pole lineárními bázovými funkcemi  $H$  (zde stačí požadavek na existenci jen prvních derivací), vyjádříme vektor pravé strany jako součin matice  $B$  a vektoru uzlových teplot

$$b_i = \left[ \iint_{\Omega} \rho \beta N_i \left( g_x \frac{\partial H_j}{\partial y} - g_y \frac{\partial H_j}{\partial x} \right) d\Omega \right] T_j = B_{ij} T_j. \quad (15)$$

### Cylindrický souřadný systém

Celý postup je možné v podstatě zopakovat i pro cylindrický souřadný systém, Bird str.102

$$\rho \left( \frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_r \frac{\partial u_x}{\partial r} \right) = - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left[ \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial u_x}{\partial r} \right) \right] + \rho g_x (1 - \beta T) \quad (16)$$

$$\rho \left( \frac{\partial u_r}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_r}{\partial x} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) = - \frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left[ \frac{\partial^2 u_r}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial r u_r}{\partial r} \right) \right] + \rho g_r (1 - \beta T) \quad (17)$$

Rovnice kontinuity

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial r u_r}{\partial r} = 0, \quad \text{resp.} \quad \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_r}{r} = 0 \quad (18)$$

Eliminací tlaku  $p$  získáme rovnici pro vířivost

$$\omega = \frac{\partial u_x}{\partial r} - \frac{\partial u_r}{\partial x} \quad (19)$$

$$\rho \left( \frac{\partial \omega}{\partial t} + u_x \frac{\partial \omega}{\partial x} + u_r \frac{\partial \omega}{\partial r} - \frac{\omega u_r}{r} \right) = \mu \left( \frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial r \omega}{\partial r} \right) \right) + \rho \beta (g_r \frac{\partial T}{\partial x} - g_x \frac{\partial T}{\partial r}) \quad (20)$$

Metoda vážených residuí (testovací funkce  $W$ ) vede po aplikaci Greenovy věty a při zanedbání všech hraničních integrálů na rovnici

$$\iint_{\Omega} \left[ \rho W \frac{\partial \omega}{\partial t} - \rho \omega (u_x \frac{\partial W}{\partial x} + u_r \frac{\partial W}{\partial r}) - \mu \omega \left( \frac{\partial^2 W}{\partial x^2} + r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial W}{\partial r} \right) \right) - \rho W \beta (g_r \frac{\partial T}{\partial x} - g_x \frac{\partial T}{\partial r}) \right] d\Omega = 0. \quad (21)$$

Vířivost vyjádříme prostřednictvím proudové funkce a tu aproximujeme bázovými funkcemi

$$u_x = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \quad u_r = -\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial x} \quad \omega = \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (22)$$

Použitím Galerkinovy metody s testovací funkcí  $W=N_i$  pak získáme opět soustavu obyčejných diferenciálních rovnic (11) s následujícím vyjádřením matice hmotnosti

$$M_{ij} = \iint_{\Omega} \frac{\rho}{r} \left( \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial r} \frac{\partial N_j}{\partial r} \right) d\Omega \quad (23)$$

i matice setrvačných a vazkých členů

$$\begin{aligned} A_{ij} &= \iint_{\Omega} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial^2 N_j}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial N_j}{\partial r} \right) \right) \left[ \rho (u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_i}{\partial r}) + \mu \left( \frac{\partial^2 N_i}{\partial x^2} + r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial N_i}{\partial r} \right) \right) \right] d\Omega = \\ &= \iint_{\Omega} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial^2 N_j}{\partial x^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 N_j}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial N_j}{\partial r} \right) \left[ \rho (u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_i}{\partial r}) + \mu \left( \frac{\partial^2 N_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 N_i}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial N_i}{\partial r} \right) \right] d\Omega \end{aligned} \quad (24)$$

Vektor  $b_i$  zůstává beze změny.

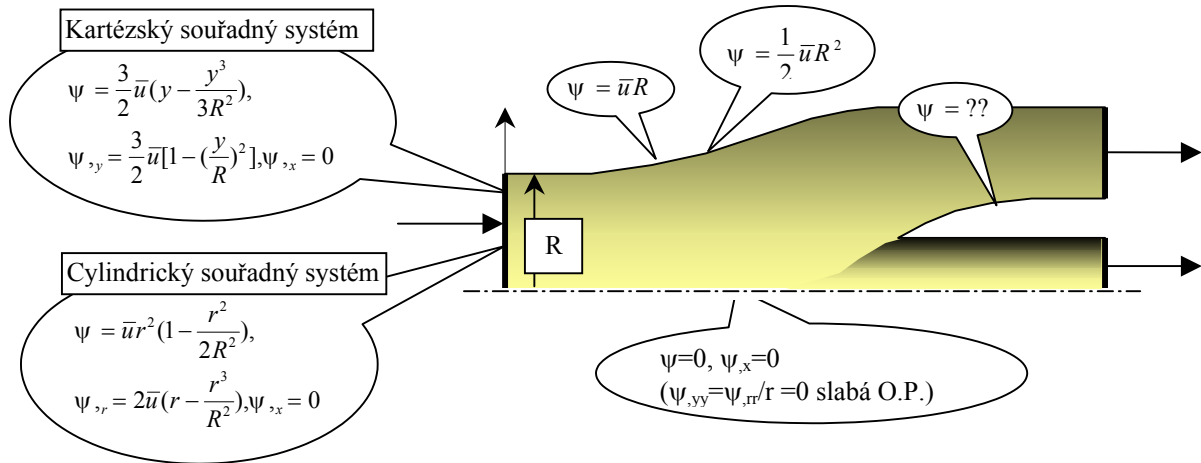
### Diskretizace času

Soustavu obyčejných diferenciálních rovnic (11) lze řešit diskretizací času a použít některé varianty Eulerovy nebo Runge Kuttovy metody. Aproximujeme-li časovou derivaci proudové funkce diferencí a použijeme-li implicitní Eulerovu metodu, získáme pro každý časový krok soustavu algebraických rovnic

$$(M_{ij} + \Delta t A_{ij}) \psi_j = M_{ij} \psi_j^0 + \Delta t B_{ij} T_j \quad (25)$$

## Okrajové podmínky

Silné okrajové podmínky představují hodnoty proudové funkce  $\psi$  a její první derivace (složky rychlosti). Tyto hodnoty je třeba zadávat na stěně (nulové rychlosti) a ve vstupním profilu (kde by měl být znám rychlostní profil).



Slabé okrajové podmínky jsou druhé derivace, např. nulové druhé derivace na ose symetrie.

Problém týkající se případů, kdy dochází k rozdělení toku do více větví (viz. předchozí obr.) a kdy neznáme dělicí poměr průtoků, nemá v této formulaci jednoduché řešení. Rozdělení průtoků a z něho vyplývající hodnoty proudové funkce ve výstupních průřezích jsou dány tlakovými poměry a ty se ve formulaci problému vůbec nevyskytují.

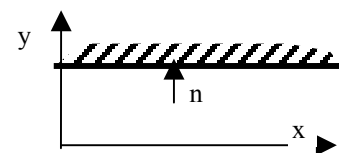
## Výpočet tlaků

Rozložení tlaků je možné spočítat v každém časovém kroku až ex post na základě stanoveného rychlostního pole. Vychází se z následující úpravy N-S rovnic (převod na Poissonovu rovnici pro tlak):

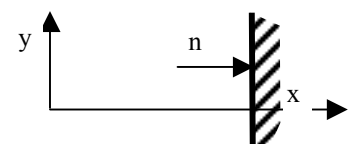
$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} + 2\rho\left[\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y}\right)^2 - \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2}\right] + \rho\beta\left(g_x \frac{\partial T}{\partial x} + g_y \frac{\partial T}{\partial y}\right) = 0 \quad (26)$$

V této rovnici se vůbec nevyskytují vazké členy: rozdělení tlaku je dáno jen distribucí rychlosti (která je ovšem viskozitou ovlivněna) a okrajovými podmínkami, tj. předepsanými hodnotami tlaku ve vstupním nebo výstupním průřezu. Na stěně je okrajová podmínka pro tlak složitější

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial y} \Big|_w &= \mu \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \rho g_y (1 - \beta T) = -\mu \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial u_x}{\partial y} + \rho g_y (1 - \beta T) = \\ &= -\mu \frac{\partial^3 \psi}{\partial x \partial y^2} + \rho g_y (1 - \beta T) = -\mu \frac{\partial \omega}{\partial x} + \rho g_y (1 - \beta T) \end{aligned} \quad (27)$$



$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial x} \Big|_w &= \mu \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \rho g_x (1 - \beta T) = -\mu \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial u_y}{\partial x} + \rho g_x (1 - \beta T) = \\ &= -\mu \frac{\partial^3 \psi}{\partial y \partial x^2} + \rho g_x (1 - \beta T) = -\mu \frac{\partial \omega}{\partial y} + \rho g_x (1 - \beta T) \end{aligned} \quad (28)$$



Rovnice (27-28) vyjadřují skutečnost, že normálová derivace tlaku je dána změnou gradientu rychlosti (nebo vířivosti) podél stěny a samozřejmě i odpovídající vztakovou složkou.

Poissonovu rovnici (26) lze řešit Galerkinovou metodou, kde pole tlaků i teplot aproximujeme bázovými funkcemi  $H$  u nichž není nutné (na rozdíl od funkcí  $N$ ) požadovat spojitost derivací:

$$\begin{aligned} & \left\{ \int_{\Omega} \left( \frac{\partial H_i}{\partial x} \frac{\partial H_j}{\partial x} + \frac{\partial H_i}{\partial y} \frac{\partial H_j}{\partial y} \right) d\Omega - \int_{\Gamma} H_i \left( \frac{\partial H_j}{\partial x} n_x + \frac{\partial H_j}{\partial y} n_y \right) d\Gamma \right\} p_j = \\ & = \int_{\Omega} H_i \left\{ 2\rho \left[ \left( \frac{\partial^2 N_j}{\partial x \partial y} \psi_j \right)^2 - \frac{\partial^2 N_j}{\partial x^2} \frac{\partial^2 N_k}{\partial y^2} \psi_j \psi_k \right] + \rho\beta \left( g_x \frac{\partial H_j}{\partial x} + g_y \frac{\partial H_j}{\partial y} \right) T_j \right\} d\Omega \end{aligned} \quad (29)$$

Stejný, byť poněkud únavnější postup, lze aplikovat i na NS rovnice v cylindrickém souřadném systému. I závěr je stejný, Poissonova rovnice pro tlak nezávisí na vazkách členech:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial p}{\partial r} \right) + 2\rho \left[ \frac{\partial u_x}{\partial r} \frac{\partial u_r}{\partial x} - \frac{\partial u_x}{\partial x} \frac{\partial u_r}{\partial r} + \left( \frac{u_r}{r} \right)^2 \right] + \rho\beta \left( g_x \frac{\partial T}{\partial x} + g_r \frac{1}{r} \frac{\partial rT}{\partial r} \right) = \\ & = \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial p}{\partial r} \right) + \\ & + \frac{2\rho}{r^2} \left[ \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial r \partial x} - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r \partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} \right) \right] + \rho\beta \left( g_x \frac{\partial T}{\partial x} + g_r \frac{1}{r} \frac{\partial rT}{\partial r} \right) = 0 \end{aligned} \quad (30)$$

Výsledek Galerkinovy metody, aplikované na rovnici (30) je soustava rovnic

$$\begin{aligned} & \left\{ \int_{\Omega} r \left( \frac{\partial H_i}{\partial x} \frac{\partial H_j}{\partial x} + \frac{\partial H_i}{\partial r} \frac{\partial H_j}{\partial r} \right) d\Omega - \int_{\Gamma} r H_i \left( \frac{\partial H_j}{\partial x} n_x + \frac{\partial H_j}{\partial r} n_r \right) d\Gamma \right\} p_j = \\ & = \int_{\Omega} H_i \left\{ \frac{2\rho}{r^2} \left[ \left( \frac{\partial^2 N_j}{\partial x \partial r} \psi_j - \frac{1}{r} \frac{\partial N_j}{\partial x} \psi_j \right)^2 + \left( \frac{1}{r} \frac{\partial^2 N_j}{\partial x \partial r} \frac{\partial N_k}{\partial x} + \left( \frac{1}{r} \frac{\partial N_j}{\partial r} - \frac{\partial^2 N_j}{\partial r^2} \right) \frac{\partial^2 N_k}{\partial x^2} \right) \psi_j \psi_k \right] + \right. \\ & \left. + \rho\beta \left( g_x \frac{\partial H_j}{\partial x} + g_y \frac{\partial H_j}{\partial y} \right) T_j \right\} d\Omega \end{aligned} \quad (31)$$

### Programová implementace:

Lokální matice  $M_{ij}$   $A_{ij}$  mají pro trojúhelníkové elementy ve variantě PSIN rozměr 9 x 9, což odpovídá 3 uzlům s uzlovými parametry  $\{\psi_1 \psi_{1,x} \psi_{1,y} \psi_2 \psi_{2,x} \psi_{2,y} \psi_3 \psi_{3,x} \psi_{3,y}\}$ . Matice  $B_{ij}$  má rozměr 9 x 3, což odpovídá lineární aproximaci průběhu teploty v trojúhelníkovém elementu.

U varianty PSBL jsou používány Bellovy bázové polynomy pátého stupně s 18 stupni volnosti  $\{\psi_1 \psi_{1,x} \psi_{1,y} \psi_{1,xx} \psi_{1,yy} \psi_{1,xy} \psi_2 \psi_{2,x} \psi_{2,y} \psi_{2,xx} \psi_{2,yy} \psi_{2,xy} \psi_3 \psi_{3,x} \psi_{3,y} \psi_{3,xx} \psi_{3,yy} \psi_{3,xy}\}$ .

```
C 7-mi bodova Gaussova integrace matic
DO IG=1,NGAUS
C Linearni bazove funkce a jejich derivace pro rychlosti a teploty
CALL FDFT(3,X,Y,GL1(IG),GL2(IG),FL,FLX,FLY,S)
C Rychlosti a teploty v integracnim uzlu
VVX=0
VVY=0
TMEAN=0
DO I=1,3
  VVX=VVX+VX(I)*FL(I)
  VVY=VVY+VY(I)*FL(I)
  TMEAN=TMEAN+T(I)*FL(I)
```

```

ENDDO
VISC=RMAT (LPROP,7)
RHO=RMAT (LPROP,3)
BETA=RMAT (LPROP,8)
C Kubicke bazove funkce a jejich derivate pro proudovou funkci
CALL FDF3 (X,Y,GL1 (IG),GL2 (IG),F,FX,FY,FXX,FYY,FX,Y,S)
RR=Y (1)*GL1 (IG)+Y (2)*GL2 (IG)+Y (3)*(1-GL1 (IG)-GL2 (IG))
DO I=1,NL
  DO J=1,NL
    IF (NAXIS.EQ.1) THEN
C cylindricky s.s.
      DA=(FXX (J)+FYY (J)-FY (J)/RR)/RR*
/      (RHO*(VVX*FX (I)+VVY*FY (I))+
/      VISC*(FXX (I)+FYY (I)-FY (I)/RR))
      DC=RHO*(FX (I)*FX (J)+FY (I)*FY (J))/RR
    ELSE
      DA=(FXX (J)+FYY (J))*
/      (RHO*(VVX*FX (I)+VVY*FY (I))+
/      VISC*(FXX (I)+FYY (I)))
      DC=RHO*(FX (I)*FX (J)+FY (I)*FY (J))
    ENDIF
    AL (I,J)=AL (I,J)+DA*S*W (IG)
    CK (I,J)=CK (I,J)+DC*S*W (IG)
  ENDDO
C Prirozena konvekce. RALGOR(1)-gx, RALGOR(2)-gy (nezavisle na s.s.)
DO J=1,3
  DB=RHO*BETA*F (I)*(RALGOR (1)*FLY (J)-RALGOR (2)*FLX (J))
  BK (I,J)=BK (I,J)+DB*S*W (IG)
ENDDO
ENDDO
ENDDO
DO I=1,NL
  DO J=1,NL
    AL (I,J)=CK (I,J)+AL (I,J)*DTIME
    BL (I)=BL (I)+CK (I,J)*POLD (J)
  ENDDO
  DO J=1,3
    BL (I)=BL (I)+DTIME*BK (I,J)*T (J)
  ENDDO
ENDDO

```

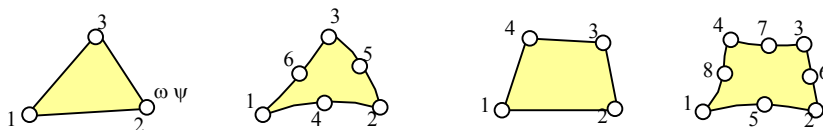
## Výsledky a postprocessing

Z hodnot uzlových parametrů  $\{\psi_1 \psi_{1,x} \psi_{1,y} \psi_2 \psi_{2,x} \psi_{2,y} \psi_3 \psi_{3,x} \psi_{3,y}\}$ , resp.  $\{\psi_1 \psi_{1,x} \psi_{1,y} \psi_{1,xx} \psi_{1,yy} \psi_{1,xy} \psi_2 \psi_{2,x} \psi_{2,y} \psi_{2,xx} \psi_{2,yy} \psi_{2,xy} \psi_3 \psi_{3,x} \psi_{3,y} \psi_{3,xx} \psi_{3,yy} \psi_{3,xy}\}$  se v každém časovém kroku vypočtou

- složky rychlostí
- rozložení tlaků

a tyto výsledky (tj.  $\psi$  a její derivate, rychlosti  $u_x$ ,  $u_y$  a tlak  $p$ ) se průběžně zapisují do souboru \*.OUT.

#### 4.1.3. Navierovy Stokesovy rovnice, formulace s proudovou funkcí a vířivostí (metoda PSOM - Psi and Omega, resp. CARE – CAmpanion-REnsonová dle autorky metody)



I tentokrát se používá místo rychlostí  $u_x$   $u_y$  proudová funkce  $\psi$  a zadání problému je totožné s předchozím (tj. nestacionární proudění s uvažováním vztlakových sil). Zásadní rozdíl je v použití mnohem jednodušších bazových funkcí  $C^0$ , které nemají spojité ani první derivace. To ovšem znamená, že nelze vyjít z jediné diferenciální rovnice čtvrtého řádu pro proudovou funkci  $\psi$ , ale je nutné zavést další veličinu, vířivost  $\omega$ , a místo jedné řešit dvě diferenciální rovnice, jenomže pouze druhého řádu. Další odlišnost spočívá v tom, že místo Galerkinovy metody je použita metoda Galerkin Petrof s asymetrickými testovacími funkcemi, která umožňuje dosáhnout neoscilujícího řešení i při vysokých hodnotách  $Re$ , tj. když setrvačné členy výrazně převyšují vliv vazkových sil. Mezi variantami PSOM a CARE je zdánlivě nepatrný rozdíl, spočívající v tom, že testovací funkce rovnice vířivosti se použijí jako bazové funkce pro proudovou funkci a obráceně, tj. testovací funkce pro Poissonovu rovnici proudové funkce se použijí jako bazové funkce pro aproximaci vířivosti. Protože pro obě funkce, tj. proudovou funkci i vířivost je použit stejný typ aproximačních polynomů, projeví se tento rozdíl jen v okrajových podmínkách a v záměně řádků lokálních matic elementů (prohození řádků odpovídajících testovací funkci pro vířivost a proudovou funkci).

#### Kartézský souřadný systém

Formulace problému je stejná jako v předchozím odstavci, tj. Navierovy Stokesovy rovnice pro nestacionární tok nestlačitelné Newtonské kapaliny s uvažováním vztlaku, mající v proměnných  $u, p$  a v kartézském souřadném systému (rovinné proudění) tvar, Bird str.101

$$\rho \left( \frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) = - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left( \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right) + \rho g_x (1 - \beta T) \quad (1)$$

$$\rho \left( \frac{\partial u_y}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) = - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left( \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} \right) + \rho g_y (1 - \beta T). \quad (2)$$

Rovnice kontinuity pro nestlačitelnou kapalinu

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} = 0. \quad (3)$$

Tlak  $p$  je z Navierových Stokesových rovnic eliminován zavedením vířivosti

$$\omega = \frac{\partial u_x}{\partial y} - \frac{\partial u_y}{\partial x} \quad (4)$$

$$\rho \left( \frac{\partial \omega}{\partial t} + u_x \frac{\partial \omega}{\partial x} + u_y \frac{\partial \omega}{\partial y} \right) = \mu \left( \frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} \right) + \rho \beta (g_y \frac{\partial T}{\partial x} - g_x \frac{\partial T}{\partial y}). \quad (5)$$

Složky vektoru rychlosti vyjádříme prostřednictvím skalární proudové funkce



$$u_x = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad u_y = -\frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad (6)$$

což po dosazení do definiční rovnice vířivosti vede k Poissonově rovnici pro proudovou funkci

$$\omega = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2}. \quad (7)$$

Problém je tím převeden na soustavu dvou diferenciálních rovnic druhého řádu, transportní rovnice (5) a rovnice (7). Pro aproximaci vířivosti, proudové funkce i teplot můžeme použít stejné báze funkce u nichž nemusíme požadovat spojitost, ale pouze existenci prvních derivací (dokonce lze použít např. i lineární polynomy)

$$\omega(x, y) = N_j(x, y)\omega_j, \quad \psi(x, y) = N_j(x, y)\psi_j, \quad T(x, y) = N_j(x, y)T_j \quad (8,9,10)$$

Na transportní rovnici (5) můžeme aplikovat metodu vážených residuí s asymetrickými testovacími funkcemi (Petrof Galerkin), viz. Zienkiewicz, díl III. str.27.

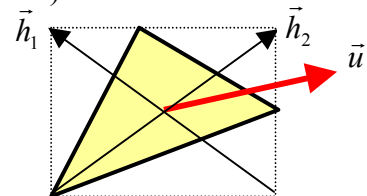
$$W(x, y) = N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \right), \quad (11)$$

kde  $h$  je charakteristický rozměr elementu. Pro optimální hodnotu koeficientu  $\alpha$  platí vztah

$$\alpha_{opt} = \coth Pe - \frac{1}{Pe}, \quad Pe = \frac{|u| h \rho}{2\mu}. \quad (12)$$

Stanovení charakteristického rozměru elementu není zcela jednoznačné. V programu FEMINA je použit postup, založený na myšlence, že důležitý je rozměr elementu ve směru rychlosti proudění (viz obr., kde vektory  $h_1, h_2$  jsou uhlopříčky obdélníku, který „zarámoval“ element):

$$h = \max\left(\frac{\vec{h}_1 \cdot \vec{u}}{|\vec{u}|}, \frac{\vec{h}_2 \cdot \vec{u}}{|\vec{u}|}\right) \quad (13)$$



Výsledkem integrace a použití Greenovy věty na snížení řádu derivací je soustava obyčejných diferenciálních rovnic

$$M_{ij} \frac{d\omega_j}{dt} + A_{ij}\omega_j = B_{ij}T_j \quad (14)$$

s maticí hmot  $M$  a maticí konvektivního a vazkého přenosu  $A$  vyjádřenou integrály

$$M_{ij} = \iint_{\Omega} \rho N_i N_j d\Omega \quad (15)$$

$$A_{ij} = \iint_{\Omega} \left[ \rho \left[ N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \right) \right] \left( u_x \frac{\partial N_j}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_j}{\partial y} \right) + \mu \left( \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} \right) \right] d\Omega +$$

$$- \int_{\Gamma} \mu N_i \left( \frac{\partial N_j}{\partial x} n_x + \frac{\partial N_j}{\partial y} n_y \right) d\Gamma \quad (16)$$

$$B_{ij} = \iint_{\Omega} \left[ N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \right) \right] \beta \rho \left( g_y \frac{\partial N_j}{\partial x} - g_x \frac{\partial N_j}{\partial y} \right) d\Omega \quad (17)$$

V uvedené formulaci hraje důležitou roli křivkový integrál v matici transportu vířivosti (16), který je třeba aplikovat na té části hranice  $\Gamma$ , kde není známá hodnota vířivosti, to jest především na stěně (ne např. v ose symetrie, nebo ve vstupním průřezu, předpokládáme-li vyvinuté paralelní proudění).

S rovnicí proudové funkce (7) je to mnohem jednodušší, aplikace Galerkinovy metody vede na soustavu lineárních rovnic

$$D_{ij}\psi_j + C_{ij}\omega_j = 0 \quad (18)$$

kde

$$C_{ij} = \iint_{\Omega} N_i N_j d\Omega \quad (19)$$

$$D_{ij} = \iint_{\Omega} \left( \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} \right) d\Omega \quad (20)$$

### Cylindrický souřadný systém

Podobně lze postupovat u cylindrického souřadného systému, kdy transportní rovnice vířivosti má tvar

$$\rho \left( \frac{\partial \omega}{\partial t} + u_x \frac{\partial \omega}{\partial x} + u_r \frac{\partial \omega}{\partial r} - \frac{u_r \omega}{r} \right) = \mu \left[ \frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{dr\omega}{dr} \right) \right] + \rho \beta \left( g_r \frac{\partial T}{\partial x} - g_x \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad (21)$$

Použijeme poněkud modifikovanou asymetrickou složku testovacích funkcí, do níž zahrneme i odstředivé síly (?)

$$W(x, y) = N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_i}{\partial y} - \frac{u_r N_i}{r} \right) \quad (22)$$

Odpovídající matice  $A$  a  $B$  lze vyjádřit těmito integrály

$$A_{ij} = \iint_{\Omega} \left[ \rho \left[ N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_i}{\partial r} - \frac{u_r N_i}{r} \right) \right] \left( u_x \frac{\partial N_j}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_j}{\partial r} - \frac{u_r N_j}{r} \right) + \right.$$

$$\left. + \mu \left( \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial r} \frac{\partial N_j}{\partial r} + \frac{N_j}{r} \frac{\partial N_i}{\partial r} \right) \right] d\Omega +$$

$$- \int_{\Gamma} \mu N_i \left( \frac{\partial N_j}{\partial x} n_x + \frac{\partial N_j}{\partial r} n_r + \frac{n_r N_j}{r} \right) d\Gamma \quad (23)$$

$$B_{ij} = \iint_{\Omega} \left[ N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_i}{\partial r} - u_r \frac{N_i}{r} \right) \right] \beta \rho \left( g_r \frac{\partial N_j}{\partial x} - g_x \frac{\partial N_j}{\partial r} \right) d\Omega \quad (24)$$

Poissonova rovnice pro proudovou funkci má v cylindrickém souřadném systému tvar

$$\omega = \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (25)$$

čemuž odpovídá změněná matice  $D$

$$D_{ij} = \iint_{\Omega} \frac{1}{r} \left( \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial r} \frac{\partial N_j}{\partial r} \right) d\Omega \quad (26)$$

### Křivkové integrály

Hlavní rozdíl proti předchozím (i následujícím) metodám spočívá v nutnosti výpočtu integrálu na té části hranice, kde není známa vířivost, tj. na stěně.

$$- \int_{\Gamma} \mu N_i \left( \frac{\partial N_j}{\partial x} n_x + \frac{\partial N_j}{\partial y} n_y \right) d\Gamma \quad (27)$$

V integrálu (27) jsou  $n_x$   $n_y$  souřadnice *vnější* normály hranice.

Poznámka: Rozlišení mezi vnitřní a vnější částí hranice je dáno polohou uzlu elementu, který není částí hranice, viz. následující obrázek:

Pro případ, kdy strana je definovaná dvěma uzly (délka strany 1-2:  $h$ ), platí až na znaménko

$$n_x = \cos \alpha = \frac{y_2 - y_1}{h} \quad (28)$$

$$n_y = \sin \alpha = \frac{x_1 - x_2}{h}$$

V případě, že strana elementu je zakřivená, a pro definici jejího tvaru jsou použity báze funkce  $N_j$  platí opět až na znaménko

$$n_x = \frac{Y}{\sqrt{X^2 + Y^2}} \quad (29)$$

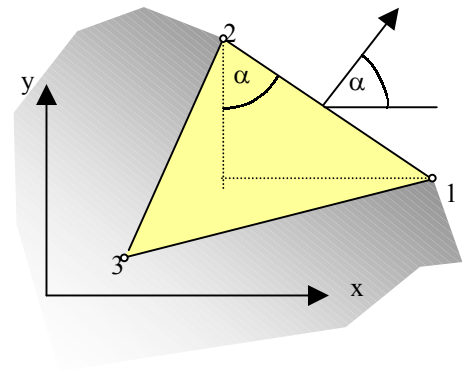
$$n_y = \frac{-X}{\sqrt{X^2 + Y^2}}$$

kde

$$X = x_j \frac{dN_j}{d\xi}, \quad Y = y_j \frac{dN_j}{d\xi} \quad (30)$$

Znaménko vektoru  $n$  je dáno požadavkem

$$\vec{n} \cdot \vec{l3} = n_x (x_3 - x_1) + n_y (y_3 - y_1) < 0 \quad (31)$$



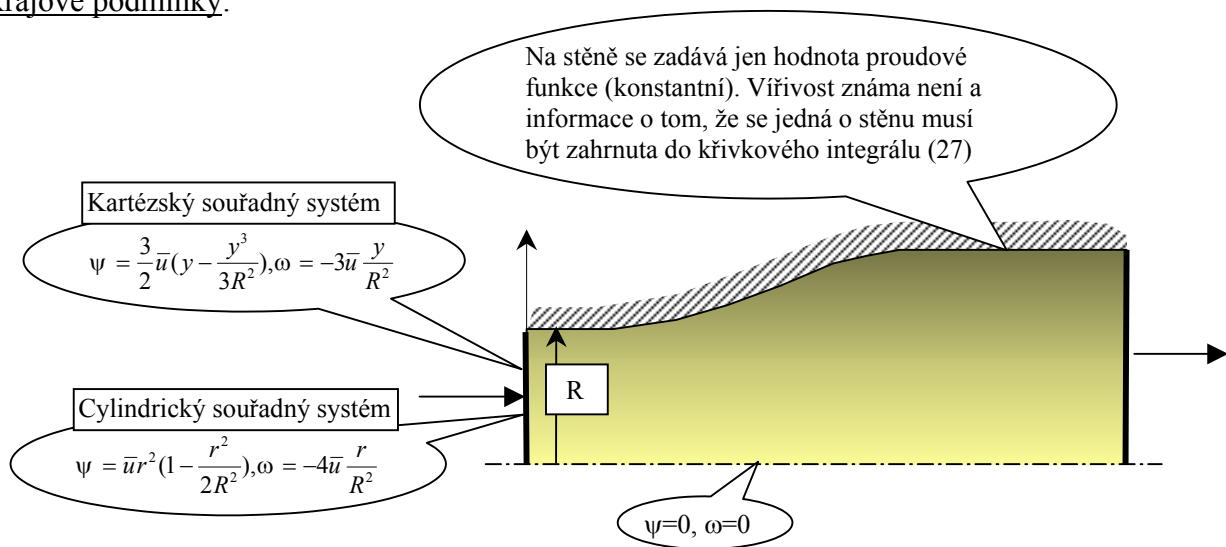
Konec poznámky.

### Diskretizace času

Výsledkem použití metody vážených reziduí je soustava obyčejných diferenciálních rovnic pro transport vířivosti (14) doplněná soustavou algebraických rovnic (18). Diskretizací času (náhradou časové derivace diferencí) získáme v každém časovém kroku  $\Delta t$  finální soustavu algebraických rovnic pro uzlové parametry  $\{\omega_j \psi_j\}$

$$\begin{aligned} (M_{ij} + \Delta t A_{ij}) \omega_j &= M_{ij} \omega_j^0 + \Delta t B_{ij} T_j \\ D_{ij} \psi_j + C_{ij} \omega_j &= 0 \end{aligned} \quad (32)$$

### Okrajové podmínky:

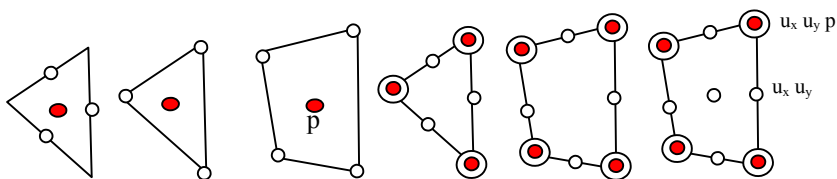


### Implementace

Pro uspořádání uzlových parametrů  $\{\omega_1 \psi_1 \omega_2 \psi_2 \dots\dots\dots\}$  má lokální matice soustavy strukturu

$$\begin{bmatrix} M_{11} + \Delta t A_{11} & 0 & M_{12} + \Delta t A_{12} & \dots \\ C_{11} & D_{11} & C_{12} & \dots \\ M_{21} + \Delta t A_{21} & 0 & M_{22} + \Delta t A_{22} & \dots \\ \dots & & & \dots \end{bmatrix}$$

#### 4.1.4. Navierovy Stokesovy rovnice – formulace v proměnných rychlosti a tlak, asymetrické testovací funkce UPWIND (název metody UVP)



Tímto odstavcem počínaje se pozornost zaměří na klasickou formulaci operující pouze s tzv. primitivními proměnnými, složkami rychlosti a tlakem. Tím ovšem přestává být samozřejmým to, co bylo pro charakteristické pro řešení s proudovou funkcí – automatické splnění rovnice kontinuity. Použití primitivních proměnných má však dvě zásadní výhody: snadno se zobecní na případ trojrozměrného proudění ( $u$  proudové funkce to jde také, ale vířivost je třeba chápat jako vektor, takže dostáváme stejný počet čtyř rovnic pro  $\psi$   $\omega_x$   $\omega_y$   $\omega_z$  jako při použití primitivních proměnných  $p$   $u_x$   $u_y$   $u_z$ ) a dále pak skutečnost, že tlak není eliminován, znamená, že lze použít i okrajové podmínky pro tlak a poměrně snadno řešit i problémy s několika výstupními proudy a případy, kdy tekutina obtéká nějakou překážku. Současné řešení Navierových Stokesových transportních rovnic (transport hybnosti) a rovnice kontinuity vyžaduje přejít na tzv. hybridní elementy s jiným typem aproximace (bázových funkcí) pro rychlosti a s jinými bázovými funkcemi pro tlak.

#### Kartézský souřadný systém

Uvažujme stejnou formulaci problému jako v předchozím odstavci, tj. Navierovy Stokesovy rovnice pro nestacionární tok nestlačitelné Newtonské kapaliny

$$\rho \left( \frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) = - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left( \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right) + \rho g_x (1 - \beta T) \quad (1)$$

$$\rho \left( \frac{\partial u_y}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) = - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left( \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} \right) + \rho g_y (1 - \beta T) \quad (2)$$

a rovnici kontinuity

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} = 0. \quad (3)$$

Na rovnice rovnováhy (bilance hybnosti) aplikujme metodu vážených residuí s asymetrickými testovacími funkcemi (Petrof Galerkin), viz. Zienkiewicz, díl III. str.27, tedy se stejnými funkcemi jako při řešení transportu vířivosti

$$u_x(x, y) = N_j(x, y)u_{xj}, \quad u_y(x, y) = N_j(x, y)u_{yj}, \quad p(x, y) = H_j(x, y)p_j, \quad (4)$$

$$W(x, y) = N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \right). \quad (5)$$

Parametr  $h$  je charakteristický rozměr elementu a pro optimální hodnotu bezrozměrného koeficientu  $\alpha$  platí vztah

$$\alpha_{opt} = \coth Pe - \frac{1}{Pe}, \quad Pe = \frac{|u| h \rho}{2\mu}. \quad (6)$$

Pro malé hodnoty Pecletova čísla elementu (v tomto kontextu vlastně Reynoldsova čísla elementu) je optimální hodnota součinitele  $\alpha_{opt} \approx Pe/2$ , zatímco pro velké hodnoty  $Pe$  se hodnota  $\alpha_{opt}$  blíží jedné.

Jako bázové funkce pro aproximaci rychlostí  $N_j(x,y)$  jsou u této operace používány kvadratické polynomy v trojúhelníkových elementech a pro aproximaci tlaků lineární polynomy  $H_j(x,y)$ . Důvodem proč nelze použít stejné typy bázových funkcí pro aproximaci pole tlaků a rychlostí je stabilita řešení – laické vysvětlení je to, že v NS rovnicích jsou druhé derivace rychlostí, ale jen první derivace tlaku, takže stupeň aproximačních polynomů rychlostí by měl být o jedničku vyšší než aproximace tlaku.

Bilance hybnosti ve směrech  $x,y$  pak přejdou na obyčejné diferenciální rovnice

$$M_{ij} \frac{\partial u_{xj}}{\partial t} + A_{ij} u_{xj} + P_{ij}^x p_j = b_i^x \quad (7)$$

$$M_{ij} \frac{\partial u_{yj}}{\partial t} + A_{ij} u_{yj} + P_{ij}^y p_j = b_i^y \quad (8)$$

kde

$$M_{ij} = \iint_{\Omega} \rho \left[ N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \right) \right] N_j d\Omega \cong \iint_{\Omega} \rho N_i N_j d\Omega \quad (9)$$

Pozn.: Zanedbání asymetrického členu asi není zcela oprávněné, ale např. příspěvek k diagonálnímu členu matice hmotností nulový je, protože asymetrická složka je funkce lichá a integrál jejího součinu s funkcí sudou ( $N_i$ ) je nula.

$$A_{ij} = \iint_{\Omega} \left[ \rho \left[ N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \right) \right] \left( u_x \frac{\partial N_j}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_j}{\partial y} \right) + \mu \left( \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} \right) \right] d\Omega + \int_{\Gamma} \mu N_i \frac{\partial N_j}{\partial n} d\Gamma \quad (10)$$

I v tomto případě je ignorována asymetrická část testovací funkce u vazkého členu – tam je to oprávněné. Křivkový integrál je nulový na stěně (protože tam je zadávána rychlost a tudíž  $N_i=0$ ), na ose symetrie ( $\partial N_j/\partial n=0$ ), ve vstupním průřezu ( $N_i=0$ ) a může být nenulový jen na výstupu, pokud tam ještě není stabilizovaný rychlostní profil. Totéž platí pro křivkové integrály v následujících vztazích pro koeficienty matice  $P$ , odpovídající gradientům tlaku v NS rovnicích:

$$P_{ij}^x = \iint_{\Omega} \left[ -H_j \frac{\partial N_i}{\partial x} + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \right) \frac{\partial H_j}{\partial x} \right] d\Omega + \int_{\Gamma} H_j N_i n_x d\Gamma \quad (11)$$

$$P_{ij}^y = \iint_{\Omega} \left[ -H_j \frac{\partial N_i}{\partial y} + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \right) \frac{\partial H_j}{\partial y} \right] d\Omega + \int_{\Gamma} H_j N_i n_y d\Gamma \quad (12)$$

Pozn.: U tohoto členu byla Greenova věta aplikována jen na symetrickou část testovací funkce. Důsledkem je to, že se v integrálu objeví první derivace bázových funkcí  $H_j$ , což by působilo problémy při použití aproximace tlaku funkcemi  $H_j$ , které jsou po elementech konstantní. V programu FEMINA je tento člen prostě vynechán.

$$b_i^x = \iint_{\Omega} \left[ N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \right) \right] \rho g_x (1 - \beta T) d\Omega \quad (13)$$

$$b_i^y = \iint_{\Omega} \left[ N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \right) \right] \rho g_y (1 - \beta T) d\Omega \quad (14)$$

Pro rovnici kontinuity se jako testovací funkce použijí bázové funkce pro tlak  $H_i$  (samozřejmě bez asymetrické složky, rovnice kontinuity není transportní rovnice, ale jen omezující podmínka)

$$Q_{ij}^x u_{xj} + Q_{ij}^y u_{yj} = 0 \quad (15)$$

kde

$$Q_{ij}^x = \iint_{\Omega} H_i \frac{\partial N_j}{\partial x} d\Omega, \quad Q_{ij}^y = \iint_{\Omega} H_i \frac{\partial N_j}{\partial y} d\Omega \quad (16)$$

Matice  $Q$  jsou až na znaménko totožné s transponovanými maticemi  $P$  pokud se v nich neuvažuje asymetrický člen testovacích funkcí (tj. když  $\alpha=0$ ).

### Cylindrický souřadný systém

V podstatě totéž platí i pro popis proudění v cylindrickém souřadném systému s Navierovými Stokesovými rovnicemi ve tvaru

$$\rho \left( \frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_r \frac{\partial u_x}{\partial r} \right) = - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left[ \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial u_x}{\partial r} \right) \right] + \rho g_x (1 - \beta T) \quad (17)$$

$$\rho \left( \frac{\partial u_r}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_r}{\partial x} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) = - \frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left[ \frac{\partial^2 u_r}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial r u_r}{\partial r} \right) \right] + \rho g_r (1 - \beta T) \quad (18)$$

a rovnicí kontinuity

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial r u_r}{\partial r} = 0. \quad (19)$$

Na rovnice bilance hybnosti ve směrech  $x, r$  aplikujme testovací funkci  $W(x, r)$ ,

$$\iint_{\Omega} W \left[ \rho \left( \frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_r \frac{\partial u_x}{\partial r} \right) - \mu \left( \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial u_x}{\partial r} \right) \right) \right] d\Omega + \iint_{\Omega} W \frac{\partial p}{\partial x} d\Omega = \iint_{\Omega} W \rho g_x (1 - \beta T) d\Omega \quad (20)$$

$$\iint_{\Omega} W \left[ \rho \left( \frac{\partial u_r}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_r}{\partial x} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) - \mu \left( \frac{\partial^2 u_r}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial r u_r}{\partial r} \right) \right) \right] d\Omega + \iint_{\Omega} W \frac{\partial p}{\partial r} d\Omega = \iint_{\Omega} W \rho g_r (1 - \beta T) d\Omega \quad (21)$$

a použijme Greenovu větu na snížení řádu derivací vazkého členu

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega} \left[ W \rho \left( \frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_r \frac{\partial u_x}{\partial r} \right) + \mu \left( \frac{\partial u_x}{\partial x} \frac{\partial W}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial r} \frac{\partial W}{\partial r} - \frac{W}{r} \frac{\partial u_x}{\partial r} \right) \right] d\Omega + \iint_{\Omega} W \frac{\partial p}{\partial x} d\Omega = \\ = \iint_{\Omega} W \rho g_x (1 - \beta T) d\Omega + \int_{\Gamma} W \left( \frac{\partial u_x}{\partial x} n_x + \frac{\partial u_x}{\partial r} n_r \right) d\Gamma \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega} [W\rho(\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_r}{\partial x} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r}) + \mu(\frac{\partial u_r}{\partial x} \frac{\partial W}{\partial x} + \frac{\partial u_r}{\partial r} \frac{\partial W}{\partial r} + \frac{u_r}{r} \frac{\partial W}{\partial r})] d\Omega + \iint_{\Omega} W \frac{\partial p}{\partial r} d\Omega = \\ = \iint_{\Omega} W\rho g_r (1 - \beta T) d\Omega + \int_{\Gamma} W(\frac{\partial u_r}{\partial x} n_x + \frac{1}{r} \frac{\partial r u_r}{\partial r} n_r) d\Gamma \end{aligned} \quad (23)$$

Dosažením testovací funkce

$$W(x, r) = N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} (u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_i}{\partial r}) \quad (24)$$

obdržíme z rovnic rovnováhy ve směrech  $x, r$  soustavu obyčejných diferenciálních rovnic

$$M_{ij} \frac{\partial u_{xj}}{\partial t} + A_{ij}^x u_{xj} + P_{ij}^x p_j = b_i^x \quad (25)$$

$$M_{ij} \frac{\partial u_{rj}}{\partial t} + A_{ij}^r u_{rj} + P_{ij}^r p_j = b_i^r \quad (26)$$

Matice hmot  $M$  je pro obě rovnice totožná

$$M_{ij} = \iint_{\Omega} \rho [N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} (u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_i}{\partial r})] N_j d\Omega \cong \iint_{\Omega} \rho N_i N_j d\Omega \quad (27)$$

(s toutéž výhradou jako u formulace v kartézském souřadném systému),

zatímco matice  $A$  se mírně odlišují pro směr  $x$  a směr  $r$

$$\begin{aligned} A_{ij}^x = \iint_{\Omega} \left[ \rho [N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} (u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_i}{\partial r})] (u_x \frac{\partial N_j}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_j}{\partial r}) + \mu (\frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial r} \frac{\partial N_j}{\partial r} - \frac{N_i}{r} \frac{\partial N_j}{\partial r}) \right] d\Omega + \\ - \int_{\Gamma} \mu N_i (\frac{\partial N_j}{\partial x} n_x + \frac{\partial N_j}{\partial r} n_r) d\Gamma \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} A_{ij}^r = \iint_{\Omega} \left[ \rho [N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} (u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_i}{\partial r})] (u_x \frac{\partial N_j}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_j}{\partial r}) + \mu (\frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial r} \frac{\partial N_j}{\partial r} + \frac{N_j}{r} \frac{\partial N_i}{\partial r}) \right] d\Omega + \\ - \int_{\Gamma} \mu N_i (\frac{\partial N_j}{\partial x} n_x + \frac{1}{r} \frac{\partial r N_j}{\partial r} n_r) d\Gamma \end{aligned} \quad (29)$$

Matice  $P$  se stejně jako vektory pravých stran nemění, tj.

$$P_{ij}^x = \iint_{\Omega} \left[ -H_j \frac{\partial N_i}{\partial x} + \frac{\alpha h}{2|u|} (u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_i}{\partial r}) \frac{\partial H_j}{\partial x} \right] d\Omega + \int_{\Gamma} H_j N_i n_x d\Gamma \quad (30)$$

$$P_{ij}^r = \iint_{\Omega} \left[ -H_j \frac{\partial N_i}{\partial r} + \frac{\alpha h}{2|u|} (u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_i}{\partial r}) \frac{\partial H_j}{\partial r} \right] d\Omega + \int_{\Gamma} H_j N_i n_r d\Gamma \quad (31)$$



$$b_i^x = \iint_{\Omega} \left[ N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_i}{\partial r} \right) \right] \rho g_x (1 - \beta T) d\Omega \quad (32)$$

$$b_i^r = \iint_{\Omega} \left[ N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_i}{\partial r} \right) \right] \rho g_r (1 - \beta T) d\Omega \quad (33)$$

Integrální formulace rovnice kontinuity je založena na symetrické testovací funkci  $H_i$

$$Q_{ij}^x u_{xj} + Q_{ij}^r u_{rj} = 0 \quad (34)$$

kde

$$Q_{ij}^x = \iint_{\Omega} H_i \frac{\partial N_j}{\partial x} d\Omega, \quad Q_{ij}^r = \iint_{\Omega} H_i \frac{1}{r} \frac{\partial r N_j}{\partial r} d\Omega \quad (35)$$

Matice  $Q$  jsou až na znaménko totožné s transponovanými maticemi  $P$  pokud je nulová asymetrická část testovacích funkcí ( $\alpha=0$ ).

### Diskretizace času

Výsledkem aplikace metody vážených reziduí je soustava obyčejných diferenciálních rovnic (7-8), resp. (25-26) doplněná algebraickými rovnicemi (15), resp. (34). Diferenciální rovnice nahradíme diferenčními rovnicemi implicitním Eulerovským schematem

$$(M_{ij} + \Delta t A_{ij}) u_{xj} + \Delta t P_{ij}^x p_j = M_{ij} u_{xj}^0 + \Delta t b_i^x \quad (36)$$

$$(M_{ij} + \Delta t A_{ij}) u_{yj} + \Delta t P_{ij}^y p_j = M_{ij} u_{yj}^0 + \Delta t b_i^y \quad (37)$$

a doplníme rovnicemi kontinuity (15), resp. (34) ve tvaru

$$\Delta t P_{ji}^x u_{xj} + \Delta t P_{ji}^y u_{yj} = 0 \quad (38)$$

využívaje ekvivalence matic  $P$  a  $Q$ .

### Implementace

Operace je implementována pro několi typů hybridních elementů, trojúhelníky s 6, resp. 4 uzly a čtyřúhelníky s 5, 8 a 9 uzly:

- Vektor uzlových parametrů trojúhelníkového elementu se 6 uzlovými body má tuto strukturu  $\{u_{x1} \ u_{y1} \ p_1 \ u_{x2} \ u_{y2} \ p_2 \ u_{x3} \ u_{y3} \ p_3 \ u_{x4} \ u_{y4} \ u_{x5} \ u_{y5} \ u_{x6} \ u_{y6} \}$ , a korespondující matice mají rozměr 15 x 15.

Struktura matice soustavy je znázorněna na následujícím schématu, kde symboly  $a_{ij}$  označují prvky matice  $A$  s dimenzí 6 x 6, která odpovídá šesti bázovým funkcím  $N_j$  pro rychlosti, a symboly  $p_{ij}$  označují prvky matice  $P$  dimenze 6 x 3, odpovídající šesti bázovým funkcím  $N_j$  a třem bázovým funkcím tlaku  $H_j$ :

$a_{11}^x$	0	$p_{11}^x$	$a_{12}^x$	0	$p_{12}^x$	$a_{13}^x$	0	$p_{13}^x$	$a_{14}^x$	0	$a_{15}^x$	0	$a_{16}^x$	0
0	$a_{11}^y$	$p_{11}^y$	0	$a_{12}^y$	$p_{12}^y$	0	$a_{13}^y$	$p_{13}^y$	0	$a_{14}^y$	0	$a_{15}^y$	0	$a_{16}^y$
$p_{11}^x$	$p_{11}^y$	0	$p_{21}^x$	$p_{21}^y$	0	$p_{31}^x$	$p_{31}^y$	0	$p_{41}^x$	$p_{41}^y$	$p_{51}^x$	$p_{51}^y$	$p_{61}^x$	$p_{61}^y$
$a_{21}^x$	0	$p_{21}^x$	$a_{22}^x$	0	$p_{22}^x$	$a_{23}^x$	0	$p_{23}^x$	$a_{24}^x$	0	$a_{25}^x$	0	$a_{26}^x$	0
0	$a_{21}^y$	$p_{21}^y$	0	$a_{22}^y$	$p_{22}^y$	0	$a_{23}^y$	$p_{23}^y$	0	$a_{24}^y$	0	$a_{25}^y$	0	$a_{26}^y$
$p_{12}^x$	$p_{12}^y$	0	$p_{22}^x$	$p_{22}^y$	0	$p_{32}^x$	$p_{32}^y$	0	$p_{42}^x$	$p_{42}^y$	$p_{52}^x$	$p_{52}^y$	$p_{62}^x$	$p_{62}^y$
$a_{31}^x$	0	$p_{31}^x$	$a_{32}^x$	0	$p_{32}^x$	$a_{33}^x$	0	$p_{33}^x$	$a_{34}^x$	0	$a_{35}^x$	0	$a_{36}^x$	0
0	$a_{31}^y$	$p_{31}^y$	0	$a_{32}^y$	$p_{32}^y$	0	$a_{33}^y$	$p_{33}^y$	0	$a_{34}^y$	0	$a_{35}^y$	0	$a_{36}^y$
$p_{13}^x$	$p_{13}^y$	0	$p_{23}^x$	$p_{23}^y$	0	$p_{33}^x$	$p_{33}^y$	0	$p_{43}^x$	$p_{43}^y$	$p_{53}^x$	$p_{53}^y$	$p_{63}^x$	$p_{63}^y$
$a_{41}^x$	0	$p_{41}^x$	$a_{42}^x$	0	$p_{42}^x$	$a_{43}^x$	0	$p_{43}^x$	$a_{44}^x$	0	$a_{45}^x$	0	$a_{46}^x$	0
0	$a_{41}^y$	$p_{41}^y$	0	$a_{42}^y$	$p_{42}^y$	0	$a_{43}^y$	$p_{43}^y$	0	$a_{44}^y$	0	$a_{45}^y$	0	$a_{46}^y$
$a_{51}^x$	0	$p_{51}^x$	$a_{52}^x$	0	$p_{52}^x$	$a_{53}^x$	0	$p_{53}^x$	$a_{54}^x$	0	$a_{55}^x$	0	$a_{56}^x$	0
0	$a_{51}^y$	$p_{51}^y$	0	$a_{52}^y$	$p_{52}^y$	0	$a_{53}^y$	$p_{53}^y$	0	$a_{54}^y$	0	$a_{55}^y$	0	$a_{56}^y$
$a_{61}^x$	0	$p_{61}^x$	$a_{62}^x$	0	$p_{62}^x$	$a_{63}^x$	0	$p_{63}^x$	$a_{64}^x$	0	$a_{65}^x$	0	$a_{66}^x$	0
0	$a_{61}^y$	$p_{61}^y$	0	$a_{62}^y$	$p_{62}^y$	0	$a_{63}^y$	$p_{63}^y$	0	$a_{64}^y$	0	$a_{65}^y$	0	$a_{66}^y$

↑ p1
↑ p2
↑ p3

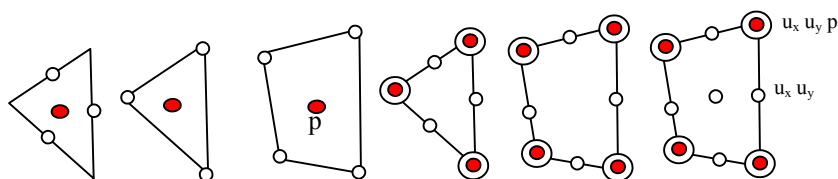
← p1
← p2
← p3

- Vektor uzlových parametrů trojúhelníkového elementu se 4 uzlovými body (3 vrcholy a těžiště) má strukturu  $\{u_{x1} \ u_{y1} \ u_{x2} \ u_{y2} \ u_{x3} \ u_{y3} \ p_4\}$ , a korespondující matice mají rozměr  $7 \times 7$ .

### Výsledky výpočtu a postprocessing

V operaci UVP se žádný postprocessing neprovádí, jediným výsledkem jsou rozložení rychlostí a tlaků, ukládané v jednotlivých časových krocích do souboru \*.OUT.

#### 4.1.5. Navierovy Stokesovy rovnice – formulace v proměnných rychlosti a tlak pro pseudostlačitelnou kapalinu, asymetrické testovací funkce UPWIND (metoda UVPP)



U předchozího řešení se na diagonále matice soustavy objevovaly nuly v řádcích, které odpovídají rovnici kontinuity. To je důsledkem toho, že v rovnici kontinuity se objevují jen složky rychlostí  $u_x$ ,  $u_y$  a nikoliv tlak  $p$ , i když tlak je právě ta veličina, která by měla být rovnicí kontinuity popisována (chápeme-li NS rovnice jako rovnice pro popis složek rychlostí). Pokud je pro řešení výsledné soustavy rovnic použita eliminační metoda, nemělo by to být na závadu, ale je to překážkou pro metody explicitní. Proto je v tomto odstavci testována metoda vycházející z rovnice kontinuity v níž se tlak vyskytuje – rovnice kontinuity je modifikována pro tekutiny pseudostlačitelné.

#### Kartézský souřadný systém

Uvažujme podobnou formulaci problému jako v předchozím odstavci, přesněji úplně stejné Navierovy Stokesovy rovnice pro nestacionární tok nestlačitelné Newtonské kapaliny

$$\rho \left( \frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) = - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left( \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right) + \rho g_x (1 - \beta T) \quad (1)$$

$$\rho \left( \frac{\partial u_y}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) = - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left( \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} \right) + \rho g_y (1 - \beta T) \quad (2)$$

a pozměněnou rovnicí kontinuity s časovou derivací tlaku

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} = - \frac{1}{\lambda} \frac{\partial p}{\partial t} \quad [\lambda = \text{Pa}] \text{ modul objemové stlačitelnosti} \quad (3)$$

Poznámka:

Rovnice kontinuity pro stlačitelnou tekutinu má tvar  $\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} = - \frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt}$  kde  $D\rho/Dt$  je materiálová derivace hustoty.

Uvažujme-li lineární vztah mezi hustotou a tlakem  $\rho = \rho_0 + p/c^2$ , kde  $c$  je rychlost zvuku, získáme rovnici

$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} = - \frac{1}{\rho_0 c^2} \frac{Dp}{Dt}$  která odpovídá rovnici kontinuity (3). Je patrné, že  $\lambda$  [Pa] by mělo být značně veliké číslo řádu  $10^9$ , neboť rychlost zvuku v kapalinách je řádově  $10^3$  m/s.

Na rovnice rovnováhy (bilance hybnosti) lze použít metodu vážených residuí stejným způsobem jako v předchozí kapitole, tj. s kvadratickými bázovými funkcemi  $N$  pro rychlosti, lineárními bázovými funkcemi  $H$  pro tlak a s asymetrickými testovacími funkcemi  $W$

$$u_x(x, y) = N_j(x, y)u_{xj}, \quad u_y(x, y) = N_j(x, y)u_{yj}, \quad p(x, y) = H_j(x, y)p_j, \quad (4)$$

$$W(x, y) = N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \right), \quad (5)$$

Rovnice (1-2) jsou stejné jako v předchozím a stejný je pochopitelně i výsledek.

Odlíšnost se týká pouze rovnice kontinuity, kde se jako testovací funkce použijí bázové funkce pro tlak  $H_i$  (bez asymetrické složky)

$$Q_{ij}^x u_{xj} + Q_{ij}^y u_{yj} = -\frac{1}{\lambda \Delta t} H_{ij} (p_j - p_j^0) \quad (6)$$

a prvky matic  $Q, H$  jsou definovány integrály

$$Q_{ij}^x = -P_{ji}^x = \iint_{\Omega} H_i \frac{\partial N_j}{\partial x} d\Omega, \quad Q_{ij}^y = -P_{ji}^y = \iint_{\Omega} H_i \frac{\partial N_j}{\partial y} d\Omega \quad H_{ij} = \iint_{\Omega} H_i H_j d\Omega \quad (7)$$

### Cylindrický souřadný systém

Stejně jako v předchozím příkladě lze aplikovat výše uvedený postup i na případ proudění v cylindrickém souřadném systému – přepíšeme opět jen rovnici kontinuity

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial r u_r}{\partial r} = -\frac{1}{\lambda} \frac{\partial p}{\partial t} \quad (8)$$

s výsledkem

$$Q_{ij}^x u_{xj} + Q_{ij}^r u_{rj} = -\frac{1}{\lambda \Delta t} H_{ij} (p_j - p_j^0) \quad (9)$$

kde

$$Q_{ij}^x = \iint_{\Omega} H_i \frac{\partial N_j}{\partial x} d\Omega, \quad Q_{ij}^r = \iint_{\Omega} H_i \frac{1}{r} \frac{\partial r N_j}{\partial r} d\Omega \quad H_{ij} = \iint_{\Omega} H_i H_j d\Omega \quad (10)$$

Matice  $Q$  jsou až na znaménko totožné s transponovanými maticemi  $P$ .

### Implementace

Operace je implementována pro 6-ti a 4-uzlové trojúhelníky.

- Vektor uzlových parametrů trojúhelníkového elementu se 6 uzlovými body má strukturu  $\{u_{x1} \ u_{y1} \ p_1 \ u_{x2} \ u_{y2} \ p_2 \ u_{x3} \ u_{y3} \ p_3 \ u_{x4} \ u_{y4} \ u_{x5} \ u_{y5} \ u_{x6} \ u_{y6} \}$ , a korespondující matice mají rozměr 15 x 15.
- Vektor uzlových parametrů trojúhelníkového elementu se 4 uzlovými body má strukturu  $\{u_{x1} \ u_{y1} \ u_{x2} \ u_{y2} \ u_{x3} \ u_{y3} \ p_4\}$ , a korespondující matice mají rozměr 7 x 7.

Struktura matice soustavy pro 6ti uzlový trojúhelník je znázorněna na následujícím schematu, kde symboly  $a_{ij}$  označují prvky matice  $A$  s dimenzí 6 x 6, která odpovídá šesti bázovým funkcím  $N$  pro rychlosti, symboly  $p_{ij}$  označují prvky matice  $P$  dimenze 6 x 3, odpovídající šesti bázovým funkcím  $N$  a

třem bázovým funkcím tlaku  $H$  a symboly  $h_{ij}$  jsou integrály součinu bázových funkcí tlaku – tyto členy také představují jedinou odchylku vůči předchozímu řešení :

$a_{11}^x$	0	$p_{11}^x$	$a_{12}^x$	0	$p_{12}^x$	$a_{13}^x$	0	$p_{13}^x$	$a_{14}^x$	0	$a_{15}^x$	0	$a_{16}^x$	0
0	$a_{11}^y$	$p_{11}^y$	0	$a_{12}^y$	$p_{12}^y$	0	$a_{13}^y$	$p_{13}^y$	0	$a_{14}^y$	0	$a_{15}^y$	0	$a_{16}^y$
$p_{11}^x$	$p_{11}^y$	$h_{11}$	$p_{21}^x$	$p_{21}^y$	$h_{12}$	$p_{31}^x$	$p_{31}^y$	$h_{13}$	$p_{41}^x$	$p_{41}^y$	$p_{51}^x$	$p_{51}^y$	$p_{61}^x$	$p_{61}^y$
$a_{21}^x$	0	$p_{21}^x$	$a_{22}^x$	0	$p_{22}^x$	$a_{23}^x$	0	$p_{23}^x$	$a_{24}^x$	0	$a_{25}^x$	0	$a_{26}^x$	0
0	$a_{21}^y$	$p_{21}^y$	0	$a_{22}^y$	$p_{22}^y$	0	$a_{23}^y$	$p_{23}^y$	0	$a_{24}^y$	0	$a_{25}^y$	0	$a_{26}^y$
$p_{12}^x$	$p_{12}^y$	$h_{21}$	$p_{22}^x$	$p_{22}^y$	$h_{22}$	$p_{32}^x$	$p_{32}^y$	$h_{23}$	$p_{42}^x$	$p_{42}^y$	$p_{52}^x$	$p_{52}^y$	$p_{62}^x$	$p_{62}^y$
$a_{31}^x$	0	$p_{31}^x$	$a_{32}^x$	0	$p_{32}^x$	$a_{33}^x$	0	$p_{33}^x$	$a_{34}^x$	0	$a_{35}^x$	0	$a_{36}^x$	0
0	$a_{31}^y$	$p_{31}^y$	0	$a_{32}^y$	$p_{32}^y$	0	$a_{33}^y$	$p_{33}^y$	0	$a_{34}^y$	0	$a_{35}^y$	0	$a_{36}^y$
$p_{13}^x$	$p_{13}^y$	$h_{31}$	$p_{23}^x$	$p_{23}^y$	$h_{32}$	$p_{33}^x$	$p_{33}^y$	$h_{33}$	$p_{43}^x$	$p_{43}^y$	$p_{53}^x$	$p_{53}^y$	$p_{63}^x$	$p_{63}^y$
$a_{41}^x$	0	$p_{41}^x$	$a_{42}^x$	0	$p_{42}^x$	$a_{43}^x$	0	$p_{43}^x$	$a_{44}^x$	0	$a_{45}^x$	0	$a_{46}^x$	0
0	$a_{41}^y$	$p_{41}^y$	0	$a_{42}^y$	$p_{42}^y$	0	$a_{43}^y$	$p_{43}^y$	0	$a_{44}^y$	0	$a_{45}^y$	0	$a_{46}^y$
$a_{51}^x$	0	$p_{51}^x$	$a_{52}^x$	0	$p_{52}^x$	$a_{53}^x$	0	$p_{53}^x$	$a_{54}^x$	0	$a_{55}^x$	0	$a_{56}^x$	0
0	$a_{51}^y$	$p_{51}^y$	0	$a_{52}^y$	$p_{52}^y$	0	$a_{53}^y$	$p_{53}^y$	0	$a_{54}^y$	0	$a_{55}^y$	0	$a_{56}^y$
$a_{61}^x$	0	$p_{61}^x$	$a_{62}^x$	0	$p_{62}^x$	$a_{63}^x$	0	$p_{63}^x$	$a_{64}^x$	0	$a_{65}^x$	0	$a_{66}^x$	0
0	$a_{61}^y$	$p_{61}^y$	0	$a_{62}^y$	$p_{62}^y$	0	$a_{63}^y$	$p_{63}^y$	0	$a_{64}^y$	0	$a_{65}^y$	0	$a_{66}^y$

↑ p1
↑ p2
↑ p3

4.1.6. Navierovy Stokesovy rovnice – eliminace tlaku metodou pokutové funkce, asymetrické testovací funkce UPWIND (název metody PENS)



Ještě drastičtější modifikací rovnice kontinuity lze dosáhnout úplně eliminace tlaku z rovnic popisu proudového pole. Je to aplikace penalizační metody nebo metody pokutové funkce (odtud název PENalty Navier Stokes).

Kartézský souřadný systém

Uvažujme opět Navierovy Stokesovy rovnice pro nestacionární tok Newtonské kapaliny

$$\rho\left(\frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y}\right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2}\right) + \rho g_x(1 - \beta T) \quad (1)$$

$$\rho\left(\frac{\partial u_y}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y}\right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu\left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2}\right) + \rho g_y(1 - \beta T). \quad (2)$$

Rovnici kontinuity pro nestlačitelnou kapalinu tentokrát nahradíme rovnicí

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} = -\frac{p}{\lambda}, \quad \lambda[\text{Pa.s}] \text{ má rozměr objemové viskozity} \quad (3)$$

kde  $\lambda$  je penalizační parametr, který by měl být natolik veliký, aby pravá strana byla pro typické hodnoty tlaku  $p(x,y)$  prakticky nulová. Znaménko minus odpovídá tomu, že expanze objemu (kladná hodnota divergence rychlosti) způsobí podtlak. Volba parametru  $\lambda$  rozhoduje o úspěšnosti či neúspěšnosti řešení: příliš malá hodnota znamená to, že nebude splněna rovnice kontinuity, příliš vysoká hodnota zase potlačí rovnice bilance hybnosti (všechny rovnice pak vlastně vyjadřují jen požadavek na splnění rovnice kontinuity a ten nezaručuje jednoznačnost řešení – vysoká hodnota  $\lambda$  se projeví ztrátou konvergence).

Dosadíme-li za tlak  $p$  z rov.(3) do rovnic bilance hybnosti (1,2), získáme dvojici rovnic pro dvojici neznámých složek rychlosti

$$\rho\left(\frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y}\right) = \lambda\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y \partial x}\right) + \mu\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2}\right) + \rho g_x(1 - \beta T) \quad (4)$$

$$\rho\left(\frac{\partial u_y}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y}\right) = \lambda\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2}\right) + \mu\left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2}\right) + \rho g_y(1 - \beta T) \quad (5)$$

Na tyto rovnice bilance hybnosti aplikujme metodu vážených residuí s asymetrickými testovacími funkcemi (Petrof Galerkin), viz. Zienkiewicz, díl III. str.27

$$u_x(x, y) = N_j(x, y)u_{xj}, \quad u_y(x, y) = N_j(x, y)u_{yj}, \quad (6)$$

$$W(x, y) = N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \right), \quad (7)$$

kde  $h$  je charakteristický rozměr elementu a pro optimální hodnotu koeficientu  $\alpha$  platí vztah

$$\alpha_{opt} = \coth Pe - \frac{1}{Pe}, \quad Pe = \frac{|u| h \rho}{2\mu}. \quad (8)$$

Jako bázové funkce pro aproximaci rychlostí  $N_j(x, y)$  lze použít libovolné polynomy (lineární, kvadratické, ...), které nemusí zajišťovat spojitost derivací, stačí, aby první derivace byly integrovatelné s kvadrátem.

Bilance hybnosti ve směrech  $x, y$  pak přejdou na rovnice

$$M_{ij} \frac{\partial u_{xj}}{\partial t} + A_{ij}^x u_{xj} + P_{ij}^x u_{yj} = b_i^x \quad (9)$$

$$M_{ij} \frac{\partial u_{yj}}{\partial t} + A_{ij}^y u_{yj} + P_{ij}^y u_{xj} = b_i^y \quad (10)$$

kde

$$M_{ij} = \iint_{\Omega} \rho N_i N_j d\Omega \quad (11)$$

$$A_{ij}^x = \iint_{\Omega} \left[ \rho \left[ N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \right) \right] \left( u_x \frac{\partial N_j}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_j}{\partial y} \right) + \left( \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} \right) (\mu + \lambda) + \mu \left( \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} \right) \right] d\Omega \quad (12)$$

$$A_{ij}^y = \iint_{\Omega} \left[ \rho \left[ N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \right) \right] \left( u_x \frac{\partial N_j}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_j}{\partial y} \right) + \left( \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} \right) (\mu + \lambda) + \mu \left( \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} \right) \right] d\Omega \quad (13)$$

V předchozích integrálech není uvažován vliv asymetrické testovací funkce na vazké ani na tlakové členy. Je to účelová konstrukce, protože použití Greenovy věty by vedlo k tomu, že by se v integrandu objevily derivace druhého řádu. Totéž platí i pro následující matici  $P$

$$P_{ij}^x = P_{ij}^y = \frac{\lambda}{2} \iint_{\Omega} \left[ \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial y} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial x} \right] d\Omega. \quad (14)$$

Asymetrickou váhovou funkci lze ponechat ve vektorech pravé strany, které popisují příspěvek vztlaku

$$b_i^x = \iint_{\Omega} \left[ N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \right) \right] \rho g_x (1 - \beta T) d\Omega \quad (15)$$

$$b_i^y = \iint_{\Omega} \left[ N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \right) \right] \rho g_y (1 - \beta T) d\Omega \quad (16)$$

Tím je dokompletována formulace v kartézském souřadném systému.

## Cylindrický souřadný systém

Navierovy Stokesovy rovnice zůstávají beze změny

$$\rho\left(\frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_r \frac{\partial u_x}{\partial r}\right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu\left[\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}\left(r \frac{\partial u_x}{\partial r}\right)\right] + \rho g_x(1 - \beta T) \quad (17)$$

$$\rho\left(\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_r}{\partial x} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r}\right) = -\frac{\partial p}{\partial r} + \mu\left[\frac{\partial^2 u_r}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r} \frac{\partial r u_r}{\partial r}\right)\right] + \rho g_r(1 - \beta T) \quad (18)$$

a modifikovaná rovnice kontinuity má tvar

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial r u_r}{\partial r} = -\frac{p}{\lambda} \quad (19)$$

Matice  $A, P$  jsou pro tento případ popisovány integrály

$$A_{ij}^x = \iint_{\Omega} \left[ \rho \left[ N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_i}{\partial r} \right) \right] \left( u_x \frac{\partial N_j}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_j}{\partial r} \right) + \right. \\ \left. + (\mu + \lambda) \left( \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} \right) + \mu \left( \frac{\partial N_i}{\partial r} \frac{\partial N_j}{\partial r} - \frac{N_i}{r} \frac{\partial N_j}{\partial r} \right) \right] d\Omega \quad (20)$$

$$A_{ij}^r = \iint_{\Omega} \left[ \rho \left[ N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_i}{\partial r} \right) \right] \left( u_x \frac{\partial N_j}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_j}{\partial r} \right) + \right. \\ \left. + \mu \left( \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} \right) + (\mu + \lambda) \left( \frac{\partial N_i}{\partial r} \frac{\partial N_j}{\partial r} + \frac{N_j}{r} \frac{\partial N_i}{\partial r} \right) \right] d\Omega \quad (21)$$

$$P_{ij}^x = \lambda \iint_{\Omega} \left[ \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial r} + \frac{1}{r} N_j \frac{\partial N_i}{\partial x} \right] d\Omega \quad (22)$$

$$P_{ij}^r = \lambda \iint_{\Omega} \left[ \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial r} \right] d\Omega \quad (23)$$

a vektory pravé strany se nemění.

## Diskretizace času

Diferenční náhradou časové derivace v soustavě diferenciálních rovnic (9-10) získáme finální soustavu algebraických rovnic pro uzlové rychlosti v každém časovém kroku:

$$(M_{ij} + \Delta t A_{ij}^x) u_{xj} + \Delta t P_{ij}^x u_{yj} = M_{ij} u_{xj}^0 + \Delta t b_i^x \quad (24)$$

$$(M_{ij} + \Delta t A_{ij}^y) u_{yj} + \Delta t P_{ij}^y u_{xj} = M_{ij} u_{yj}^0 + \Delta t b_i^y \quad (25)$$



## Implementace

Na rozdíl od předchozích hybridních elementů (s kombinací uzlových parametrů rychlosti a tlak) je možné použít širší škálu bázových funkcí. Proto je varianta PENS implementována pro troj i čtyřúhelníkové elementy s libovolným počtem uzlů.

## Výsledky výpočtu a postprocessing

U metody řešení PENS se žádný postprocessing neprovádí, jediným výsledkem je rozložení rychlostí ukládané v jednotlivých časových krocích do souboru \*.OUT.

#### 4.1.7. Proudění s minimální dissipací a kinetickou energií (metoda nejmenších čtverců, název metody MIDE)



V kapitole 4.1.1 byla uvedena metoda řešení spočívající v minimalizaci dissipované energie, přičemž výsledkem byla proudová funkce, automaticky splňující rovnici kontinuity. Stejný přístup lze použít i bez proudové funkce, tj. s primitivními proměnnými – rychlostmi  $u_x$ ,  $u_y$  a požadavek na splnění rovnice kontinuity formulovat zvlášť jako jednu část minimalizovaného funkcionálu. Princip, na kterém bude následující řešení založeno, vychází z funkcionálu, který je součtem dissipované energie, kinetické energie a kvadrátu rezidua rovnice kontinuity. Není to příliš korektní formulace, např. z toho důvodu, že výsledkem řešení bude soustava lineárních (a nikoliv nelineárních) rovnic. Chování této aproximace snad ale za pozornost stojí, především pro její jednoduchost.

#### Kartézský souřadný systém

Funkcionál, který zahrnuje dissipovanou i kinetickou energii dvourozměrného proudění je dán integrálem (jehož rozměr je W/m – výkon vztažený na 1 m šířky kanálu)

$$F(u_x, u_y) = \iint_{\Omega} \left\{ \mu \left[ 2 \left( \frac{\partial u_x}{\partial x} \right)^2 + 2 \left( \frac{\partial u_y}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right)^2 \right] + \frac{\rho}{2} (u_x^2 + u_y^2) + \lambda \left( \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right)^2 \right\} dx dy \quad (1)$$

přičemž poslední člen integrandu je kvadrát rezidua rovnice kontinuity, násobený parametrem  $\lambda$ , který hraje podobnou roli jako penalizační faktor u předchozí metody PENS (parametr  $\lambda$  má i stejný rozměr [Pa.s] objemové viskozity).

Vzhledem k tomu, že v integrandu jsou nejvýše první derivace rychlostí, lze pro jejich aproximaci použít víceméně libovolné (například i lineární) bázové funkce

$$u_x(x, y) = N_i(x, y)u_{xi}, \quad u_y(x, y) = N_i(x, y)u_{yi} \quad (2)$$

které lze dosadit do funkcionálu (1) a tím ho převést na funkci uzlových parametrů, rychlostí  $u_{xi}$   $u_{yi}$ . Minimalizací této funkce, tj. z podmínek

$$\frac{\partial F}{\partial u_{xi}} = \frac{\partial F}{\partial u_{yi}} = 0 \quad (3)$$

získáme tuto soustavu lineárních algebraických rovnic pro uzlové parametry

$$K_{ij}^{xx} u_{xj} + K_{ij}^{xy} u_{yj} = 0 \quad (4)$$

$$K_{ij}^{yx} u_{xj} + K_{ij}^{yy} u_{yj} = 0 \quad (5)$$

kde matice K jsou definovány následujícími integrály

$$K_{ij}^{xx} = \iint_{\Omega} \left[ (4\mu + 2\lambda) \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + 2\mu \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} + \rho N_i N_j \right] dx dy \quad (6)$$

$$K_{ij}^{xy} = \iint_{\Omega} (2\lambda \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial y} + 2\mu \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial x}) dx dy \quad (7)$$

$$K_{ij}^{yy} = \iint_{\Omega} [(4\mu + 2\lambda) \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} + 2\mu \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \rho N_i N_j] dx dy \quad (8)$$

$$K_{ij}^{yx} = \iint_{\Omega} (2\lambda \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial x} + 2\mu \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial y}) dx dy \quad (9)$$

Tím je celá formulace uzavřena.

### Cylindrický souřadný systém

Funkcionál, který je analogií (1) je dán vztahem

$$F(u_x, u_r) = \iint_{\Omega} r \{ \mu [2(\frac{\partial u_x}{\partial x})^2 + 2(\frac{\partial u_r}{\partial r})^2 + 2(\frac{u_r}{r})^2 + (\frac{\partial u_x}{\partial r} + \frac{\partial u_r}{\partial x})^2] + \frac{\rho}{2} (u_x^2 + u_r^2) + \lambda (\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial r u_r}{\partial r})^2 \} dx dr \quad (10)$$

a stejným postupem jako u kartézského souřadného systému získáme soustavu rovnic pro uzlové parametry

$$K_{ij}^{xx} u_{xj} + K_{ij}^{xr} u_{rj} = 0 \quad (11)$$

$$K_{ij}^{rx} u_{xj} + K_{ij}^{rr} u_{rj} = 0 \quad (12)$$

s maticemi  $K$

$$K_{ij}^{xx} = \iint_{\Omega} r [(4\mu + 2\lambda) \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + 2\mu \frac{\partial N_i}{\partial r} \frac{\partial N_j}{\partial r} + \rho N_i N_j] dx dr \quad (13)$$

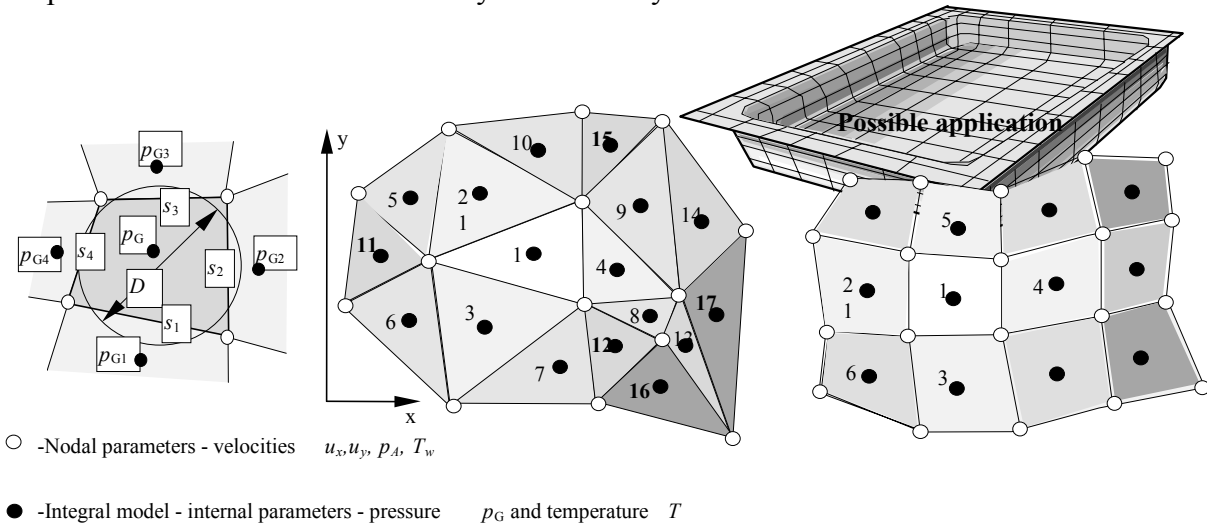
$$K_{ij}^{xr} = 2 \iint_{\Omega} r (\lambda \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial r} + \mu \frac{\partial N_i}{\partial r} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \lambda \frac{N_j}{r} \frac{\partial N_i}{\partial x}) dx dr \quad (14)$$

$$K_{ij}^{rx} = 2 \iint_{\Omega} r (\mu \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial r} + \lambda \frac{\partial N_i}{\partial r} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \lambda \frac{N_i}{r} \frac{\partial N_j}{\partial x}) dx dr \quad (15)$$

$$K_{ij}^{rr} = \iint_{\Omega} r [(4\mu + 2\lambda) \frac{\partial N_i}{\partial r} \frac{\partial N_j}{\partial r} + 2\mu \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + (\rho + \frac{4\mu + 2\lambda}{r^2}) N_i N_j + \frac{2\lambda}{r} (N_i \frac{\partial N_j}{\partial r} + N_j \frac{\partial N_i}{\partial r})] dx dr \quad (16)$$

#### 4.1.8. Proudění s minimální kinetickou energií (metoda MIKE, MInimum Kinetic Energy)

Tato poněkud nezvykle formulovaná úloha byla motivována problémem expanze škrobové suspenze v relativně tenké štěrbině vyhřívací formy.



Pro analýzu tohoto procesu byl navržen integrální model, který popisuje to, co se odehrává v průřezu stěny, tj. jak se mění v čase příčný teplotní profil, porozita látky, jak se vyvíjí povrchová krusta, jaký je hmotnostní průtok odpařované vody a také to, do jaké míry látka expanduje, což lze vyjádřit rovnicí kontinuity pro dvourozměrný tok ve štěrbině formy

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} = \Phi(t, x, y) \quad (1)$$

Jako model toku byla navržena nejjednodušší možná formulace, založená na minimalizaci integrálu

$$\iint_{\Omega} (u_x^2 + u_y^2) dx dy \equiv \min \quad (2)$$

který na první pohled představuje princip minima kinetické energie, ale v uvažovaném kontextu jde o princip minima práce, konané třecími silami na povrchu formy (za předpokladu, že třecí síly jsou úměrné rychlosti pohybu expandující látky).

Problém hledání vázaného extrému lze řešit metodou Lagrangeových multiplikátorů: Místo hledání minima funkcionálu (2) a eliminace omezující podmínky (1) se hledá minimum funkcionálu

$$F(u_x, u_y, p) = \iint_{\Omega} [u_x^2 + u_y^2 - p(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} - \Phi)] d\Omega \quad (3)$$

již bez omezujících podmínek, ale s rozšířením minimalizovaného funkcionálu o další parametr - Lagrangeův multiplikátor  $p$ . Pro aproximaci rychlostí a Lagrangeova multiplikátoru můžeme použít stejné báze funkce jako v metodě UVP (podobnost rovnic je očividná, Lagrangeův multiplikátor hraje roli tlaku)

$$u_x = N_j u_{xj} \quad u_y = N_j u_{yj} \quad p = H_j p_j \quad (4)$$

Po dosazení této aproximace do funkcionálu (3) získáme z podmínek minima soustavu rovnic

$$2M_{ij}u_{xj} + P_{ij}^x p_j = 0 \quad (5)$$

$$2M_{ij}u_{yj} + P_{ij}^y p_j = 0 \quad (6)$$

$$P_{ij}^x u_{xj} + P_{ij}^y u_{yj} = b_i \quad (7)$$

kde

$$M_{ij} = \iint_{\Omega} N_i N_j d\Omega \quad (8)$$

$$P_{ij}^x = -\iint_{\Omega} H_j \frac{\partial N_i}{\partial x} d\Omega \quad (9)$$

$$P_{ij}^y = -\iint_{\Omega} H_j \frac{\partial N_i}{\partial y} d\Omega \quad (10)$$

$$b_i(t) = -\iint_{\Omega} H_i \Phi d\Omega \quad (11)$$

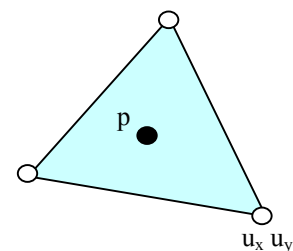
Výsledkem řešení soustavy rovnic (5-7) doplněné eventuálně okrajovými podmínkami pro rychlosti a alespoň jednou hodnotou  $p_j$  bude vektor složek rychlostí a vektor Lagrangeových multiplikátorů – tlaků, které splňují kritérium nejmenšího integrálu čtverce rychlosti a současně splňují rovnici kontinuity. Na rozdíl od metody UVP je celý problém lineární a není nutné iterovat. Řešení existuje i v případě, že není předepsána žádná okrajová podmínka pro rychlosti – to je právě případ volně expandující látky v nezaplněné formě.

### Implementace

U hybridního trojúhelníkového elementu jsou implementovány dvě varianty bázevých funkcí:

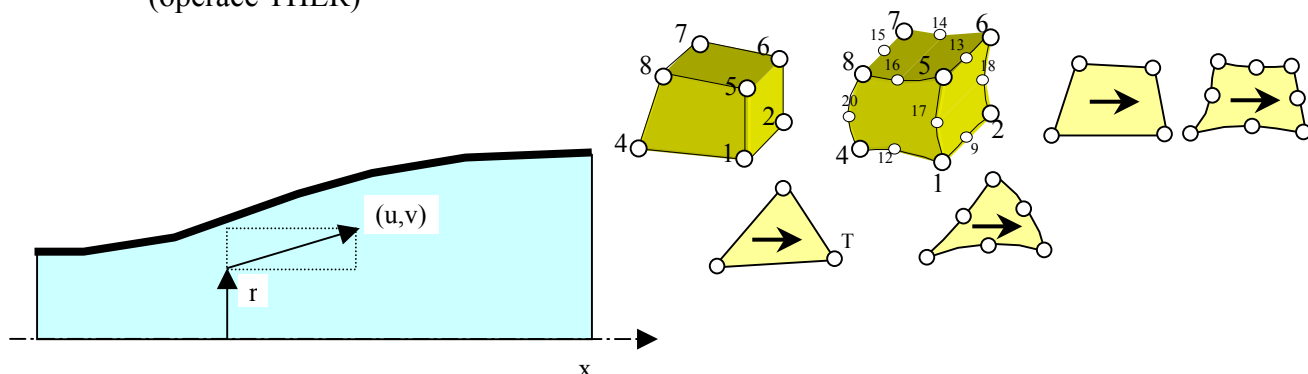
- Lineární aproximace rychlostí bází  $N_1, N_2, N_3$  a konstantní bázevá funkce v elementu  $H_1$ .  
Odpovídající matice soustavy má rozměr 7 x 7

$$\begin{bmatrix} 2M_{11} & 0 & 2M_{12} & 0 & 2M_{13} & 0 & P_{11}^x \\ 0 & 2M_{11} & 0 & 2M_{12} & 0 & 2M_{13} & P_{11}^y \\ 2M_{21} & 0 & 2M_{22} & 0 & 2M_{23} & 0 & P_{21}^x \\ 0 & 2M_{21} & 0 & 2M_{22} & 0 & 2M_{23} & P_{21}^y \\ 2M_{31} & 0 & 2M_{32} & 0 & 2M_{33} & 0 & P_{31}^x \\ 0 & 2M_{31} & 0 & 2M_{32} & 0 & 2M_{33} & P_{31}^y \\ P_{11}^x & P_{11}^y & P_{21}^x & P_{21}^y & P_{31}^x & P_{31}^y & 0 \end{bmatrix}$$



- Kvadratické aproximace rychlostí a lineární aproximace tlaku vede na matici soustavy s rozměrem 15x15, která svou strukturou odpovídá matici použité u elementu UVP.

4.1.9. Teplotní pole ve známém rychlostním poli kapaliny s vnitřním ohmickým ohřevem (operace THER)



Fourierova Kirchhoffova rovnice v cylindrickém souřadném systému má tvar

$$\rho c_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + u_x \frac{\partial T}{\partial x} + u_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \lambda r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \kappa \left[ \left( \frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial U}{\partial r} \right)^2 \right] \quad (1)$$

kde poslední člen pravé strany vyjadřuje přímý ohmický ohřev a  $U$  je elektrický potenciál (napětí). Předpokládejme, že na části hranice  $\Gamma$  dochází k přenosu tepla, který je popisován okrajovou podmínkou třetího druhu

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = k(T_e - T). \quad (2)$$

Aproximujme teploty bázovými funkcemi  $N_j$  a použijme metodu vážených residuí s asymetrickými testovacími funkcemi

$$W(x, y) = N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_i}{\partial r} \right), \quad (3)$$

kde součinitel asymetrie  $\alpha \in (0, 1)$  závisí na lokální hodnotě Pecletova čísla elementu  $Pe = \frac{|u| h \rho c_p}{2\lambda}$

Získáme tak soustavu rovnic

$$(M_{ij} + \Delta t A_{ij}) T_j = M_{ij} T_j^0 + \Delta t b_i \quad (4)$$

kde

$$M_{ij} = \iint_{\Omega} \rho c_p r N_i N_j d\Omega \quad (5)$$

$$A_{ij} = \iint_{\Omega} r \left[ \rho c_p \left[ N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_i}{\partial r} \right) \right] \left( u_x \frac{\partial N_j}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_j}{\partial r} \right) + \lambda \left( \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial r} \frac{\partial N_j}{\partial r} \right) \right] d\Omega + \int_{\Gamma} r k N_i N_j d\Gamma \quad (6)$$

$$b_i = \iint_{\Omega} r \kappa \left[ N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} \left( u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_i}{\partial r} \right) \right] \left[ \left( \frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial U}{\partial r} \right)^2 \right] d\Omega + \int_{\Gamma} r k T_e N_i d\Gamma \quad (7)$$

Je zřejmé, že formulace v kartézském souřadném systému je naprosto identická, v integrálech se jenom vynechá násobení  $r$ .

### Programová realizace.

V tomto případě umožňuje FEMINA používat trojúhelníkové elementy se třemi nebo šesti uzlovými body (T3,T6) nebo i zakřivené čtyřúhelníkové elementy se čtyřmi nebo osmi uzly (Q4,Q8). Bázové funkce v trojúhelníkových elementech (lineární nebo kvadratické) počítá procedura FDFT a ve čtyřúhelníkových (isoparametrické bilineární nebo kvadratické) procedura FDFQ.

Integrace se provádí Gaussovou metodou, přičemž je možné zadat různý počet integračních bodů: 1,3,4,7 pro elementy T3,T6 a 1x1, 2x2, 3x3 pro elementy Q4,Q8.

Implementace výpočtu teplotního pole se od předchozích případů odlišuje m.j. i tím, že počítá hraniční integrály na té části hranice, kde je předepsaná okrajová podmínka třetího druhu, tj. přenos tepla přes termický odpor vrstvičky kapaliny. Přičtení těchto integrálů k matici (75) a pravé straně (76) soustavy rovnic lze řešit dvěma způsoby:

- Definovat hraniční elementy (se dvěma nebo třemi uzly) a počítat lokální matice těchto samostatných prvků s rozměrem  $2 \times 2$  nebo  $3 \times 3$ .
- Počítat příspěvky křivkových integrálů přímo při zpracování každého trojúhelníkového nebo čtyřúhelníkového elementu. V tomto případě (který je také použit v operaci THERMAL) je ovšem nutné umět stanovit, které strany zpracovávaného elementu jsou částí hranice s okrajovou podmínkou třetího druhu. Tento problém se řeší na základě informací o parametrech uzlových bodů elementu. Je-li totiž status uzlového parametru teploty (IPU) v rozmezí 11 až 20 znamená to dle konvencí, které jsou zavedeny v programu FEMINA, že v tomto uzlu je předepsána slabá okrajová podmínka.<sup>8</sup>

Nejtěžší problém spočívá v identifikaci *strany* elementu, která je částí hranice, na základě informace o tom, které uzly elementu na této hranici leží (a je jim přiřazena hodnota  $\alpha$ ). Je to snadné u elementů, které mají uzly uprostřed stran (T6,Q8), protože typ tohoto prostředního uzlu určuje typ strany. Např. pro trojúhelníkový element T6 (proměnná NBCR je zjišťovaný počet stran na hranici, a sloupce matice IBCR tvoří uzly těchto stran):

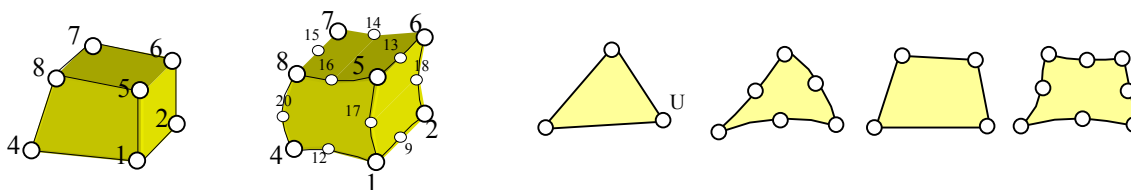
```
C Trojuhelnik se 6 uzly. 1 nebo 2 strany (3 nebo 5 uzlu na hranici)
C NBND je počet uzlu, ležících na hranici.
  NBCR=NBND/2
  DO IB=1,NBCR
C Stredni uzel identifikuje stranu
  IBCR(3,IB)=IBND(NBCR+1+IB)
  IBCR(1,IB)=IBCR(3,IB)-3
  IBCR(2,IB)=IBCR(3,IB)-2
  IF (IBCR(2,IB).GT.3) IBCR(2,IB)=1
ENDDO
```

Nejkomplikovanější je situace u obyčejného trojúhelníkového elementu T3 tehdy, když dvě z jeho tří stran jsou součástí hranice (element se nachází v rohu vyšetřované oblasti). V tomto případě totiž leží všechny uzly elementu na hranici a určit ten z nich, který je společným bodem dvou hraničních stran, vyžaduje provést inspekci matice konektivity (tento "rohový" uzel se nesmí vyskytnout v žádném jiném elementu).

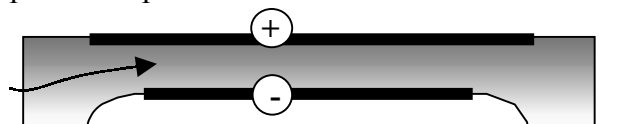
Po určení strany elementu, která je částí hranice  $\Gamma$  se integrály počítají Gaussovou integrací bázových funkcí počítaných procedurou FDCR.

<sup>8</sup> Záporné hodnoty IPU označují silné okrajové podmínky (přímo zadané teploty), hodnoty 0 a vyšší označují volné parametry. Indexy 11 až 20 signalizují slabé okrajové podmínky.

#### 4.1.10. Rozložení elektrického potenciálu (operace ELEC)



Výpočet rozložení elektrického potenciálu (stejně jako např. elektromagnetického pole) není problém transportní, ale s transportními problémy souvisí. Jeho stanovení je totiž nutné pro zjištění intenzity ohřevu (přímý ohmický ohřev, mikrovlnný ohřev), která se objevuje jako zdrojový člen v transportních rovnicích přenosu tepla.



Z matematického hlediska jde o řešení Laplaceovy rovnice, což je vlastně speciální případ předchozí FK rovnice, ale bez setrvačných a zdrojových členů

$$0 = \frac{\partial}{\partial x} \left( \kappa \frac{\partial U}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \kappa r \frac{\partial U}{\partial r} \right) \quad (1)$$

kde  $U$  je elektrický potenciál a  $\kappa$  [S/m] je měrná elektrická vodivost látky, kterou protéká elektrický proud. Na hranici vyšetřované oblasti je buď předepsána hodnota napětí (silná okrajová podmínka) nebo izolace (nulový gradient potenciálu ve směru normály) a eventuálně elektrická vodivost ekvivalentní vrstvy rozhraní  $k_e$  [S/m<sup>2</sup>], reprezentující nedokonalou izolaci

$$\kappa \frac{\partial U}{\partial n} = k_e (U_e - U) \quad (2)$$

kde  $U_e$  je napětí (el.potenciál) vně vyšetřované oblasti.

Diferenciální rovnici (1) s okrajovou podmínkou třetího druhu (2) lze řešit Galerkinovou metodou, tj. použitím identických testovacích a bázeových funkcí  $N_i(x,y)$ . Na bázeové funkce nejsou kladeny vysoké požadavky, takže lze použít prakticky libovolné varianty elementů (trojúhelníky/čtyřúhelníky s lineárními / kvadratickými polynomy). Výsledkem aplikace Galerkinovy metody je soustava algebraických rovnic pro elektrický potenciál

$$A_{ij} U_j = b_i \quad (3)$$

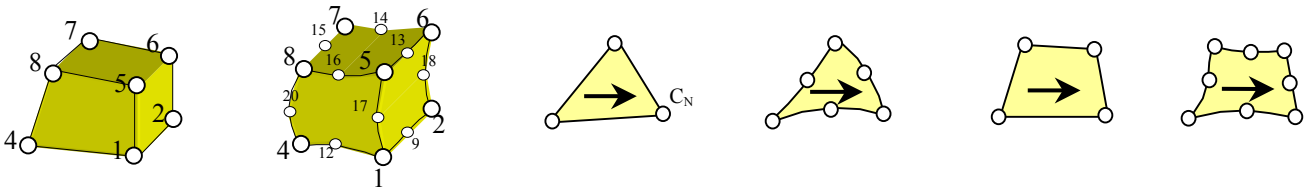
$$A_{ij} = \iint_{\Omega} r \left[ \kappa \left( \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial r} \frac{\partial N_j}{\partial r} \right) \right] d\Omega + \int_{\Gamma} r k_e N_i N_j d\Gamma \quad (4)$$

$$b_i = \int_{\Gamma} r k_e U_e N_i d\Gamma \quad (5)$$

Pro rovinný problém se v integrálech jenom vynechá násobení  $r$ . Programová implementace je totožná s procedurou výpočtu teplotního pole (tj. elementy T3,T6,Q4,Q8 a proměnný počet integračních uzlů).



#### 4.1.11. Transport hmoty s chemickou reakcí prvního řádu (operace CONC)



Řešení transportní rovnice pro rozložení koncentrace složky  $N$  má význam např. při modelování experimentů s nástřikem značkovácí látky, jejichž cílem je stanovení distribuce dob zdržení (to je případ bez reakce) nebo pro modelování reaktoru v němž probíhá jednoduchá chemická reakce, např. denaturace proteinů v mléce.

#### Cylindrický souřadný systém

Rovnici popisující koncentrační pole složky  $N$  má v cylindrickém souřadném systému tvar

$$\frac{\partial c_N}{\partial t} + u_x \frac{\partial c_N}{\partial x} + u_y \frac{\partial c_N}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} (D_N \frac{\partial c_N}{\partial x}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (D_N r \frac{\partial c_N}{\partial r}) - A e^{-E/RT} c_N \quad (1)$$

kde poslední člen pravé strany vyjadřuje spotřebu složky  $N$  chemickou reakcí prvního řádu. Pokud neuvažujeme difuzi složky stěnou zařízení jsou okrajové podmínky buď prvního nebo druhého druhu.

Aproximujme koncentrace bázovými funkcemi  $N_j$  a použijme metodu vážených residuí s asymetrickými testovacími funkcemi

$$W(x, y) = N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} (u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_i}{\partial r}) \quad (2)$$

s optimální hodnotou koeficientu asymetrie  $\alpha$ , který závisí na Pecletově čísle přenosu hmoty

$$\alpha_{opt} = \coth Pe - \frac{1}{Pe}, \quad Pe = \frac{|u| h \rho}{2D_N}. \quad (3)$$

Diferenciální rovnici (1) tak převedeme na soustavu algebraických rovnic

$$(M_{ij} + \Delta t A_{ij}) c_j = M_{ij} c_j^0 \quad (4)$$

kde

$$M_{ij} = \iint_{\Omega} r N_i N_j d\Omega \quad (5)$$

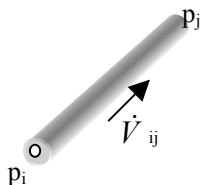
$$A_{ij} = \iint_{\Omega} r \left[ \left[ N_i + \frac{\alpha h}{2|u|} (u_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_i}{\partial r}) \right] (u_x \frac{\partial N_j}{\partial x} + u_r \frac{\partial N_j}{\partial r} + A e^{-E/RT} N_j) + D_N \left( \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial r} \frac{\partial N_j}{\partial r} \right) \right] d\Omega \quad (6)$$

Formulace v kartézském souřadném systému je stejná, v integrálech se jenom vynechá násobení  $r$ .

#### 4.1.12. Potrubní síť – rozložení tlaků (operace FLOW, elementy PIPE2D)

Předpokládejme, že je zadaná kompletní geometrie potrubního systému (délky i průměry potrubních úseků), a termofyzikální parametry kapaliny, která potrubím protéká. Neuvažujeme-li stabilizační úsek proudění, neizotermnost toku, či proměnný průřez potrubí, je gradient tlaku v každém úseku (elementu) konstantní a axiální profil tlaku lineární. Stačí tedy uvažovat jen dvouuzlové elementy s lineárními bázovými funkcemi pro popis tlaků, přičemž tlak je jediným uzlovým parametrem.

##### Potrubní segment



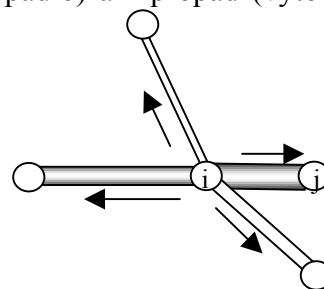
Při řešení tentokrát nepoužijeme ani variační princip, ani diferenciální rovnice, ale omezíme se na jednoduchou průtokovou bilanci. Tlakové ztrátě v elementu spojujícím uzly  $i$  a  $j$  odpovídá objemový průtok

$$\dot{V}_{ij} = \varphi_{ij}(|p_i - p_j|) \cdot (p_i - p_j) \quad (1)$$

Součet orientovaných průtoků  $\dot{V}$  v uzlu, kde není ani zdroj (čerpadlo) ani propad (výtok), musí být nulový, což je vlastně rovnice kontinuity

$$\sum_j \varphi_{ij}(|p_i - p_j|) \cdot (p_i - p_j) = 0 \quad (2)$$

Celou potrubní síť pak popisuje soustava rovnic



$$\begin{bmatrix} \sum_{j=2,3,\dots} \varphi_{1j} & -\varphi_{12} & \dots \\ -\varphi_{21} & \sum_{j=1,3,\dots} \varphi_{2j} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \dots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dot{V}_1 \\ \dot{V}_2 \\ \dots \end{bmatrix} \quad (3)$$

kde  $\dot{V}_1, \dot{V}_2$  jsou nenulové jen v uzlech kde je zdroj, např. pumpe dodávající do sítě kapalinu. Tato globální matice vznikne sestavením lokálních matice elementů

$$[K_{ij}] = \begin{bmatrix} \varphi_{ij} & -\varphi_{ij} \\ -\varphi_{ij} & \varphi_{ij} \end{bmatrix} \quad (4)$$

kde průtokové součinitele závisí na reologických charakteristikách kapaliny, režimu toku a na geometrii potrubního úseku

$$\varphi_{ij} = \frac{\pi R^4}{8\mu L_{ij}}, \quad \text{pro laminární tok Newtonské kapaliny } Re < 2300 \quad (5)$$

nebo

$$\varphi_{ij} = \left( \frac{0.558}{L_{ij}} \right)^{4/7} \frac{(2R)^{19/7}}{(\rho|\Delta p|)^{3/7} \mu^{1/7}}, \quad \text{pro } 2300 < Re < 10^5 \text{ (Blasius)}. \quad (6)$$

V případě, že kapalina je Newtonská a režim toku laminární, jsou průtokové koeficienty  $\varphi$  konstantní a celý problém je lineární. Pokud se vyskytnou potrubní úseky kde to neplatí, je třeba iterovat a vyhodnocovat koeficienty  $\varphi_{ij}$  z rovnice (6) pro hodnoty tlaku z předchozí iterace. Rozhodnutí, zda tok v té které větvi bude laminární či turbulentní je založeno na výpočtu  $Re$ , přičemž se vychází z hypotézy laminárního režimu toku

$$Re = \frac{R^3 |\Delta p|}{4\mu^2 L_{ij}} \quad (7)$$

Verzi FEMINA 3.3 počínaje byl upraven element PIPE2D tak, že v turbulentním režimu proudění je respektována i drsnost stěny potrubí  $k$  a místo Blasiovy korelace (6), která je použita jen jen pro stanovení počátečního “náštrelu”, se aplikují Churchillovy vztahy pro výpočet tlakové ztráty

$$\Delta p = \frac{1}{2} \rho u^2 \left( \lambda \frac{L}{D} + \zeta \right) \quad (7)$$

kde  $\lambda$  je součinitel třecích ztrát (Churchill 1977)

$$\lambda = 8 \left[ \left( \frac{8}{Re} \right)^{12} + \frac{1}{(a+b)^{3/2}} \right]^{1/12} \quad (8)$$

$$a = \left[ 2.457 \ln \frac{1}{\left( \frac{7}{Re} \right)^{0.9} + 0.27 \frac{k}{D}} \right]^{16} \quad b = \left( \frac{37530}{Re} \right)^{16} \quad (9)$$

Parametr  $\zeta$  ve vztahu (7) je součinitel místních ztrát, zadávaný jako parametr elementu RCONST – tím je možné zahrnout vliv dodatečné tlakové ztráty při rozšíření nebo kontrakci trubky a přibližně lze prostřednictvím tohoto parametru modelovat i chování kolena a T-kusů.

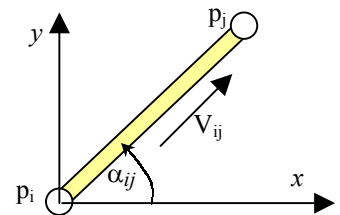
### Hydrostatický tlak

Vliv gravitace se projeví změnou distribuce tlaků i průtoků. Je třeba ho respektovat např. při studiu vlivu vztlačkových sil na přirozenou cirkulaci, vycházejí z vypočtených teplot kapaliny a jí odpovídající hustotě. Průtokovou charakteristiku přímého segmentu (1) je třeba modifikovat

$$\dot{V}_{ij} = \varphi_{ij} [p_i - p_j + \rho L_{ij} (g_y \sin \alpha_{ij} + g_x \cos \alpha_{ij})] \quad (10)$$

a bilance průtoků v uzlu  $i$

$$\sum_j \dot{V}_{ij} = \sum_j \varphi_{ij} (p_i - p_j) + \sum_j \rho L_{ij} \varphi_{ij} (g_y \sin \alpha_{ij} + g_x \cos \alpha_{ij}) = 0 \quad (11)$$



Soustava rovnic pro tlaky v uzlových bodech

$$\begin{bmatrix} \sum_{j=2,3,\dots} \varphi_{1j} & -\varphi_{12} & \dots \\ -\varphi_{21} & \sum_{j=1,3,\dots} \varphi_{2j} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \dots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dot{V}_1 - \sum_i \rho L_{1i} \varphi_{1i} (g_y \sin \alpha_{1i} + g_x \cos \alpha_{1i}) \\ \dot{V}_2 - \sum_i \rho L_{2i} \varphi_{2i} (g_y \sin \alpha_{2i} + g_x \cos \alpha_{2i}) \\ \dots \end{bmatrix} \quad (12)$$

se získá sestavením lokálních matic elementů (uvažujeme element s uzly  $i$  a  $j$ )

$$\begin{bmatrix} \varphi_{ij} & -\varphi_{ij} \\ -\varphi_{ij} & \varphi_{ij} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} p_i \\ p_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\rho L_{ij} \varphi_{ij} (g_y \sin \alpha_{ij} + g_x \cos \alpha_{ij}) \\ \rho L_{ij} \varphi_{ij} (g_y \sin \alpha_{ij} + g_x \cos \alpha_{ij}) \end{bmatrix} \quad (13)$$

Při výpočtu koeficientů  $\varphi_{ij}$  je třeba mít na zřeteli to, že jsou funkcemi rozdílu tlaků  $p_i - p_j$ , které odpovídají pouze třecím ztrátám, respektive hydraulické charakteristice – je tedy třeba odečíst hydrostatický tlak.

### Místní odpory

Součástí potrubní sítě jsou i další komponenty: škrtkové ventily, čerpadla ale třeba i míchané nádoby. Všechny tyto prvky lze chápat jako dvouzlové prvky (2 tlaky a průtok), jenomže s jinou průtokovou charakteristikou. V programu FEMINA je to zařízeno tak, že nestandardní průtokovou charakteristiku elementu  $\varphi_{ij}(\Delta p, Re, D_e, H)$  je možné zadávat jako funkci, jejíž index je ve skupině parametrů EGROU (nulový index znamená trubku). Funkce se definuje úplně stejně jako třeba teplotní závislost termofyzikálních parametrů (tj. buď jako výraz nebo jako tabulka), přičemž jako argumenty lze použít proměnné DP (tlaková diference s již odečteným hydrostatickým tlakem), RE (Reynoldsovo číslo), DE (charakteristický průměr), HE (délka elementu), TEMP (střední teplota elementu).

Poznamenejme, většinu těchto komponent (kolena, ventily) lze modelovat i mnohem jednodušeji elementem PIPE2D tak, že se zadá nenulová hodnota součinitel místních ztrát  $\zeta$ .

#### 4.1.13. Potrubní sítě – teplotní pole, výměníky tepla (operace THER elementy PIPE2D, HEXC)

Uvažujme tutéž potrubní síť jako v předchozím případě, s již vypočtenými tlaky a především průtoky v jednotlivých úsecích. Je tedy známa střední rychlost proudění, a dodáme-li další termofyzikální parametry a údaje vnější teplotě, tepelné izolaci apod. je možné řešit i problém stanovení teplotních profilů v jednotlivých elementech. Na rozdíl od předchozího případu je ale pro přesnost výsledku žádoucí rozdělit potrubní úsek na větší počet krátkých elementů i v případě, že se nemění průměr, drsnost či další charakteristiky potrubí. To je dáno tím, že axiální teplotní profil není na rozdíl od profilu tlaku lineární, nýbrž popsáný diferenciální rovnicí transportního typu.

##### Potrubní segment

Entalpická bilance vyplývá z Fourierovy Kirchhoffovy rovnice integrované přes průřez trubky

$$A\rho c_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial T}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} (A\rho c_p a_e \frac{\partial T}{\partial x}) + kO(T_e - T) + Q \quad Q = A\kappa \left( \frac{\Delta U}{h} \right)^2 \quad (1)$$

kde  $T(t,x)$  je střední (kalorimetrická) teplota v průřezu trubky,  $a_e$  je axiální teplotní disperse kapaliny,  $k$  je součinitel prostupu tepla do okolí,  $O$  obvod,  $A$  plocha průřezného průřezu trubky,  $T_e$  vnější teplota a  $Q$  vyjadřuje vnitřní zdroj tepla (např. přímý ohmický ohřev,  $\Delta U$  [V]-rozdíl potenciálu odpovídající délce elementu  $h$ ,  $\kappa$  je měrná elektrická vodivost kapaliny [S/m]). Rozměr každého členu je W/m tj. výkon vztažený na jednotku délky trubky. Poznamenejme, že průřez trubky  $A$  může být, stejně jako střední rychlost proudění, funkcí  $x$ , ale součin  $Au$ =objemový průtok je konstantní.

Zvláštní pozornost je třeba věnovat součiniteli axiální disperse  $a_e$ , který není totožný se součinitelem teplotní vodivosti. V případě, že tok v trubce je laminární lze jeho hodnotu stanovit na základě Taylorovy Arisovy teorie (viz např. Thýn 2000):

$$a_e = a + \frac{\bar{u}^2 D^2}{192a} \quad \left[ \frac{m^2}{s} \right] \quad (1a)$$

resp. v turbulentním režimu jako funkci Reynoldsova čísla

$$a_e = \bar{u}D \left( \frac{3 \cdot 10^7}{Re^{2.1}} + \frac{1.35}{Re^{0.125}} \right). \quad (1b)$$

Protože je ve většině případů konvektivní přenos tepla mnohem významější než axiální vedení tepla ( $Pe \gg 1$ ) je třeba použít v metodě vážených residuí asymetrické testovací funkce

$$T = N_j T_j \quad W_i = N_i + \frac{\alpha h \bar{u}}{2|\bar{u}|} \frac{dN_i}{dx} \quad (2)$$

s optimální hodnotou koeficientu asymetrie  $\alpha$

$$\alpha_{opt} = \coth Pe - \frac{1}{Pe}, \quad Pe = \frac{|u| h \rho}{2a_e}. \quad (3)$$

Násobením rovnice (1) testovací funkcí  $W$ , integrací a použitím integrace per partes získáme slabou formulaci

$$\int [W\rho c_p A \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \rho c_p A a_e \frac{\partial W}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial x} - WkO(T_e - T) - WQ] dx = 0$$

odkud dosazením aproximace teplotního pole a váhové funkce (2) obdržíme soustavu obyčejných diferenciálních rovnic pro časové průběhy uzlových teplot

$$M_{ij} \frac{dT_j}{dt} + A_{ij} T_j = b_i \quad (4)$$

kde matice tepelných kapacit  $M$ , přenosu  $A$  a vektor zdrojů tepla mají tvar

$$M_{ij} = \int_{\Omega} A \rho c_p (N_i + Z \frac{dN_i}{dx}) N_j dx \quad Z = \frac{\alpha h \bar{u}}{2 |\bar{u}|} \quad (5)$$

$$A_{ij} = \int_{\Omega} \{ A \rho c_p [(N_i + Z \frac{dN_i}{dx}) \frac{dN_j}{dx} \bar{u} + a_e \frac{dN_i}{dx} \frac{dN_j}{dx}] + (N_i + Z \frac{dN_i}{dx}) k O N_j \} dx \quad (6)$$

$$b_i = \int_{\Omega} (N_i + Z \frac{dN_i}{dx}) (k O T_e + Q) dx \quad (7)$$

Soustavu obyčejných diferenciálních rovnic lze řešit Eulerovou metodou ( $\theta=0$  explicitní,  $\theta=1$  implicitní)

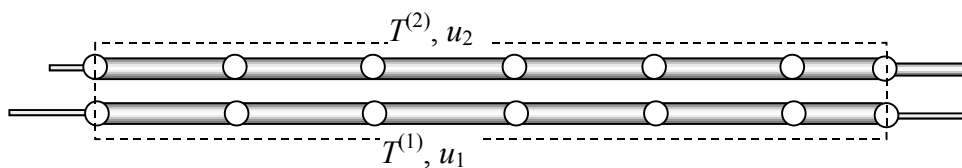
$$M_{ij} \frac{T_j - T_j^0}{\Delta t} + A_{ij} [\theta T_j + (1-\theta) T_j^0] = b_i,$$

tj. v každém časovém kroku se výpočet nových uzlových teplot redukuje na řešení soustavy lineárních algebraických rovnic

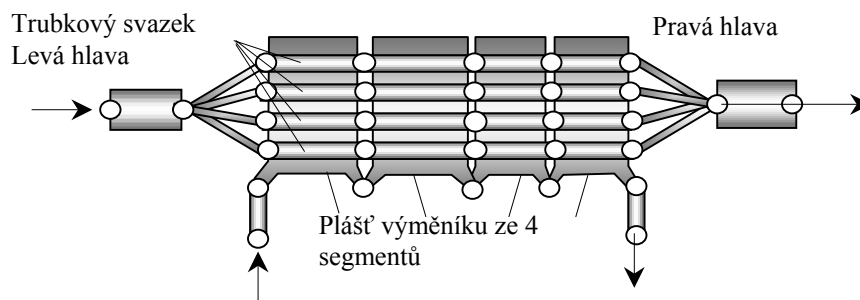
$$(M_{ij} + \Delta t \theta A_{ij}) T_j = [M_{ij} + \Delta t (1-\theta) A_{ij}] T_j^0 + \Delta t b_i.$$

### Výměník tepla

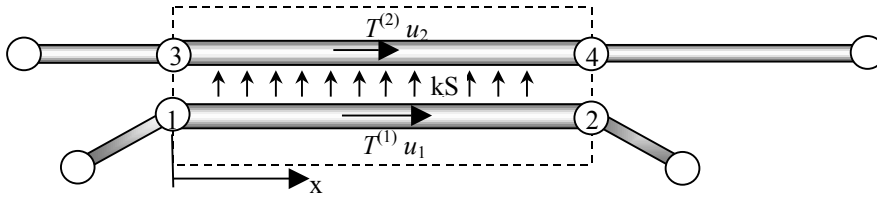
Budeme uvažovat jednoduchý výměník se dvěma paralelními proudy (je lhostejné zda v protiproudém či souproutém uspořádání):



Z jednoduchých segmentů lze skládat i komplikovanější výměníky tepla, např. trubkové:



Základní element výměníku tvoří dva stejně dlouhé potrubní segmenty



Rovnice popisující teplotní profily v obou proudech jsou téměř totožné s rovnicí pro samostatný segment, liší se jen dodatečným členem, který popisuje tepelný tok mezi proudy

$$A_1 \rho_1 c_{p1} \left( \frac{\partial T^{(1)}}{\partial t} + \bar{u}_1 \frac{\partial T^{(1)}}{\partial x} \right) = A_1 \rho_1 c_{p1} a_{e1} \frac{\partial^2 T^{(1)}}{\partial x^2} + k_1 O_1 (T_e - T^{(1)}) + Q^{(1)} + kS(T^{(2)} - T^{(1)}) \quad (8)$$

$$A_2 \rho_2 c_{p2} \left( \frac{\partial T^{(2)}}{\partial t} + \bar{u}_2 \frac{\partial T^{(2)}}{\partial x} \right) = A_2 \rho_2 c_{p2} a_{e2} \frac{\partial^2 T^{(2)}}{\partial x^2} + k_2 O_2 (T_e - T^{(2)}) + Q^{(2)} + kS(T^{(1)} - T^{(2)}) \quad (9)$$

I konečněprvková aproximace je téměř totožná

$$M_{ij}^{(1)} \frac{dT_j^{(1)}}{dt} + A_{ij}^{(1)} T_j^{(1)} + B_{ij}^{(1)} (T_j^{(1)} - T_j^{(2)}) = b_i^{(1)} \quad (10)$$

$$M_{ij}^{(2)} \frac{dT_j^{(2)}}{dt} + A_{ij}^{(2)} T_j^{(2)} + B_{ij}^{(2)} (T_j^{(2)} - T_j^{(1)}) = b_i^{(2)} \quad (11)$$

kde

$$M_{ij}^{(k)} = \int_{\Omega} A_k \rho_k c_{pk} (N_i + Z^{(k)} \frac{dN_i}{dx}) N_j dx \quad (12)$$

$$A_{ij}^k = \int_{\Omega} \{ A_k \rho_k c_{pk} [(N_i + Z^{(k)} \frac{dN_i}{dx}) \frac{dN_j}{dx} \bar{u}_k + a_{ek} \frac{dN_i}{dx} \frac{dN_j}{dx}] + (N_i + Z^{(k)} \frac{dN_i}{dx}) k_k O_k N_j \} dx \quad (13)$$

$$B_{ij}^{(k)} = \int_{\Omega} (N_i + Z^{(k)} \frac{dN_i}{dx}) N_j k S dx \quad (14)$$

$$b_i^{(k)} = \int_{\Omega} (N_i + Z^{(k)} \frac{dN_i}{dx}) (k_k O_k T_e + Q_k) dx \quad (15)$$

Poznamenejme, že integrály pro koeficienty  $\mathbf{M}$ ,  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{b}$  jsou naprosto totožné se vztahy odvozenými pro samotnou trubku, přičemž součinitel prostupu tepla  $k_k$  se týká jen přenosu tepla mezi trubkou a okolím (uvažujeme-li dobře izolovaný výměník je tento koeficient nula). To co dělá výměník výměníkem tepla jsou pouze koeficienty  $\mathbf{B}$ , v nichž  $k$  je součinitel prostupu tepla na teplosměnné ploše výměníku a měl by správně zahrnovat jak termický odpor vlastní teplosměnné plochy, ale i termické odpory vrstev foulingu a teplotních mezních vrstev v trubkách 1 a 2.  $S$  je ve vztahu (14) teplosměnná plocha, ale vztahena na jednotku délky výměníku (má tedy rozměr metr). Kdybychom neuvažovali asymetrickou složku váhové funkce  $Z^{(k)}$ , byly by koeficienty  $\mathbf{B}$  nezávislé na charakteristikách jednotlivých trubek (např. na jejich rozměrech, na průtoku medií apod.).

### Fouling

Tvorba úsad na teplosměnné ploše výměníku se projeví především zvýšením termického odporu, resp. snížením parametru teplosměnné plochy  $kS$ . Růst vrstvičky úsad je už z podstaty věci děj

nestacionární a ovlivňovaný složením kapaliny, její teplotou i teplotou stěny (pozor, není to totéž), velikostí smykových sil u stěny a i koncentrací látky, z níž se vrstva úsad konstituuje.

Velmi jednoduchý model pro tvorbu úsad z ropy, kdy zřejmě vůbec není nutné uvažovat koncentraci úsadotvorných látek, navrhl Ebert a Panchal (1995)

$$\frac{dr}{dt} = \frac{\alpha}{\text{Re}^{0.88}} \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) - \gamma\tau, \quad (17)$$

kde  $\alpha=8.39$  [ $\text{m}^2\text{K}/\text{J}$ ],  $E=68$  [ $\text{kJ}/\text{mol}$ ],  $\gamma=4.03 \cdot 10^{-11}$  [ $\text{Pa} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{K}/\text{J}$ ] jsou konstanty Ebert Panchalova modelu (platí ale jen pro ropu).  $\tau$  je smykové napětí na stěně, počítané dle vztahu

$$\tau = \frac{1}{2} \rho f u^2, \quad (18)$$

pro  $f = 0.0792 / \text{Re}^{0.25}$  (turbulence Blasius), resp  $f = 16 / \text{Re}$  (laminár).

Termický odpor  $r$  [ $\text{m}^2 \cdot \text{K}/\text{W}$ ] v rovnici (15) je třeba započíst k součiniteli prostupu  $k$

$$k^* = \frac{k}{1 + kr} \quad (19)$$

### Diskretizace času

Obyčejné diferenciální rovnice (3), resp. (9,10) jsou řešeny implicitní Eulerovou metodou

$$[M_{ij}^{(1)} + \Delta t(A_{ij}^{(1)} + B_{ij}^{(1)})]T_j^{(1)} - \Delta t B_{ij}^{(1)} T_j^{(2)} = \Delta t b_i^{(1)} + M_{ij}^{(1)} T_j^{(1)0} \quad (20)$$

$$[M_{ij}^{(2)} + \Delta t(A_{ij}^{(2)} + B_{ij}^{(2)})]T_j^{(2)} - \Delta t B_{ij}^{(2)} T_j^{(1)} = \Delta t b_i^{(2)} + M_{ij}^{(2)} T_j^{(2)0} \quad (21)$$

Ebertova - Panchalova rovnice

$$r = r^0 + \Delta t \left[ \frac{\alpha}{\text{Re}^{0.88}} \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) - \gamma\tau \right]. \quad (22)$$

### Implementace

Rozlišují se dva typy elementů: dvouzlový, popisující jeden potrubní segment,

$$\begin{bmatrix} M_{11} + \Delta t A_{11} & M_{12} + \Delta t A_{12} \\ M_{21} + \Delta t A_{21} & M_{22} + \Delta t A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11} T_1^0 + M_{12} T_2^0 + \Delta t b_1 \\ M_{21} T_1^0 + M_{22} T_2^0 + \Delta t b_2 \end{bmatrix} \quad (23)$$

a čtyřzlový, popisující výměník. Jenomže dvouzlové segmenty jsou současně i částí elementů výměníků a proto lokální matice výměníku  $4 \times 4$  zahrnuje jen členy  $B$ , příspěvky vyjadřující přenos tepla mezi proudy (jinak by se totiž potrubní úsek jako část výměníku sestavoval dvakrát).

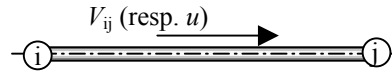
$$\begin{bmatrix} \Delta t B_{11}^{(1)} & \Delta t B_{12}^{(1)} & -\Delta t B_{11}^{(1)} & -\Delta t B_{12}^{(1)} \\ \Delta t B_{21}^{(1)} & \Delta t B_{22}^{(1)} & -\Delta t B_{21}^{(1)} & -\Delta t B_{22}^{(1)} \\ -\Delta t B_{11}^{(2)} & -\Delta t B_{12}^{(2)} & \Delta t B_{11}^{(2)} & \Delta t B_{12}^{(2)} \\ -\Delta t B_{21}^{(2)} & -\Delta t B_{22}^{(2)} & \Delta t B_{21}^{(2)} & \Delta t B_{22}^{(2)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1^{(1)} \\ T_2^{(1)} \\ T_1^{(2)} \\ T_2^{(2)} \end{bmatrix} \quad (24)$$



#### 4.1.14. Potrubní síť – transport hmoty (operace CONC, elementy PIPE2D)

Analogie předchozího případu přenosu tepla na transport hmoty (analogií výměníků tepla jsou separační aparáty, např. membránové filtry). Základním elementem je opět dvouuzlový element, který může charakterizovat potrubní segment, nebo promíchávanou nádobu. Cílem řešení je stanovit změny koncentrace  $c_N$  sledované komponenty v čase, se zvláštním zřetelem na možnost vyšetřování koncentrace značkovací látky při vyšetřování charakteristik systému (např. rozložení dob prodlení) metodou vzruchu a odezvy.

##### Potrubní segment (axiální disperze)



Uvažujeme jednorozměrný konvektivní i difuzní transport reagující složky, popisovaný rovnicí axiální disperze

$$\frac{\partial c_N}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial c_N}{\partial x} = D_{Ne} \frac{\partial^2 c_N}{\partial x^2} - A_N c_N e^{-E_N / RT}. \quad (1)$$

$D_{Ne}$  je součinitel axiální disperze, který není totožný se difuzním součinitelem  $D_N$ , ale souvisí s ním. V případě, že tok v trubce je laminární lze jeho hodnotu stanovit na základě Taylorovy Arisovy teorie (Thýn 2000) z průměru potrubí  $D$ , střední rychlosti a difuzního součinitele  $D_N$ :

$$D_{Ne} = D_N + \frac{\bar{u}^2 D^2}{192 D_N} \quad \left[ \frac{m^2}{s} \right] \quad (1a)$$

zatímco v turbulentním režimu je disperze na difuzním součiniteli nezávislá

$$D_{Ne} = \bar{u} D \left( \frac{3 \cdot 10^7}{\text{Re}^{2.1}} + \frac{1.35}{\text{Re}^{0.125}} \right). \quad (1b)$$

Rovnici (1) budeme řešit metodou vážených residuí s asymetrickými testovacími funkcemi

$$c_N = N_j c_{Nj} \quad W_i = N_i + \frac{\alpha h \bar{u}}{2 |\bar{u}|} \frac{dN_i}{dx}. \quad (2)$$

Násobením (1) testovací funkcí  $W$ , integrací a použitím integrace per partes získáme soustavu obyčejných diferenciálních rovnic pro časové průběhy koncentrací v uzlech

$$M_{ij} \frac{dc_{Nj}}{dt} + A_{ij} c_{Nj} = 0 \quad (3)$$

kde matice hmot  $M$  a matice přenosu  $A$  mají tvar

$$M_{ij} = \int_{\Omega} (N_i + Z \frac{dN_i}{dx}) N_j d\Omega \quad Z = \frac{\alpha h \bar{u}}{2 |\bar{u}|} \quad (4)$$

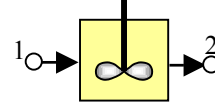
$$A_{ij} = \int_{\Omega} \left[ (N_i + Z \frac{dN_i}{dx}) \frac{dN_j}{dx} \bar{u} + D_{Ne} \frac{dN_i}{dx} \frac{dN_j}{dx} + (N_i + Z \frac{dN_i}{dx}) A_N e^{-E_N / RT} N_j \right] d\Omega \quad (5)$$

## Ideální mísič

Pro zjednodušený popis průtočných systémů se kromě základního prvku typu trubka (pístový tok, resp. model axiální disperze) často používá ideálně promíchávaná nádoba/reaktor (CSTR - Continuous Stirred Tank Reactor).

Jeho popis je velmi prostý – obyčejná diferenciální rovnice

$$V \frac{dc_{N2}}{dt} = \dot{V}(c_{N1} - c_{N2}) - VA_N c_{N2} e^{-E_N/RT}$$



(6)

kde  $V$  je objem aparátu a  $\dot{V}$  je objemový průtok.

## Časová diskretizace

Obyčejné diferenciální rovnice (3), resp.(6) jsou řešeny implicitní Eulerovou metodou, tj.

$$(M_{ij} + \Delta t A_{ij}) c_{Nj} = M_{ij} c_{Nj}^0 \quad (7)$$

$$c_{N2} [1 + \Delta t (\frac{\dot{V}}{V} + A_N e^{-E_N/RT})] + c_{N1} \Delta t \frac{\dot{V}}{V} = c_{N2}^0 \quad (8)$$

(8)

Popis ideální mísiče je trochu problém – chybějící difuzní člen vylučuje možnost použít stejný algoritmus jako u přímé trubky. Rovnice (8) je implementována na úrovni jednoho elementu takto

Pro  $\dot{V} > 0$  (směr toku z uzlu 1 do uzlu 2)

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \Delta t \frac{\dot{V}}{V} & 1 + \Delta t (\frac{\dot{V}}{V} + A_N e^{-E_N/RT}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{N1} \\ c_{N2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ c_{N2}^0 \end{bmatrix}$$

(9)

Pro  $\dot{V} < 0$  (směr toku z uzlu 2 do uzlu 1)

$$\begin{bmatrix} \Delta t \frac{\dot{V}}{V} & 1 + \Delta t (\frac{\dot{V}}{V} + A_N e^{-E_N/RT}) \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{N1} \\ c_{N2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{N1}^0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

(10)

#### 4.1.15. Potrubní sítě a výměníky tepla metodou entalpických bilancí (operace THER elementy PIPE2D, HEXC)

Předchozí kapitoly se zabývaly popisem potrubních sítí, který vycházel z rovnic přenosu tepla a přenosu hmoty, na něž byla aplikována metoda vážených reziduí. Tímto způsobem byly konstruovány i čtyřuzlové konečné elementy popisující souproudé event. protiproudé výměníky tepla. Pokud je ovšem teplotní profil ve výměnících komplikovanější, např. u výměníků s více tahy, a když tento teplotní profil není znám a celá komplikovanost uspořádání proudů ve výměníku je zahrnuta do jeho efektivity  $\varepsilon$  (metoda  $\varepsilon$ -NTU), nedá se metoda vážených reziduí použít (alespoň ne tak jednoduše). Z tohoto důvodu je ve FEMINĚ implementována i koncepčně jiná metoda řešení potrubních sítí s výměníky tepla, založená na bilanci entalpických toků v uzlových bodech. Princip se dá formulovat takto: součet orientovaných entalpických toků musí být v každém ulovém bodě nulový a to i v nestacionárním případě. Poznámka: na podobném principu je koneckonců založena většina bilančních systémů, jako je ASPEN MAX, PRO II apod. Ve FEMINĚ se tato metoda výpočtu zvolí nastavením přepínače HEPI=1, nebo zadáním odpovídajícího parametru v příkazu OPTION. Metodu entalpických bilancí lze aplikovat na všechny dříve uvedené typy konečných elementů (PIPE2D, HEXC, VALVE, PUMP), ale i na některé další speciální výměníky definované jako podtyp elementů HEXC: jde o deskové výměníky tepla s šípovým zvlněním desek, o výměníky kotlové (shell & tube) a o dvoutrubkové výměníky.

Ať již jde o dvou nebo čtyřuzlové elementy, řeší se stejně jako u metody vážených reziduí soustava obyčejných diferenciálních rovnic pro teploty event. koncentrace v uzlových bodech

$$M_{ij} \frac{dT_j}{dt} + A_{ij} T_j = b_i \quad (1)$$

Vektor pravé strany  $b_i$  vyjadřuje součet entalpických toků a ve vnitřních uzlech je tudíž nulový (můžeme ovšem uvažovat i bodový zdroj tepla – jeho výkon ve Watech je přímo koeficient  $b_i$ ). Globální matice  $A_{ij}$  vodivosti vzniká standardním sestavením matic vodivosti elementů, přičemž fyzikální význam součinu lokální matice vodivosti elementu a vektoru teplot  $A_{ij} T_j$  je entalpický tok z uvažovaného elementu do uzlu  $i$  ( $i=1$  nebo  $2$ ).

Pro element typu trubka závisí příspěvek elementu k soustavě (1) na směru proudění. Pokud je tento směr z uzlu 1 do uzlu 2 (kladná rychlost proudění  $W > 0$ ) platí

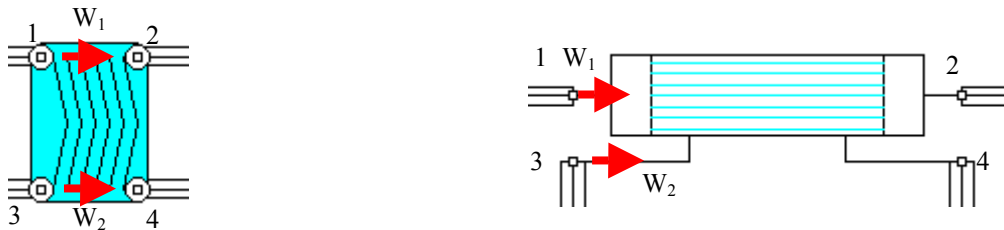
$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\frac{\rho c_p V}{2} & -\frac{\rho c_p V}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{dT_1}{dt} \\ \frac{dT_2}{dt} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -W - \frac{A\lambda_e}{L} & \frac{A\lambda_e}{L} \\ W + \frac{A\lambda_e}{L} - \frac{kS}{2} & -\frac{A\lambda_e}{L} - \frac{kS}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -QV - kST_e \end{pmatrix} \quad (2)$$

zatímco pro opačný směr proudění  $W < 0$

$$\begin{pmatrix} -\frac{\rho c_p V}{2} & -\frac{\rho c_p V}{2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{dT_1}{dt} \\ \frac{dT_2}{dt} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\frac{A\lambda_e}{L} - \frac{kS}{2} & \frac{A\lambda_e}{L} - \frac{kS}{2} - W \\ \frac{A\lambda_e}{L} & W - \frac{A\lambda_e}{L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -QV - kST_e \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

kde  $V$  je objem,  $A$  plocha průřezu,  $S$  teplosměnná plocha a  $L$  je délka elementu.  $Q$  [ $W/m^3$ ] zahrnuje všechny formy vnitřních zdrojů tepla, konkrétně ohmický ohřev (s uvažováním podélné i příčné složky elektrického pole) a zdroje zadávané uživatelsky jako funkce souřadnic a času.  $W$  je tepelná kapacita proudu ( $A\rho c_p \mu$ ),  $k$  součinitel prostupu tepla z povrchu trubky a  $T_e$  je vnější teplota ( $kS\Delta T$  představuje tepelné ztráty do okolí). V uvedené formulaci jsou jak patrně zahrnuty nejen ztráty do okolí, nýbrž i axiální vedené tepla úměrné efektivní axiální tepelné vodivosti  $\lambda_e$  v níž je zahrnutý i vliv axiální disperze.

Pro dvoumediové výměníky tepla (čtyřuzlové elementy) je použita následující konvence lokálního číslování uzlů



$W_1$ ,  $W_2$  označují tepelné kapacity proudů ( $W_i = \rho_i c_{p,i} A_i u_i$ ) a jejich kladné hodnoty odpovídají orientaci toku uvedené na předchozím obrázku. Matice vodivosti těchto elementů závisí právě na orientaci toků a jsou možné 4 varianty, kde pro zjednodušení neuvažujeme ani axiální vedení tepla, ani tepelné ztráty (odvod tepla do okolí)

$$W_1 > 0, W_2 > 0 \quad A = \begin{pmatrix} -W_1 & 0 & 0 & 0 \\ W_1 - W & 0 & W & 0 \\ 0 & 0 & -W_2 & 0 \\ W & 0 & W_2 - W & 0 \end{pmatrix} \quad (4)$$

$$W_1 > 0, W_2 < 0 \quad A = \begin{pmatrix} -W_1 & 0 & 0 & 0 \\ W_1 - W & 0 & W & 0 \\ W & 0 & 0 & -W_2 - W \\ 0 & 0 & 0 & W_2 \end{pmatrix} \quad (5)$$

$$W_1 < 0, W_2 > 0 \quad A = \begin{pmatrix} 0 & -W_1 - W & W & 0 \\ 0 & W_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -W_2 & 0 \\ 0 & W & W_2 - W & 0 \end{pmatrix} \quad (6)$$

$$W_1 < 0, W_2 < 0 \quad A = \begin{pmatrix} 0 & -W_1 - W & 0 & W \\ 0 & W_1 & 0 & 0 \\ 0 & W & 0 & -W_2 - W \\ 0 & 0 & 0 & W_2 \end{pmatrix} \quad (7)$$

Do symbolu  $W$  v maticích (4-7) je zahrnuta efektivita výměníku

$$W = |W_1| \varepsilon_1 \quad (8)$$

$$\varepsilon_1 = \frac{|T_1 - T_2|}{\Delta T'} = \frac{Q}{|W_1| \Delta T'} \quad (9)$$

kde  $Q$  je celkový tepelný výkon přenášený z proudu 1 do proudu 2 a  $\Delta T'$  je rozdíl teplot vstupujících proudů (vstupní teplota prvního proudu minus vstupní teplota druhého proudu). Efektivita výměníku se počítá dle vztahů odpovídajících určitému typu výměníku a orientaci toku

Souproud

$$\varepsilon_1 = \frac{1 - \exp[-NTU_1(1 + R_1)]}{1 + R_1} \quad (10)$$

protiproud

$$\varepsilon_1 = \frac{1 - \exp[-NTU_1(1 - R_1)]}{1 - R_1 \exp[-NTU_1(1 - R_1)]} \quad (11)$$

Počet převodových jednotek je vztažen na tepelnou kapacitu proudu číslo 1 (nerozlišujeme tedy slabší a silnější proud)

$$NTU_1 = \frac{kS}{|W_1|} \quad (12)$$

a  $R_1$  je absolutní hodnota poměru tepelných kapacit proudů

$$R_1 = \left| \frac{W_1}{W_2} \right| \quad (13)$$

Jednou z nevýhod metody entalpických bilancí ve srovnání s metodou vážených residuí je to, že zde nejsou přirozené okrajové podmínky a koncové uzly sítě musí být ošetřovány zvlášť (v těchto uzlech neplatí to, že součet entalpických toků je nulový). Výstupní uzly v nichž nejde předepsat teplotu jako silnou okrajovou podmínku, je tedy třeba označit (ve FEMINĚ změnou statusu uzlového parametru teplota na libovolný index větší než 20) a formulovat pro ně poněkud jiné rovnice, tj. použít modifikované matice  $A$  (modifikace spočívá v přičtení tepelné kapacity proudu k diagonálnímu prvku)

$$W_1 > 0, W_2 > 0 \quad A = \begin{pmatrix} -W_1 & 0 & 0 & 0 \\ W_1 - W & -\mathbf{W}_1 & W & 0 \\ 0 & 0 & -W_2 & 0 \\ W & 0 & W_2 - W & -\mathbf{W}_2 \end{pmatrix} \quad (14)$$

$$W_1 > 0, W_2 < 0 \quad A = \begin{pmatrix} -W_1 & 0 & 0 & 0 \\ W_1 - W & -\mathbf{W}_1 & W & 0 \\ W & 0 & \mathbf{W}_2 & -W_2 - W \\ 0 & 0 & 0 & W_2 \end{pmatrix} \quad (15)$$

$$W_1 < 0, W_2 > 0 \quad A = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_1 & -W_1 - W & W & 0 \\ 0 & W_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -W_2 & 0 \\ 0 & W & W_2 - W & -\mathbf{W}_2 \end{pmatrix} \quad (16)$$

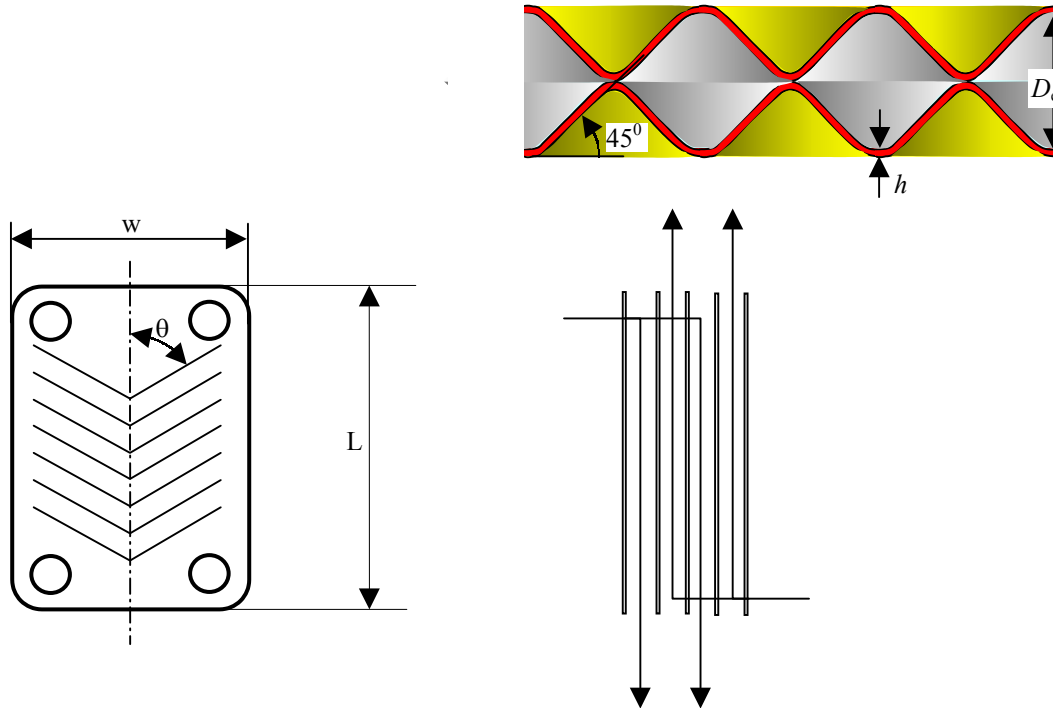
$$W_1 < 0, W_2 < 0 \quad A = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_1 & -W_1 - W & 0 & W \\ 0 & W_1 & 0 & 0 \\ 0 & W & \mathbf{W}_2 & -W_2 - W \\ 0 & 0 & 0 & W_2 \end{pmatrix} \quad (17)$$

Naprogramování výpočtu specifických výměníků tepla se tudíž redukuje na problém výpočtu tlakových ztrát, resp. průtokových koeficientů obou proudů  $\phi_{ij}(\Delta p)$  a efektivity vztažené na proud číslo 1, což prakticky vzto znamená stanovení součinitele prostupu tepla, který zahrnuje součinitele přestupu tepla v obou proudech výměníku, termické odpory foulingu a konečně termický odpor vlastní teplosměnné plochy.

### Deskové výměníky tepla

Vzhledem k tomu, že ve FEMINĚ lze snadno řadit výměníky za sebou nebo vedle sebe, stačí uvažovat jen deskový výměník s jediným tahem a s  $m$  paralelními kanály do nichž se rozděluje

celkový průtok proudy. Těmto  $m$ -kanálům odpovídá  $2m+1$  desek výměníku o šířce  $w$  a výšce  $L$ . Vzdálenost sousedních desek je  $D_e/2$ , kde  $D_e$  je hydraulický průměr jednoho kanálu. Uvažujeme desky typu chevron, se šipovým zvlněním teplosměnné plochy, což je schematicky znázorněno na následujícím obrázku:



Z předchozího obrázku ( $m=2$ ) plyne, že celková teplosměnná plocha mezi proudy 1 a 2 je

$$S = S_{\text{desky}} (2m-1) \quad (18)$$

a teplosměnná plocha jedné desky je přibližně

$$S_{\text{desky}} = \sqrt{2} w L \quad (19)$$

Průtočný průřez jednoho kanálu je  $A_{\text{kanal}} = \frac{D_e w}{2}$  a jemu odpovídá střední rychlost  $u$  a Re číslo

$$u = \frac{2\dot{V}}{m D_e w}, \quad \text{Re} = \frac{u D_e \rho}{\mu} \quad (20)$$

Tlaková ztráta na délce desky  $L$  je dána obecnou závislostí na Fanningově součiniteli třecích ztrát

$$\Delta p = 2f \frac{L}{D_e} \rho u^2 = \frac{8fL\rho}{D_e^3 m^2 w^2} \dot{V}^2 \quad (21)$$

tudíž

$$\dot{V}_{ij} = \varphi_{ij} \Delta p_{ij}, \quad \varphi_{ij} = \frac{m w D_e^{3/2}}{\sqrt{8fL_{ij} \rho \Delta p_{ij}}} \quad (22)$$

Pro Fanningův součinitel  $f$  udává Martin (1996) následující vztahy zachycující explicitně vliv úhlu šípu  $\theta$

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = \frac{\cos\theta}{\sqrt{0.045 \tan\theta + 0.09 \sin\theta + \frac{f_0}{\cos\theta}}} + \frac{1 - \cos\theta}{\sqrt{3.8 f_1}} \quad (23)$$

Funkce  $f_0$  a  $f_1$  závisí na režimu toku, tj. na hodnotě Reynoldsova čísla kanálu

$Re < 2000$

$$f_0 = \frac{16}{Re} \quad , \quad f_1 = \frac{149}{Re} + 0.9625$$

$Re > 2000$

$$f_0 = \frac{1}{1.56 \ln Re - 3} \quad f_1 = \frac{9.75}{Re^{0.289}} \quad . \quad (24)$$

Součinitel přenosu tepla je v téže práci (Martin 1996) vyjádřen právě prostřednictvím Fanningova součinitele

$$Nu = \frac{\alpha D_e}{\lambda} = 0.205 Pr^{1/3} \left( \frac{\mu}{\mu_w} \right)^{1/6} (f Re^2 \sin 2\theta)^{0.374} \quad . \quad (25)$$

## 4.2. Strukturální analýza pružných těles

### 4.2.1. Systém táhel (velké deformace metodou Monte Carlo, operace TRUSS, elementy TRUSS2D)

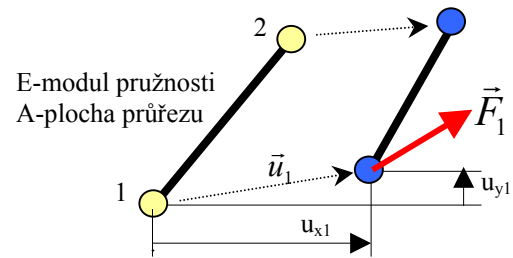
Tento příklad je spíše jen hříčkou. Řeší případ soustavy lineárně elastických táhel zatížených uzlovými silami, ale ne tak, že by se formulovaly rovnice popisující posunutí uzlových bodů, nýbrž se jen stanoví celková potenciální energie náhodně deformované soustavy táhel a z těchto náhodných pokusů se vybírá konfigurace, která vedla k nejmenší hodnotě celkové potenciální energie. Princip minima celkové energie platí i pro případ velkých posunutí, a pokud se tedy deformační energie nepočítá na základě teorie malých deformací, ale přesně, není nutné používat komplikované numerické metody pro řešení nelineárních problémů. Současně se však ukazuje, že tento triviální způsob je schůdný jen pro velmi malý počet táhel, protože konvergence je extrémně pomalá (pro Monte Carlo je typické  $\sqrt{n}$ ).

Celkovou energii vyjádříme součtem energií elastické deformace elementů (e) a potenciální energie vnějších sil (n).

$$W_{total} = \frac{1}{2} \sum_e \int E_e \varepsilon_e^2 dl - \sum_n (F_{xn} u_{xn} + F_{yn} u_{yn}) =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_e E_e \frac{[\sqrt{(x_{e2} + u_{xe2} - x_{e1} - u_{xe1})^2 + (y_{e2} + u_{ye2} - y_{e1} - u_{ye1})^2} - \sqrt{(x_{e2} - x_{e1})^2 + (y_{e2} - y_{e1})^2}]^2}{\sqrt{(x_{e2} - x_{e1})^2 + (y_{e2} - y_{e1})^2}} +$$

$$- \sum_n (F_{xn} u_{xn} + F_{yn} u_{yn})$$



### 4.2.2. Systém táhel (velké deformace iterační metodou, operace STRESS, elementy TRUSS2D)

Tentýž element TRUSS2D je standardním algoritmem (tj. operací SOLVE) řešen standardním způsobem, tj. řešením soustavy rovnic pro uzlová posunutí. Matice tuhosti elementu je dána vztahem, který vychází z celkové energie popisované vztahem, uvedeným v předchozím odstavci 4.2.1.

$$[K] = EA \begin{bmatrix} A_x E_x & A_y E_x & -A_x E_x & -A_y E_x \\ A_x E_y & A_y E_y & -A_x E_y & -A_y E_y \\ -A_x E_x & -A_y E_x & A_x E_x & A_y E_x \\ -A_x E_y & -A_y E_y & A_x E_y & A_y E_y \end{bmatrix}$$

kde  $A_x E_x, \dots$  nejsou konstanty, ale funkce posuvů uzlových bodů přebíraných z předchozí iterace.

$$A_x = \frac{1}{2L^2} (2\Delta x + \Delta u_x - \frac{\Delta x \Delta u_x + \Delta y \Delta u_y}{L^2} \Delta x), \quad A_y = \frac{1}{2L^2} (2\Delta y + \Delta u_y - \frac{\Delta x \Delta u_x + \Delta y \Delta u_y}{L^2} \Delta y)$$

$$E_x = \frac{\Delta x + \Delta u_x}{\sqrt{(\Delta x + \Delta u_x)^2 + (\Delta y + \Delta u_y)^2}}, \quad E_y = \frac{\Delta y + \Delta u_y}{\sqrt{(\Delta x + \Delta u_x)^2 + (\Delta y + \Delta u_y)^2}}$$

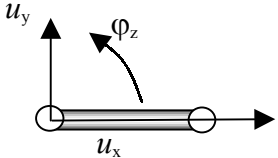
a

$$\Delta x = x_2 - x_1, \Delta y = y_2 - y_1 \quad \Delta u_x = u_{x2} - u_{x1}, \Delta u_y = u_{y2} - u_{y1}.$$



#### 4.2.3. Nosníky, potrubní sítě (operace STRESS, elementy PIPE2D, BEAM2D)

Uvažujme dvourozměrnou soustavu nosníků, jejímž speciálním případem je např. potrubní síť. Matice tuhosti nosníkového prvku se dvěma uzlovými body jimž přísluší trojice DOF:  $u_x$   $u_y$   $\varphi_z$  má tvar

$$K_{\text{lokální}} = \begin{bmatrix} \frac{AE}{L} & 0 & 0 & -\frac{AE}{L} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{12EJ}{L^3} & \frac{6EJ}{L^2} & 0 & -\frac{12EJ}{L^3} & \frac{6EJ}{L^2} \\ 0 & \frac{6EJ}{L^2} & \frac{4EJ}{L} & 0 & -\frac{6EJ}{L^2} & \frac{2EJ}{L} \\ -\frac{AE}{L} & 0 & 0 & \frac{AE}{L} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{12EJ}{L^3} & -\frac{6EJ}{L^2} & 0 & \frac{12EJ}{L^3} & -\frac{6EJ}{L^2} \\ 0 & \frac{6EJ}{L^2} & \frac{2EJ}{L} & 0 & -\frac{6EJ}{L^2} & \frac{4EJ}{L} \end{bmatrix} \quad \begin{array}{c} u_y \\ \varphi_z \\ u_x \end{array} \quad (1)$$


kde  $A$  je plocha průřezu nosníku  $L$  délka nosníku a  $J$  moment setrvačnosti vzhledem k ose  $z$ . Pro kruhovou trubku o vnějším průměru  $D_2$ , vnitřním průměru  $D_1$  (s tloušťkou stěny  $h=(D_2-D_1)/2$ ) je moment setrvačnosti dán vztahem

$$J = \frac{\pi}{64}(D_2^4 - D_1^4), \quad (2)$$

pro obdélníkový průřez  $b \times h$  platí

$$J = \frac{bh^3}{12}. \quad (3)$$

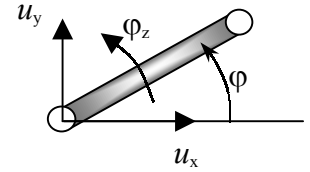
Vektor pravé strany představuje zatížení – kromě osamělých sil, které jsou automaticky přičítány k vektoru pravé strany procedurou frontální metody, se počítají i spojitá zatížení vyvolaná teplotní dilatací, spojitým vnějším zatížením  $q$  [N/m], které působí kolmo na osu nosníku a v případě, že element je typu PIPE2D, i axiální silou, vyvolanou kontrakcí trubky nafukované vnitřním přetlakem  $p$ :

$$F_{\text{lokální}} = \begin{bmatrix} \alpha(T_1 - T_e)AE - \mu \frac{p_1 DA}{2h} \\ -\frac{qL}{2} \\ 0 \\ -\alpha(T_2 - T_e)AE + \mu \frac{p_2 DA}{2h} \\ -\frac{qL}{2} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4)$$

kde  $\alpha$  je součinitel lineární teplotní roztažnosti materiálu stěny trubky,  $T_e$  je referenční montážní teplota,  $T_1$ ,  $T_2$  jsou uzlové teploty (předpokládáme, že teplota stěny trubky je stejná jako teplota kapaliny, která jí protéká),

Matice tuhosti (1) odpovídá nosníku, jehož osa je osou  $x$  globálního souřadného systému ( $K_{\text{lokální}}$  je matice tuhosti v lokálním souřadném systému). Pro nosník v obecné poloze, natočený o úhel  $\varphi$  vzhledem k ose  $x$ , je třeba matici tuhosti  $K_{\text{lokální}}$  transformovat násobením maticí rotace  $Q$  zleva i zprava a analogickou transformaci je třeba aplikovat i na vektor zatížení  $F$ :

$$Q = \begin{bmatrix} C & S & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -S & C & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C & S & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -S & C & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad C = \cos\varphi, \quad S = \sin\varphi$$



(5)

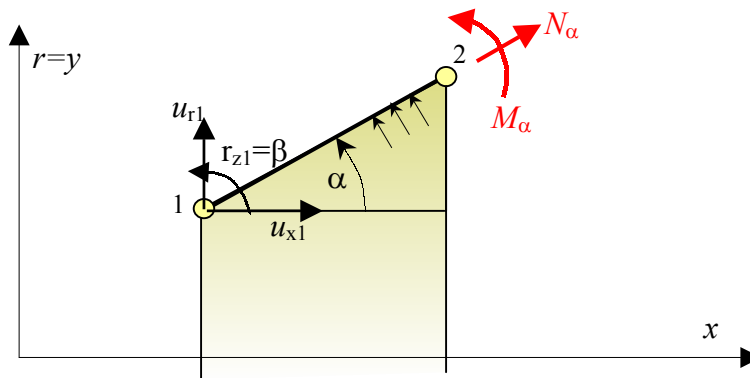
$$[F_{lokální}] = [Q][F_{globální}], \quad [Q^T][K_{lokální}][Q] = [K_{globální}] \quad (6)$$

Protože matice pootočení  $Q$  je ortogonální,  $Q^T Q = I$ , lze poměrně jednoduše počítat vnitřní síly (osovou a posouvající sílu i ohybový moment) z vypočtených posunutí v globálním souřadném systému a z matice tuhosti v lokálním souřadném systému

$$[F_{lokální}] = [K_{lokální}][Q][q_{globální}] \quad (7)$$

#### 4.2.4. Rotačně symetrické skořepiny (operace STRESS, elementy SHELLX)

Řešení tohoto technicky důležitého případu je založeno na dvouzlovém Vykutilově prvku se 6 stupni volnosti (posuvy a natočení v každém uzlu, tedy stejně jako BEAM2D), viz. Schneider 1990.



Výsledkem výpočtu jsou posuvy  $u_x$ ,  $u_r$  a natočení  $\beta$  v uzlových bodech. Z těchto hodnot jsou během postprocesingu vypočteny silové charakteristiky elementů, jednotkové síly ve směru meridiánu (poledníků)  $N_\alpha$  [N/m] a ve směru rovnoběžek  $N_\beta$  [N/m] (kladné hodnoty odpovídají tahu) a jednotkové momenty  $M_\alpha$  [N] a  $M_\beta$  [N], jejichž kladné hodnoty odpovídají *rozevírání* elementu skořepiny (tahovým napětím na vnitřním povrchu skořepiny, viz obr.). Dále je stanovena i velikost jednotkové příčné síly  $Q$  [N/m] vyvolávající smyková napětí.

$$N_\alpha = \frac{Eh}{1-\mu^2} (\varepsilon_\alpha + \mu\varepsilon_\beta) = \frac{Eh}{1-\mu^2} \left[ \frac{u_{x2} - u_{x1}}{L} \cos\alpha + \frac{u_{r2} - u_{r1}}{L} \sin\alpha + \mu \frac{u_{r2} + u_{r1}}{2R} \right] \quad (1)$$

$$N_\beta = \frac{Eh}{1-\mu^2} (\varepsilon_\beta + \mu\varepsilon_\alpha) = \frac{Eh}{1-\mu^2} \left[ \mu \left( \frac{u_{x2} - u_{x1}}{L} \cos\alpha + \frac{u_{r2} - u_{r1}}{L} \sin\alpha \right) + \frac{u_{r2} + u_{r1}}{2R} \right] \quad (2)$$

$$M_\alpha = \frac{Eh^3}{12(1-\mu^2)} (\kappa_\alpha + \mu\kappa_\beta) = \frac{Eh^3}{12(1-\mu^2)} \left[ \frac{\beta_2 - \beta_1}{L} + \mu \sin\alpha \frac{\beta_2 + \beta_1}{2R} \right] \quad (3)$$

$$M_\beta = \frac{Eh^3}{12(1-\mu^2)} (\kappa_\beta + \mu\kappa_\alpha) = \frac{Eh^3}{12(1-\mu^2)} \left[ \mu \frac{\beta_2 - \beta_1}{L} + \sin\alpha \frac{\beta_2 + \beta_1}{2R} \right] \quad (4)$$

$$Q = \frac{5Eh}{12(1+\mu)} \left[ \frac{u_{x2} - u_{x1}}{L} \sin\alpha + \frac{u_{r2} - u_{r1}}{L} \cos\alpha + \frac{\beta_2 + \beta_1}{2} \right] \quad (5)$$

#### 4.2.5. Rovinná napjatost/deformace, rotačně symetrická tělesa (operace STRESS, elementy PLANE2)

##### Rovinná napjatost

V tomto případě jsou nenulové jen složky napětí v rovině  $x-y$ , dvě normálová a jedno smykové napětí. V rovině kolmé k  $x-y$  je povolena deformace, ale protože odpovídající normálové napětí  $s_{zz}$  je nulové, je nulový i příspěvek příčné deformace k deformační energii tělesa. Odpovídající matice tuhosti elementu je dána integrálem

$$[K] = \iint [B]^T \cdot [D] \cdot [B] dS = \iint \begin{bmatrix} [B_1]^T \\ [B_2]^T \\ \dots \end{bmatrix} \cdot [D] \cdot \begin{bmatrix} [B_1] & [B_2] & \dots \end{bmatrix} dS = \begin{bmatrix} [K_{11}] & [K_{12}] & \dots \\ [K_{21}] & [K_{22}] & \\ \dots & & \end{bmatrix} \quad (1)$$

kde  $D$  je matice elastických konstant a submatice  $K_{ij}$  o rozměru  $2 \times 2$  korespondují kombinaci uzlů  $i$  a  $j$

$$[K_{ij}] = \iint [B_i]^T \cdot [D] \cdot [B_j] dS = \frac{E}{1-\mu^2} \iint \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ 0 & \frac{\partial N_i}{\partial y} & \frac{\partial N_i}{\partial x} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & \mu & 0 \\ \mu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-\mu}{2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \frac{\partial N_j}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_j}{\partial y} \\ \frac{\partial N_j}{\partial y} & \frac{\partial N_j}{\partial x} \end{bmatrix} dS =$$

$$= \frac{E}{1-\mu^2} \iint \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{1-\mu}{2} \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} & \mu \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial y} + \frac{1-\mu}{2} \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial x} \\ \mu \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{1-\mu}{2} \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial y} & \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} + \frac{1-\mu}{2} \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} \end{bmatrix} dS \quad (2)$$

##### Rovinná deformace

Případ kdy je nulová složka tenzoru deformace  $e_{zz}$  se od předchozího případu rovinné napjatosti liší jen jinou maticí elastických konstant

$$[D] = \frac{E(1-\mu)}{(1+\mu)(1-2\mu)} \begin{bmatrix} 1 & \frac{\mu}{1-\mu} & 0 \\ \frac{\mu}{1-\mu} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-2\mu}{2(1-\mu)} \end{bmatrix} \quad (3)$$

### 4.3. RTD zpracování časových závislostí a modely obyčejných diferenciálních rovnic

Pro porovnání nestacionárního řešení získaného metodou konečných prvků s experimentálními daty, dále pro modelování diskrétních systémů (založené na kombinaci elementárních aparátů jako je ideální míšič a ideální trubka), a konečně pro regresní analýzu vypočtených nebo změřených dat se používá matice bodů pozorování, v níž jsou uloženy časové závislosti: První sloupec matice je interpretován jako čas, jemuž odpovídají data ve sloupcích následujících (2,3,...,10). Matice bodů pozorování tedy popisuje až 9 různých funkcí času reprezentovaných tabulkou funkčních hodnot se společnou časovou základnou (matice pozorování má 1024 řádků – bodů pozorování).

Každému sloupci matice bodů pozorování je přiřazena dvojice parametrů: TYP a INDEX, které určují typ veličiny, kterou funkce (sloupec) reprezentuje

- TYP=0 Nedefinovaný (prázdný) sloupec
- TYP=1 Hodnoty času
- TYP=2 Časový průběh vybraného uzlového parametru (INDEX je index uzlu)
- TYP=3 Experimentální data (zpravidla importovaná příkazy READCO, READTC)
- TYP=4 Vzruchová funkce modelu (INDEX je index této funkce u modelů s více vstupy)
- TYP=5 Odezva modelu (INDEX je index funkce u modelů s více výstupy)
- TYP=6 Predikce regresního modelu
- TYP=7 Směrodatná odchylka bodu pozorování  $\sigma$
- TYP=8 Impulsní odezva systému E(t)
- TYP=9 Vzájemná korelační funkce  $R_{xy}(t)$

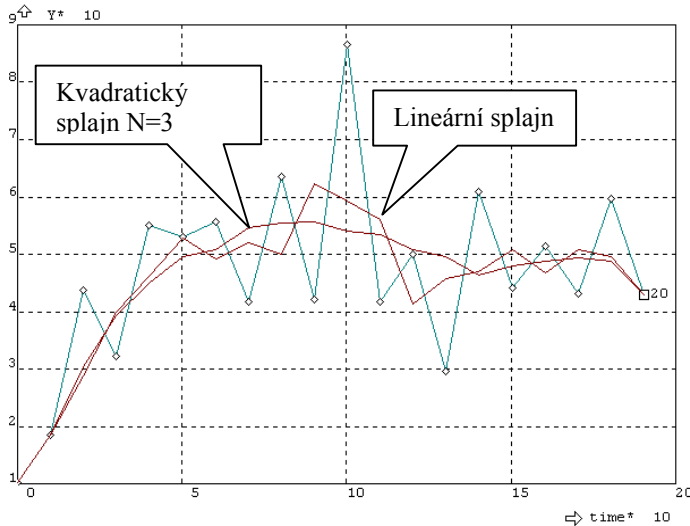
Následující odstavce jsou věnovány stručnému popisu metod, používaných pro zpracování (vyhodnocování, modifikaci či generování) časových závislostí.

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
TIME	EMPTY	EXPERI	EXPERI	EMPTY	EMPTY	EMPTY	EMPTY	EMPTY	EMPTY
1	.00E+00	.20E+00	.10E+00	.10E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00
2	.10E+00	.29E+00	.19E+00	.19E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00
3	.20E+00	.36E+00	.44E+00	.31E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00
4	.30E+00	.42E+00	.32E+00	.39E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00
5	.40E+00	.47E+00	.55E+00	.45E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00
6	.50E+00	.50E+00	.53E+00	.50E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00
7	.60E+00	.53E+00	.56E+00	.51E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00
8	.70E+00	.55E+00	.42E+00	.55E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00
9	.80E+00	.56E+00	.64E+00	.55E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00
10	.90E+00	.57E+00	.42E+00	.56E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00
11	.10E+01	.57E+00	.87E+00	.54E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00
12	.11E+01	.57E+00	.42E+00	.53E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00
13	.12E+01	.56E+00	.50E+00	.51E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00
14	.13E+01	.55E+00	.30E+00	.50E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00
15	.14E+01	.55E+00	.61E+00	.47E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00
16	.15E+01	.53E+00	.44E+00	.48E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00
17	.16E+01	.52E+00	.52E+00	.49E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00
18	.17E+01	.51E+00	.43E+00	.49E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00
19	.18E+01	.50E+00	.60E+00	.49E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00
20	.19E+01	.48E+00	.43E+00	.43E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00	.00E+00

observation matrix 20-rows

### 4.3.1. Vyhlazování funkčních průběhů

V operaci SMOOTH jsou naprogramovány jednoduché metody lokálního vyhlazování dat: mediánová filtrace a lineární nebo kvadratické regresní splajny byť v poněkud nestandardní podobě. Koeficienty splajnů nejsou vyhodnocovány řešením soustavy rovnic, nýbrž rekurzivně od prvního do posledního bodu vyhlazované křivky. Idea vyhlazení je jednoduchá:  $i+1$  bod je počítán jako hodnota lineárního či kvadratického polynomu, který prochází předchozím (již vyhlazeným) bodem  $i$  a současně má nejmenší hodnotu součtu čtverců od  $N$ -původních bodů křivky před bodem  $i$  a od  $N$ -bodů za bodem  $i+1$ . Pro  $N=0$  by tudíž byla výsledkem stejná funkce jako před vyhlazením.



Symbolem  $c$  budeme označovat již vyhlazené, symbolem  $y$  původní hodnoty:

Lineární splajn

$$c = y_i + a_i(t - t_i),$$

a koeficient  $a_i$  vyplyne z podmínky minima součtu čtverců

$$s_i^2 = \sum_{j=i-1}^{i+2} [y_j - y_i - a_i(t_j - t_i)]^2$$

$$a_i = \frac{\sum_{j=i-1}^{i+2} (y_j - c_i) \frac{t_{i+1} - t_j}{t_{i+1} - t_i} (t_j - t_i)}{\sum_{j=i-1}^{i+2} (t_j - t_i)^2}$$

Kvadratický splajn

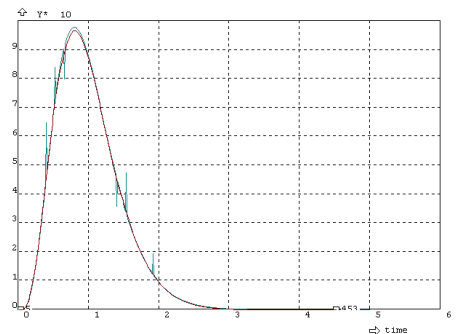
$$c = y_i + a_i(t - t_i) + b_i(t - t_i)^2$$

kde koeficienty  $a_i$   $b_i$  jsou stanoveny z podmínky minima součtu čtverců

$$s_i^2 = \sum_{j=i-N+1}^{i+N} [y_j - y_i - a_i(t_j - t_i) - b_i(t_j - t_i)^2]^2$$

což vede na soustavu dvou lineárních rovnic

$$\begin{pmatrix} \sum_{j=i-N+1}^{i+N} (t_j - t_i)^2 & \sum_{j=i-N+1}^{i+N} (t_j - t_i)^3 \\ \sum_{j=i-N+1}^{i+N} (t_j - t_i)^3 & \sum_{j=i-N+1}^{i+N} (t_j - t_i)^4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_i \\ b_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{j=i-N+1}^{i+N} (t_j - t_i)(y_j - c_i) \\ \sum_{j=i-N+1}^{i+N} (t_j - t_i)^2 (y_j - c_i) \end{pmatrix}$$



Mediánová filtrace spočívá v tom, že místo tabulkové hodnoty  $y_i$  se použije medián hodnot  $y_{i-N}, y_{i-N+1}, \dots, y_{i-1}, y_i, y_{i+1}, \dots, y_{i+N}$ .

#### 4.3.2. Import dat s kvadratickou interpolací

Při čtení dat do matice bodů pozorování se řeší problém interpolace hodnot v tabulce dat  $(t_i, y_i)$ . Nepoužívá se klasická lineární interpolace, ale kvadratický regresní polynom, který prochází dvojicí bodů, ohraničujících interpolovanou hodnotu času  $t$ , a navíc má nejmenší hodnotu součtu čtverců odchylek od dvou sousedních bodů (vlevo a vpravo). Kvadratický interpolační polynom je tedy definován čtveřicí bodů, které označíme  $t_0, \dots, t_3$

$$c = y_1 + a(t - t_1) + b(t - t_1)^2$$

přičemž koeficienty  $a, b$  jsou stanoveny z interpolačních podmínek

$$y_2 = y_1 + a(t_2 - t_1) + b(t_2 - t_1)^2$$

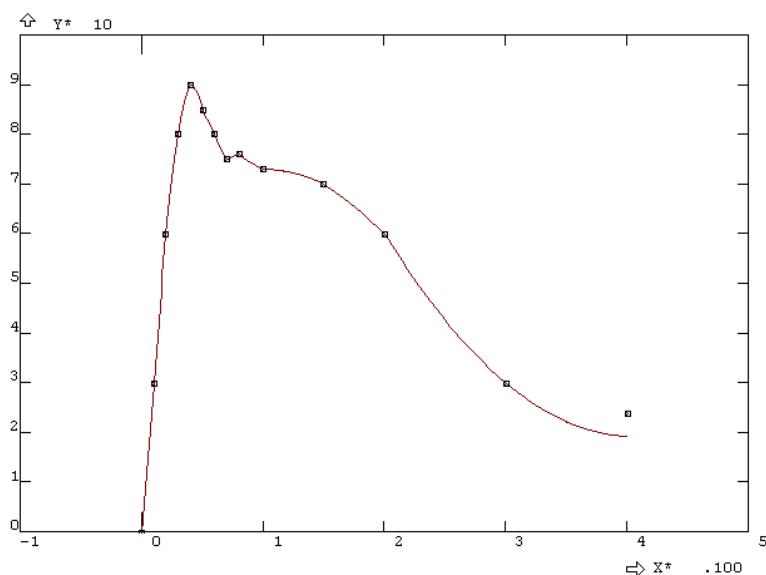
a z podmínky minima součtu čtverců

$$s^2 = \sum_{j=0,3} [y_j - y_1 - a(t_j - t_1) - b(t_j - t_1)^2]^2.$$

Řešením této soustavy rovnic je

$$b = - \frac{\sum_{j=0,3} [y_j - y_1 - (y_2 - y_1) \frac{t_j - t_1}{t_2 - t_1}] [(t_2 - t_1)(t_j - t_1) - (t_j - t_1)^2]}{\sum_{j=0,3} [(t_2 - t_1)(t_j - t_1) - (t_j - t_1)^2]^2}$$

$$a = \frac{y_2 - y_1}{t_2 - t_1} - b(t_2 - t_1)$$



#### 4.3.3. Aproximace chvostu

Pro aproximaci chvostu jsou k dispozici tři možnosti, tři aproximační funkce, identifikované nelineární regresí

míchaná nádoba  $c(t) = y_\infty + a \exp(-bt)$

dvě míchané nádoby  $c(t) = y_\infty + t \exp(a - bt)$

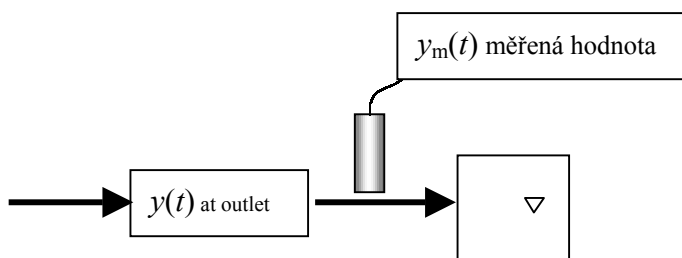
konvektivní model  $c(t) = y_\infty + a/t^3$

Při identifikaci parametrů se nejprve odhadne úroveň pozadí  $y_\infty$  na základě minimálních hodnot zpracovávané funkce, pak se regresní vztahy linearizují a lineární regresí vypočtou koeficienty  $a, b$ . Zpřesnění hodnoty  $y_\infty$  se provádí metodou půlení intervalu.

#### 4.3.4. Korekce na zvýšení pozadí

Případ, kdy limitní hodnota naměřené odezvy  $y_m$  pro nekonečně dlouhý čas je vyšší než počáteční hodnota v čase nula se dá vysvětlit tím, že detektor na výstupu registruje i signál značkovací látky, která se hromadí za výstupem z aparátu (tato hypotéza může být správnou v případě, že jde o měření s radioisotopy):

$$y_m(t) = y(t) + k \int_0^t y(u) du \quad (1)$$



Konstanta  $k$  je dána podílem záření značkovací látky v zásobníku, která je registrována detektorem (závisí na dokonalosti stínění detektoru) a nelze ji stanovit jinak, než na základě registrované hodnoty v čase nekonečno, kdy se již všechna značkovací látka nachází v zásobníku

$$k = \frac{y_m(\infty) - y_m(0)}{\int_0^\infty y(u) du} \quad (2)$$

Integrovní rovnici (1) lze řešit Laplaceovou transformací

$$y(t) = y_m(t) - k \int_0^t y_m(u) e^{-k(t-u)} du \quad (3)$$

Protože konstanta  $k$  závisí na neznámém průběhu signálu  $y(t)$  je třeba řešení hledat iteračně, tj. výpočtem  $y(t)$  z rovnice (3) na základě hodnoty  $k$  z předchozí iterace a jejím následným zpřesněním dle rovnice (2). Výše uvedené vztahy předpokládají, že výchozí (i konečná) hodnota signálu  $y(t)$  je nulová (nulová koncentrace značkovací látky na výstupu). Protože kromě signálu ze zásobníku registruje detektor i přirozené záření pozadí (předpokládejme, že konstantní), je i výchozí hodnota  $y_m(0)$  větší než nula a tuto hodnotu je třeba od výstupního signálu odečíst (což FEMINA dělá automaticky).

#### 4.3.5. Výpočty momentů

Obyčejné momenty jsou počítány numerickou integrací, která vychází z lineární interpolace tabelovaných hodnot funkcí

$$M_0 = \int_0^\infty y(t) dt = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N-1} (y_{i+1} + y_i)(t_{i+1} - t_i)$$

$$M_1 = \int_0^\infty ty(t) dt = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^{N-1} [y_i(t_{i+1}^2 + t_i t_{i+1} - 2t_i^2) - y_{i+1}(t_i^2 + t_i t_{i+1} - 2t_{i+1}^2)]$$

$$M_2 = \int_0^{\infty} t^2 y(t) dt = \sum_{i=1}^{N-1} \left\{ y_i \frac{t_{i+1}^3 - t_i^3}{3} - \frac{y_{i+1} - y_i}{t_{i+1} - t_i} \left[ \frac{t_{i+1}^4 - t_i^4}{4} - \frac{t_i(t_{i+1}^3 - t_i^3)}{3} \right] \right\}$$

#### 4.3.6. Rychlá Fourierova transformace, konvoluce, dekonvoluce a korelace

Pro filtraci šumu, výpočet konvoluce, dekonvoluce a korelací dvou funkcí je používána rychlá Fourierova transformace N-vzorkovaných hodnot (FFT - Fast Fourier Transformation), která je přesnou analogií spojité Fourierovy transformace

$$\tilde{E}(f) = \int_{-\infty}^{\infty} E(t) e^{2\pi i f t} dt, \quad \tilde{E}_n = \sum_{k=0}^{N-1} E_k e^{2\pi i k n / N}, \quad n = 0, 1, \dots, N-1.$$

Zpětná Fourierova transformace (zpětná FFT) se liší jen znaménkem exponentu

$$E(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{E}(f) e^{-2\pi i f t} df, \quad E_k = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \tilde{E}_n e^{-2\pi i k n / N}, \quad k = 0, 1, \dots, N-1.$$

Operace konvoluce funkcí  $x$  a  $y$  ( $C_{xy}(t) = \int x(t-\tau)y(\tau) d\tau$ ) se redukuje na násobení Fourierových obrazů, tj. Fourierových koeficientů

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left( \int_{-\infty}^{\infty} x(t-\tau)y(\tau) d\tau \right) e^{2\pi i f t} dt = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \int_{-\infty}^{\infty} x(t-\tau) e^{2\pi i f(t-\tau)} y(\tau) e^{2\pi i f \tau} d\tau \right) dt = \tilde{x}(f) \tilde{y}(f).$$

a korelace dvou funkcí  $x$  a  $y$  ( $R_{xy}(t) = \int x(\tau)y(\tau+t) d\tau$ ) znamená jen násobení komplexně sdruženého obrazu  $x$  a obrazu  $y$ :

$$\begin{aligned} \tilde{R}_{xy}(f) &= \int_{-\infty}^{\infty} \left( \int_{-\infty}^{\infty} x(\tau)y(\tau+t) d\tau \right) e^{2\pi i f t} dt = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \int_{-\infty}^{\infty} x(\tau) e^{-2\pi i f \tau} y(\tau+t) e^{2\pi i f(\tau+t)} d\tau \right) dt = \\ &= \left( \int_{-\infty}^{\infty} x(\tau) e^{-2\pi i f \tau} d\tau \right) \left( \int_{-\infty}^{\infty} y(\tau) e^{2\pi i f \tau} d\tau \right) = \tilde{x}(-f) \tilde{y}(f) = \tilde{x}^*(f) \tilde{y}(f), \end{aligned}$$

Poznámka: Předchozí vztahy psané pro spojitou FT platí i pro diskrétní data.

Poněkud podrobněji popíšeme způsob, kterým je realizována dekonvoluce, tj. stanovení impulsní odezvy systému  $E(t)$  řešením Volterrový integrální rovnice prvního druhu

$$y(t) = \int_{-\infty}^{\infty} E(t-\tau)x(\tau) d\tau.$$

Koeficienty FFT hledané impulsní odezvy se počítají z koeficientů FFT vstupu  $x(t)$  a odezvy  $y(t)$  regularizací

$$\tilde{E}_i = \frac{\tilde{y}_i \tilde{x}_i^* + W(i-1)^4 \tilde{r}_i}{\tilde{x}_i \tilde{x}_i^* + W(i-1)^4}, \quad W \approx w^2 \left( \frac{2\pi}{N\Delta t} \right)^4$$

kde  $W$  je váhový koeficient regularizace (uživatelé zadávají hodnotu optimální regularizace  $w$  je nezávislá na délce periody  $N\Delta t$  a bývá řádově  $10^{-3}$ ). Z předchozího vztahu je patrné, že pro  $W=0$  jde o klasickou metodu dekonvoluce, počítající FT impulsní odezvy prostě jako podíl FT odezvy  $y$  a vstupu  $x$ .  $W>0$  má smysl zadávat tehdy, když máme silné důvody věřit tomu, že určitý analytický model je dobrou aproximací hledaného řešení:  $\tilde{r}_i$  je Fourierův koeficient tohoto analytického modelu. V programu FEMINA je jako regularizační model použita impulsní odezva serie M-ideálních mísičů

$$\tilde{r}_i = \frac{1}{\left(1 - \frac{2\pi(i-1)t}{MN\Delta t}\right)^M},$$



kde  $\bar{t}$  je střední doba impulsní odezvy a  $N\Delta t$  celková doba – tj. perioda Fourierovy transformace.

#### 4.3.7. Řešení soustavy obyčejných diferenciálních rovnic

Pro řešení soustav obyčejných diferenciálních rovnic prvního řádu

$$\begin{aligned} \frac{dc_1}{dt} &= f_1(t, c_1, c_2, \dots, c_M) \\ \frac{dc_2}{dt} &= f_2(t, c_1, c_2, \dots, c_M) \\ &\dots \\ \frac{dc_M}{dt} &= f_M(t, c_1, c_2, \dots, c_M) \end{aligned} \quad \frac{d\vec{c}}{dt} = \vec{f}(t, \vec{c})$$

je použita klasická Eulerova metoda

$$\vec{c}(t + \Delta t) = \vec{c}(t) + \Delta t \vec{f}(t, \vec{c}(t))$$

popřípadě metoda Runge Kutta čtvrtého řádu

$$\vec{c}(t + \Delta t) = \vec{c}(t) + \frac{\vec{k}_1}{6} + \frac{\vec{k}_2}{3} + \frac{\vec{k}_3}{3} + \frac{\vec{k}_4}{6}$$

kde

$$\begin{aligned} \vec{k}_1 &= \Delta t \vec{f}(t, \vec{c}(t)) \\ \vec{k}_2 &= \Delta t \vec{f}\left(t + \frac{\Delta t}{2}, \vec{c}(t) + \frac{\vec{k}_1}{2}\right) \\ \vec{k}_3 &= \Delta t \vec{f}\left(t + \frac{\Delta t}{2}, \vec{c}(t) + \frac{\vec{k}_2}{2}\right) \\ \vec{k}_4 &= \Delta t \vec{f}(t + \Delta t, \vec{c}(t) + \vec{k}_3) \end{aligned}$$

Při řešení metodou Runge Kutta lze v programu FEMINA zvolit konstantní časový integrační krok  $\Delta t$  (do matice bodů pozorování se ukládá jen každý m-tý integrační krok – pozor, neztotožňujte integrační krok se základním krokem datové základny, který bývá větší). Je ale též možné zvolit proměnný integrační krok nastavovaný tak, aby bylo dosaženo požadované relativní přesnosti  $\varepsilon$ . Ta se odhaduje metodou půlení časového kroku: každý integrační krok se provede jednou s délkou  $\Delta t$  a poté se dvěma polovičními kroky  $\Delta t/2$  – rozdíl výsledků je měřítkem aproximační chyby a na základě srovnání s chybou požadovanou se integrační krok buď zkrátí nebo prodlouží. Vyžaduje to o něco větší objem výpočtů, ale skutečnost, že v každém časovém kroku jsou k dispozici výsledky získané s různým časovým krokem, se využije ke zlepšení přesnosti výsledku Aitkenovou metodou.

Používají se následující vztahy

$$\text{Odhadnutá relativní chyba v integračním kroku} \quad \varepsilon_{\max} = \max_j \frac{|y_{j,\Delta t/2} - y_{j,\Delta t}|}{|y_{j,\Delta t/2}|}, \quad \varepsilon^* = \frac{\varepsilon_{\max}}{\varepsilon}.$$

Pokud je  $\varepsilon^* > 1$ , nebylo dosaženo požadované přesnosti a integrační krok se zkracuje dle vztahu

$$\Delta t \leftarrow \frac{0.9\Delta t}{\sqrt[4]{\varepsilon^*}}.$$

V opačném případě ( $\varepsilon^* < 1$ ) a současně tehdy, když v aktuálním integračním kroku nebylo nutné jeho zkracování, se integrační krok prodloužuje (maximálně na čtyřnásobek)

$$\Delta t \leftarrow \frac{0.9\Delta t}{\sqrt[5]{\varepsilon^*}}.$$

Extrapoláční zpřesnění výsledků vychází z faktu, že použitá varianta metody Runge Kutta je čtvrtého řádu přesnosti, což znamená, že přibližně platí

$$y_{\Delta t} = y + k\Delta t^4 \quad \text{vztah mezi správnou hodnotou } y \text{ a hodnotou vyčíslenou numericky s krokem } \Delta t$$

$$y_{\Delta t/2} = y + k(\Delta t/2)^4 \quad \text{vztah mezi } y \text{ a hodnotou vyčíslenou numericky s krokem } \Delta t/2 \text{ (dva půlkroky).}$$

Protože hodnoty  $y_{\Delta t}$  a  $y_{\Delta t/2}$  jsou známy, lze z předchozích rovnic vypočítat neznámý koeficient  $k$  a „správnou“ hodnotu  $y$

$$y_j = y_{j,\Delta t/2} + \frac{1}{15}(y_{j,\Delta t/2} - y_{j,\Delta t}).$$

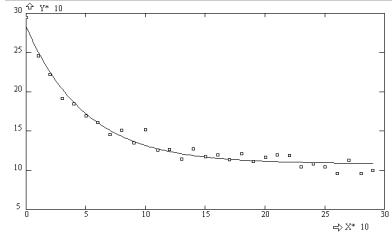
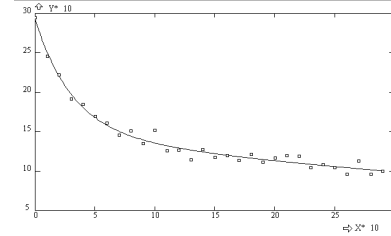
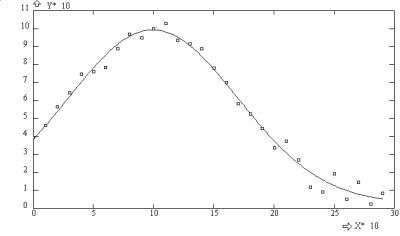
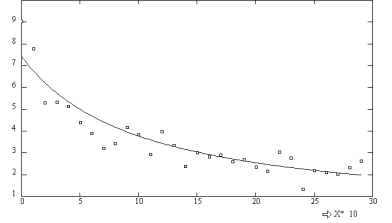
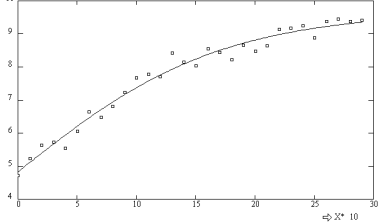
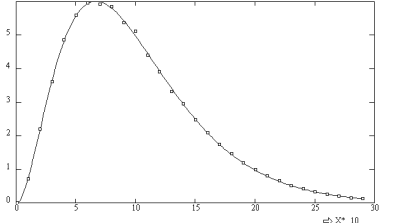
Jednotlivé modely jsou definovány v souborech, jejichž popis byl uveden v kapitole 3.

### 4.3.8. Lineární a nelineární regresní analýza

Lineární regrese polynomiální

$$y = a_1 + a_2x + \dots + a_{N+1}x^N$$

Modely použité při nelineární analýze

<p><b>EXPONENCIÁLA</b></p> $y = a_1 + a_2e^{-a_3x}$ $\frac{\partial y}{\partial a_1} = 1$ $\frac{\partial y}{\partial a_2} = e^{-a_3x}$ $\frac{\partial y}{\partial a_3} = -a_2xe^{-a_3x}$ <p style="text-align: center;"><b>1</b></p>	<p><b>DVOJITÁ EXPON.</b></p> $y = a_1 + a_2e^{-a_4x} + a_3e^{-a_5x}$ $\frac{\partial y}{\partial a_1} = 1$ $\frac{\partial y}{\partial a_2} = e^{-a_4x}$ $\frac{\partial y}{\partial a_3} = e^{-a_5x}$ $\frac{\partial y}{\partial a_4} = -a_2xe^{-a_4x}$ $\frac{\partial y}{\partial a_5} = -a_3xe^{-a_5x}$ <p style="text-align: center;"><b>2</b></p>	<p><b>GAUSSOVA FUNKCE</b></p> $y = a_1 + a_2e^{-\frac{(x-a_3)^2}{a_4}}$ $\frac{\partial y}{\partial a_1} = 1$ $\frac{\partial y}{\partial a_2} = e^{-\frac{(x-a_3)^2}{a_4}}$ $\frac{\partial y}{\partial a_3} = 2a_2 \frac{x-a_3}{a_4^2} e^{-\frac{(x-a_3)^2}{a_4}}$ $\frac{\partial y}{\partial a_4} = 2a_2 \frac{(x-a_3)^2}{a_4^3} e^{-\frac{(x-a_3)^2}{a_4}}$ <p style="text-align: center;"><b>3</b></p>
<p><small>NONLINEAR REGRESSION AT (EXP) (A3*)</small></p> <p><small>1 parameters:</small>  <small>100E+01 174E+01 202E+01</small>  <small>30 Data points CH2D= 1770E+02 Probability Q= 929E+00</small></p> 	<p><small>NONLINEAR REGRESSION AT (EXP) (A4*) (A5*)</small></p> <p><small>2 parameters:</small>  <small>100E+00 141E+01 112E+01 320E+01 200E+00</small>  <small>30 Data points CH2D= 1002E+02 Probability Q= 934E+00</small></p> 	<p><small>NONLINEAR REGRESSION AT (EXP) (A3*) (A4*)</small></p> <p><small>4 parameters:</small>  <small>100E+01 303E+00 303E+00 500E+00</small>  <small>30 Data points CH2D= 4400E+01 Probability Q= 100E+01</small></p> 
<p><b>RACIONÁLNÍ FUNKCE</b></p> $y = \frac{a_1 + a_2x}{1 + a_3x}$ $u_x = \frac{\partial \psi}{\partial y}$ $\frac{\partial y}{\partial a_2} = \frac{x}{1 + a_3x}$ $\frac{\partial y}{\partial a_3} = -x \frac{a_1 + a_2x}{1 + a_3x}$ <p style="text-align: center;"><b>4</b></p>	<p><b>LOGISTIKA</b></p> $y = \frac{a_1}{1 + a_2e^{-a_3x}}$ $\frac{\partial y}{\partial a_1} = \frac{1}{1 + a_2e^{-a_3x}}$ $\frac{\partial y}{\partial a_2} = -\frac{a_1e^{-a_3x}}{(1 + a_2e^{-a_3x})^2}$ $\frac{\partial y}{\partial a_3} = \frac{a_1a_3xe^{-a_3x}}{(1 + a_2e^{-a_3x})^2}$ <p style="text-align: center;"><b>5</b></p>	<p><b>SERIE</b></p> $y = a_1x^{a_3-1}e^{-a_2x}$ $\frac{\partial y}{\partial a_1} = x^{a_3-1}e^{-a_2x}$ $\frac{\partial y}{\partial a_2} = -a_1x^{a_3}e^{-a_2x}$ $\frac{\partial y}{\partial a_3} = a_1x^{a_3-1}e^{-a_2x} \ln x$ <p style="text-align: center;"><b>6</b></p>
<p><small>NONLINEAR REGRESSION AT (EXP) (A3*)</small></p> <p><small>3 parameters:</small>  <small>140E+00 110E+01 300E+00</small>  <small>30 Data points CH2D= 1174E+02 Probability Q= 807E+00</small></p> 	<p><small>NONLINEAR REGRESSION AT (EXP) (A3*)</small></p> <p><small>3 parameters:</small>  <small>100E+00 300E+00 112E+01</small>  <small>30 Data points CH2D= 1002E+01 Probability Q= 100E+01</small></p> 	<p><small>NONLINEAR REGRESSION AT (EXP) (A3*) (A2*)</small></p> <p><small>3 parameters:</small>  <small>100E+01 500E+01 300E+01</small>  <small>30 Data points CH2D= 5441E+03 Probability Q= 100E+01</small></p> 

### AXIÁLNÍ DISPERSE I.

$$y = \frac{a_1}{\sqrt{x}} e^{-a_2 \frac{(x-a_3)^2}{x}}$$

7

$$\frac{\partial y}{\partial a_1} = \frac{1}{\sqrt{x}} e^{-a_2 \frac{(x-a_3)^2}{x}}$$

$$\frac{\partial y}{\partial a_2} = -\frac{a_1 (x-a_3)^2}{x\sqrt{x}} e^{-a_2 \frac{(x-a_3)^2}{x}}$$

$$\frac{\partial y}{\partial a_3} = \frac{2a_1 a_2 (x-a_3)}{x\sqrt{x}} e^{-a_2 \frac{(x-a_3)^2}{x}}$$

### AXIÁLNÍ DISPERSE II.

$$y = \frac{a_1}{x\sqrt{x}} e^{-a_2 \frac{(x-a_3)^2}{x}}$$

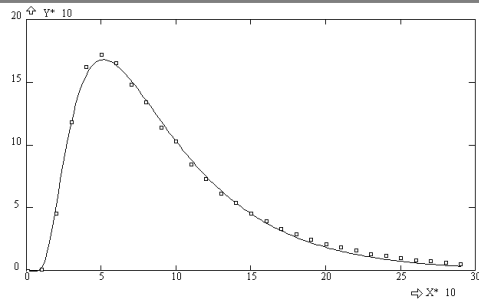
8

$$\frac{\partial y}{\partial a_1} = \frac{1}{x\sqrt{x}} e^{-a_2 \frac{(x-a_3)^2}{x}}$$

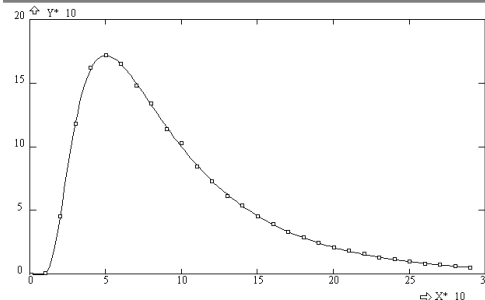
$$\frac{\partial y}{\partial a_2} = -\frac{a_1 (x-a_3)^2}{x^2 \sqrt{x}} e^{-a_2 \frac{(x-a_3)^2}{x}}$$

$$\frac{\partial y}{\partial a_3} = \frac{2a_1 a_2 (x-a_3)}{x^2 \sqrt{x}} e^{-a_2 \frac{(x-a_3)^2}{x}}$$

NONLINEAR REGRESSION A1\*exp(-(A3-X)\*\*2/D1\*.5)  
3-parameters:  
.127E+01 .170E+01 .545E+00  
30 data points CHISQ= .2415E+01 Probability Q= .100E+01



NONLINEAR REGRESSION A1\*exp(-(A3-X)\*\*2/D1\*.5)  
3-parameters:  
.998E+00 .100E+01 .998E+00  
30 data points CHISQ= .2557E+00 Probability Q= .100E+01



Pro nelineární regresi dat se dvěma nezávislými proměnnými jsou k dispozici následující modely

Lineární polynom

$$y = a_1 + a_2 x_1 + a_3 x_2$$

Bilineární polynom

$$y = a_1 + a_2 x_1 + a_3 x_2 + a_4 x_1 x_2$$

Kvadratický polynom

$$y = a_1 + a_2 x_1 + a_3 x_2 + a_4 x_1 x_2 + a_5 x_1^2 + a_6 x_2^2$$

Exponenciální model

$$y = a_1 + (a_2 + a_3 x_1 + a_4 x_2) \exp(a_5 x_1 + a_6 x_2)$$

Mocninový model

$$y = a_1 x_1^{a_2} x_2^{a_3}, \quad y = a_1 + a_2 x_1^{a_3} x_2^{a_4}$$

Racionální mocninový

$$y = a_1 + a_2 \frac{x_1^{a_3} x_2^{a_4}}{1 + a_5 x_1^{a_6} x_2^{a_7}}$$

### 4.3.9. Optimalizace (operace OPTIMA a SOMA)

Základní metoda použitá pro optimalizaci obecného matematického modelu systému OPTIMA je stejná jako při řešení nelineární regrese – Marquardt Levenberg. Je založena na linearizaci optimalizovaného modelu  $f(x_i, p_1, \dots, p_M) = f_i$ , kde  $x_i$  jsou nezávisle proměnné  $i$ -tého bodu pozorování a  $p_1, \dots, p_M$  jsou optimalizované parametry modelu.

$$s^2 = \sum_i (y_i - f_i)^2 w_i \quad (1)$$

$$\frac{\partial s^2}{\partial p_j} = 2 \sum_i (y_i - f_i) \frac{\partial f_i}{\partial p_j} w_i \equiv 0 \quad (2)$$

$$\sum_i (y_i - f_{i0} - \sum_k \frac{\partial f_i}{\partial p_k} \Delta p_k) \frac{\partial f_i}{\partial p_j} w_i \equiv 0, \quad (3)$$

kde  $\Delta p_k = p_k - p_{k0}$  je hledaný přírůstek  $k$ -tého parametru v prováděném iteračním kroku. Pro vektor přírůstků parametrů tedy získáváme soustavu lineárních algebraických rovnic

$$\sum_k C_{jk} \Delta p_k = B_j \quad (4)$$

kde

$$C_{jk} = \sum_i \frac{\partial f_i}{\partial p_j} \frac{\partial f_i}{\partial p_k} w_i, \quad B_j = \sum_i \frac{\partial f_i}{\partial p_j} (y_i - f_{i0}) w_i. \quad (5)$$

V případě, že model je vzhledem k určovaným parametrům lineární, stačí jediná iterace spočívající v řešení soustavy rovnic (4). Zpravidla jsou však některé parametry nelineární a v tom případě se iteruje: v každé iteraci se nejprve stanoví přesné hodnoty lineárních parametrů modelem řešením soustavy (4) s tím, že nelineární parametry jsou fixované. Poté se řeší úplný systém rovnic pro všechny, tj. lineární i nelineární parametry, ale soustava rovnic (4) je modifikována přičtením kladného parametru  $\lambda$  k diagonálním prvkům matice tak, aby byla posílena diagonální dominance matice soustavy. Předtím je provedeno škálování soustavy spočívající v transformaci, jejímž výsledkem je ekvivalentní soustava rovnic, ale s jedničkami na diagonále:

$$\sum_k C_{jk}^* \Delta p_k^* = B_j^* \quad (6)$$

$$C_{jk}^* = \frac{C_{jk}}{\sqrt{C_{jj} C_{kk}}}, \quad C_{jj}^* = 1 + \lambda, \quad B_j^* = \frac{B_j}{\sqrt{C_{jj}}}, \quad \Delta p_k^* = \Delta p_k \sqrt{C_{kk}} \quad (7)$$

Pro řešení soustavy rovnic (6) je použita Gaussova eliminace (Gaussova Jordanova redukce), vektor vypočtených přírůstků je odškálován

$$\Delta p_k = \frac{\Delta p_k^*}{\sqrt{C_{kk}}} \quad (8)$$

a přičten k vektoru optimalizovaných parametrů z předchozí iterace.

Hodnota parametru  $\lambda$  se po provedení každé iterace modifikuje: pokud došlo ke zlepšení výsledku, tj. ke zmenšení váženého součtu čtverců odchylek, hodnota  $\lambda$  se desetkrát zmenší (pro nulové  $\lambda$  by se vlastně řešila nemodifikovaná soustava normálních rovnic, což je klasická Gaussova metoda), v opačném případě se  $\lambda$  desetkrát zvětšuje (tj. zvyšuje se diagonální dominance matice soustavy, čímž se algoritmus přibližuje k metodě gradientní).

Kromě této metody je implementován i algoritmus SOMA (Zelinka 2002), který nevyžaduje vyčíslování derivací účelové funkce a je tudíž mnohem jednodušší, spolehlivější, ale také výrazně pomalejší. Je to algoritmus nazývaný memetický, který modeluje pohyb několika jedinců (pod pojmem

jedinec se chápe řešení matematického modelu pro určité hodnoty parametrů) po hyperploše. Princip je triviální:

- Vygeneruje se NSPEC náhodných řešení (jedinců) generátorem náhodných čísel. Všichni jedinci musí ležet v zadávaném intervalu parametrů modelu – na zadání těchto mezí nesmírně závisí efektivita řešení (pokud je tento interval příliš široký, bylo by třeba extrémně velkého počtu iterací).
- Z náhodně vygenerovaných jedinců se vybere ten nejlepší (řešení s nejmenší odchylkou predikce od referenčních dat). Tomuto řešení se říká LEADER.
- Cyklus iterací, v terminologii SOMy tzv. migračních kol. V každém kole se každý z NSPEC jedinců pohybuje ve směru k LEADERovi a to po krocích o délce STEP (přesněji řečeno STEP je relativní délka kroku vzhledem k vzdálenosti mezi počáteční polohou jedince a polohou LEADERa), počet kroků je MASS/STEP (MASS je zadávaný řídicí parametr, stejně jako STEP a NSPEC). V prostoru parametrů modelu se tedy postupně vyhodnocují řešení, odpovídající přímce – spojnici výchozího vektoru parametrů modelu a nejlepšího vektoru parametrů z předchozího migračního kola. Ve skutečnosti je ale směr tohoto vektoru úmyslně trochu narušen použitím generátoru náhodných čísel tak, aby ne všechny trajektorie jedinců směřovaly k LEADERovi. Říká se tomu perturbace směru a její míra je určována parametrem PRT: když je PRT=1 žádná porucha se neuplatní, a čím je hodnota PRT menší (ale musí být stále větší než 0), tím větší je směrová odchylka od směru k LEADERovi (dělá se to tak, že některé náhodně zvolené parametry modelu se prostě zafixují, a čím menší je PRT, tím více parametrů je fixováno). Migrační kolo končí tím, že se každý jedinec přesune do té polohy, kde dosáhl svého nejlepšího výsledku, a poté se vybere nový LEADER.

## Příloha Výpis společných proměnných ukládaných do databáze

```
C SFEM for FEMINF
  INCLUDE '$FEM-PAR'
  INCLUDE '$FEM-COM'

C SFEM-PAR AMETERS for /$FEM/
C FINITE ELEMENTS DATABASE pro 3D (popis viz. $FEM)
C
C $LEPAR=90 - zacatek zony indexu parametru elementu
C napr. $LEPAR+$ENALFA=91 pozice prvnio indexu ENA
C $LDOF =10 - zacatek zony indexu DOF (TEMP,UX,...)
C $LELEM=70 - zacatek zony indexu nazvu elementu (PIPE2D,...)
C $LMETHOD=120-zacatek zony indexu nazvu metod (UVP,...)
C
  INTEGER
  / $LEPAR,
  / $ENALFA, $ENBETA, $EMALFA, $EMBETA, $EQZ,
  / $EQ, $ERE, $ETAU, $EFOUL, $EDISS, $ELAV,
  / $EII, $EGTX, $EGTY, $EGTZ, $ESXX, $ESYY,
  / $ESXY, $EMISE, $EPOWER, $ETMEAN, $EE1, $EE2,
  / $EVX, $EVY, $EVZ, $EALPHA, $ENU,
  / $LDOF,
  / $TEMP, $UX, $UY, $UZ, $RX, $RY, $RZ, $VOLT, $VX, $VY, $VZ, $PRES,
  / $OMG, $PS, $PSX, $PSY, $PSXX, $PSYY, $PSXY,
  / $CN, $CD, $CA, $TK, $STEPS, $FILM,
  / $LELEM,
  / $PIPE2D, $PIPE3D, $TRUSS2D, $TRUSS3D, $BEAM2D, $BEAM3D,
  / $CSTR, $PUMP, $VALVE, $SHELLAX, $HEXC, $PLANE2D, $FLOW2D, $SOLID,
  / $LMETHOD,
  / $UVP, $UVPP, $MIKE, $PENS, $MIDE, $PSIN, $PSBL, $CREE, $PSOM,
  / $CARE, $CHEV, $STUB, $HAIR,
  / $ELEC, $FLOW, $THER, $CONC, $STAT,
  / $KX, $CP, $RHO, $KAPPA, $E, $MI, $VISC, $BETA, $DN, $EN, $AN, $ALEX,
  / $ENAME, $ST, $GAUSS, $AXIS, $STRESS, $METHOD, $FI, $HEAT,
  / $H, $D, $P, $ALFA, $TE, $AREA, $PERIM, $VOL, $DUDY, $JZ,
  / $CONV, $BUOY, $OHMIC, $UPW, $FOUL, $HEPI,
  / $TEMPEPS, $UEPS, $REPS, $VOLTEPS, $VEPS, $PRESEPS,
  / $OMGEPS, $PSEPS, $PSDEPS, $CNEPS
  PARAMETER (
  / $LEPAR=90,
  / $ENALFA=1, $ENBETA=2, $EMALFA=3, $EMBETA=4, $EQZ=5,
  / $EQ=6, $ERE=7, $ETAU=8, $EFOUL=9, $EDISS=10, $ELAV=11, $EII=12,
  / $EGTX=13, $EGTY=14, $EGTZ=15, $ESXX=16, $ESYY=17, $ESXY=18,
  / $EMISE=19, $EPOWER=20, $ETMEAN=21, $EE1=22, $EE2=23,
  / $EVX=24, $EVY=25, $EVZ=26, $EALPHA=27, $ENU=28,
  / $LDOF=10,
  / $TEMP=1, $UX=2, $UY=3, $UZ=4, $RX=5, $RY=6, $RZ=7,
  / $VOLT=8, $VX=9, $VY=10, $VZ=11, $PRES=12, $OMG=13,
  / $PS=14, $PSX=15, $PSY=16, $PSXX=17, $PSYY=18, $PSXY=19,
  / $CN=20, $CD=21, $CA=22, $TK=23, $STEPS=24, $FILM=25,
  / $LELEM=70,
  / $PIPE2D=1, $PIPE3D=2, $TRUSS2D=3, $TRUSS3D=4, $BEAM2D=5, $BEAM3D=6,
  / $CSTR=7, $PUMP=8, $VALVE=9, $SHELLAX=10, $HEXC=11, $PLANE2D=12,
  / $FLOW2D=13, $SOLID=17,
  / $LMETHOD=120,
  / $UVP=1, $UVPP=2, $MIKE=3, $PENS=4, $MIDE=5, $PSIN=6, $PSBL=7, $CREE=8,
  / $PSOM=9, $CARE=10, $CHEV=11, $STUB=12, $HAIR=13,
  / $ELEC=1, $FLOW=2, $THER=3, $CONC=4, $STAT=5,
  / $KX=1, $CP=2, $RHO=3, $KAPPA=4, $E=5, $MI=6, $VISC=7, $BETA=8, $DN=9,
  / $EN=10, $AN=11, $ALEX=18,
  / $ENAME=1, $ST=2, $GAUSS=3, $AXIS=4, $STRESS=5, $METHOD=6, $FI=7,
  / $HEAT=8,
  / $H=1, $D=2, $P=3, $ALFA=4, $TE=5, $AREA=6, $PERIM=7, $VOL=8, $DUDY=10,
  / $JZ=11,
  / $CONV=2, $BUOY=3, $OHMIC=4, $UPW=5, $FOUL=6, $HEPI=9,
  / $TEMPEPS=11, $UEPS=12, $REPS=13, $VOLTEPS=14, $VEPS=15, $PRESEPS=16,
  / $OMGEPS=17, $PSEPS=18, $PSDEPS=19, $CNEPS=20)

  PARAMETER (MAXND=50000, MAXDOF=17, MAXTDOF=30, MAXEL=50000,
  / MAXANA=3, MAXEPAR=14, MAXTEPAR=28, MAXELEM=19,
  / MAXMET=13,
  / MAXMGROUP=8, MAXMRCONS=10, MAXMMPROP=5,
  / MAXNGROUP=8, MAXNRCONS=11, MAXNMPROP=18)
  PARAMETER (MAXPT=100, MAXCR=100, MAXSF=100, MAXVL=10)
  PARAMETER (MAXAUX=140)
  PARAMETER (MAXCON=300)
```

```
PARAMETER (MIFUN=-10,MAFUN=50,MAXFUN=9,MAXRPN=200,  
/  
MAXTAB=9,MAXTPT=8)  
PARAMETER (MAXMRPN=2000,MAXMCON=200,MAXCMOD=200,MAXPMOD=20,  
/  
MAXINPUTS=5,MAXOUTPUTS=5,MAXMOD=200)  
PARAMETER (LENLIN=120,LENITE=80,LENDIAL=48,LENMODEL=8000,  
/  
MAXPAR=38,MAXLABELS=100,MAXLINES=200)  
PARAMETER (MAXNTS=1024,MAXSEL=10)  
PARAMETER (MAXDET=10)  
PARAMETER (MAXEXCOM=10,MAXOPER=5)  
PARAMETER (MAXATR=300)  
PARAMETER (MAXCIND=30)
```



```

C SFEM-COM (konstanty jsou definovane v $fem-par)
C MAXAUX=120
C
C STRUCNY PREHLED=====
C
C COMMON /FEM/
C IAUX (MAXAUX) ,
C NPT, NCR, NSF, NVL,
C NE, ND, KELEM, KOPER, KANAL, NEPAR (MAXELEM) , MDOF, NDOF, JDOF (MAXDOF) ,
C NTSTEP, DTIME,
C IALGOR (50) , RALGOR (50) ,
C MGROUP, MRCONS, MMPROP,
C NGROUP (MAXELEM) , NRCONS (MAXELEM) , NMPROP (MAXELEM) ,
C LGROUP (MAXELEM, MAXNGROUP) , JGROUP (MAXMGROUP, MAXNGROUP) ,
C LRCONS (MAXELEM, MAXNRCONS) , RRCONS (MAXMRCONS, MAXNRCONS) ,
C LMPROP (MAXELEM, MAXNMPROP) , RMPROP (MAXMMPROP, MAXNMPROP) ,
C JMPROP (MAXMMPROP, MAXNMPROP) ,
C IUE (4*MAXEL) , LUE (MAXEL+1) , MUE (MAXEL) ,
C JEPAR (MAXELEM, MAXEPAR) ,
C KEPAR (MAXELEM, MAXEPAR) ,
C LEPAR (MAXELEM, MAXTEPAR) ,
C EPAR (MAXEL, MAXEPAR) ,
C IGROUP (MAXEL) , IRCONS (MAXEL) , IMPROP (MAXEL) ,
C XX (MAXND) , YY (MAXND) , ZZ (MAXND) ,
C JPU (MAXDOF) , KPU (MAXDOF) , LPU (MAXTDOF) ,
C IPU (MAXND*MAXDOF) , VAL (MAXND*MAXDOF, 4) ,
C XGR (MAXND) , VGR (MAXND) ,
C XBOXMI, XBOXMA, DXBOX, NXBOX,
C YBOXMI, YBOXMA, DYBOX, NYBOX,
C ZBOXMI, ZBOXMA, DZBOX, NZBOX,
C PTX (MAXPT) , PTY (MAXPT) , PTZ (MAXPT) , NEARND (MAXPT) ,
C ISF (8, MAXSF) , MSF (MAXSF) ,
C ICR (3, MAXCR) , MCR (MAXCR) , NXCR (MAXCR) , FLAFI (MAXCR) ,
C IVL (20, MAXVL) , MVL (MAXVL) ,
C DOFMIN (MAXTDOF) , DOFMAX (MAXTDOF) ,
C DOFRESI (MAXTDOF) , DOFMEAN (MAXTDOF) ,
C IMARK (MAXTDOF) , IACT (8) ,
C IICONS (MAXCON) ,
C INDFUN (MIFUN:MAFUN) ,
C MFUNCT, MRPN (MAXFUN) , IRPN (MAXRPN, MAXFUN) ,
C MTABLE, KTABLE (MAXTAB) ,
C MTPT (MAXTAB) , XTAB (MAXTPT, MAXTAB) , YTAB (MAXTPT, MAXTAB) ,
C IMODELA, MIRPN, MMRPN, NUMLINES, LINESRPN (MAXLINES) ,
C MODRPN (MAXMRPN) , MODCON (MAXMCON) ,
C CMODEL (MAXCMOD, 2) ,
C IDENUM, METHOD, NEQUAT,
C NINPUTS, MINPUTS (MAXINPUTS) , XINPUTS (MAXINPUTS) ,
C NOUTPUTS, MOUTPUTS (MAXOUTPUTS) , YOUTPUTS (MAXOUTPUTS) ,
C NUMODP,
C PMODEL (MAXPMOD) , RMODEL (MAXPMOD) , ZMINP (MAXPMOD) , ZMAXP (MAXPMOD) ,
C LMODEL (MAXPMOD) , JMODEL (MAXPMOD) , KMODEL (MAXPMOD) ,
C RP (MAXPAR) , IP (MAXPAR) , LAST, ISEMI,
C NLABELS, LABELINE (MAXLABELS) ,
C LOOPMAX (MAXLABELS) , LOOPCOUNT (MAXLABELS) , LOOPLINE (MAXLABELS) ,
C NGR, YGR (MAXNTS, MAXSEL) ,
C INDG (MAXSEL) , IQGR (MAXSEL) ,
C KCOMP, SCOMP, NCOMP, ICOMP (3, MAXSEL/2) , ICOMP1, ICOMP2,
C XDET (MAXDET, 2) , YDET (MAXDET, 2) , ZDET (MAXDET, 2) , DDET (MAXDET) ,
C ANGDET (MAXDET) , DISDET (MAXDET) , ATEDET (MAXDET) ,
C GFIX, GFY, GFZ, CFIX, CFY, CFZ, SFIX, SFY, SFZ,
C XVIEW, YVIEW, ZVIEW,
C NEXCOM, NEXPAR (MAXEXCOM) , DEXPAR (MAXPAR, MAXEXCOM) ,
C NMODELS,
C READFI, RECORD, READMA,
C PROBLEM, FILENAM, FILEDAT, FILEXPERI (MAXSEL) ,
C LABELS (MAXLABELS) ,
C NEXKWD (MAXEXCOM) , NEXFILE (MAXEXCOM) , NEXPARTXT (MAXPAR, MAXEXCOM) ,
C MODKWD (MAXMOD) , MODFILE (MAXMOD) ,
C MODTXT, MODPARTXT (MAXPMOD) , VARTXT (MAXPMOD) ,
C TP (MAXPAR) , FUNTXT (MAXFUN) ,
C TDOF (MAXTDOF) , TELEM (MAXELEM) ,
C TGROUP (MAXNGROUP) , TRCONS (MAXNRCONS) , TMPROP (MAXNMPROP) ,
C TANAL (MAXANA) , TEPAR (MAXTEPAR) , TOPER (MAXOPER) , TTC (20) ,
C TMETHOD (MAXMET) , KEYW8, IENDCHECK
C
C UPLNY POPIS=====
C Zona IAUX je vicemene pracovni, nejsou v ni ulozena stala data.
C Cast A,...Z je vyhrazena uzivateli bez blizsiho urceni.
C Prvni promenne TIME,X,Y,Z a druhy invariant (tenzoru deformace, resp. rychlosti deformace)

```

C jsou hodnoty, které se aktualizují v jednotlivých uzlech nebo elementech a  
 C používají je pak uživatelsky definované funkce či tabulky definující viskozitu a  
 C další proměnné termofyzikální vlastnosti. U proměnných DOF (TEMP,...) an EPAR (ENA,...)  
 C je to trochu složitější: před zpracováním příkazového řádku v režimu dialogu jsou  
 C tyto proměnné přiřazeny indexy 1,2,... (např. TEMP=1,UX=2,..., PIPE2D=1,...,ENA=1,...)  
 C a příslušnou entitu je pak možné vybrat buď jejím jménem nebo přímo odpovídajícím indexem.  
 C Při vyhodnocování závislosti (např. teplotních) jsou tyto proměnné přiřazovány aktuální  
 C příslušné hodnoty teplot, posuvu,... ve zpracováváných elementech.

```

C
C   IAUX:
C           1  2  3  4  5  6  7  8  9 10
C           TIME, X, Y, Z, SINVAR, free, free, free, free, free,
C
C   DOF:
C           11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22
C           TEMP, UX, UY, UZ, RX, RY, RZ, VOLT, VX, VY, VZ, PRES,
C
C           23 24 25 26 27 28 29
C           OMG, PS, PSX, PSY, PSXX, PSYY, PSXY,
C
C           30 31 32 33 34 35 36 37 38 39 40
C           CN, CD, CA, KT, EPS, FILM, d26, d27, d28, d29, d30
C
C   USER:
C           41 42 66 free: 67 68 69 70
C           A, B,..., Z, pro interpret
C
C   ELEMENT:
C           71 72 73 74 75 76 77 78
C           PIPE2D PIPE3D TRUSS2D TRUSS3D BEAM2D BEAM3D CSTR PUMP
C
C           79 80 81 82 83 84 85 86
C           VALVE SHELLAX HEXCH PLANE2D FLOW2D FLOW3D FLOWT2D FLOWT3D
C
C           87 88 89 free: 90
C           PSI PLINK MASS
C
C   EPAR:
C           91 92 93 94 95 96 97 98
C           ENA ENB EMA EMB EQZ EQ ERE ETAU
C
C           99 100 101 102 103 104 105 106
C           EFOUL EDISS ELAV EII EGTX EGTY EGTZ ESXX
C
C           107 108 109 110 111 112 113 114
C           ESYX ESXY EMISE EPOWER ETMEAN EE1 EE2 EVX
C
C           115 116 117 free: 118,...,120
C           EVY EVZ EALPHA
C
C   METFLOW:
C           121 122 123 124 125 126 127 128 129
C           UVP UVPP MIKE PENS MIDE PSIN PSBL CREE PSBL
C
C           free: 130,...,136

```

```

C IFISTEP - interpretace krok po kroku
C ICOUNTS - citac elementu (pomocna promenna)
C ZZDEF - default hodnota pro Z souradnici
C NPT, NCR, NSF, NVL-POCET BODU, KRIVEK, PLOCH, OBJEMU
C NE, ND - POCET ELEMENTU, UZLU
C
C KELEM - Typ elementu (aktuální hodnota poslední generovaných elementu)
C         Nazvy elementu TELEM(MAXELEM)
C         1-PIPE2D, 2-PIPE3D, 3-TRUSS2D, 4-TRUSS3D, 5-BEAM2D,
C         6-BEAM3D, 7-CSTR, 8-PUMP, 9-VALVE, 10-SHELLAX,
C         11-HEXCH, 12-PLANE2D, 13-FLOW2D, 14-FLOW3D, 15-FLOWT2D
C         16-FLOWT3D, 17-SOLID, 18-PLINK, 19-MASS
C KOPER - Typ operace
C         Nazvy operaci TOPER(MAXOPER)
C         1-ELEC, 2-FLOW, 3-THER, 4-CONC, 5-STAT
C KANAL - Typ analyzy
C         Nazvy analyz TANAL(MAXANA)
C         1-PIPE, 2-UVP, 3-PSB
C         Volba KANAL určuje význam a počet uzlových parametrů (JPU, LPU).
C         Provádí procedura ANASET.
C NEPAR(MAXELEM) Pocet parametru elementu typu PIPE,...
C         Poznámka: do výstupního souboru EPA se vypisuje NEPAR sloupce-u každého řádku to může
C         být jiné.
C MDOF - Celkový počet uvažovaných DOF pro daný typ analyzy KANAL (PIPE/UVP/PSB)
C NDOF - Pocet aktivních DOF uzlu pro danou operaci KOPER (delka JDOF(NDOF))
C JDOF(MAXDOF) - aktivní DOF pro prováděnou operaci (viz. NDOF<MDOF).
C         Tyto parametry se kopírují procedurou LOADIN (transformace počáteční podmínky)
C
C NTSTEP - POCET CASOVYCH (iteracních) KROKU
C DTIME - CASOVY KROK
C

```

```

C IALGOR(50) - BLIZSI SPECIFIKACE ALGORITMU VYPOCTU MATICE ELEMENTU
C IALGOR(1)-vypocet matice hmotnosti IALGOR(2)-uvazovani rychlosti,
C IALGOR(3)-prirozena konvekce IALGOR(4)-uvazovani zdrojovych clenu
C IALGOR(5)-upwind IALGOR(6)-fouling
C IALGOR(7)-neliminace IALGOR(8)-ninteg
C IALGOR(9)-MWR (varianta PIPE) IALGOR(10)-volne
C IALGOR(11)-operace ELEC (poc.iter.) IALGOR(12)-operace FLOW
C IALGOR(13)-operace THER IALGOR(14)-operace CONC
C IALGOR(15)-operace STAT IALGOR(16)-index okna pro VIEW (21 nebo 20)
C IALGOR(17) ... zatim nevyuzito
C RALGOR(50) - podobne jako IALGOR mohou byt v tomto vektoru konstanty (realne)
C specifikujici algoritmus reseni
C RALGOR(1) -gx zrychleni, RALGOR(2)-gy zrychleni ,
C RALGOR(3) -alpha (prestup tepla), RALGOR(4)-Te okolni teplota,
C RALGOR(5) -korekce upwind, RALGOR(6)-EPS pivot,
C RALGOR(7) -relaxacni faktor, RALGOR(8)-Scale DEFORM
C RALGOR(9) -penal.parametr Lambda RALGOR(10)-TOL vzdaleness bodu
C RALGOR(11)-residuum TEMP RALGOR(12)-residuum UX,UY,RZ
C RALGOR(13)-residuum RX,RY,RZ RALGOR(14)-residuum VOLT
C RALGOR(15)-residuum VX,VY,VZ RALGOR(16)-residuum PRES
C RALGOR(17)-residuum OMG RALGOR(18)-residuum PS
C RALGOR(19)-residuum PSX,PSY RALGOR(20)-residuum CN,CD,CA
C RALGOR(21)-optimalizovana hodnota RALGOR(22)-box ratio (0.01-1)
C RALGOR(23)-result RALGOR(24)-THETA (implicit 1, explicit 0)
C RALGOR(25)-POWERT=kapa(grad Volt)^2 RALGOR(26)-POWERF=mi.(grad Veloc)^2
C RALGOR(27)-POWERT RALGOR(28)-POWERC
C RALGOR(29)-POWERS
C MGROUP,MRCONS,MMPROP - POCET SKUPIN ELEMENTU, REALNYCH KONSTANT A VLASTNOSTI
C NGROUP(k) - pocet atributu elementu pro typ elementu K (viz. LGROUP)
C NRCONS(k) - pocet realnych konstant pro typ elementu K (viz. LRCONS)
C NMPROP(k) - pocet materialovych parametru pro typ K (viz. LMPROP)
C LGROUP,LRCONS,LMPROP slouzi jen pro dialog zadavani parametru
C LGROUP(MAXELEM,MAXNGROUP)- Vyber sloupce JGROUP,tj. vyber atributu elementu pro zvoleny typ
C elementu (KELEM)
C JGROUP(,) - ATRIBUTY SKUPINY ELEMENTU
C 1 2 3 4 5 6 7 8
C ELEMENT Steady/Trans. GAUSS-pt XY/XR Strain/Stress Metoda fi(dp) Source
C Poznámka: Parametr cislo 4 (XY/XR) je u elementu HEXC podtyp vymeniku
C (0-trubka/trubka, 1-shell/tube, 2-plate)
C Poznámka: parametr fi je hydraulicka charakteristika (index funkce nebo tabulky)
C parametr Metoda se tyka vypoctu proudeni (1-UVP,2-UVPP,3-MIKE,4-PENS,5-MIDE,
C 6-PSIN,7-PSBL,8-CREE,9-PSOM,10-CARE, vymeniky 11-CHEV,12-STUB,13-HAIR)
C parametr Source je index funkce CURFUN(i), ktera popisuje objemovy zdroj
tepla
C
C LRCONS(MAXELEM,MAXNRCONS)- Vyber sloupce RRCONS, tj. vyber realnych konstant pro dany typ elementu
C RRCONS(,) - REALNE KONSTANTY (RADEK JE SKUPINA, SLOUPEC PARAMETR)
C 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11
C H D p alpha Te Area Perim Vol Ratio dUdy Jz
C Poznámka: U elementu PIPE je Area plocha prurezu, u elementu HEXC teplosmenná plocha
C Vol-objem idealniho misice, Ratio-delici pomer (paralelni proudy)
C dUdy-derivace elektrickeho potencialu kolmo k ose elementu.
C LMPROP(MAXELEM,MAXNMPROP) - Vyber sloupce RMPROP,tj.materialovych parametru pro dany typ elementu
C RMPROP(,) - MATERIALOVE PARAMETRY
C JMPROP(,) - CISLO FUNKCE, kterou se NASOBI HODNOTY MATERIALOVYCH PARAMETRU v matici RMPROP
C 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18
C Kx Cp RHO KAPPA E MI VISC beta Dn En An Dd Ed Ad Da Ea Aa alpha(expans)
C
C IUE() - VEKTOR KONEKTIVITY
C LUE(ie) - LUE(IE)+I POZICE I-TEHO UZLU ELEMENTU IE VE VEKTORU KONEKTIVITY
C MUE(ie) - |MUE| POCET UZLU ELEMENTU
C
C JEPAR(K,I) - Typ parametru v I-tem sloupci matice EPAR (1-Nalfa,...) pro typ elementu K
C KEPAR(K,I) - parametr v I-tem sloupci matice EPAR byl pocitan kdyz KEPAR(I)>0.
C LEPAR(K,I) - Index sloupce matice EPAR odpovidajici parametru typu I.
C Poznámka: index K urcuje typ elementu (PIPE,PLANE2D,...)
C EPAR(ie,maxepa)-PARAMETRY ELEMENTU (NAPR. DISSIPOVANY VYKON, VYPOCITANE VYSLEDKY)
C vyznam sloupce je urcen vektory JEPAR, LEPAR (stejne jako JPU LPU uzlovych parametru).
C
C IGROUP(ie) - CISLO SKUPINY EGROUP ELEMENTU
C IRCONS(ie) - CISLO SKUPINY RC ELEMENTU
C IMPROP(ie) - CISLO SKUPINY MPROP ELEMENTU
C XX,YY,ZZ(nd) - SOURADNICE UZLU
C JPU(*) - TYP UZLOVEHO PARAMETRU (vyznam sloupce matice uzlovych parametru)
C KPU(*) - parametr v I-tem sloupci matice VAL byl pocitan, kdyz KPU(I)>0.
C LPU(*) - lokator sloupce matic IPU,VAL odpovidajici zadanemu DOF (1-temp,...)
C LPU(I)+J je pozice parametru typu I v uzlu J.
C vektor LPU ma dimensi MAXTDOF=30, vetsi nez je dimenze JPU(MAXDOF=17)
C IPU(*) - STATUS UZLOVEHO PARAMETRU
C VAL(*,4) - UZLOVE PARAMETRY,

```

```

C          1.SLOUPEC: ZADAVANE HODNOTY zatizeni, okrajove podminky (PREPROCESOR),
C          2.SLOUPEC: Transformace prvnioho sloupce (LOADIN). Vstup i vystup FTFRON.
C          3.SLOUPEC: POCATECNI PODMINKY NEBO HODNOTY Z PREDCHOZIHO CASOVEHO KROKU.
C          4.SLOUPEC: hodnoty z predchozi iterace (v ramci jednoho cas.kroku)
C XGR (ND) - vybrane hodnoty uzlovehu parametru pro grafiku (pomocny vektor)
C VGR (ND) - vybrane hodnoty uzlovehu parametru pro grafiku (pomocny vektor)
C XBOXMI,XBOXMA,DXBOX,NXBOX, - zaramovani oblasti modelu do BOXU s rozmery
C YBOXMI,YBOXMA,DYBOX,NYBOX   xBOXMI,xBOXMA, a rozmery elementarnioho hranolku DxBOX,
C ZBOXMI,ZBOXMA,DZBOX,NZBOX   NxBOX je pocet delicich useku na osach X,Y,Z.
C PTX,PTY,PTZ (npt)- SOURADNICE BODU
C NEARND (npt) - INDEX NEJBLIZSIHO UZLU
C ISF (8,*),MSF (*) - INDEXY BODU PLOCH, POCET TVORICICH BODU (4 NEBO 8)
C ICR (3,*),MCR (*) - INDEXY BODU KRIVEK, POCET TVORICICH BODU (2 NEBO 3)
C NXCR (maxcr) - informace o mesovani (pocet elementu na krivce)
C FLAFI (maxcr) - informace o mesovani (rovnornost deleni)
C IVL (20,*),MVL (*) - INDEXY BODU OBJEMU, POCET TVORICICH BODU (8 NEBO 20)
C DOFMIN (MAXTDOF) - MINIMALNI HODNOTY UZLOVYCH PARAMETRU
C DOFMAX (MAXTDOF) - MAXIMALNI HODNOTY UZLOVYCH PARAMETRU
C DOFRESI (MAXTDOF) - aktualni hodnoty rezidui parametru pocitanych procedurou FTFRON
C DOFMEAN (MAXTDOF) - stredni absolutni hodnoty uzlovych parametru
C IMARK (MAXTDOF) - cislo znacky odpovidajici stupni volnosti
C          1-troj.nahoru,2-troj.dolu,3-krizek,4-ctver s troj.,5-kosoctverec,
C          6-ctverec s diag,7-kolecko,8-svisla sipka,9-vodorovna sipka
C
C IACT (9) - 0/1 ACTIVATION
C          1-KGROUP,2-KMPROP,3-KRCONS,4-KND,5-KEL,6-KPT,7-KCR,8-KSF,9-KVL
C
C ----- FUNCTIONS AND TABLES pro interpretaci parametru prikazu a funkci
C
C PARAMETER (MAXCON=300) =MAXCINT*10
C PARAMETER (MIFUN=-10,MAFUN=50,MAXFUN=9,MAXRPN=200,MAXTAB=9,MAXTPT=8)
C IICONS - zona konstant pro 10 FUNKCI (max. 15 konstant pro funkci,
C          kazda konstanta potrebuje 2 slova)
C INDFUN -10,...-1 OKRAJOVE PODMINKY, 1:50 ZATIZENI A SLABE OKRAJ.PODMINKY
C MFUNCT - POCET DEFINOVANYCH FUNKCI (maximalne MAXFUN)
C MRPN (I) - DELKA KODU IRPN (maximalne MAXRPN)
C IRPN (,J) - KOD RPN J-TE FUNKCE
C MTABLE - POCET DEFINOVANYCH TABULEK (maximalne MAXTAB)
C KTABLE (J) - =0 TABULKA F(TEMPERATURE)
C          =1 TABULKA F(TIME)
C          =2 TABULKA F(X)
C          =3 TABULKA F(Y)
C MTPT (J) - POCET BODU (X,Y) J-TE TABULKY (maximalne MAXTPT)
C XTAB, YTAB - HODNOTY NEZAVISLE A ZAVISLE PROMENNE
C
C ----- PROGRAM interpretovaneho modelu
C
C PARAMETER (MAXMRPN=2000,MAXMCON=200,MAXCMOD=200,MAXPMOD=20)
C Model vznikne prekladem dvou sekci (\\IN a \\MO ) a vysledny kod
C je ulozen do vektoru MODRPN. Nejprve sekce \\IN a delce MIRPN a
C hned za ni sekce model o delce MMRPN. Celkova delka obou sekci
C je maximalne MAXMRPN. Obe sekce vyuzivaji stejnou zonu konstant
C a nove definovanych promennych MODCON.
C IMODELA - index aktivniho modelu (index klicoveho slova a jmena souboru)
C MIRPN - DELKA KODU RPN modelu (sekce \\IN). Vlastni kod je vektor MODRPN.
C MMRPN - DELKA KODU RPN modelu (sekce \\MO). Vlastni kod je MODRPN ale az od indexu MIRPN+1
C NUMLINES - pocet radku textu modelu MODTXT (ma vyznam pouze pro zobrazovani textu)
C LINESRPN (MAXLINES) - pozice znaku v retezci MODTXT indikujici zacatky radku
C MODRPN (*) - KOD RPN modelu (obou sekci)
C MODCON (*) - konstanty modelu (obou sekci)
C CMODEL (MAXCMOD,2) - koncentrace (1.sloupec hodnoty C(i), 2.sloupec derivace DC(i))
C IDENUM - identifikacni cislo modelu (uvadene v datovem souboru popisu modelu)
C METHOD - metoda reseni soustavy diferencialnich rovnic
C          METHOD=0 Eulerova metoda, METHOD>0 RK s konstantnim krokem DTIME
C          METHOD<0 RK s promennym krokem a pozadovanou presnosti EPS=10**METHOD
C NEQUAT - pocet resenych rovnic (delka vektoru CMODEL)
C NINPUTS - pocet vzruchovych funkci x(t,i)
C MINPUTS (MAXINPUTS) - indexy funkcnich prubehu (viz YGR)
C XINPUTS (MAXINPUTS) - pracovni vektor hodnot vzruchovych funkci (pro aktualni cas)
C NOUTPUTS - pocet odezvovych funkci y(t,i)
C MOUTPUTS (MAXOUTPUTS) - indexy funkcnich prubehu (viz YGR)
C YOUTPUTS (MAXOUTPUTS) - pracovni vektor hodnot odezvovych funkci (pro aktualni cas)
C NUMODP - pocet parametru modelu
C PMODEL (MAXPMOD) - pomocny vektor (muze to byt vektor parametru modelu, zalezi na LMODEL)
C RMODEL (MAXPMOD) - vektor relaxacnich parametru (pro kazdy optimalizovany parametr)
C ZMINP (MAXPMOD) - vektor urcujici dolni meze optimalizovanych parametru
C ZMAXP (MAXPMOD) - vektor urcujici horni meze optimalizovanych parametru
C LMODEL (MAXPMOD) - indexy parametru odkazujici na prvek /FEM/. Tento prvek (a ne nutne
C          vektor PMODEL) je povazovan za parametr pri regresni analyze.

```

```

C JMODEL(MAXXPMOD) -typ parametru =1 real, =2 integer
C KMODEL(MAXXPMOD) -urceni toho, zda ma byt parametr stanoven regresi
C (0-nepocitat, 1-linearni parametr, 2-nelinearni, 3-linear search)
C
C ----- DIALOG
C
C MAXPAR-maximalni pocet PARAMETRU PRIKAZU,
C LENLIN-delka prikaz.radku,
C LENITE-max.delka polozky (napr. vyrazu jako parametru)
C LENDIAL-delka napovedneho textu pri zadavani parametru
C LENMODEL-delka textu modelu (ve znacich)
C MAXLABELS-max.pocet navesti pouzitych v session filu
C PARAMETER (MAXPAR=23,LENLIN=100,LENITE=80,LENDIAL=50,LENMODEL=8000,MAXLABELS=100)
C RP(MAXPAR) - hodnota I-teho parametru prikazu (REAL)
C IP(MAXPAR) - hodnota I-teho parametru prikazu (INTEGER)
C LAST - INDEX POSLEDNIHO PRIKAZU ZADAVANEHO PRIMO, LAST+1,... V DIALOGU
C ISEMI - POZICE UKONCOVACIHO STREDNIKU v textu
C NLABELS - pocet navesti
C Kazde navesti ma tyto charakteristiky:
C LABELINE() - cislo radku v interpretovanem souboru, ktere odpovida navesti
C LOOPMAX() - pocet cyklu LOOP
C LOOPCOUNT() - pocitadlo cyklu
C LOOPLINE() - cislo radku za prikazem #LOOP
C
C ----- RTD casove krivky ZMENA: MATICE BODU POZOROVANI
C
C MAXNTS-maximalni pocet casovych kroku, MAXSEL-maximalni pocet casovych prubehu,
C PARAMETER (MAXNTS=1000,MAXSEL=10)
C NGR - pocet bodu (radek) matice bodu pozorovani YGR
C Poznamka: prvni sloupec matice bodu pozorovani je interpretovan jako cas
C YGR(MAXNTS,MAXSEL) - nezavisle i zavisle promenne (cas, koncentrace, teploty,...)
C INDG(MAXSEL) - (1) index uzlu ND, kteremu odpovida casovy prubeh nebo
C (2) index vzruchove funkce modelu x(t,i) (inlet i) nebo
C (3) index odezvove funkce modely y(t,i) (outlet i)
C IQGR(MAXSEL) - typ sloupce matice bodu pozorovani (+1=index jmena TTC)
C (0-empty,1-cas,2-FEM,3-experiment,4-inlet,5-outlet,
C 6-regres.model,7-std.dev,8-impulse resp.,9-Rxy,
C 10-data,...19-data)
C
C KCOMPAR - kriterium pouzite pro porovnani krivek
C =0 sum(abs(Y1-Y2))/n
C =1 sum(abs((Y1-Y2)/max(Y1,Y2)))/n
C =2 sqrt(sum((Y1-Y2)**2)/n)
C =3 sqrt(sum((Y1-Y2)/max(Y1,Y2))**2)/n
C =4 intg(abs(Y1-Y2))
C =5 intg(abs((Y1-Y2)/max(Y1,Y2)))
C =6 sqrt(intg((Y1-Y2)**2))
C =7 sqrt(intg((Y1-Y2)/max(Y1,Y2))**2)
C SCOMPAR - hodnota sumy odchylek vseh porovnavanych krivek
C NCOMPAR - pocet porovnavanych dvojic TC
C ICOMP(3,MAXSEL/2) - indexy porovnavanych TC krivek (1.radek model,
C 2.radek data, 3.radek vahove koeficienty)
C ICOMP1,ICOMP2 - prvni a posledni radek matice bodu pozorovani pouzity pro porovnani
C
C DETECT(MAXDET,10) - celo a konec kolimatoru,
C D-kolim, uhel videni, dosah videni, utlum materialu
C GFIX,GFY,GFZ,CDIX,CFIX,CFIZ,SFIX,SFIY,SFIZ - natoceni souradnych os X,Y,Z pro 3D grafiku
C XVIEW,YVIEW,ZVIEW - souradnice bodu (0,0,1) po natoceni
C<----- AZ SEM SE NULUJE DATABASE PRI INICIALIZACI (NOVY PROBLEM)
C
C ----- EXTERNAL programs
C
C PARAMETER (MAXEXCOM=10)
C NEXCOM - pocet definovanych externich programu
C NEXPAR(i) - pocet parametru zadavanych pred spustenim programu i
C DEXPAR(j,i) - default hodnota j-teho parametru programu i
C NMODELS - pocet externich modelu (a tez klicovych slov i jmen souboru)
C
C ----- logical
C LOGICAL READFI,RECORD,READMA
C READFI - priznak cteni prikazu ze souboru pri interpretaci (logical)
C RECORD - zaznam prikazu do souboru a potlacení interpretace prikazu #xxx (logical)
C READMA - read macro
C
C ----- strings
C PROBLEM - character *8 nazev problemu (nebo vystupnich souboru)
C FILENAM - character *12 jmeno souboru (s priponou - napr. record)
C FILEDAT - default jmeno pro datovy soubor
C FILEXPERI(MAXSEL)- nazev souboru casove krivky odpovidajici sloupci YGR
C LABELS() - jmena navesti (na 4 znaky), viz #GOTO, #LABEL, #LOOP

```

C NEXKWD(i) - klicove slovo (pouze na 4 znaky) volani externiho programu  
 C NEXFILE(i) - jmeno souboru externiho programu cislo i  
 C NEXPARTXT(j,i) - text hlavicky zadavani j-teho parametru i-teho EXterniho programu  
 C MODKWD(i) - klicove slovo (pouze na 4 znaky) interpretovaneho modelu  
 C MODFILE(i) - jmeno souboru interpretovaneho programu cislo i  
 C MODTXT - TEXT modelu (aktualniho)  
 C MODPARTXT(j) - text hlavicky zadavani j-teho parametru aktualniho modelu  
 C VARTXT(j) - jmeno j-teho parametru  
 C TP (MAXPAR) - text I-teho parametru prikazu (dialog zadavani parametru)  
 C FUNTXT (MAXFUN) - text J-te funkce (viz FUNDEF casove nebo teplotni zavislosti)  
 C TDOF (MAXTDOF) - nazvy DOF (4 znaky)  
 C TELEM (MAXELEM) - nazvy elementu  
 C TGROUP, TRCONS, TMPROP - nazvy parametru EGROU, RRCONS, MPROP (a 32 znaku)  
 C TANAL - nazvy zvoleneho typu analyzy (1-PIPES, 2-PIPEL, 3-UVP, ...)  
 C TEPAR (IPAR) - nazvy parametru elementu (pro max. 4 typy analyz)  
 C TOPER (operace) - nazvy operaci (UVP, PIPE, RTD, ...)  
 C TTC (typ TC) - nazvy typu casovych prubehu EMPTY, TIME, EXPERIM, ...  
 C TMETHOD (MAXMET) - UVP, UVPP, MIKE, ...

C  
 CHARACTER\*4 LABELS, NEXKWD, MODKWD, TDOF, TOPER, TANAL, TMETHOD  
 CHARACTER\*6 KEYW  
 CHARACTER\*8 PROBLEM, KEYW8, TEPAR, TTC, TELEM  
 CHARACTER\*12 FILENAM, FILEDAT, FILEEXPERI, NEXFILE, MODFILE, VARTXT  
 CHARACTER\*32 TGROUP, TRCONS, TMPROP  
 CHARACTER\* (LENMODEL) MODTXT  
 CHARACTER\* (LENITE) TP, FUNTXT  
 CHARACTER\* (LENDIAL) NEXPARTXT, MODPARTXT

COMMON /FEM/

/ IAUX (MAXAUX) ,  
 / NPT, NCR, NSF, NVL,  
 / NE, ND, KELEM, KOPER, KANAL, NEPAR (MAXELEM) , MDOF, NDOF, JDOF (MAXDOF) ,  
 / NTSTEP, DTIME,  
 / IALGOR (50) , RALGOR (50) ,  
 / MGROUP, MRCONS, MMPROP,  
 / NGROUP (MAXELEM) , NRCONS (MAXELEM) , NMPROP (MAXELEM) ,  
 / LGROUP (MAXELEM, MAXNGROUP) , JGROUP (MAXMGROUP, MAXNGROUP) ,  
 / LRCONS (MAXELEM, MAXNRCONS) , RRCONS (MAXMRCONS, MAXNRCONS) ,  
 / LMPROP (MAXELEM, MAXNMPROP) , RMPROP (MAXMMPROP, MAXNMPROP) ,  
 / JMPROP (MAXMMPROP, MAXNMPROP) ,  
 / IUE (4\*MAXEL) , LUE (MAXEL+1) , MUE (MAXEL) ,  
 / JEPAR (MAXELEM, MAXEPAR) ,  
 / KEPAR (MAXELEM, MAXEPAR) ,  
 / LEPAR (MAXELEM, MAXTEPAR) ,  
 / EPAR (MAXEL, MAXEPAR) ,  
 / IGROUP (MAXEL) , IRCONS (MAXEL) , IMPROP (MAXEL) ,  
 / XX (MAXND) , YY (MAXND) , ZZ (MAXND) ,  
 / JPU (MAXDOF) , KPU (MAXDOF) , LPU (MAXTDOF) ,  
 / IPU (MAXND\*MAXDOF) , VAL (MAXND\*MAXDOF, 4) ,  
 / XGR (MAXND) , VGR (MAXND) ,  
 / XBOXMI, XBOXMA, DXBOX, NXBOX,  
 / YBOXMI, YBOXMA, DYBOX, NYBOX,  
 / ZBOXMI, ZBOXMA, DZBOX, NZBOX,  
 / PTX (MAXPT) , PTY (MAXPT) , PTZ (MAXPT) , NEARND (MAXPT) ,  
 / ISF (8, MAXSF) , MSF (MAXSF) ,  
 / ICR (3, MAXCR) , MCR (MAXCR) , NXCR (MAXCR) , FLAFI (MAXCR) ,  
 / IVL (20, MAXVL) , MVL (MAXVL) ,  
 / DOFMIN (MAXTDOF) , DOFMAX (MAXTDOF) ,  
 / DOFRESI (MAXTDOF) , DOFMEAN (MAXTDOF) ,  
 / IMARK (MAXTDOF) , IACT (9) ,  
 / IICONS (MAXCON) ,  
 / INDFUN (MIFUN:MAFUN) ,  
 / MFUNCT, MRPN (MAXFUN) , IRPN (MAXRPN, MAXFUN) ,  
 / MTABLE, KTABLE (MAXTAB) ,  
 / MTPT (MAXTAB) , XTAB (MAXTPT, MAXTAB) , YTAB (MAXTPT, MAXTAB) ,  
 / IMODELA, MIRPN, MMRPN, NUMLINES, LINESRPN (MAXLINES) ,  
 / MODRPN (MAXMRPN) , MODCON (MAXMCON) ,  
 / CMODEL (MAXCMOD, 2) ,  
 / IDENUM, METHOD, NEQUAT,  
 / NINPUTS, MINPUTS (MAXINPUTS) , XINPUTS (MAXINPUTS) ,  
 / NOUTPUTS, MOUTPUTS (MAXOUTPUTS) , YOUTPUTS (MAXOUTPUTS) ,  
 / NUMODP,  
 / PMODEL (MAXPMOD) , RMODEL (MAXPMOD) , ZMINP (MAXPMOD) , ZMAXP (MAXPMOD) ,  
 / LMODEL (MAXPMOD) , JMODEL (MAXPMOD) , KMODEL (MAXPMOD) ,  
 / RP (MAXPAR) , IP (MAXPAR) , LAST, ISEMI,  
 / NLABELS, LABELINE (MAXLABELS) ,  
 / LOOPMAX (MAXLABELS) , LOOPCOUNT (MAXLABELS) , LOOPLINE (MAXLABELS) ,  
 / NGR, YGR (MAXNTS, MAXSEL) ,  
 / INDG (MAXSEL) , IQGR (MAXSEL) ,  
 / KCOMPAR, SCOMPAR, NCOMPAR, ICOMPAR (3, MAXSEL/2) , ICOMP1, ICOMP2,

```

/ DETECT (MAXDET, 10) ,
/ GFIX, GFIY, GFIZ, CFIX, CFYI, CFIZ, SFIX, SFYI, SFIZ,
/ XVIEW, YVIEW, ZVIEW,
/ NEXCOM, NEXPAR (MAXEXCOM) , DEXPAR (MAXPAR, MAXEXCOM) ,
/ NMODELS,
/ READFI, RECORD, READMA,
/ PROBLEM, FILENAM, FILEDAT, FILEXPERI (MAXSEL) ,
/ LABELS (MAXLABELS) ,
/ NEXKWD (MAXEXCOM) , NEXFILE (MAXEXCOM) , NEXPARTXT (MAXPAR, MAXEXCOM) ,
/ MODKWD (MAXMOD) , MODFILE (MAXMOD) ,
/ MODTXT, MODPARTXT (MAXPMOD) , VARTXT (MAXPMOD) ,
/ TP (MAXPAR) , FUNTXT (MAXFUN) ,
/ TDOF (MAXTDOF) , TELEM (MAXELEM) ,
/ TGROUP (MAXNGROUP) , TRCONS (MAXNRCONS) , TMPROP (MAXNMPROP) ,
/ TANAL (MAXANA) , TEPAR (MAXTEPAR) , TOPER (MAXOPER) , TTC (20) ,
/ TMETHOD (MAXMET) , KEYW8, IENDCHECK

```

C

C Popisy EQUIVALENCE

C

```

DIMENSION AUX (MAXAUX) , IEPAR (MAXEL, MAXEPAR)
EQUIVALENCE (IAUX, AUX, TIME) , (IEPAR, EPAR) ,
/ (IAUX (MAXAUX-1) , ICOUNTS) , (AUX (MAXAUX-2) , ZZDEF) ,
/ (IAUX (MAXAUX-3) , IFISTEP) ,
/ (IAUX (5) , SINV) , (IAUX (11) , TEMP) , (IALGOR (16) , IVIEW) ,
/ (RALGOR (1) , GX) , (RALGOR (2) , GY) , (RALGOR (5) , RUPW) ,
/ (RALGOR (6) , EPSPIV) , (RALGOR (7) , RELFAKT) , (RALGOR (9) , PENFAKT) ,
/ (RALGOR (10) , TOL) , (SUMREZ , RALGOR (21) ) , (BOXRATIO, RALGOR (22) ) ,
/ (RINTG, RALGOR (23) ) , (THETA, RALGOR (24) ) ,
/ (POWERC, RALGOR (25) ) , (POWERF, RALGOR (26) ) , (POWERT, RALGOR (27) ) ,
/ (POWERC, RALGOR (28) ) , (POWERS, RALGOR (29) ) ,
/ (KEYW, KEYW8)
EQUIVALENCE (IACT (1) , KGROUP) , (IACT (2) , KMPROP) , (IACT (3) , KRCONS) ,
/ (IACT (4) , KND) , (IACT (5) , KEL) , (IACT (6) , KPT) , (IACT (7) , KCR) ,
/ (IACT (8) , KSF) , (IACT (9) , KVL)

```

C-----

## C SFEM-LOC (parametry definovany v \$fem-par)

```
C $fem-loc (parametry definovany v $fem-par)
C FINITE ELEMENTS DATABASE COMMON /FEM/ (vcetne DIAL,FUNC,RTD)
C MAXEND JE CELKOVA DELKA ZONY /FEM/
C
C-----
```

```
PARAMETER (
/   LOCAUX1=MAXAUX+1,
/   LOCAUX2=MAXAUX+2,
/   LOCAUX3=MAXAUX+3,
/   LOCAUX4=MAXAUX+4,
/   LOCAUX5=MAXAUX+5,
/   LOCAUX6=MAXAUX+6,
/   LOCAUX7=MAXAUX+7,
/   LOCAUX8=MAXAUX+8,
/   LOCJDOF=MAXAUX+12+MAXELEM,
/   LOCNTSTEP=LOCJDOF+MAXDOF,
/   LOCETIME=LOCNTSTEP+1,
/   LOCIALG1=LOCETIME+1,
/   LOCIVELLO=LOCIALG1+1,
/   LOCIBUOY=LOCIALG1+2,
/   LOCIOHMI=LOCIALG1+3,
/   LOCIUPW =LOCIALG1+4,
/   LOCINTG =LOCIALG1+7,
/   LOCIELEC=LOCIALG1+10,
/   LOCITHER=LOCIALG1+11,
/   LOCICONC=LOCIALG1+12,
/   LOCIFLOW=LOCIALG1+13,
/   LOCISTAT=LOCIALG1+14,
/   LOCRALG1=LOCIALG1+30,
/   LOCALG2=LOCRALG1+1,
/   LOCRUPW =LOCRALG1+4,
/   LOCPIVT =LOCRALG1+5,
/   LOCRELAX=LOCRALG1+6,
/   LOCRSCL =LOCRALG1+7,
/   LOCRLAMB=LOCRALG1+8,
/   LOCRTOL =LOCRALG1+9,
/   LOCSUMREZ=LOCRALG1+20,
/   LOCRINTG=LOCRALG1+22,
/   LOCETHETA=LOCRALG1+23,
/   LOCMGROUP=LOCRALG1+30,
/   LOCMRCONS=LOCMGROUP+1,
/   LOCMMPROP=LOCMRCONS+1,
/   LOCVELEM=LOCMMPROP+MAXELEM*(MAXNGROUP+3)+1,
/   LOCVST=LOCVELEM+MAXMGROUP,
/   LOCVGSS=LOCVST+MAXMGROUP,
/   LOCVPAX=LOCVGSS+MAXMGROUP,
/   LOCVSTS=LOCVPAX+MAXMGROUP,
/   LOCVH=LOCVELEM+MAXNGROUP*MAXMGROUP+MAXELEM*MAXNRCONS,
/   LOCVD=LOCVH+MAXMRCONS,
/   LOCVPRS=LOCVD+MAXMRCONS,
/   LOCVALF=LOCVPRS+MAXMRCONS,
/   LOCVTE=LOCVALF+MAXMRCONS,
/   LOCVARE=LOCVTE+MAXMRCONS,
/   LOCVPER=LOCVARE+MAXMRCONS,
/   LOCVJZ=LOCVPER+MAXMRCONS,
/   LOCVKX=LOCVH+MAXNRCONS*MAXMRCONS+MAXELEM*MAXNMPROP,
/   LOCVCP=LOCVKX+MAXMMPROP,
/   LOCVDEN=LOCVCP+MAXMMPROP,
/   LOCVKAP=LOCVDEN+MAXMMPROP,
/   LOCVEX=LOCVKAP+MAXMMPROP,
/   LOCVMI=LOCVEX+MAXMMPROP,
/   LOCVIS=LOCVMI+MAXMMPROP,
/   LOCVBET=LOCVIS+MAXMMPROP,
/   LOCVDN=LOCVBET+MAXMMPROP,
/   LOCVEN=LOCVDN+MAXMMPROP,
/   LOCVAN=LOCVEN+MAXMMPROP,
/   LOCVKXF=LOCVKX+MAXMMPROP*MAXNMPROP,
/   LOCIUE=LOCVKX+2*MAXMMPROP*MAXNMPROP,
/   LOCLUE=LOCIUE+4*MAXEL,
/   LOCMUE=LOCLUE+MAXEL+1,
/   LOCJEL=LOCMUE+MAXEL,
/   LOCLEL=LOCJEL+2*MAXEPAR*MAXELEM,
/   LOCEPAR=LOCLEL+MAXTEPAR*MAXELEM,
/   LOCEPA2=LOCEPAR+MAXEL,
/   LOCEPA3=LOCEPA2+MAXEL,
/   LOCEPA4=LOCEPA3+MAXEL,
/   LOCEPA5=LOCEPA4+MAXEL,
```



```

/ LOCIGROUP=LOCEPAR+MAXEL*MAXEPAR,
/ LOCIRCONS=LOCIGROUP+MAXEL,
/ LOCIMPROP=LOCIRCONS+MAXEL,
/ LOCXX=LOCIMPROP+MAXEL,
/ LOCYY=LOCXX+MAXND,
/ LOCZZ=LOCYY+MAXND,
/ LOCJPU=LOCZZ+MAXND,
/ LOCLPU=LOCJPU+2*MAXDOF,
/ LOCIPU=LOCLPU+MAXTDOF,
/ LOCVAL=LOCIPU+MAXDOF*MAXND,
/ LOCV2 =LOCVAL+MAXDOF*MAXND,
/ LOCV3 =LOCV2 +MAXDOF*MAXND,
/ LOCXGR=LOCVAL+4*MAXDOF*MAXND,
/ LOCVGR=LOCXGR+MAXND,
/ LOCPTX=LOCVGR+MAXND+12,
/ LOCPTY=LOCPTX+MAXPT,
/ LOCPTZ=LOCPTY+MAXPT,
/ LOCNEAR=LOCPTZ+MAXPT,
/ LOCRANGE=LOCNEAR+MAXPT+9*MAXSF+6*MAXCR+21*MAXVL,
/ LOCRESI=LOCRANGE+2*MAXTDOF,
/ LOCMEAN=LOCRESI+MAXTDOF,
/ LOCIACT=LOCRANGE+5*MAXTDOF,
/ LOCONST=LOCIACT+8,
/ LOCIFUN=LOCONST+MAXCON,
/ LOCMFUN=LOCIFUN+MAFUN-MIFUN+1,
/ LOCMTAB=LOCMFUN+(MAXRPN+1)*MAXFUN+1,
/ LOCIMODELA=LOCMTAB+(MAXTPT*2+2)*MAXTAB+1,
/ LOCMODRPN=LOCIMODELA+4+MAXLINES,
/ LOCMODCON=LOCMODRPN+MAXMRPN,
/ LOCMVAL=LOCMODCON+MAXMCON,
/ LOCMDER=LOCMVAL+MAXCMOD,
/ LOCMETHOD=LOCMDER+MAXCMOD+1,
/ LOCNEQUAT=LOCMETHOD+1,
/ LOCNINPUTS=LOCNEQUAT+1,
/ LOCMINPUTS=LOCNINPUTS+1,
/ LOCXINPUTS=LOCMINPUTS+MAXINPUTS,
/ LOCNOUTPUTS=LOCXINPUTS+MAXINPUTS,
/ LOCMOUTPUTS=LOCNOUTPUTS+1,
/ LOCYOUTPUTS=LOCMOUTPUTS+MAXOUTPUTS,
/ LOCNUMODP=LOCYOUTPUTS+MAXOUTPUTS,
/ LOCPMOD=LOCNUMODP+1,
/ LOCRMOD=LOCPMOD+MAXPMOD,
/ LOCZMINP=LOCRMOD+MAXPMOD,
/ LOCZMAXP=LOCZMINP+MAXPMOD,
/ LOCLMOD=LOCZMAXP+MAXPMOD,
/ LOCJMOD=LOCLMOD+MAXPMOD,
/ LOCKMOD=LOCJMOD+MAXPMOD,
/ LOCNLABELS=LOCKMOD+MAXPMOD+2*MAXPAR+2,
/ LOCNGR=LOCNLABELS+1+4*MAXLABELS,
/ LOCYG1=LOCNGR+1,
/ LOCYG2=LOCYG1+MAXNTS,
/ LOCYG3=LOCYG2+MAXNTS,
/ LOCYG4=LOCYG3+MAXNTS,
/ LOCYG5=LOCYG4+MAXNTS,
/ LOCYG6=LOCYG5+MAXNTS,
/ LOCYG7=LOCYG6+MAXNTS,
/ LOCYG8=LOCYG7+MAXNTS,
/ LOCYG9=LOCYG8+MAXNTS,
/ LOCYG10=LOCYG9+MAXNTS,
/ LOCINDG=LOCYG1+MAXNTS*MAXSEL,
/ LOCIQGR=LOCINDG+MAXSEL,
/ LOCKCOMPAR=LOCIQGR+MAXSEL,
/ LOCSCOMPAR=LOCKCOMPAR+1,
/ LOCNCOMPAR=LOCSCOMPAR+1,
/ LOCI COMPAR=LOCNCOMPAR+1,
/ LOCNEXCOM=LOCI COMPAR+3*MAXSEL/2+2,
/ LOCNMODELS=LOCNEXCOM+MAXEXCOM*(MAXPAR+1)+1,
/ LOCPROBLEM=LOCNMODELS+4,
/ MAXEND=LOCPROBLEM+50+3*MAXSEL+MAXLABELS+
/ (LENITE/4)*(MAXPAR+MAXFUN)+4*MAXMOD+
/ LENMODEL/4+(LENDIAL/4)*(MAXPMOD+MAXPAR*MAXEXCOM)+
/ 3*MAXPMOD+4*MAXEXCOM+MAXTDOF+
/ 8*(MAXNGROUP+MAXNRCONS+MAXNMPROP)+MAXELEM*2+
/ MAXANA+MAXOPER+MAXTEPAR*2+MAXMET)

```

## C \$FEMLOC

```
C FINITE ELEMENTS DATABASE COMMON /FEM/ (vcetne DIAL, FUNC, RTD)
  INCLUDE '$FEM-PAR'
  INCLUDE '$FEM-COM'
  INCLUDE '$FEM-LOC'
  DIMENSION INTERC (MAXEND) , REALRC (MAXEND)
  EQUIVALENCE (INTERC, REALRC, IAUX)
```