С.И. Дворецкий, А.А. Ермаков,
О.О. Иванов, Е.И. Акулинин

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ ПИЩЕВОЙ, БИО- И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ В СРЕДЕ *FlexPDE*

ИЗДАТЕЛЬСТВО ТГТУ

Министерство образования и науки Российской Федерации

Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Тамбовский государственный технический университет»

**С.И. Дворецкий, А.А. Ермаков,
О.О. Иванов, Е.И. Акулинин**

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ ПИЩЕВОЙ, БИО- И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ В СРЕДЕ *FlexPDE*

Утверждено Ученым советом университета
в качестве учебного пособия для студентов
4, 5 курсов специальностей 240902, 260601, 240802

Тамбов
Издательство ТГТУ
2006

УДК ç966-01
ББК 80я73
Д24

Рецензенты:
Доктор технических наук, профессор
А.А. Арзамасцев

Доктор технических наук, доцент
Е.Н. Туголуков

Дворецкий С.И., Ермаков А.А., Иванов О.О., Акулинин Е.И.
Д24 Компьютерное моделирование процессов и аппаратов пищевой, био- и химической технологии в среде *FlexPDE*: Учеб. пособие / Тамбов: Изд-во Тамб. гос. тех. ун-та, 2006. 72 с.

Рассматриваются задачи пищевой, био- и химической технологии, приводящие к решению уравнений математической физики – дифференциальных уравнений с частными производными.

В пособии даются основы работы с пакетом *FlexPDE* и приводятся примеры компьютерного моделирования процессов и аппаратов пищевой, био- и химической технологии с распределенными переменными.

Предназначено для студентов, магистрантов и аспирантов, обучающихся по специальностям «Машины и аппараты химических производств», «Машины и аппараты пищевых производств», «Пищевая биотехнология», «Основные процессы химических производств и химическая кибернетика» и направлению «Технологические машины и оборудование».

УДК ç966-01
ББК 80я73

ISBN 5-8265-0450-1

Учебное издание

ДВОРЕЦКИЙ Станислав Иванович,
ЕРМАКОВ Александр Анатольевич,
ИВАНОВ Олег Олегович,
АКУЛИНИН Евгений Иванович

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ ПИЩЕВОЙ, БИО- И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ В СРЕДЕ *FlexPDE*

Учебное пособие

Редактор З.Г. Чернова

Компьютерное макетирование Е.В. Кораблевой

Подписано к печати 30.01.2006
Гарнитура Times New Roman. Формат 60 × 84/16. Бумага офсетная.
Печать офсетная. Объем: 4,19 усл. печ. л.; 4,15 уч.-изд. л.
Тираж 120 экз. С. $43^М$

Издательско-полиграфический центр ТГТУ
392000, Тамбов, Советская, 106, к. 14

ВВЕДЕНИЕ

Мощным инструментом познания, анализа и синтеза нелинейных процессов и систем пищевой, био- и химической технологии является метод математического моделирования, поддерживаемый разнообразными компьютерными системами и пакетами прикладных программ. Достаточно известны предназначенные для решения широкого круга задач пищевой, био- и химической технологии системы и пакеты *MathCAD* [1], *Matlab* [2], *Maple* [3], *ChemCAD* [4] и др.

Среди указанных программных продуктов особое место занимает пакет *FlexPDE*, поддерживающий метод конечных элементов при моделировании объектов с распределенными переменными, описываемых нелинейными дифференциальными уравнениями с частными производными.

В науке и технике большинство задач на том или другом уровне сложности может быть описано с использованием дифференциальных уравнений в частных производных. Из этого следует, что программный пакет такой, как *FlexPDE*, может применяться почти в любой области науки или техники.

Исследователи в различных отраслях могут применять *FlexPDE* в построении моделей экспериментов или аппаратуры, оценивая или предсказывая значимость различных эффектов. Разнообразие параметров или зависимостей не ограничено заданными рамками, а может произвольно быть аналитически задано.

В технике *FlexPDE* может быть использован для оптимизации проектов, оценки их выполнимости и концептуального анализа. При этом важно отметить, что одно и то же программное обеспечение может применяться для моделирования всех деталей проекта и нет необходимости привлекать дополнительные инструменты для оценки отдельных эффектов.

При разработке программного обеспечения пакет *FlexPDE* может служить ядром для программ специального назначения, в которых необходимо создание модели конечных элементов для системы уравнений частных производных.

Программный пакет *FlexPDE* может применяться при решении следующих задач:

- стационарных задач в электротехнике, механике и теплотехнике;
- нестационарных (зависящих от времени) задач в химии, механике, теплотехнике, биологии, электротехнике, оптике и акустике.

В настоящем пособии рассматриваются возможность решения задач пищевой, био- и химической технологии, сформулированных в виде уравнений математической физики – дифференциальных уравнений с частными производными. Для их решения рекомендуется использовать метод конечных элементов, реализованный в пакете прикладных программ *FlexPDE*. Конечно-разностные методы, в частности метод конечных элементов, хорошо изучены, однако реализация этих методов с использованием языков программирования может вызвать у студентов затруднения. Поэтому в пособии приведены не только постановки задач, но возможные алгоритмы их решения.

Кроме этого, в пособии даются основы работы с пакетом *FlexPDE* и приводятся примеры компьютерного моделирования процессов и аппаратов пищевой, био- и химической технологии с распределенными переменными.

Содержание учебного пособия соответствует требованиями Государственного образовательного стандарта и основано на программе дисциплины «Математическое моделирование и оптимизация технологических процессов и оборудования», преподаваемой в ТГТУ студентам специальностей 240801 «Машины и аппараты химических производств», 260601 «Машины и аппараты пищевых производств», 240902 «Пищевая биотехнология», 240802 «Основные процессы химических производств и химическая кибернетика» и магистрантам по направлению подготовки магистров 150400 «Технологические машины и оборудование».

1 МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ЗАДАЧИ ПИЩЕВОЙ, БИО- И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ, ПРИВОДЯЩИЕ К УРАВНЕНИЯМ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

При математическом решении практических задач анализа и синтеза возникает необходимость интегрирования нелинейных дифференциальных уравнений с частными производными, численными методами.

Все многообразие уравнений в частных производных, описывающих физические явления, можно объединить в три больших класса:

- эллиптическое уравнение, представляемое в виде

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2}=0\,; \tag{1}$$

- параболическое уравнение

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}-\frac{\partial\Phi}{\partial t}=0\,; \tag{2}$$

- гиперболическое уравнение

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial t^2}-\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}=0\,. \tag{3}$$

Уравнения эллиптического типа встречаются при изучении стационарных режимов в электротехнике (электростатика или магнитостатика), механике (деформация твердых тел, лапласовское течение жидкости или газа) и теплотехнике (распределение температур). Обычно совместно с этими уравнениями используются граничные условия типа: Дирихле $\left(\Phi(S)=\Phi_0=f_0(S)\right)$, Неймана $\left(\dfrac{\partial\Phi}{\partial n}(S)=f_0(S)\right)$ или смешанные $\left(\Phi(S)+\dfrac{\partial\Phi}{\partial n}(S)=f_0(S)\right)$.

К уравнениям параболического типа приводят задачи теплопроводности и диффузии. Эти уравнения описывают также проникновение наведенных токов в проводящее тело в задачах электротехники. Данные уравнения решаются совместно с граничными условиями типа Дирихле, Неймана или смешанными на границе области и начальными условиями по всей области.

Уравнения гиперболического типа характеризуют явления распространения волн, будь то волны вибрации механического типа или электромагнитных волн.

При изучении процессов и аппаратов пищевой, био- и химической технологии выделяются шесть основных типов процессов и аппаратов для их реализации, при математическом описании которых используются уравнения в частных производных одного из вышеупомянутого класса.

1 *Гидромеханические процессы* (разделение жидких неоднородных систем, разделение газовых неоднородных систем, оборудование для неоднородных систем, перемещение жидких систем, перемещение и сжатие газовых систем), в описании кинетики которых лежат уравнения гидродинамики.

Уравнение движения идеальной жидкости (*уравнение Эйлера*) которое в векторной форме имеет вид

$$\frac{\partial \mathrm{v}}{\partial\tau}=F-\frac{1}{\rho}\operatorname{grad} p \tag{4}$$

или

$$\frac{\partial \mathrm{v}}{\partial\tau}+(\mathrm{v}\nabla)\mathrm{v}=F-\frac{1}{\rho}\operatorname{grad} p\,, \tag{5}$$

где F – напряженность поля массовых сил; ρ – плотность жидкости или газа; p – давление; v – скорость, $(\mathrm{v}\nabla)=\mathrm{v}_x\dfrac{\partial}{\partial x}+\mathrm{v}_y\dfrac{\partial}{\partial y}+\mathrm{v}_z\dfrac{\partial}{\partial z}$.

Уравнение движения вязкой жидкости (*уравнение Навье-Стокса*) в векторной форме имеющее вид

$$\frac{\partial \mathrm{v}}{\partial\tau}=F-\frac{1}{\rho}\operatorname{grad} p+\mathrm{v}^*\nabla^2\mathrm{v}+\left(\frac{\xi}{\rho}+\frac{v^*}{3}\right)\operatorname{grad}\operatorname{div}\mathrm{v}\,, \tag{6}$$

где $\nu^* = \eta / \rho$ – кинематическая вязкость жидкости; η – динамическая вязкость; ξ – вторая вязкость; $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

2 *Теплообменные процессы* (теплообменные процессы без изменения агрегатного состояния, теплообменные процессы с изменением агрегатного состояния, холодильные процессы), скорость которых определяется законами теплопередачи и записывается в виде уравнения теплопередачи

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial \tau} + \nabla\left(-\lambda \nabla T + \rho C_p \mathrm{v}\right) = Q\,, \tag{7}$$

где C_p – коэффициент теплоемкости; λ – коэффициент теплопроводности; Q – источник или сток тепла.

3 *Массообменные* (диффузионные) *процессы* (тепломассообменные процессы, сорбционные процессы, экстракционные процессы, мембранные и электродиффузионные процессы), скорость которых определяется скоростью перехода вещества из одной фазы в другую и выражается в форме закона Фика

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} + \nabla\left(-D \nabla c + \mathrm{v} c\right) = R\,, \tag{8}$$

где D – коэффициент диффузии; R – сток или приток вещества в результате взаимодействия.

4 *Механические процессы* (разделение твердых тел, измельчение, смешение, формообразование, дозирование), скорость которых определяется законами физического тела; среди базовых законов в первую очередь следует указать закон Гука, который в частном случае может быть записан в следующем виде:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \dfrac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + \dfrac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} = 0; \\ \dfrac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \dfrac{\partial \sigma_y}{\partial y} + \dfrac{\partial \tau_{yz}}{\partial z} = 0; \\ \dfrac{\partial \tau_{zx}}{\partial x} + \dfrac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \dfrac{\partial \sigma_z}{\partial z} = 0, \end{cases} \tag{9}$$

где $\sigma_x = \frac{E}{(1-\mu^2)}\left(\frac{\partial V}{\partial x} + \mu \frac{\partial U}{\partial y}\right)$ – тензор нормального напряжения по x; $\sigma_y = \frac{E}{(1-\mu^2)}\left(\mu \frac{\partial V}{\partial x} + \frac{\partial U}{\partial y}\right)$ – тензор нормального напряжения по y; $\tau_{xy} = \frac{E(1-\mu)}{2(1-\mu^2)}\left(\frac{\partial V}{\partial y} + \frac{\partial U}{\partial x}\right)$ – тензор касательных напряжений; E – модуль Юнга; μ – коэффициент Пуассона; V – деформация по x; U – деформация по y.

5 *Химические процессы*, связанные с превращением веществ и изменением их химических свойств. Скорость этих процессов определяется закономерностями химической кинетики и законом Фика (уравнение (8)).

6 *Биохимические процессы*, связанные с синтезом веществ и осуществляемые под воздействием и при непосредственном участии живых микроорганизмов и выделенных из них ферментов. Скорость биохимических процессов, как и в предыдущем случае, определяется скоростью роста культуры в зависимости от концентрации одного или нескольких наиболее важных компонентов среды, обеспечивающих основу метаболизма. Эти компоненты получили название лимитирующих субстратов.

Из приведенной классификации процессов видно, что в основе их математического описания лежат системы дифференциальных уравнений в частных производных, решения для которых в аналитическом виде, возможно, получить только в частных случаях. Поэтому при математическом моделировании указанных процессов необходимо прибегать к тем или иным численным методам, позволяющим найти приближенное решение дифференциальной задачи в виде таблицы чисел, на основе которой можно построить графическое отображение решения, получить те или иные количественные характеристики процесса, выбрать оптимальные параметры, т.е., в конечном счете, получить достаточно полное представление относительно изучаемой проблемы.

Наибольшее распространение из численных методов решения дифференциальных уравнений в частных производных получил *метод конечных элементов* [5], поддерживаемый пакетом *FlexPDE.*

2 МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ С ЧАСТНЫМИ ПРОИЗВОДНЫМИ

При численном решении дифференциальных уравнений в частных производных используются, в основном, методы конечных разностей [6] и конечных элементов [5].

Конечно-разностные методы хорошо изучены и их применение не вызывает особых затруднений [7]. В настоящем пособии изучается метод конечных элементов.

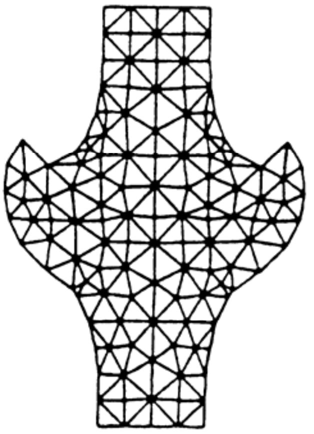
В этом методе исходная дифференциальная задача заменяется дискретной конечномерной моделью. По существу, метод конечных элементов сочетает разностный метод с кусочно-полиномиальным интерполированием сеточных функций. Приближенное решение в методе конечных элементов ищется в виде разложения по базису из кусочно-линейных (в более общем случае – кусочно-полиномиальных) функций, каждая из которых отлична от нуля лишь в некоторой достаточно малой области. Для определения коэффициентов разложения получаются системы линейных алгебраических уравнений с большими разреженными матрицами специального вида. Эти системы уравнений представляют собой разностные схемы, аппроксимирующие исходную задачу.

В общих чертах метод конечных элементов состоит в следующем.

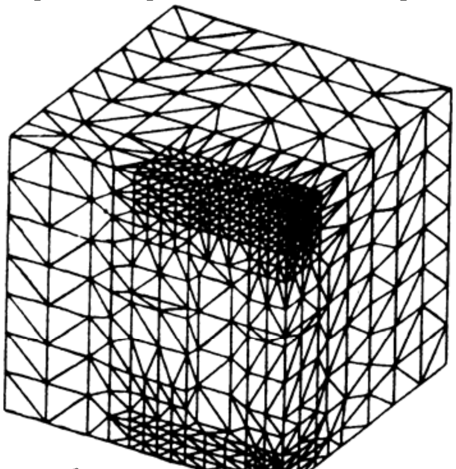
Исходная задача рассматривается как операторное уравнение вида

$$Lu = \frac{\partial}{\partial x}\left(k(x)\frac{\partial u}{\partial x}\right) = f \tag{10}$$

в некоторой области Ω. Внутри рассматриваемой области выделяют конечные элементы, представляющие собой некоторые подобласти Ω_i, геометрические размеры которых очень малы по сравнению с размерами области Ω, но, тем не менее, остаются конечными. В простейшем случае конечные элементы имеют треугольную (2*D*) или тетраэдральную (3*D*) топологию для плоских и трехмерных задач. Исходная область разбивается на конечные элементы без перекрытия и пересечения (рис. 1), при этом каждый элемент характеризуется числом геометрических узлов и степенью аппроксимации функции в области Ω. Аппроксимация может быть прямолинейной или криволинейной, а порядок аппроксимации лежит в пределах от 1 до 6.



а)



б)

Рис. 1 Примеры разбиения расчетных областей в двумерных (2*D*) и трехмерных (3*D*) задачах

Приближенное решение задачи (10) u_N ищется в виде разложения по базису конечномерного подпространства $\Omega_N \subset \Omega$ размерности *N* т.е. неизвестная функция после решения задачи будет характеризоваться ее значением в каждом узле разбиения

$$u_N = \sum_{i=1}^{N} y_i \varphi_i \,, \tag{11}$$

где $\{\varphi_i\}_{i=1}^{N}$ – базис в Ω_N, y_i – искомые коэффициенты разложения.

Выбор базиса вида $\varphi_i(x) \neq 0$ для конечного элемента приводит к системам уравнений

$$\begin{gathered} Ay = b; \\ y = \left(y_1, y_2, \ldots. y_N\right)^T \end{gathered} \tag{12}$$

для коэффициентов разложения (11) с разреженной матрицей A, что упрощает нахождение коэффициентов y_i. В этом случае система уравнений (12) трактуется как разностная схема для задачи (10).

Обобщенная схема расчета по методу конечных элементов представлена на рис. 2.

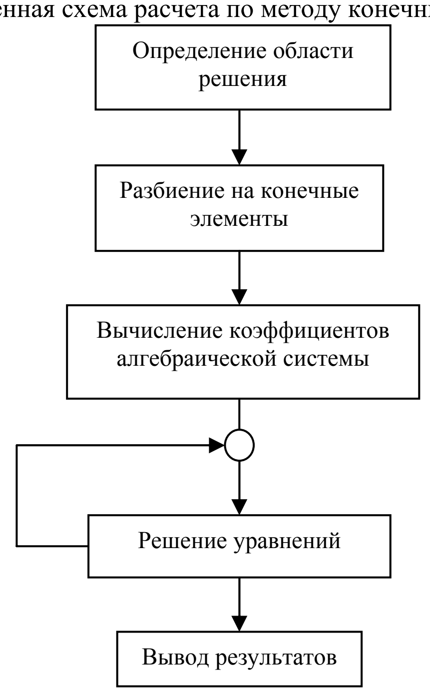


Рис. 2 Схема организации расчета по методу конечных элементов

Для решения полученных сеточных уравнений используются различные методы: Якоби, Зейделя, верхней релаксации, явный итерационный, попеременно-треугольный итерационный, итерационный переменных направлений, Ньютона-Рафсона, матричной прогонки и др.

В пакете *FlexPDE* реализован метод Ньютона-Рафсона [5].

Основой метода Ньютона-Рафсона является построение ряда значений $x^{(0)}$, $x^{(1)}$, ..., $x^{(N)}$, исходя из начальной величины $x^{(0)}$ с использованием процесса итераций, учитывающего значения $\varphi_i(x)$, а также значения ее производной.

Пусть $x^{(0)}$ – начальная величина ряда; назовем $\Delta x^{(0)}$ приращением величины x_0 так, чтобы $x^{(1)} = x^{(0)} + \Delta x^{(0)}$ удовлетворяло уравнению $\varphi_i(x) = 0$ с точностью до второго порядка:

$$\varphi\left(x^{(0)} + \Delta x^{(0)}\right) \cong \varphi\left(x^{(0)}\right) + \varphi'\left(x^{(0)}\right)\Delta x = 0 . \qquad (13)$$

Отсюда следует, что если $\varphi'(x_0) \neq 0$, то

$$\Delta x^{(0)} = -\varphi\left(x^{(0)}\right) / \varphi'\left(x^{(0)}\right), \qquad (14)$$

откуда значение x_1 равно

$$x^{(1)} = x^{(0)} - \varphi\left(x^{(0)}\right) / \varphi'\left(x^{(0)}\right). \qquad (15)$$

Вновь повторяя ту же операцию, начиная с x_1, можно построить ряд итераций по следующему алгоритму:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \varphi\left(x^{(k)}\right) / \varphi'\left(x^{(k)}\right). \qquad (16)$$

Итерации прекращаются, когда разность между двумя последовательными итерациями удовлетворяет заданной точности ε:

$$\frac{\left|x^{(k+1)} - x^{(k)}\right|}{\left|x^{(k+1)}\right|} < \varepsilon . \qquad (17)$$

В дальнейшем будет показано использование метода Ньютона-Рафсона для решения типичных классов задач.

3 ОСНОВЫ РАБОТЫ С ПАКЕТОМ **FlexPDE**

FlexPDE – программа, предназначенная для построения сценарных моделей решения дифференциальных уравнений *методом конечных элементов*, т.е. по сценарию, написанному пользователем, *FlexPDE* производит операции, необходимые для того, чтобы преобразовать описание системы дифференциальных уравнений в частных производных в модель для расчета методом конечных элементов, найти решение для этой системы и представить результаты в графической форме. Таким образом, *FlexPDE* выполняет роль вычислительной среды для решения задач, поскольку в этой программе заключен полный набор функций, необходимых для решения системы дифференциальных уравнений в частных производных:

- функции редактирования для подготовки сценариев;
- генератор сеток конечных элементов;
- функции подбора конечных элементов при поиске решения;
- графические функции представления результатов решения.

FlexPDE не ограничивает пользователя заранее заданным списком прикладных задач или видов уравнений. Выбор вида дифференциальных уравнений в частных производных полностью зависит от пользователя.

Язык сценария позволяет пользователю описывать математический аппарат его системы дифференциальных уравнений в частных производных и структуру области решений в целом в естественном формате. Эта форма сценария имеет много преимуществ.

- Сценарий полностью описывает систему уравнений и область решений, так что нет никакой неопределенности относительно того, какие именно уравнения решаются, что могло бы иметь место в случае программы с фиксированным набором прикладных задач.
- Новые переменные, новые уравнения или новые условия могут легко добавляться в сценарий по желанию.
- Много различных задач могут быть решены при помощи одной и той же программы, так что нет необходимости заново проходить обучение для решения каждой новой задачи.
- *FlexPDE* позволяет решать системы дифференциальных уравнения первого или второго порядка в частных производных.
- Система дифференциальных уравнений может быть стационарной или зависимой от времени.
- При помощи *FlexPDE* можно решать задачи о собственных значениях функций.
- В рамках одной задачи могут быть рассмотрены стационарные и нестационарные уравнения одновременно. Число уравнений в системе определяется мощностью компьютера, на котором установлен математический пакет *FlexPDE*.
- Уравнения могут быть линейными или нелинейными. Математический пакет *FlexPDE* решает нелинейные системы методом Ньютона-Рафсона [5].
- Может быть задано любое количество геометрических областей для решения с различными свойствами материала.

FlexPDE – имеет несколько модулей, для обеспечения решения задач:

- Модуль редактирования сценария, предоставляет средства для редактирования текста и предварительного просмотра графического результата.
- Анализатор записи уравнения в виде символов, который преобразует информацию, записанную в виде символов уравнения в набор переменных, параметров и их соотношений, понижает порядок интегрирования. Затем раскладывает эти уравнения в матрицу Якоби.
- Модуль генератора сетки строит сетку треугольных конечных элементов в двумерной области решений. При решении трехмерных задач двумерная сетка преобразуется в тетраэдрическую, перекрывающую произвольное количество неплоских слоев.
- Модуль численного анализа конечного элемента осуществляет выбор соответствующей схемы решения для задач стационарных, нестационарных и поиска собственных значений, причем для линейных и нелинейных систем применяются отдельные процедуры расчета.
- Процедура оценки погрешности оценивает степень приближения сетки и уточняет координаты сетки в областях, где погрешность велика. Система осуществляет итеративное уточнение параметров сетки и решения до тех пор, пока не достигается заданный пользователем уровень погрешности.
- Модуль графического вывода принимает произвольные алгебраические функции из полученного решения и осуществляет построение графиков контура, поверхности и векторов.
- Модуль внешнего вывода данных предоставляет возможность распечатки отчетов в виде многих форматов, включая таблицы численных значений, данные сетки конечных элементов, а также в форматах совместимых с программами *CDF* или *TecPlot*.

В пакете *FlexPDE* имеется программа-редактор, с помощью которой можно создать сценарий для данной задачи. Этот сценарий можно отредактировать, запустить расчет, снова отредактировать и снова произвести расчеты, пока результат не удовлетворит всем требованиям пользователя. Далее сценарий можно сохранить в виде файла для дальнейшего использования или в качестве основы для дальнейших модификаций.

Самый простой путь к постановке задачи состоит в копировании решения для аналогичных задач, которые уже имеются у пользователя. В любом случае, следует определить четыре основные составляющих этапа разработки сценария:

1) переменные и уравнения;
2) область решений и граничные условия;
3) свойства параметров;
4) в каком графическом виде должно быть представлено решение.

При постановке любой задачи для *FlexPDE* рекомендуется следовать некоторым общим правилам:

• Начните с фундаментальных законов для данной физической системы. Формульная запись основных законов сохранения обычно работает лучше, чем псевдоаналитические упрощения.

• Начните с простой модели, предпочтительно с той, для которой ответ известен. Это позволяет, с одной стороны, проверить свое понимание задачи и, с другой стороны, почувствовать уверенность в возможностях пакета *FlexPDE*. Полезно бывает взять аналитическое решение и, пользуясь *FlexPDE*, рассчитать значения исходных параметров, при которых данное решение достигается. Следует принять во внимание соответствующие граничные условия.

• Следует задавать условие графического вывода во всех случаях, когда оно может помочь в ходе решения. Если построить график только для конечного значения, то будет сложно определить, на каком этапе вычислений вкралась ошибка. Постоянный контроль изменений в ходе решения с помощью графиков бывает удобен.

Работа в *FlexPDE* начинается с запуска рабочего окна редактора. При запуске *FlexPDE* из главного меню *Windows* открывается основное рабочее окно программы-редактора с элементами (меню, панелями инструментов, диалоговыми окнами) характерными для всех *windows* приложений (рис. 3).

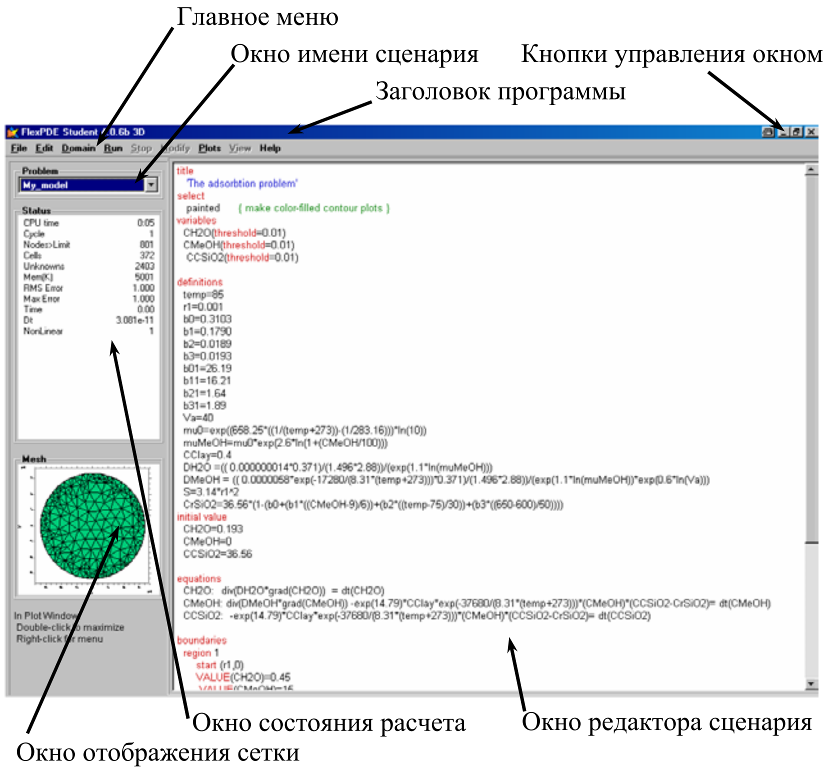


Рис. 3 Основное рабочее окно программы *FlexPDE*

В состав главного окна программы включен следующий набор основных элементов:

- главное меню (*Main menu* – содержит команду по созданию и управлению сценарием);
- окно отображения имени текущего сценария (*Name window* – содержит имя исполняемого или редактируемого сценария);
- кнопки управления окном программы;
- окно отображения состояния расчета (*Status solve* – содержит параметры состояния расчета);
- окно отображения сетки разбиения (*Mesh window* – содержит графическое изображение сетки разбиения);
- окно редактора сценария (*Notepad* – отображает содержимое используемого сценария).

Главное меню, как и во всех приложениях *Windows*, представляет собой линейку раскрывающихся меню. Оно содержит следующие основные команды: *File* (Файл), *Edit* (Правка), *Domain* (Область), *Run* (Выполнить), *Stop* (Стоп), *Modify* (Модифицировать), *Plots* (Графики), *View* (Вид), *Help* (Помощь). Основные команды главного меню перечислены в табл. 1.

1 Команды главного меню

Команда главного меню	Команда	Назначение
File (Файл)	*New* (Новый)	Создать новый сценарий
	Open (Открыть)	Открыть существующий сценарий
	Save (Сохранить)	Сохранить сценарий под прежним именем
	Save As (Сохранить как)	Сохранить сценарий под новым именем
	Close (Закрыть)	Закрыть текущий сценарий
	Import (Импорт)	Импортировать данные из *AutoCad* в формате *DXF*
	View (Вид)	Повторно запустить графический вывод задачи *FlexPDE*, которая была выполнена и закончена ранее
	Exit (Выход)	Выход из *FlexPDE*
Edit (Правка)	*Undo* (Отменить)	Отменяет предыдущую команду
	Cut (Вырезать)	Вырезать фрагмент
	Copy (Копировать)	Копировать фрагмент в буфер обмена
	Paste (Вставить)	Вставить фрагмент из буфера обмена
	Delete (Удалить)	Удаляет выделенное
	Find (Найти)	Вызывает диалоговое окно поиска
	Font (Шрифт)	Вызывает диалоговое окно установки шрифта
	Print (Печать)	Печать сценария или результатов расчета
Domain (Область)		Просмотр расчетной области без построения сетки
Run (Выполнить)		Выполнить расчет сценария

Продолжение табл. 1

Команда главного меню	Команда	Назначение
Stop (Стоп)	*Stop Now* (Остановить сейчас)	Остановить расчет текущего сценария сейчас
	Finish Modes (Закончить режимы)	Завершить выполнение модуля
	Finish Iterations (Закончить итерации)	Завершить итерации
	Finish Grid (Закончить сетку)	Завершить генерацию сетки
	Pause (Пауза)	Установить паузу в расчете сценария
Modify (Модифицировать)	–	Редактировать (модифицировать) сценарий
Plots (Графики)	–	Вывести на экран графики результатов расчета
View (Вид)	*Next* (Далее)	Загрузить следующие графики с результатами расчета
	Back (Назад)	Загрузить предыдущие графики с результатами расчета

	Restart (Перезапустить)	Перерисовать график
	Movie (Проиграть)	Выполнить вывод графиков результатов ранее выполненного расчета
	Stop (Остановить)	Остановить вывод графиков результатов ранее выполненного расчета
Help (Помощь)	*Help* (Помощь)	Получить помощь по *FlexPDE*
	Register (Регистрация)	Зарегистрировать *FlexPDE*
	License (Лицензия)	Вывести файл лицензии на экран
	About (О программе)	Выводит информацию о программе

Окно отображения состояния расчета содержит активные сообщения о состоянии решения. Формат выводимых данных в этом окне зависит от вида решаемой задачи, но общие особенности таковы:

- затраты машинного времени (*CPU Time*);
- номер расчетного цикла (*Cycle*);
- ограничения по числу узлов сетки (*Nodes limit*);
- число конечных элементов (*Cells*);
- число неизвестных переменных (*Unknowns*);
- объем памяти, выделенный для решения задачи в КБ (*Mem(K)*);
- текущая оценка RMS ошибки решения (*RMS Error*);
- текущая оценка максимальной ошибки решения (*Max Error*);
- используемый метод решения итерационного метода Ньютона.

Другие пункты, которые могут появляться во время выполнения задачи:

- текущее расчетное время (*Time*);
- величина текущего временного шага (*Dt*);
- номер циклического повторения решения задачи (*Stage*);
- сообщение текущего действия;
- сообщение о завершении расчета (*DONE*).

Основным элементом рабочего окна *FlexPDE* является окно редактора сценария (*Notepad*). Сценарий описания задачи представляет собой текстовый файл без любых вставленных символов. Такие сценарии могут быть подготовлены не только во *FlexPDE*, но и в любом редакторе текста *ASCII* или любом редакторе, способном к экспорту чистого текстового файла *ASCII*. Содержание этого файла представляет собой ряд разделов, каждый из которых идентифицируется при помощи заголовка. В *FlexPDE* могут использоваться следующие основные разделы:

TITLE – заголовок программы;

SELECT – раздел устанавливает различные опции и средства управления;

COORDINATES – раздел задания типа используемых координат;

VARIABLES – раздел задания переменных задачи;

DEFINITIONS – раздел задания вспомогательных переменных задачи;

INITIAL VALUES – раздел задания начальных значений для нестационарных задач;

EQUATIONS – раздел задания дифференциальных уравнений в частных производных;

CONSTRAINTS – задание интегральных связей;

EXTRUSION – раздел расширения расчетной области на три измерения;

BOUNDARIES – раздел задания граничных условий;

REGION 1 – задание областей для нескольких материалов;

START(,) – задание границ для области;

TIME – установка времени расчета для нестационарных задач;

MONITORS – задание параметров вывода промежуточных данных расчета;

CONTTOUR – раздел вывода графических результатов в виде контурных изображений;

ELEVATION – раздел вывода графических результатов в виде графика для оговоренной области;

PLOTS – раздел вывода графических результатов;

REPORT – вывод результатов расчета в виде текстовых данных;

HISTORIES – вывод результатов расчета;

END – обозначает конец программы.

Некоторые из указанных разделов в конкретной задаче могут быть опущены. При этом, в то время как существует некоторая гибкость в размещении этих разделов, предполагается, что пользователь твердо придерживается упорядоченности, описанной выше.

Вышеупомянутые разделы файла сценария могут содержать различные переменные и определенные имена, которые динамически обрабатываются в ходе расчета. В этой связи рассмотрим более подробно перечисленные разделы.

Раздел *Title* является необязательным и может содержать одну литеральную строку. В случае присутствия данного раздела в сценарии литеральная строка используется как метка заголовка для выводимых графиков.

Раздел *Select* не является обязательным и используется, когда необходимо ввести или отменить некоторые внутренние параметры. Переменные в данном разделе используются для управления процессом расчета и имеют предопределенные имена. Некоторые переменные, доступные пользователю в данном разделе, приведены в табл. 2.

2 Переменные раздела *Select*

Название	Значение по умолчанию	Назначение
ALIAS(X)	–	Назначает дополнительную метку для графической оси *X*
ASPECT	4	Максимальный коэффициент сжатия ячейки
AUTOHIST	*On*	Заставляет графики перерисовываться во время расчета
AUTOSTAGE	*On*	Устанавливает отсутствие паузы при расчете
BLACK	*Off*	Вывод графиков только в черно-белом режиме
CDFGRID	51	Определяет размет сетки вывода *CDF*
COLORCYCLE	32	Максимальное количество цветов
CONTOURS	15	Число уровней на контурных графиках
CUBIC	*On*	Устанавливает использование кубических базисных функций
DEBUG(GRID)	*Off*	Показывать процесс отображения сетки
ERLIM	0.001	Точность расчета
FONT	1	Устанавливает тип шрифта как *San-Serif Font*
NODELIMIT	800	Максимальное число узлов решения
NONLINEAR	*AUTOMATIC*	Устанавливает нелинейный метод решения, даже если автоматический процесс расчета этого не требует
PAINTED	*Off*	Отображение заполненных цветом контурных графиков
REGRID	*On*	По умолчанию *FlexPDE* осуществляет адаптивное усовершенствование расчетной сетки
QUADRATIC	*On*	Устанавливает использование квадратичной базисной функции
STATUSMESH	*On*	Расчетная сетка показывается в *Mesh Window*
NGRID	10	Определяет число ячеек сетки в максимальном измерении
REGRID	*On*	По умолчанию *FlexPDE* осуществляет адаптивное усовершенствование расчетной сетки

Раздел *Coordinates* (необязательный) определяет систему координат для конкретной задачи. При этом раздел задается в следующем виде:

COORDINATES <geom>

где <*geom*> – тип задаваемой системы координат, может быть любой из видов, указанных в табл. 3.

3 Виды системы координат

Название	Значение
CARTESIAN	Декартовы координаты по имени '*X*' и '*Y*'
XCYLINDER	Цилиндрические координаты с осевой координатой '*Z*', находящейся на горизонтальной графической оси '*X*', и радиальной координатой '*R*', находящейся на вертикальной графической оси '*Y*'.
YCYLINDER	Цилиндрические координаты с радиальной координатой '*R*', находящейся на горизонтальной графической оси '*X*', и осевой координатой '*Z*', находящейся на вертикальной графической оси '*Y*'.
CARTESIAN3	Декартовы координаты по имени '*X*', '*Y*' и '*Z*'

В данном разделе возможно произвести переименование координат, в этом случае используется следующая запись:

COORDINATES <geom> ('Xname', 'Yname', {'Zname'}).

При этом применение переименования вызывает переопределение дифференциальных операторов**.**

Раздел *Variables* используется для определения переменных, используемых в сценарии. Каждая переменная определяет непрерывное скалярное поле по расчетной области. При применении имен зависимых переменных применяются следующие правила:

- Имена переменных должны начинаться с алфавитного символа. Они не могут начинаться с цифры или символа.
- Имена переменных должны быть уникальными и отличаться от символа *t*, который зарезервирован для переменной времени.
- Имена переменных могут иметь любую длину и любую комбинацию символов, цифр и (или) символов, отличных от зарезервированных слов.
- Имена переменных не должны содержать любые разделители. Составные имена могут быть сформированы с использованием симво- ла '_'.
- Имена переменных не могут содержать '–', который зарезервирован для знака 'минус'.

При этом программа не различает заглавные и строчные буквы, так переменная *X* и *x* обозначают одно и то же.

Раздел *Definitions* используется, чтобы объявить и назначить названия на специальные постоянные и функции, используемые в сценарии. При описании переменных в данном разделе придерживаются тех же правил, что и в разделе *Variables*. Дополнительно здесь возможно задание массивов или списков значений в форме:

<Name>=ARRAY [<value_1>, <value_2>, ….. <value_n>]

или, например,

Xk=ARRAY (1, 2, 3, 4, 6.5).

Значения, заданные в списке, должны быть натуральными числами. Они не могут содержать координатные или зависимые переменные. Использование средства *ARRAY* демонстрирует следующий пример:

```
DEFINITIONS
Xc=array (1/3, 2/3, 3/3, 4/3, 5/3)     {Список X-координат} Yc=array (1/3. 2/3, 3/3. 4/3, 5/3)     {Список Y-
координат} BOUNDARIES
Region 1
 for i=1 to 5 {Индексированный цикл на X-позиции}
 for j=1 to 5 {Индексированный цикл на Y-позиции}
   Start (xc [i] +rad, yc [jJ)          {Массив точек}
   Arc (center=xc [i], yc [j]) angle=360 {сведенных в таблицу координат}
 Endfor
 Endfor
```

Раздел *Initial values* используется при решении нестационарных задач, когда необходимо задать начальное значение для времязависимых переменных. Инструкция сформирована таким образом, что за именем переменной стоит оператор назначения '=', а справа константа, функция, выражение или предварительно введенное определение, например:

```
Initial values
    Xk=25-x
```

Раздел *Equations* используется, чтобы перечислить дифференциальные уравнения в частных производных, которые определяют зависимые переменные решаемой задачи. Уравнения, вводимые в сценарий, записываются в естественной форме, используя операторы табл. 4.

4 Операторы дифференциальных уравнений

Команда, функция или константа	Синтаксис	Название
CURL	*CURL(X)*	Ротор числа *X*
DEL2	*DEL2 (X)*	Лапласиан числа *X*, эквивалентный *Div(Grad(X))*
DIV	*DIV(X)*	Дивергент числа *X*
GRAD	*GRAD(X)*	Градиент числа *X*
D	*DX()*	Дифференциальный оператор по *X*
D	*DXX()*	Вторая производная по *X*

В случае решения задачи, включающей в себя бигармонические уравнения, которые требуют использования более высоких порядков производных, они должны быть переписаны, используя промежуточные переменные так, чтобы содержать только производные второго порядка.

Раздел *Constraints* является необязательным и используется, чтобы применить дополнительные интегральные связи к решаемой системе. Эти связи используются для устранения неоднозначности, которая может возникнуть в установившихся системах, или в случае, если граничные условия содержат только производные зависимых переменных.

Раздел *Constraints* обычно содержит один или большее количество инструкций формы

Integral(argument) = Expression

Раздел *Extrusion* зачастую при решении дифференциальных уравнений в качестве областей решения используются не плоские, а объемные 3*D*-объекты; в этом случае используется раздел *Extrusion*, который расширяет расчетную область до 3*D*-объекта.

В качестве примера рассмотрим часть сценария, отвечающую за задание расчетной области в виде цилиндра радиусом *R0* и высотой, равной единице.

EXTRUSION
SURFACE Z =0{Нижняя граница по оси *Z*}
SURFACE Z =1{Верхняя граница по оси *Z*}
BOUNDARIES
SURFACE 1 VALUE(U) = 100 {Задаем граничные условия снизу}
SURFACE 2 VALUE(U) = 0 {Задаем граничные условия сверху}
REGION 1
START (R0,0)
ARC(CENTER=0,0) ANGLE=360 TO FINISH {Задаем форму основания}

Результат выполнения данного кода иллюстрирует рис. 4.

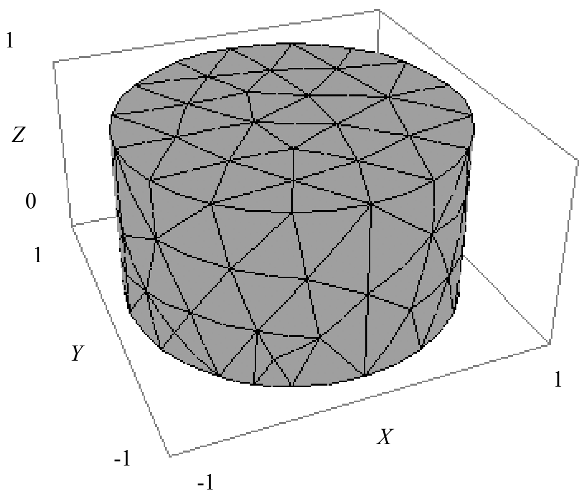


Рис. 4 Расчетная область в виде цилиндра

Раздел *Boundaries* (обязательный) используется, чтобы описать двумерную область или проекцию трехмерной области на основную плоскость и присоединить граничные значения и внешние источники на физических границах задачи. В *FlexPDE* осуществует два основных типа задания граничных условий – *VALUE* и *NATURAL*. В граничные условия в форме *VALUE* (или по Дирихле) определяется значение, которое должна принять переменная на границе области решения. В граничных условиях в форме *NATURAL* задается значение потока на границе области решений. Кроме того, существуют и другие граничные условия:

LOAD (VARIABLE) = Expression
NEUMANN (VARIABLE) = Expression
DNORMAL (VARIABLE) = Expression
DTANGENTIAL (VARIABLE) = Expression
NOBC (VARIABLE)

Условия *NATURAL* и *LOAD* синонимичны. Выражением в этих граничных условиях может быть явная спецификация, содержащая только константы и координаты, или это может быть неявное отношение, зависящее от значения переменных системы и их производных.

Условия *NEUMANN* и *DNORMAL* синонимичны. Они определяют производную по внешней нормали для названной переменной. В частном случае задают уравнение вида *DIV (Grad (U))+f=0*.

Граничные условия *NEUMANN* и *NATURAL* эквивалентны.

Граничное условие *DTANGENTIAL* определяет касательную производную указанной переменной.

Условие типа *NOBC* используется, чтобы выключить предварительно указанное граничное условие. Оно эквивалентно условию *NATUAL(VARIABLE)=0.*

В пределах *Boundaries* физическая область делится на части *Region*, *Features* и *Exlude* (подразделы). Каждый прикладной описатель должен иметь, по крайней мере, один подраздел *Region*.

Подраздел *REGION* используется, чтобы описать замкнутые области, которые составляют физическую геометрию проблемы в двумерной плоскости, или двумерные проекции на основную плоскость в трехмерных проблемах. Подразделы *REGIONS* включают области и подобласти с определимыми материальными параметрами. Подразделы *REGIONS* сформированы таким образом, что начинаются с зарезервированного слова *START*, сопровождаемого физическими координатами отправной точки, затем следует идти вдоль границы области, описывая их прямолинейными отрезками или дуговыми сегментами, и замыкается область зарезервированным словом *FINISH*. Координаты имеют стандартную математическую форму (*X*, *Y*). Среди возможных графических примитивов используемых во *FlexPDE* существуют примитивы, указанные в табл. 5.

5 Используемые графические примитивы

Примитив	Синтаксис	Название
LINE	*LINE TO (X,Y)*	Линия от точки *START* до точки с координатами (*X*, *Y*)
–	*LINE TO (X,Y) TO (X1,Y1) TO (X2,Y2) TO …*	Полилиния, проходящая через точки с координатами (*X*, *Y*), (*X*1, *Y*1), (*X*2, *Y*2) и др.
ARC	*ARC TO (X1,Y1) TO (X2,Y2)*	Дуга от точки с координатами (*X*1, *Y*1) до точки с координатами (*X*2, *Y*2)
–	*ARC (RADIUS=R) TO (X,Y)*	Дуга радиусом *R* до точки с координатами (*X*, *Y*)
–	*ARC (CENTER=X1,Y1) TO (X2,Y2)*	Дуга с центром в точке с координатами (*X*1,*Y*1), проведенная до точки с координатами (*X*2, *Y*2)
–	*ARC (CENTER=X1,Y1) ANGLE=angle*	Дуга с центром в точке с координатами (*X*1, *Y*1), проведенная на угол *angle* (в градусах)

Подраздел *EXLUDES* (исключения) используется, чтобы описать замкнутые области, который имеют оверлейные (пересекающиеся) части в одном или большем количестве подразделов *REGIONS*. Область, описанная подразделом *EXLUDES*, исключается из системы расчета. Подразделы *EXLUDES*, должны следовать за подразделами *REGIONS*, которым они оверлейны.

Подразделы *EXLUDES* описываются тем же самым способом, как и подразделы *REGIONS*, и могут использовать также *LINE* и *ARC* сегменты.

В качестве примера можно рассмотреть следующий код:

```
Region 1 {Задаем исходную расчетную область в виде квадрата}
    start(-1,-1)
          value(u)=u0
   line to (1,-1) to (1,1) to (-1,1) finish
EXCLUDE {Удаляем из расчета треугольную область}
 start(-1,-1)
 line to (0,0) to (1,-1) to (-1,1) finish
```

Результат выполнения данного кода иллюстрирует рис. 5.

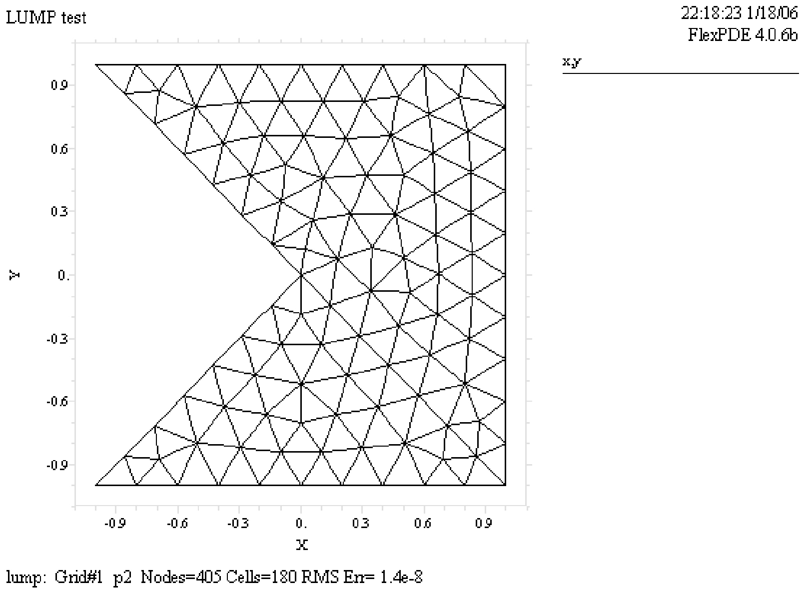


Рис. 5 Расчетная область, построенная с использованием подраздела *EXLUDES*

Подраздел *FEATURE* используется, чтобы описать незамкнутые объекты, которые не включают подобласть с определимыми материальными параметрами. Подразделы *FEATURE* формируются тем же самым способом, как и подразделы *REGIONS*, и могут использовать также *LINE* и *ARC* сегменты. Подразделы *FEATURE* не заканчиваются резервным словом *FINISH*.

Подразделы *FEATURE* используются, когда проблема имеет внутренние линейные источники, когда желательно вычислить интегралы по нерегулярному пути, или когда требуется явное управление вычислительной сеткой. Пример применения данного подраздела иллюстрирует следующий программный код:

REGION 1 {Задаем расчетную область в виде квадрата}
START(0,0) LINE TO (10,0) TO (10,10) TO (0,10) TO FINISH
FEATURE {Задаем линию сетки}
START(0,0) LINE TO (10,10)

При применении данных подразделов следует помнить, что все подразделы *REGIONS* должны быть перечислены прежде, чем будут упомянуты подразделы *EXLUDES* или *FEATURE*. Соответственно подразделы *EXLUDES* должны быть перечислены до подразделов *FEATURE*.

Подразделы *REGIONS*, *EXLUDES* и *FEATURE* могут иметь как численное, так и буквенное обозначение имен. В случае использования в качестве имени указанных подразделов цифровых обозначений, номера должны назначаться в порядке возрастания, начиная с первого. Более предпочтительным является задание имен подразделов в виде чисел.

Однако если в сценарии ставится задача вывода значения объемного интеграла для произвольной области, то в этом случае целесообразно задавать имена подразделов литеральными символами. В случае задания таких имен они должны иметь форму цитируемой строки и быть помещены немедленно после зарезервированного слова *REGIONS*, *EXLUDES* или *FEATURE*. Назначенные имена должны быть уникальны к подразделам *REGIONS*, *EXLUDES* и *FEATURE*.

Помимо подразделов собственные имена могут иметь и *пути*. *Путь* можно определить как непрерывный ряд сегментов *ARC* и (или) *LINE*. Каждый путь начинается с зарезервированного слова *START* и заканчивается зарезервированным словом *FINISN* или другим словом *START*. В случае назначения имени на путь, оно имеет форму цитируемой строки и должно быть помещено после зарезервированного слова *START*:

START «namedpath» (< x>, <y>)

Назначенные имена для путей должны быть уникальными и отличными от имен, которые назначены для подразделов *REGIONS*, *EXLUDES* или *FEATURE*.

Помимо вышеупомянутых инструкций сегментов *LINE* и *ARC* во *FlexPDE* имеются и дополнительные графические инструкции. К таким инструкциям относятся *FILLETS* (скругление) и *BEVELS* (скос). Посредством данных инструкций любая точка контура расчетной области может быть заменена круговой дугой указанного радиуса, или отрезком указанной длины. Сегменты *FILLETS* и *BEVELS* не могут применяться к точкам, которые являются пересечением нескольких сегментов, так как может привести к путанице.

Нижеприведенный программный код иллюстрирует применение сегментов *FILLETS* и *BEVELS* для задания расчетных областей

```
Region 1
      start(-1,-1)
      value(u)=u0      line to (1,-1) fillet(0.1)
                       to (-0.25,-0.25) fillet(0.1)
```

to (-1,1) bevel(0.1)
to finish

Рисунки 6 и 7 иллюстрируют различия в созданных расчетных областях в случае применения сегментов *FILLETS* и *BEVELS.*

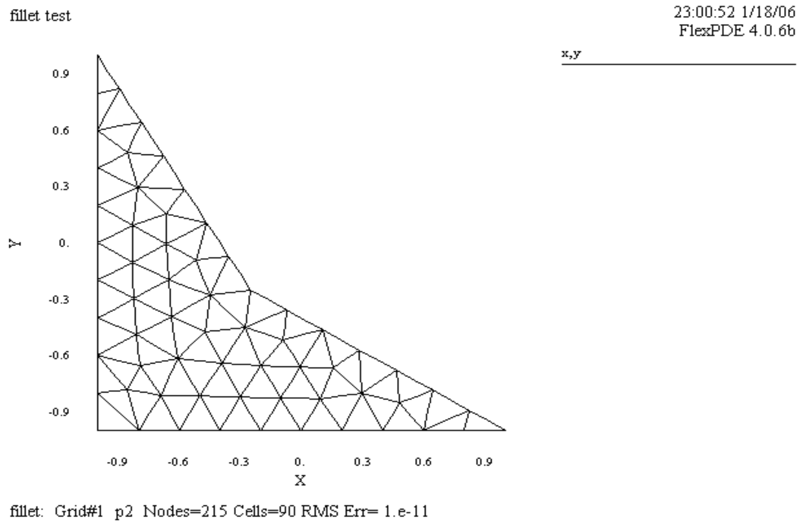


Рис. 6 Произвольная расчетная область, созданная с использованием инструкции *LINE*

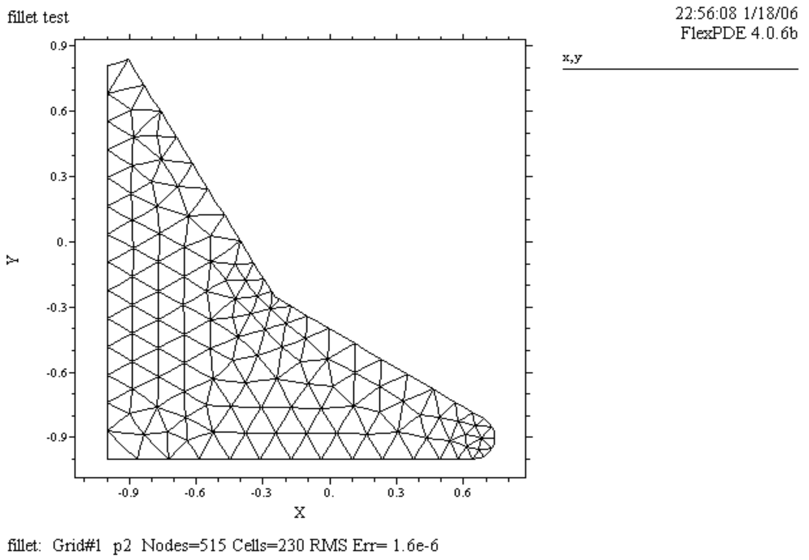


Рис. 7 Расчетная область, созданная с использованием инструкций *FILLETS* и *BEVELS*

Ранее мы рассматривали граничные условия, заданные для сегментов *LINE* и *ARC*. В дополнение к указанным граничным условиям во *FlexPDE* имеет возможность задания граничных условий для отдельных точек в форме *VALUE* и *LOAD*.

Граничные условия в форме *VALUE* для точки задаются посредством инструкции *POINT VALUE* (точечные граничные условия). Синтаксис данной инструкции иллюстрирует следующий пример:

POINT VALUE(VARIABLE) = Expression – данная инструкция указывается после координатной спецификации. Заданное значение граничных условий будет наложено только на точку, координаты которой определены предшествующей спецификацией.

Граничные условия вида *POINT LOAD* могут быть добавлены, помещением следующего программного кода:

POINT LOAD(VARIABLE) = Expression – данная инструкция указывается после координатной спецификации. Заявленные граничные условия будут наложены только на точку, координаты которой, определенной предшествующей спецификацией.

Помимо этого произвольные точки в пределах расчетных областей могут быть выбраны посредством применения инструкции *FIXED POINTS* для специальной обработки расчетных инструкций. Задание этих точек осуществляется посредством инструкции вида:

Fixed Points (X, Y) – заявленная точка будет представлена узлом сетки и может определить изменение плотности узлов сетки в ее окрестности.

При решении задач для 3*D*-объектов иногда необходимо определить различные отверстия или исключенные области в расчетной области. Это может быть сделано с использованием инструкции *VOID*. *VOID* имеет синтаксис переопределения параметра. Например, следующий фрагмент кода иллюстрирует применение инструкции *VOID*:

```
EXTRUSION  Z=0,1,2,3
BOUNDARIES
 REGION 1
   START(0,0) LINE TO (3,0) TO (3,3) TO (3,0) TO FINISH
 REGION 2
   LAYER 2 VOID
   START(1,1) LINE TO (2,1) TO (2,2) TO (2,0) TO FINISH
```

Рисунки 8 и 9 иллюстрируют изменение в расчетной области в результате применения данного программного кода.

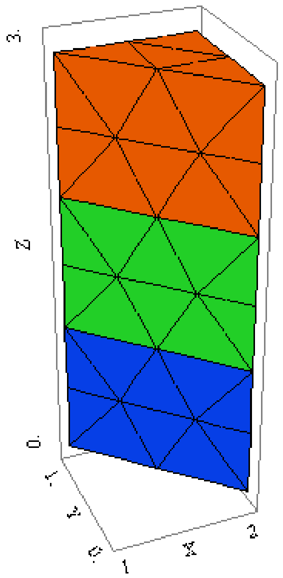


Рис. 8 Исходная расчетная область

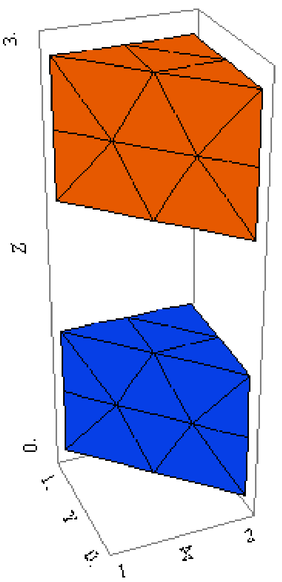


Рис. 9 Расчетная область, в которой посредством инструкции *VOID* исключен один слой

Раздел *Time* используется в нестационарных прикладных описателях, чтобы определить диапазон времени. Во *FlexPDE* поддерживаются следующие альтернативные формы задания временного диапазона:

FROM time1 TO time2
EROM time1 INCREMENT TO time2
EROM time1 TO time2 increment

где *time1* – начальное время; *time2* – конечное время; *increment* – необязательная спецификация начального шага по времени.

Раздел *Monitors* является необязательным и используется, чтобы перечислить графические дисплеи (промежуточные графики), которые выводятся в процессе решения задачи.

Раздел *Plots* является необязательным, используется чтобы перечислить графические дисплеи (окончательные графики), которые будут выведены на экран по завершению решения задачи. Раздел *Plots* отличается от раздела *Monitors* так же тем, что графики первого могут быть записаны в файл с расширением *.PGX* для последующего отображения после выполнения задачи.

Инструкции *Plots* и *Monitors* имеют одинаковую форму и функции. Разделы *Monitors* или *Plots* могут содержать один или большее количество спецификаций дисплея следующих типов:

CDF (arg1 [, arg2, ...]) – выполняет экспорт перечисленных значений в виде сетки *CDF* формата версии 3.

CONTOUR (arg) – выполняет вывод двумерного контурного графика параметра *(arg)*, с однородными интервалами уровня параметра.

ELEVATION(arg1, [arg2,...]) <path> – выполняет двумерный график, который отображает значение параметра(ов) вертикально по оси *Y* а горизонтально (ось *OX*) область локализации независимой переменной.

GRID (arg1, arg2) – рисует двумерную сетку вычислений с узловыми координатами, определенными двумя параметрами. Сетки могут быть особенно полезны для отображения материальных деформаций.

SUMMARY('string') – этот графический тип определяет текстовую страницу, содержащей только сообщение о данных, введенных в текстовой строке.

TABLE (arg1 [, arg2, ...]) – выполняет экспорт перечисленных значений в табличном текстовом формате.

TECPLOT (arg1 [, arg2, ...]) – выполняет экспорт перечисленных значений в файл, читаемый *TecPlot* системой визуализации.

VECTOR(arg1, arg2) – рисует двумерный дисплей направленных стрелок, в которых *X*- и *Y*-компоненты стрелок задаются arg1 и arg2.

Вид любого дисплея может изменяться путем прибавления одного или нескольких предложений вида:

AS 'string' – изменяет метку на дисплее на выражение, указанное в строке.

EXPORT – записывает на диске файл, содержащий данные, представленные в разделах *Monitors* или *Plots*.

INTEGRATE – возвращает значение интеграла от функции, изображенной на графике.

LOG
LINLOG
LOGLIN
LOGLOG

Данные спецификаторы изменяют заданные по умолчанию линейные масштабы вывода графиков на специальные. Команда масштабирования состоит или из отдельного слова или составного слова. В случае использования односложного слова, например, *LIN* – это означает задание линейного масштаба отображения графиков, в случае задания *LOG* графики будут иметь логарифмические оси. При использовании составных слов (*LINLOG, LOGLIN, LOGLOG*) первое слово применяет к логической Оси *X*, второе – к логической Оси *Y* и так далее.

NOTIPS – данный спецификатор отображает графики типа *Vector* как отрезки без стрелок.

PAINTED – заполняет области между контурными линиями цветом.

Любая спецификация дисплея может сопровождаться одним или большим количеством следующих предложений с целью прибавления сообщений к графикам:

REPORT expression – данная спецификация добавляет внизу графика текст *'text expression=value expression'*, где expression – любое выражение, включая выражения, содержащие интегралы.

В дополнение можно отметить, что в нестационарных задачах спецификациям дисплея должна предшествовать инструкция, регламентирующая вывод графиков. Эта инструкция может иметь любую из нижеприведенных форм:

FOR CYCLE = number – в этом случае графики будут обновляться на каждом указанном временном шаге.

FOR T = timeset1 [timeset2 ...] – каждый *timeset* (временной шаг) может быть или определенным временем или группой временных шагов, указанных как массив значений.

Раздел *Histories* является необязательным, определяет значения, переменных для которых хронология изменения. Инструкции этого раздела имеют следующий вид:

HISTORY(arg)

при этом определяются координаты точки в области, в которой регистрируется хронология изменения. Если точка не задана, то переменная должна быть скалярной величиной.

В *FlexPDE* используется порядка 140 различных команд, функции и констант, некоторые из наиболее часто используемые при разработке сценариев приведены в табл. 6.

6 Математические функции и константы *FlexPDE*

Команда, функция или константа	Синтаксис	Название
ABS	*ABS(X)*	Модуль числа *X*
ARCCOS	*ARCCOS(X)*	Арккосинус числа *X*
ARCSIN	*ARCSIN(X)*	Арксинус числа *X*
ARCTAN	*ARCTAN(X)*	Арктангенс числа *X*
ATAN2	*ATAN2(Y,X)*	Арктангенс числа (*Y*/*X*)
BESSJ	*BESSJ(N,X)*	Функция Бесселя 1-го рода *N*-го рода числа *X*
BESSY	*BESSY(N,X)*	Функция Бесселя 2-го рода *N*-го рода числа *X*
BINTEGRAL	*BINTEGRAL (<уравнение>, <имя границы>)*	Интегральное значение *<уравнения>* для линейной области *<имя границы>*
COS	*COS(X)*	Косинус *X*
COSH	*COSH(X)*	Гиперболический косинус *X*
CROSS	*CROSS (vector1, vector2)*	Возвращает векторную величину, равную сумме векторов
DOT	*DOT(vector1, vector2)*	Возвращает скалярную величину для точки, равную сумме двух векторов
ERF	*ERF(X)*	*R*-функция числа *X*
ERFC	*ERFC(X)*	Дополнительная *R*-функция числа *X*

Продолжение табл. 6

Команда, функция или константа	Синтаксис	Название
EXP	*EXP(X)*	Экспонента числа *X*
EXPINT	*EXPINT(X)*	Интеграл $\ln(X)$
–	*EXPINT(n,X)*	Интеграл $(\ln(X))^n$
GAMMAF	*GAMMAF(X)*	Гамма-функция (эйлеров интеграл первого рода)
–	*GAMMAF(a,X)*	Гамма-функция (эйлеров интеграл второго рода)
INTEGRAL	*LINE_INTEGRAL (X, Region 1)*	Возвращает значение интеграла функции *X*, для области 1 (1*D*-объект)
–	*AREA_INTEGRAL (X, Region 1)*	Возвращает значение интеграла функции *X*, для области 1 (2*D*-объект)
–	*VOL_INTEGRAL (X, Region 1)*	Возвращает значение интеграла функции *X*, для облас-

		ти 1 (3*D*-объект)
LOG10	*LOG10(X)*	Логарифм десятичный числа *X*
LN	*LN(X)*	Логарифм натуральный числа *X*
MAGNITUDE	*MAGNITUDE (vector1)*	Возвращает скалярную величину вектора
MAX	*MAX (arg1,arg2)*	Возвращает максимальное значение функции двух значений
MIN	*MIN (arg1,arg2)*	Возвращает минимальное значение функции двух значений
MOD	*MOD(arg1,arg2)*	Возвращает абсолютное значение функции двух значений

Продолжение табл. 6

Команда, функция или константа	Синтаксис	Название
SIN	*SIN(X)*	Синус числа *X*
NORMAL	*NORMAL(vector1)*	Возвращает скалярную величину нормальной составляющей к границе области заданного вектора
SINH	*SINH(X)*	Гиперболический синус *X*
SQRT	*SQRT(X)*	Корень квадратный числа *X*
SIGN	*SIGN (X)*	Возвращает число, равное 1 если $X > 0$ и -1 если $X < 0$
SUM	*SUM(i,1,10,exp(-i))*	Возвращает значение суммы для функции $f(i) = \sum_{i=1}^{10} \exp(-i)$
TAN	*TAN(X)*	Тангенс числа *X*
TANH	*TANH(X)*	Гиперболический тангенс числа *X*

Помимо указанных функций и констант в *FlexPDE* используются стандартные математические операторы (табл. 7)

7 Математические операторы

Оператор	Выполняемая операция
–	Вычитание
+	Сложение
*	Умножение
/	Деление
^ или **	Возведение в степень

Ниже нами рассматриваются постепенно усложняющиеся примеры решения различных задач с использование *FlexPDE*.

5.1 Краевые дифференциальные задачи с двумя переменными

В качестве первого примера рассмотрим типичную задачу нестационарной диффузионной химической кинетики для прямоугольной области с граничными условия вида *VALUE* и *NATURAL*. Данная задача может быть сформулирована в математическом виде следующим образом:

$$\frac{\partial C_A}{\partial \tau} = \nabla\big(D(T, C_A)\,\mathrm{grad}(C_A)\big) - k_1 C_A\,, \tag{23}$$

где $D(T, C_A)$ – коэффициент диффузии; $k_1 = k_0 \exp\left(\frac{-E}{RT}\right)$ – константа скорости химической реакции; E – энергия активации химического процесса.

Начальное условие в рассматриваемой задаче запишется как при $\tau = 0$, $C_A(X,Y) = 0$, где $X \in [0, L_x]$, $Y \in [0, L_y]$.

Граничные условия: слева, снизу и сверху при $\tau > 0$ $C_A = 0$; справа при $\tau > 0$ $\partial C / \partial n = \beta\ (C_r - C)$

Поставленная задача формулируется во *FlexPDE* следующим образом:

TITLE *'Diffusion and chemical reaction'* {Этот заголовок печатается на графиках}

VARIABLES {Искомые переменные}
C(threshold=0.1)

DEFINITIONS {Используемые константы и зависимости}
L1=0.05 {Линейный размер}
Temp=318 {Температура процесса в градусах Кельвина}
R=8.31
Ed=17000 {Энергия активации процесса диффузии в Дж/моль}
*D=10.4e-5*exp(-Ed/(R*Temp))* {Коэффициент диффузии}
K0=exp(3) {Константа скорости химической реакции}
E=25000 {Энергия активации химической реакции в Дж/моль}
*K=K0*exp(-E/(R*Temp))* {Скорость химической реакции}
Cr=10 {Равновесная концентрация компонента}
NU=2 {Критерий Нуссельта диффузионный}

INITIAL VALUES
C=0 {Начальная концентрация компонента в расчетной области}

EQUATIONS {Расчетное уравнение}
*div(D*grad(C))-K*C=dt(C)*

BOUNDARIES {Расчетная область и граничные условия}

REGION 1 {Расчетная область}
START(0,0) Value(C)=0 LINE TO (0,L1) {Устанавливаем граничные условия равные C=0 на границе слева}
Value(C)=0 LINE TO (L1,L1) {Устанавливаем граничные условия равные $C = 0$ на границе сверху}
*Natural(C)=(D*NU/L1)*(Cr-C) LINE TO (L1,0)* {Устанавливаем граничные условия равные $\partial C / \partial n = \beta\ (C_r - C)$ на границе справа, где β – коэффициент массоотдачи}
Value(C)=0 LINE TO (0,0) Finish {Устанавливаем граничные условия равные $C = 0$ на границе снизу}

TIME *0 TO 600* {Устанавливаем диапазон изменения времени процесса}

PLOTS
For cycle=1 contour(C) {Рисуем график распределения компонента в расчетной области на каждом расчетном цикле.}

HISTORIES
*history(Area_Integral(C/(L1*L1)))* {Выводим кинетику накопления компонента в расчетной области}

END

Результаты решения поставленной задачи иллюстрируются графиками, представленными на рис. 10 и 11.

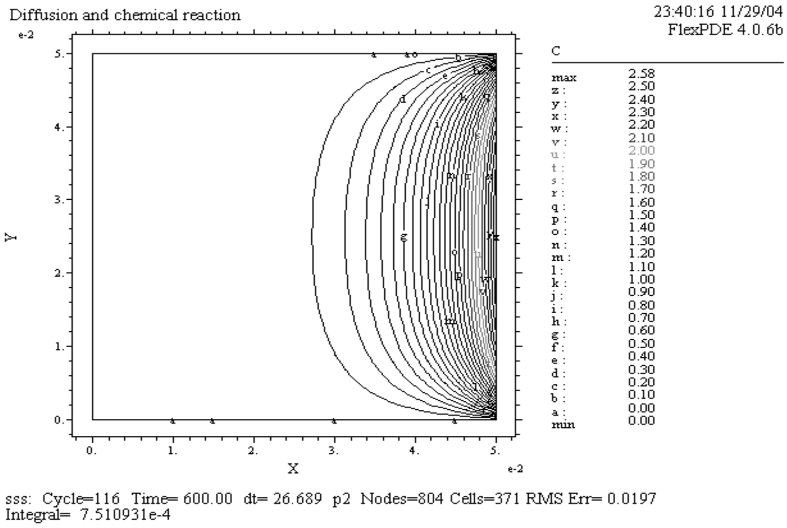


Рис. 10 Конечное распределение компонента в расчетной области

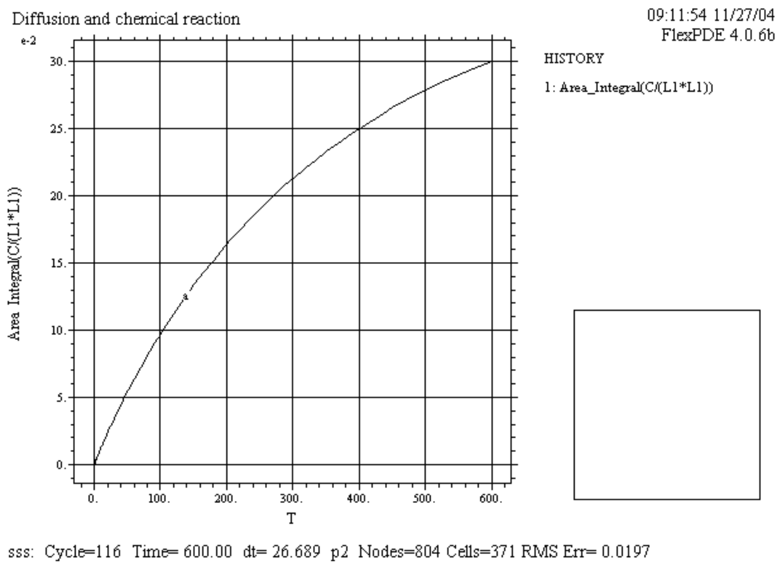


Рис. 11 Кинетика накопления компонента в расчетной области

Постановка задачи решения системы дифференциальных уравнений в *FlexPDE* производится так же, как и в случае с одним уравнением. При этом каких-либо существенных изменений, помимо включения дополнительных расчетных уравнений, не требуется. Для примера решим следующую задачу.

Рассматривается область в виде круга, в которой протекает совокупность химических превращений, протекающих в диффузионной области и описываемых уравнениями формальной кинетики вида

$$\begin{cases} A + B \xrightarrow{k_1} C; \\ C + D \xrightarrow{k_2} E, \end{cases} \tag{19}$$

где вещества B и D не расходуются в ходе реакций. Исходя из вышесказанного, система дифференциальных уравнений запишется в виде

$$\begin{cases} \dfrac{\partial C_A}{\partial \tau} = \operatorname{div}(D_A(T)\operatorname{grad}(C_A)) - k_1 C_A C_B; \\ \dfrac{\partial C_C}{\partial \tau} = k_1 C_A C_B - k_2 C_C C_D; \\ \dfrac{\partial C_E}{\partial \tau} = k_2 C_C C_D \end{cases} \tag{20}$$

с начальными условиями при $0 \le r \le R_1$ и $\tau = 0$

$$C_A(0,r)=0\,;\qquad C_C(0,r)=0\,;\qquad C_E(0,r)=0 \tag{21}$$

и граничными условиями при $\tau > 0$:

$$\frac{\partial C_A}{\partial r}=\beta(C_r - C(\tau,R_1))\,;\qquad C_C(\tau,R_1)=0\,;\qquad C_E(\tau,R_1)=0\,. \tag{22}$$

Поставленная задача может быть решена по следующему сценарию:

TITLE *'Diffusion and chemical reaction'* {Этот заголовок печатается на графиках}

VARIABLES {Искомые переменные}
Ca(threshold=0.1) {Концентрация компонента *A*}
Cc(threshold=0.1) {Концентрация компонента *C*}
Ce(threshold=0.1) {Концентрация компонента *E*}

DEFINITIONS {Используемые константы и зависимости}
R1=0.05 {Радиус окружности в м}
Temp=318 {Температура процесса в градусах Кельвина}
R=8.31
Ed=17000 {Энергия активации процесса диффузии в Дж/моль}
*D=10.4e-5*exp(-Ed/(R*Temp))* {Коэффициент диффузии}
K0=exp(3) {Константа скорости химической реакции}
E1=25000 {Энергия активации химической реакции в Дж/моль}
*K1=K0*exp(-E1/(R*Temp))* {Скорость химической реакции}
K02=exp(2) {Константа скорости химической реакции}
Cr=10 {Равновесная концентрация компонента *A*}
NU=2 {Критерий Нуссельта диффузионный}
Cb=3 {Концентрация компонента *B*}
Cd=5 {Концентрация компонента *D*}
E2=28000 {Энергия активации химической реакции в Дж/моль}
*K2=K02*exp(-E2/(R*Temp))* {Скорость химической реакции}

INITIAL VALUES {Начальные концентрации компонентов в расчетной области}
Ca=0
Cc=0
Ce=0

EQUATIONS {Расчетные уравнения}
*Ca: div(D*grad(Ca))-K1*Ca*Cb=dt(Ca)*
*Cc: K1*Ca*Cb- K2*Cc*Cd=dt(Cc)*
*Ce: K2*Cc*Cd=dt(Ce)*

BOUNDARIES {Расчетная область и граничные условия}
REGION 1 {Расчетная область}
Start(0,R1)
*Natural(Ca)=(D*NU/L1)*(Cr-Ca)* {Устанавливаем граничные условия равные $\partial C/\partial r = \beta\,(C_r - C)$, где β – коэффициент массотдачи}
Arc(Center=0,0) Angle=360
TIME 0 TO 600 {Устанавливаем диапазон изменения времени процесса}

PLOTS
For cycle=10 {Каждые 10 расчетных циклов рисуем графики распределение компонентов в расчетной области}
contour(Ca)
contour(Cc)
contour(Ce)
HISTORIES
*hitory(Area_Integral(Ca/(L1*L1)),Area_Integral(Cc/(L1*L1)), Area_Integral(Ce/(L1*L1))))))* {Выводим кинетику накопления компонентов в расчетной области.}

END

Результаты решения задачи иллюстрирует рис. 12.

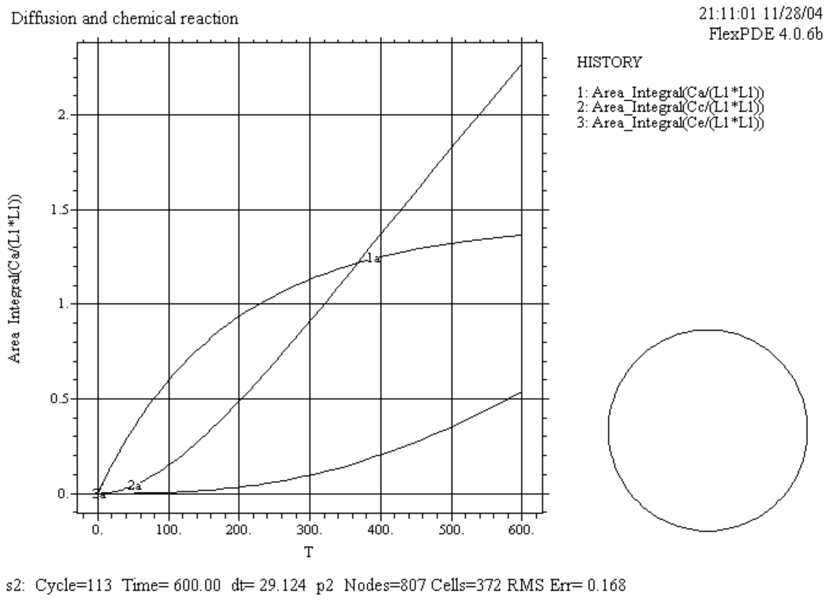


Рис. 12 Кинетика накопления компонентов в расчетной области

Команда *Run* из программного меню *FlexPDE* начинает расчеты, автоматически создавая сетку конечных элементов, заполняющую описанную пользователем область решений. В этой сетке размер ячеек определяется расстоянием между отдельными заданными точками на границе области или кривизной дуг. Однако в случае необходимости пользователь может изменять построение сетки при помощи нескольких средств контроля (табл. 8).

8 Команды управления сеткой

Команда управления сеткой	Синтаксис	Назначение
MESH_SPACING	*MESH_SPACING=X*	Устанавливает расстояние между узлами сетки равным *X*
MESH_DENSITY	*MESH_DENSITY=X*	Устанавливает число узлов сетки для рассматриваемой области равным *X*

Возможные виды сетки при изменении параметров *MESH_SPACING* и *MESH_DENSITY* представлены на рис. 13 и 14.

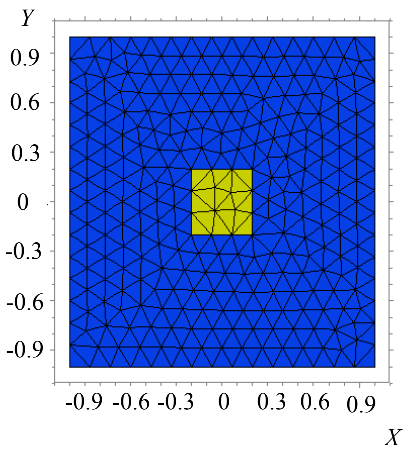


Рис. 13 Сетка конечных элементов

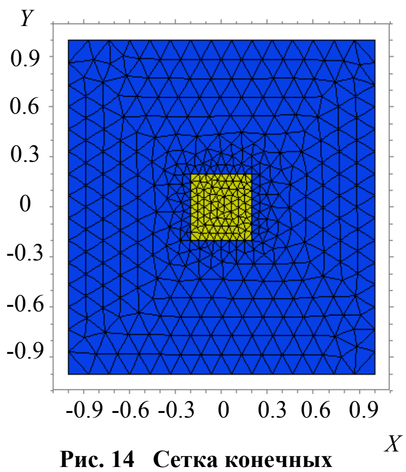


Рис. 14 Сетка конечных элементов

5.2 *Краевые дифференциальные задачи с тремя переменными*

Зачастую при решении дифференциальных уравнений в качестве областей решения используются не плоские, а объемные 3*D*-объекты. При решении таких задач с использованием *FlexPDE* каких-либо существенных трудностей не возникает. Общая постановка задачи – задание переменных и констант, решаемых уравнений, граничных и начальных условий, осуществляется как и в случае с 2*D*-объектом. Различия наблюдаются при задании области решения. В качестве первого отличия необходимо указать необходимость записи *cartesian3* в разделе
COORDINATES.

Второе отличие касается разности в способах задания расчетных областей. Во *FlexPDE* нет графических команд, позволяющих непосредственно создавать трехмерные объекты. Поэтому создание любого 3*D*-объекта осуществляется в два этапа:

- задаются расположения верха и низа объекта с использованием команды *SURFACE* в разделе сценария *EXTRUSION;*
- создаются поверхности в разделе *BOUNDARIES* с использованием стандартных графических примитивов.

В случае если основание объекта не может быть создано посредством простейших примитивов, например объект в виде сферы, прибегают к заданию формы объекта в аналитическом виде. В качестве примера задания такого рода расчетных областей и постановки нестационарной задачи распространения температурного фронта рассмотрим сферу, верхняя полусфера которой охлаждается до 0, а нижняя нагревается до температуры T_0. Решение подобной задачи реализуется в виде следующего сценария:

```
TITLE '3D Sphere'

COORDINATES
    cartesian3 {Указываем, что используем трехмерное пространство}

VARIABLES
    u(threshold=0.1)
DEFINITIONS
    K = 1e-7*(u^2){Коэффициент теплопроводности}
    R0 = 1 {Радиус сферы}
    T0=100

INITIAL VALUES
    u=0

EQUATIONS
    u: div(K*grad(u)) = dt(u)

EXTRUSION
    surface z = -sqrt(R0^2 – (x^2+y^2)) {Задаем нижнюю полусферу}
    surface z = sqrt(R0^2  -(x^2+y^2))  {Задаем верхнюю  полусферу}

BOUNDARIES
    surface 1 value(u) = T0 {Задаем граничное условие для нижней полусферы}
    surface 2 value(u) = 0  {Задаем граничное условие для верхней полусферы}
REGION 1
    start  (R0,0)
    arc(center=0,0) angle=360 to finish
TIME  0 TO 300

PLOTS
    For cycle=10
    contour(u) on x=0 {Выводим распределение температурного фронта в плоскости ZY}

HISTORIES
    history(vol_Integral(u/((4/3)*pi*(R0^3)))) {Выводим кинетику нагрева}

END
```

Результаты расчета по данному сценарию иллюстрирует рис. 15.

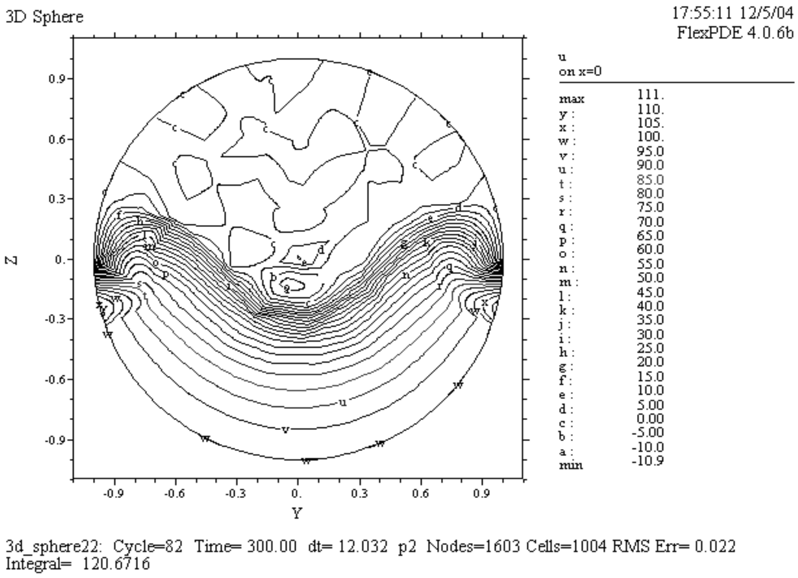


Рис. 15 Конечное распределение температурного поля в плоскости *ZY*

В качестве примера решения системы дифференциальных уравнений для 3*D*-объектов рассмотрим задачу определения деформаций и возникающих напряжений под воздействием внешней нагрузки на металлический стержень. Аналитически условия задачи формулируются следующим образом:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \dfrac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + \dfrac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} = 0; \\ \dfrac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \dfrac{\partial \sigma_y}{\partial y} + \dfrac{\partial \tau_{yz}}{\partial z} = 0; \\ \dfrac{\partial \tau_{zx}}{\partial x} + \dfrac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \dfrac{\partial \sigma_z}{\partial z} = 0, \end{cases} \tag{23}$$

где $\sigma_x = \dfrac{E}{(1-\mu^2)}\left(\dfrac{\partial V}{\partial x} + \mu \dfrac{\partial U}{\partial y}\right)$ – тензор нормального напряжения по *x*; $\sigma_y = \dfrac{E}{(1-\mu^2)}\left(\mu \dfrac{\partial V}{\partial x} + \dfrac{\partial U}{\partial y}\right)$ – тензор нормального напряжения по *y*; $\tau_{xy} = \dfrac{E(1-\mu)}{2(1-\mu^2)}\left(\dfrac{\partial V}{\partial y} + \dfrac{\partial U}{\partial x}\right)$ – тензор касательных напряжений; E – модуль Юнга; μ – коэффициент Пуассона; V – деформация по *x*; U – деформация по *y*.

Решение может быть оформлено в виде следующего сценария:

TITLE 'Bimetal Part'

COORDINATES
cartesian3 {Используем трехмерную систему координат}

VARIABLES
U {Деформация по *X*}
V {Деформация по *Y*}
W {Деформация по *Z*}

DEFINITIONS
R0=1 {Радиус стержня}
force = 2500 {Общая прилагаемая нагрузка в Ньютонах}
*dist = 0.5*force*z^2* {Распределенная нагрузка}
E = 20e11 {Модуль Юнга}
nu =0.28 {Коэффициент Пуассона}
G = E/((1+nu)(1-2*nu))*
C11 = G(1-nu)*
*C12 = G*nu*   *C13 = G*nu*   *C22 = G*(1-nu)*
*C23 = G*nu*   *C33 = G*(1-nu)*   *C44 = G*(1-2*nu)/2*
{Деформации}
ex = dx(U)
ey = dy(V)
ez = dz(W)
gxy = dy(U) + dx(V)

```
	gyz = dz(V) + dy(W)
	gzx = dx(W) + dz(U)
	{Напряжения}
	Sx  =  C11*ex + C12*ey + C13*ez
	Sy  =  C12*ex + C22*ey + C23*ez
	Sz  =  C13*ex + C23*ey + C33*ez
	Txy =  C44*gxy   Tyz =  C44*gyz   Tzx =  C44*gzx
	{Подсчитываем среднее значение сдвига и поворота}
	Vol = Integral(1)
	Tx = integral(U)/Vol {Сдвиг по X}
	Ty = integral(V)/Vol {Сдвиг по Y}
	Tz = integral(W)/Vol {Сдвиг по Z}
	Rz = 0.5*integral(dx(V) – dy(U))/Vol {Поворот по Z}
	Rx = 0.5*integral(dy(W) – dz(V))/Vol {Поворот по X}
	Ry = 0.5*integral(dz(U) – dx(W))/Vol {Поворот по Y}
	Up = U – Tx + Rz*y – Ry*z
	Vp = V – Ty + Rx*z – Rz*x
	Wp = W – Tz + Ry*x – Rx*y
	Mx = 0.2*globalmax(magnitude(y,z))/globalmax(magnitude(Vp,Wp))
	My = 0.2*globalmax(magnitude(x,z))/globalmax(magnitude(Up,Wp))
	Mz = 0.2*globalmax(magnitude(x,y))/globalmax(magnitude(Up,Vp))
Mt=0.4*globalmax(magnitude(x,y,z))/globalmax(magnitude(Up,Vp,Wp))
INITIAL VALUES
	U = 1.e-5   V = 1.e-5    W = 1.e-5
EQUATIONS
	U:   dx(Sx) + dy(Txy) + dz(Tzx) = 0
	V:   dx(Txy) + dy(Sy) + dz(Tyz) = 0
	W:   dx(Tzx) + dy(Tyz) + dz(Sz) = 0
EXTRUSION
	surface z = 0    surface z = 10
BOUNDARIES
	surface 1 value(W)=dist         {Зафиксированное основание}
	surface 2 load(W)=0
	Region 1    {Сталь}
	K = 0.11
	E = 20e11
	nu  =0.28
	start  (R0,0)   value(V)=0
	arc(center=0,0) angle=360 to finish
MONITORS
	contour(Up) on y=high/2 as "X-displacement"
	contour(Vp) on x=4*wide/5 as "Y-displacement"
	contour(Wp) on y=high/2 as "Z-displacement"
	grid(x+Mt*Up,y+Mt*Vp,z+Mt*Wp)  as "Shape"
PLOTS
	contour(Up) on y=high/2 as "X-displacement"
	contour(Vp) on x=4*wide/5 as "Y-displacement"
	contour(Wp) on y=high/2 as "Z-displacement"
	grid(x+Mt*Up,y+Mt*Vp,z+Mt*Wp)  as "Shape"
END
```

Результаты решения иллюстрирует рис. 16.

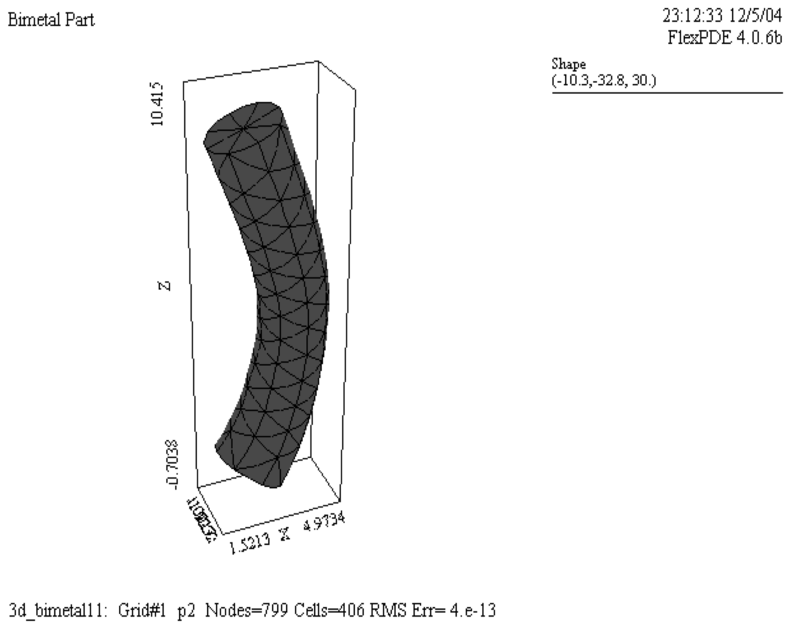


Рис. 16 Деформация стержня под воздействием нагрузки

5.3 Решение краевых дифференциальных задач в среде FlexPDE *с использованием* AutoCAD *для импорта данных и создания сценария*

Одним из достоинств программного продукта *FlexPDE* является возможность использования *AutoCAD* для создания и экспорта сценария решения краевых задач. При этом *AutoCAD* используется не только для задания расчетной области, но и для создания самого сценария. Таким образом, в случае использования системы *AutoCAD*, функция *FlexPDE* сводится собственно к генерации разностной сетки и получению численных значений.

Экспорт данных из *AutoCAD* осуществляется в формате *.DXF* посредством команды главного меню *File→Import..→DXF*. При импорте данных необходимо учитывать, что импортироваться могут только области расчета в виде 2*D*-объектов. В случае, если задача решается для 3*D*-объекта, создание его осуществляется в три этапа:

1. Создается сценарий и область расчета в системе *AutoCAD* в виде 2*D*-объекта.
2. Производится импорт данных из *AutoCAD* во *FlexPDE*.
3. Используются операторы *FlexPDE* для преобразования 2*D*-объектов в 3*D*.

При создании сценария в среде *AutoCAD*, необходимо выполнять следующие правила по созданию сценария:

1 Текст сценария должен создаваться с использованием *Single Line Text* в отдельном слое.

2 Расчетная область создается с использованием графических примитивов *AutoCAD*. При этом каждая подобласть общей расчетной области создается в отдельном слое.

3 Граничные условия записываются на границах расчетной области в явном виде в отдельном слое.

Результаты выполнения данных правил на примере решения задачи об остывании детали средствами *AutoCAD* представлены на рис. 17.

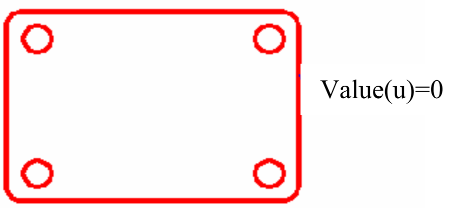


Рис. 17 Пример создания сценария решения краевых задач с использованием системы *AutoCAD*

Полученный *DXF* файл экспортировался в систему *FlexPDE*. Окончательный вид решаемой задачи иллюстрирует листинг сценария. Результаты решения поставленной задачи представлены на рис. 18.

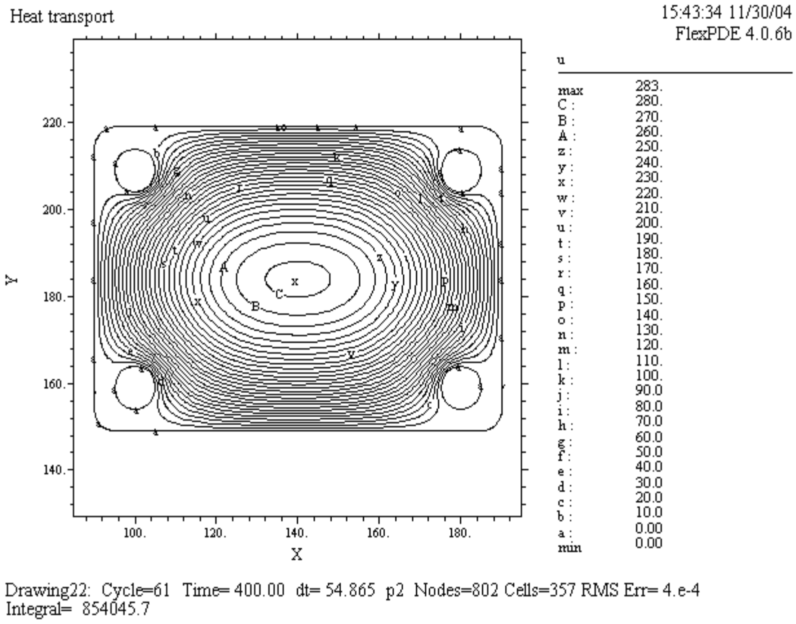


Рис. 18 Конечное распределение температурного поля

```
TITLE ' Heat transport'
VARIABLES
    u(threshold=0.1)
DEFINITIONS
    k=0.3
INITIAL VALUES
    u=300
EQUATIONS
    u: div(k*grad(u)) = dt(u)
BOUNDARIES
    REGION 1 'REGION1'
    start( 95., 149.)
    value(u)=0 line to ( 185., 149.)
    value(u)=0 arc(center= 185., 154.) angle= 90.
    line to ( 190., 214.)
    arc(center= 185., 214.) angle= 90.
    line to ( 95., 219.)
    arc(center= 95., 214.) angle= 90.
    line to ( 90., 154.)
    arc(center= 95., 154.) angle= 90.
    start( 190., 149.)
    line to ( 190., 149.)
    start( 105., 209.)
    value(u)=0 arc(center= 100., 209.) angle= 360.
    start( 105., 159.)
    value(u)=0 arc(center= 100., 159.) angle= 360.
    start( 185., 209.)
    value(u)=0 arc(center= 180., 209.) angle= 360.
    start( 185., 159.)
    value(u)=0
    arc(center= 180., 159.) angle= 360.
TIME  0 TO 400
PLOTS
    For cycle=10
    contour(u)
    surface(u)
```

END

Применение *AutoCAD* или других программных продуктов для обработки векторной графики в качестве инструмента создания сценариев *FlexPDE* облегчает и существенно упрощает решение задач.

ЛАБОРАТОРНЫЙ ПРАКТИКУМ ПО КОМПЬЮТЕРНОМУ МОДЕЛИРОВАНИЮ ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ ПИЩЕВОЙ, БИО- И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ В СРЕДЕ FlexPDE

С целью закрепления изложенного материала ниже представлены задания для выполнения лабораторных работ в пакете *FlexPDE*.

Лабораторная работа 1

ОСНОВЫ ПРОГРАММИРОВАНИЯ В СРЕДЕ FlexPDE

Цель работы: приобретение и закрепление навыков в разработке сценарных моделей решения дифференциальных уравнений в частных производных 2*D*-объектов методом конечных элементов.

Задачи работы:

1 В соответствии с индивидуальным заданием, выданным преподавателем, сформулировать в математическом виде поставленную задачу.

2 Разработать сценарий решения задачи, в котором указать наименование и величины констант и переменных (в том числе и вспомогательных), параметры граничных и начальных условий, решаемые дифференциальные уравнения и искомые зависимости.

3 Реализовать поставленную задачу в виде программного кода в среде *FlexPDE*.

4 Привести результаты выполненных расчетов и произвести их анализ.

5 Оформить отчет о выполнении работы.

Варианты задания

Вариант задания состоит из трех цифр: первая означает тип исследуемого процесса (распространение температурного фронта, химическая кинетика, распространение концентрационного фронта), вторая – вид граничных (в форме 1-го, 2-го и 3-го рода) и начальных условий (табл. 9); третья – область решения (табл. 10). Дополнительные значения констант и переменных выдаются персонально преподавателем.

1 Тип исследуемого процесса:

1) нестационарная задача распространения температурного фронта, описываемая уравнением вида

$$c(T)\rho\frac{\partial T}{\partial \tau} = \nabla\big(\lambda(T)\operatorname{grad}(T)\big),$$

где $c(T)$ – теплоемкость материала; ρ – плотность материала; $\lambda(T)$ – коэффициент теплопроводности;

2) нестационарная задача химической кинетики (диффузионная область) для реакции вида $A \xrightarrow{k_1} nC$, описываемая уравнением вида

$$\frac{\partial C_A}{\partial \tau} = \nabla\big(D(T, C_A)\operatorname{grad}(C_A)\big) - k_1 C_A\,,$$

где $D(T, C_A)$ – коэффициент диффузии; $k_1 = k_0 \exp\left(\frac{-E}{RT}\right)$ – константа скорости химической реакции; E – энергия активации химического процесса;

3) нестационарная задача распространения концентрационного фронта (диффузионная задача), описываемая уравнением вида

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = \nabla\big(D(T, C)\operatorname{grad}(C)\big),$$

где $D(T, C)$ – коэффициент диффузии.

2 Граничные и начальные условия указаны в табл. 9.

9 Граничные и начальные условия

у е м о	Решаемая задача

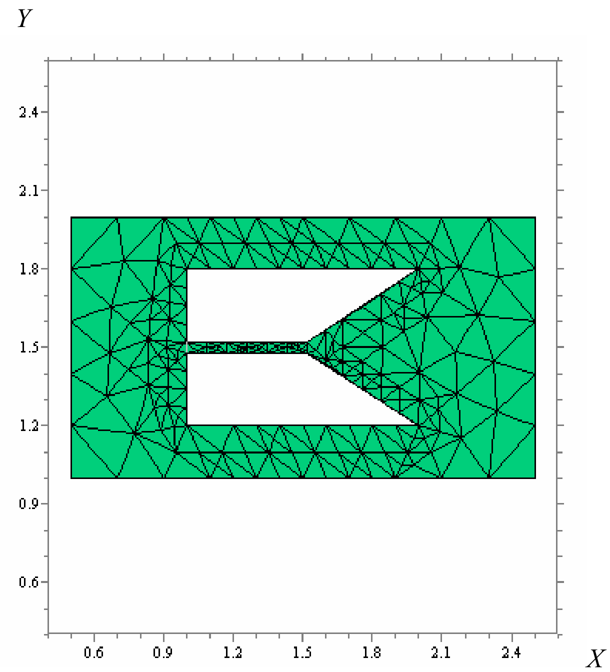
	Распространение температурного фронта	Задача химической кинетики	Распространение концентрационного фронта
1	$\partial T_н / \partial \tau = 0$ и $T_в = T_0$ при $\tau > 0$, $T = T_0$ при $\tau = 0$	$\partial C_н / \partial \tau = 0$ и $C_в = C_0$ при $\tau > 0$, $C = C_0$ при $\tau = 0$	$\partial C_н / \partial \tau = 0$ и $C_в = C_0$ при $\tau > 0$, $C = C_0$ при $\tau = 0$
2	$\partial T_н / \partial \tau = \alpha(T_p - T)$ и $T_в = T_0$ при $\tau > 0$, $T = T_0$ при $\tau = 0$	$\partial T_н / \partial \tau = 0$ и $T_в = T_0$ при $\tau > 0$, $T = T_0$ при $\tau = 0$	$\partial T_н / \partial \tau = 0$ и $T_в = T_0$ при $\tau > 0$, $T = T_0$ при $\tau = 0$

Продолжение табл. 9

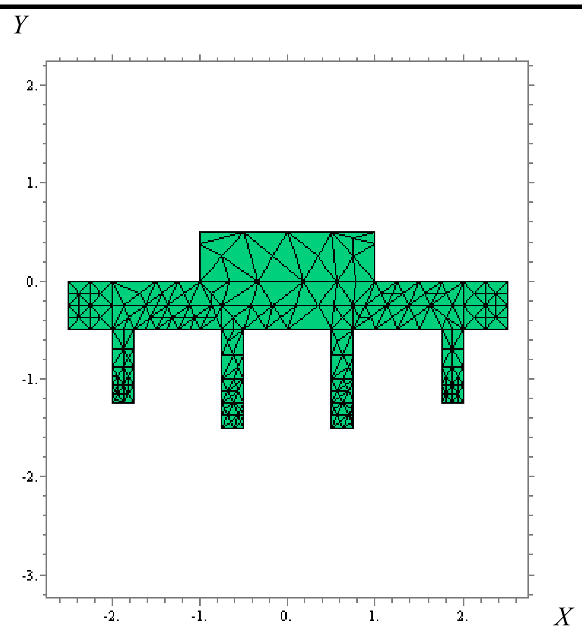
Тип исследуемого процесса	Решаемая задача		
	Распространение температурного фронта	Задача химической кинетики	Распространение концентрационного фронта
3	$T_н = T_0$ и $T_в = T_0$ при $\tau > 0$, $T = T_0$ при $\tau = 0$	$\partial T_н / \partial \tau = 0$ и $T_в = T_0$ при $\tau > 0$, $T = T_0$ при $\tau = 0$	$\partial T_н / \partial \tau = 0$ и $T_в = T_0$ при $\tau > 0$, $T = T_0$ при $\tau = 0$

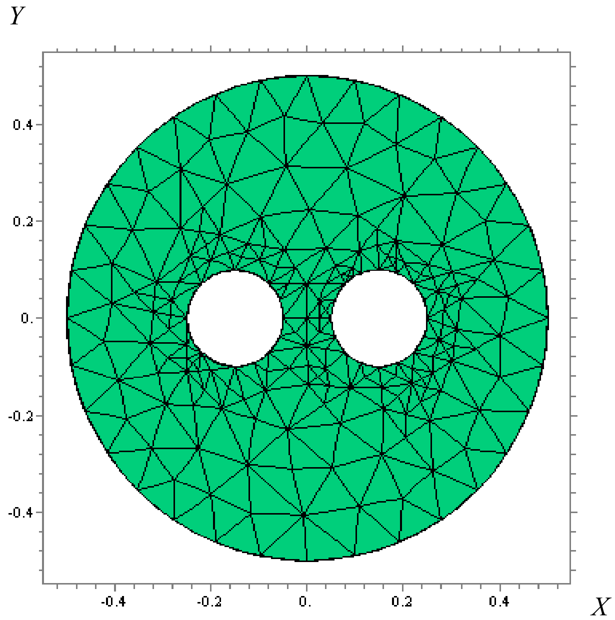
Примечание. В приведенных уравнениях индекс «в» означает внутренние границы, а индекс «н» – внешние границы расчетной области.

10 Область решения

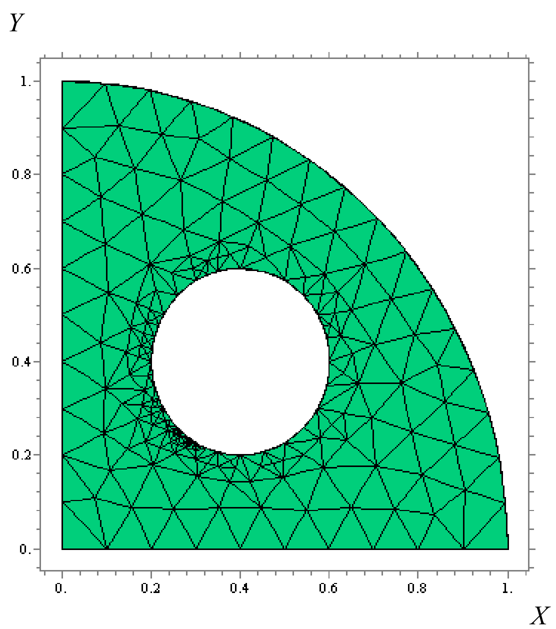


Продолжение табл. 10





Продолжение табл. 10



Контрольные вопросы

1 Какие основные разделы имеет сценарий *FlexPDE*?
2 Как задается производная во *FlexPDE*?
3 Как и в каком разделе задается область решения уравнения во *FlexPDE*?
4 В каком виде и разделе задаются граничные условия во *FlexPDE*?
5 В каком разделе задаются начальные условия во *FlexPDE.*

Лабораторная работа 2

РЕШЕНИЕ СИСТЕМЫ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ В СРЕДЕ FlexPDE

Цель работы: приобретение и закрепление навыков в разработке сценарных моделей решения систем дифференциальных уравнений в частных производных 2*D*-объектов методом конечных элементов.

Задачи работы:

1 В соответствии с индивидуальным заданием, выданным преподавателем, сформулировать в математическом виде поставленную задачу.

2 Разработать сценарий решения задачи, в котором указать наименование и величины констант и переменных (в том числе и вспомогательных), параметры граничных и начальных условий, решаемые дифференциальные уравнения и искомые зависимости.

3 Реализовать поставленную задачу в виде программного кода в среде *FlexPDE*.

4 Привести результаты выполненных расчетов и произвести их анализ.

5 Оформить отчет о выполнении работы.

Варианты задания

Вариант задания состоит из двух цифр: первая означает тип исследуемого процесса (химическая кинетика, распространение концентрационного фронта, деформация твердых тел), вторая – область решения (табл. 10). Дополнительные значения констант и переменных выдаются персонально преподавателем.

Тип исследуемого процесса:

1) нестационарная задача химической кинетики для реакции вида $A + nB \xrightarrow{k_1} n_1 C$, описываемая системой уравнений

$$\begin{cases} \dfrac{\partial C_A}{\partial \tau} = \nabla\left(D_A\left(C_A, T\right)\operatorname{grad}(C_A)\right) - k_1 C_A; \\ \dfrac{\partial C_B}{\partial \tau} = -k_1 C_B^n; \\ \dfrac{\partial C_C}{\partial \tau} = \nabla\left(D_C\left(C_C, T\right) grad(C_C)\right) - n_1 k_1 C_A C_B^n \end{cases}$$

с начальными условиями

$$C_A(0,r) = 0\,;\; C_B(0,r) = C_0\,;\; C_C(0,r) = 0$$

и граничными условиями при $\tau > 0$, для внешних границ

$$\frac{\partial C_A}{\partial l} = \beta_A\left(C_{Ar} - C_A\left(\tau, L_{\text{н}}\right)\right);$$

$$\frac{\partial C_C}{\partial l} = 0$$

для внутренних границ

$$\frac{\partial C_C}{\partial l} = \beta_C\left(C_{Cr} - C_C\left(\tau, L_{\text{в}}\right)\right);$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial l} = 0\,,$$

где $D_i(C_i, T)$ – коэффициент диффузии *i*-го компонента; k_0 – константа скорости химической реакции; $k_1 = k_0 \exp\left(\dfrac{-E}{RT}\right)$ – скорость химической реакции; E – энергия активации химического процесса;

2) нестационарная задача сорбции-десорбции веществ (диффузионная задача), описываемая системой уравнений вида

$$\begin{cases} \dfrac{\partial C_A}{\partial \tau} = \nabla(D_A(C_A, T)\mathrm{grad}(C_A)); \\ \dfrac{\partial C_B}{\partial \tau} = \nabla(D_B(C_B, T)\mathrm{grad}(C_B)); \\ \dfrac{\partial C_c}{\partial \tau} = \nabla(D_C(C_C, T)\mathrm{grad}(C_C)) \end{cases}$$

с начальными условиями

$$C_A(0,r) = 0\,;\ C_B(0,r) = C_0\,;\ C_C(0,r) = 0$$

и граничными условиями при $\tau > 0$:

$$\frac{\partial C_A}{\partial l} = \beta_A\left(C_{Ar} - C_A(\tau, L_\text{н})\right);$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial l} = \beta_B\left(C_{Br} - C_B(\tau, L_\text{н})\right);$$

$$\frac{\partial C_C}{\partial l} = 0$$

для внутренних границ

$$\frac{\partial C_C}{\partial l} = \beta_C\left(C_{Cr} - C_C(\tau, L_\text{в})\right);$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial l} = \beta_B\left(C_{Br} - C_B(\tau, L_\text{в})\right);$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial l} = 0,$$

где $D_i(C_i, T)$ – коэффициент диффузии; *i*-го компонента;

3) задача определения деформации и возникающих напряжений под воздействием внешней нагрузки, описываемая системой уравнений

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \dfrac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} = 0; \\ \dfrac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \dfrac{\partial \sigma_y}{\partial y} = 0, \end{cases}$$

где $\sigma_x = \dfrac{E}{(1-\mu^2)}\left(\dfrac{\partial V}{\partial x} + \mu\dfrac{\partial U}{\partial y}\right)$ – тензор нормального напряжения по *x*; $\sigma_y = \dfrac{E}{(1-\mu^2)}\left(\mu\dfrac{\partial V}{\partial x} + \dfrac{\partial U}{\partial y}\right)$ – тензор нормального напряжения по *y*; $\tau_{xy} = \dfrac{E(1-\mu)}{2(1-\mu^2)}\left(\dfrac{\partial V}{\partial y} + \dfrac{\partial U}{\partial x}\right)$ – тензор касательных напряжений; E – модуль Юнга; μ – коэффициент Пуассона; V – деформация по *x*; U – деформация по *y*.

В рассматриваемой задаче объекты фиксируются с правой стороны, т.е. для границы справа верно равенство

$$V = F(L^2 - X^2);$$

$$U = 0{,}5FY^2,$$

где F – прилагаемая нагрузка; L – линейный размер объекта по X.

Контрольные вопросы

1 Перечислите основные этапы разработки сценария решения дифференциальных уравнений во *FlexPDE*.

2 Какие операторы интегрирования используются во *FlexPDE*?

3 Запишите нестационарную задачу распространения тепла в операторах *FlexPDE*.

4 Перечислите основные программные модули, существующие во *FlexPDE* для обеспечения решения задачи.

5 Какие средства контроля и создания сеток используются во *FlexPDE*?

Лабораторная работа 3

РЕШЕНИЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ 3D-ОБЪЕКТОВ В СРЕДЕ FlexPDE

Цель работы: приобретение и закрепление навыков в разработке сценарных моделей решения дифференциальных уравнений в частных производных 3*D*-объектов методом конечных элементов.

Задачи работы:

1 В соответствии с индивидуальным заданием, выданным преподавателем, сформулировать в математическом виде поставленную задачу.

2 Разработать сценарий решения задачи, в котором указать наименование и величины констант и переменных (в том числе и вспомогательных), параметры граничных и начальных условий, решаемые дифференциальные уравнения и искомые зависимости.

3 Реализовать поставленную задачу в виде программного кода в среде *FlexPDE*.

4 Привести результаты выполненных расчетов и произвести их анализ.

5 Оформить отчет о выполнении работы.

Варианты задания

Вариант задания состоит из четырех цифр: первая означает тип исследуемого процесса (распространение температурного фронта, химическая кинетика, распространение концентрационного фронта); вторая – вид граничных (в форме 1-го, 2-го и 3-го рода) и начальных условий (см. табл. 9); третья – область решения (см. табл. 10); четвертая – высота расчетной области (длина по оси *Z*), табл. 11.

Тип исследуемого процесса:

1) нестационарная задача распространения температурного фронта.

2) нестационарная задача химической кинетики (диффузионная область) для реакции вида $A \xrightarrow{k_1} nC$.

3) нестационарная задача распространения концентрационного фронта (диффузионная задача).

11 Высота расчетной области

Высота расчетной области	№ варианта				
	1	2	3	4	5
Z	0,5	0,3	0,4	0,7	1,0

Контрольные вопросы

1 Какие системы координат могут использоваться во *FlexPDE*?
2 Каким образом можно задать расчетную область в виде пирамиды?
3 Как вывести распределение температурного фронта по плоскостям *XY* и *XZ*?
4 Чему по умолчанию равна относительная погрешность во *FlexPDE*?
5 В каком виде получаем результат численного моделирования во *FlexPDE*?

Лабораторная работа 4

РЕШЕНИЕ СИСТЕМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ 3D-ОБЪЕКТОВ В СРЕДЕ FlexPDE

Цель работы: приобретение и закрепление навыков в разработке сценарных моделей решения систем дифференциальных уравнений в частных производных 3*D*-объектов методом конечных элементов.

Задачи работы:

1 В соответствии с индивидуальным заданием, выданным преподавателем, сформулировать в математическом виде поставленную задачу.

2 Разработать сценарий решения задачи, в котором указать наименование и величины констант и переменных (в том числе и вспомогательных), параметры граничных и начальных условий, решаемые дифференциальные уравнения и искомые зависимости.

3 Реализовать поставленную задачу в виде программного кода в среде *FlexPDE*.

4 Привести результаты выполненных расчетов и произвести их анализ.

5 Оформить отчет о выполнении работы.

Варианты задания

Вариант задания состоит из трех цифр: первая означает тип исследуемого процесса (химическая кинетика, распространение концентрационного фронта, деформация твердых тел), вторая – область решения (табл. 10), третья – высота расчетной области (длина по оси *Z*), табл. 11. Дополнительные значения констант и переменных выдаются персонально преподавателем.

Тип исследуемого процесса:

1) нестационарная задача химической кинетики для реакции вида $A + nB \xrightarrow{k_1} n_1 C$;

2) нестационарная задача сорбции-десорбции веществ (диффузионная задача), описываемая системой уравнений вида;

3) задача определения деформации и возникающих напряжений под воздействием внешней нагрузки, описываемая системой уравнений

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \dfrac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + \dfrac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} = 0; \\ \dfrac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \dfrac{\partial \sigma_y}{\partial y} + \dfrac{\partial \tau_{yz}}{\partial z} = 0; \\ \dfrac{\partial \tau_{zx}}{\partial x} + \dfrac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \dfrac{\partial \sigma_z}{\partial z} = 0, \end{cases}$$

где $\sigma_x = \dfrac{E}{(1-\mu^2)}\left(\dfrac{\partial V}{\partial x} + \mu \dfrac{\partial U}{\partial y}\right)$ – тензор нормального напряжения по *x*; $\sigma_y = \dfrac{E}{(1-\mu^2)}\left(\mu \dfrac{\partial V}{\partial x} + \dfrac{\partial U}{\partial y}\right)$ – тензор нормального напряжения по *y*; $\tau_{xy} = \dfrac{E(1-\mu)}{2(1-\mu^2)}\left(\dfrac{\partial V}{\partial y} + \dfrac{\partial U}{\partial x}\right)$ – тензор касательных напряжений; E – модуль Юнга; μ – коэффициент Пуассона; V – деформация по *x*; U – деформация по *y*.

В рассматриваемой задаче объекты фиксируются с правой стороны, т.е. для границы справа верно равенство

$$V = F(L^2 - X^2),$$

а для границы слева

$$U = 0{,}5FY^2,$$

где *F* – прилагаемая нагрузка; *L* – линейный размер объекта по *X*.

Контрольные вопросы

1 Сформулируйте уравнение Навье-Стокса для трехмерного пространства.

2 Запишите уравнение нестационарного распространения температурного фронта в 3*D*-объекте с помощью операторов *FlexPDE*.

3 Какой командой осуществляется чтение данных из файла?

4 Какими параметрами задачи можно варьировать в ходе решения?

5 Какой командой осуществляется запись результирующего значения в файл?

Лабораторная работа 5

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ AutoCAD *ДЛЯ ЭКСПОРТА ДАННЫХ И СОЗДАНИЯ СЦЕНАРИЯ* FlexPDE

Цель работы: приобретение и закрепление навыков в разработке сценарных моделей решения систем дифференциальных уравнений в частных производных методом конечных элементов с использованием *AutoCad* для экспорта данных и создания сценария *FlexPDE*.

__Задачи работы__:

1 В соответствии с индивидуальным заданием, выданным преподавателем, сформулировать в математическом виде поставленную задачу.

2 Разработать сценарий решения задачи, в котором указать наименование и величины констант и переменных (в том числе и вспомогательных), параметры граничных и начальных условий, решаемые дифференциальные уравнения и искомые зависимости.

3 Реализовать поставленную задачу в виде файла формата *DXF* в среде *AutoCad*.

4 Произвести экспорт данных из *AutoCad* в среду разработки сценариев решения дифференциальных уравнений *FlexPDE*.

5 Привести результаты выполненных расчетов и произвести их анализ.

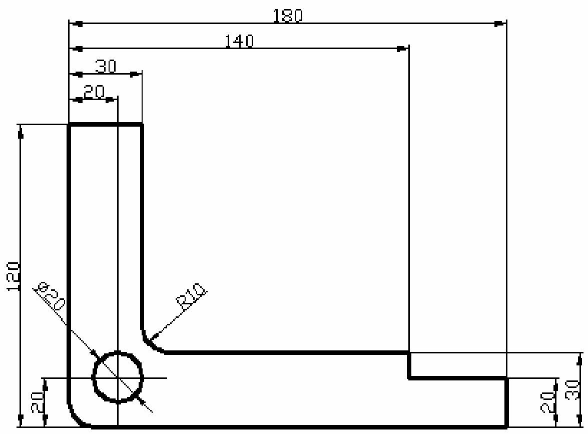
6 Оформить отчет о выполнении работы.

Варианты задания

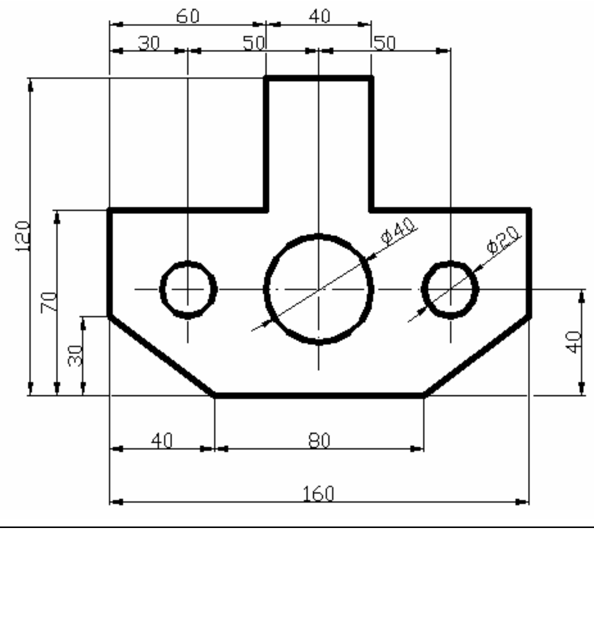
Вариант задания состоит из трех цифр: первая означает тип исследуемого процесса (распространение температурного фронта, химическая кинетика, распространение концентрационного фронта), вторая – вид граничных (в форме 1-го, 2-го и 3-го рода) и начальных условий (см. табл. 9); третья – область решения (см. табл. 12).

12 Область решения

1)

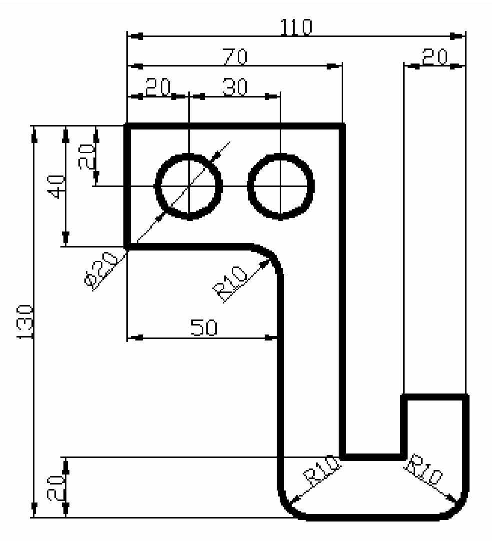


2)

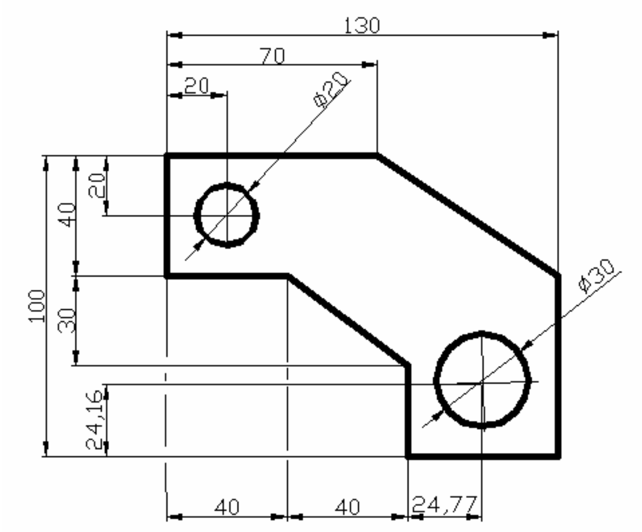


Продолжение табл. 12

3)



4)



Контрольные вопросы

1 Возможно ли создание и экспорт 3*D*-объектов из *AutoCAD* во *FlexPDE*?
2 С помощью, какой команды осуществляется импорт данных из *AutoCAD*?
3 Перечислите основные правила создания сценария с использованием средств *AutoCAD*.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данном пособии рассмотрены основные краевые задачи, возникающие при синтезе и анализе нелинейных процессов и систем пищевой, био- и химической технологии. Оценены методические, математические и информационные аспекты, связанные с применением метода конечных элементов и пакета прикладных программ *FlexPDE* для решения практического круга задач, связанных с решением дифференциальных уравнений в частных производных.

СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Математическое моделирование и оптимизация ХТП / В.А. Холоднов, В.П. Дьяконов, Е.Н. Иванова, Л.С. Киреянова. СПб., 2003. 480 с.
2. Дворецкий Д.С., Ермаков А.А., Пешкова Е.В. Расчет и оптимизация процессов и аппаратов химических и пищевых производств в среде *Matlab*: Учеб. пособие / Под ред. С.И. Дворецкого. Тамбов: Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та, 2005. 80 с.
3. Прохоров Г.В., Леденев М.А., Колбеев В.В. Пакет символьных вычислений Maple V. М.: Петит, 1997. 200 с.
4. Исследование и проектирование химико-технологических процессов с применением моделирующей программы *ChemCAD*: Учеб. пособие / Н.Н. Зиятдинов, В.М. Емельянов, Л.А. Смирнова, Т.В. Лаптева. Казань: Изд-во Казан. техн. ун-та, 2001. 84 с.
5. Сабоннадьер Ж.К., Кулон Ж.Л. Метод конечных элементов и САПР. М.: Мир, 1989. 190 с.
6. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. 6-е изд. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1999.

7 Дворецкий С.И., Егоров А.Ф., Дворецкий Д.С. Компьютерное моделирование и оптимизация технологических процессов и оборудования: Учеб. пособие. Тамбов: Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та, 2003. 224 с.

ДЛЯ ЗАМЕТОК