VĚDECKÉ SPISY VYSOKÉHO UČENÍ TECHNICKÉHO V BRNĚ Edice Habilitační a inaugurační spisy, sv. 424 ISSN 1213-418X

Eva Kroutilová

HYBRIDNÍ NUMERICKÉ METODY

VYSOKÉ TECHNICKÉ V BRNĚ Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií Ústav teoretické a experimentální elektrotechniky

Ing. Eva Kroutilová, Ph.D.

HYBRIDNÍ NUMERICKÉ METODY

HYBRID NUMERICAL METHOD

zkrácená verze habilitační práce



Klíčová slova

Hybridní numerické metody, nukleární magnetická rezonance, numerické modelování vlivu magnetické susceptibility na MR obraz, metoda konečných prvků, numerická metoda teplotně radiační, přechodová analýza stacionárního magnetického pole, metoda uzlových oteplení

Keywords

Hybrid numerical methods, nuclear magnetic resonance, Numerical models of the magnetic susceptibility influence to MR image, finite element method, numerical method of thermal radiation, transient analysis of stationary magnetic field, nodal warming method

Místo uložení

Práce je k dispozici na Vědeckém oddělení děkanátu Fakulty elektrotechniky a komunikačních technologií VUT v Brně, Technická 3058/10, 616 00 Brno.

© Eva Kroutilová, 2012 ISBN 978-80-214-4525-3 ISSN 1213-418X

Obsah

1	SEZNAM POUŽITÝCH ZKRATEK A SYMBOLŮ	4
2	ÚVOD	7
3	ZÁKLADNÍ ROVNICE MATEMATICKÉ FYZIKY	7
3.1	Modelování a simulace technických systémů v současné době	11
4	HYBRIDNÍ MODELY	12
4.1	Hybridní simulační modely a systémy	13
5 RAI	HYBRIDNÍ NUMERICKO - NUMERICKÁ METODA TEPLOTNĚ DIAČNÍ	15
6	METODY ŘEŠENÍ TEPELNÉHO HYBRIDNÍHO MODELU	15
6.1	Metoda uzlových oteplení	15
6.2	Modifikovaná metoda uzlových oteplení	16
7 AN 7. 7.	HYBRIDNÍ NUMERICKO – ANALYTICKÁ METODA, PŘECHODO ALÝZA STACIONÁRNÍHO ELMG. POLE 1.1 Algoritmus odrazu a lomu elektromagnetické vlny 1.2 Numerické metody pro automatizovaný výpočet	VÁ 18 18 20
8 VLI	HYBRIDNÍ NUMERICKO-EXPERIMENTÁLNÍ METODA, MODELO VU MAGNETICKÉ SUSCEPTIBILITY NA MR OBRAZ MKP	VÁNÍ 20
8.1	Úvod do numerického modelování vlivu magnetické susceptibility	20
8.2 8. 8. 8.	 Experimentální metoda měření vlivu magnetické susceptibility na MR obraz Experimentální měření Odvození numerického modelu Geometrický model 	22 22 24 26
9	ZÁVĚR	33
10	LITERATURA	34

1 SEZNAM POUŽITÝCH ZKRATEK A SYMBOLŮ

Fyzikální ve	ličiny měrná chladivost povrchu	$\frac{Jednotky}{Wm^{-2}V^{-1}}$
u a	měrná chladivost povrchu	$W m^{-2} K^{-1}$
u_o	náhradní velikostí měrné chladivosti, vztaženo na povrch vodiče	VV.111 .IX
α_{on}	P_v (zahrnuje v sobě i vliv tepelných odporů mezivrstev)	$W.m^{-2}.K^{-1}$
$lpha_{z}$	činitel chladivosti	$W.m^{-1}.K^{-1}$
β	pomocná proměnná	
β_o	Objemový součinitel teplotní roztažnosti tekutiny	K^{-1}
Δ	determinant matice	
δ	šířka, tloušťka	m
δ_{p}	pomocná proměnná pro substituci	
δ_{s}	střední vzdálenost	m
ε	úhel	0
η	dynamická viskozita	kg s ⁻¹ m ⁻¹
φ	úhel	0
Λ	tepelná vodivost	$W.K^{-1}$
λ	měrná tepelná vodivost	$W.m^{-1}.K^{-1}$
λ_{ef}	efektivní součinitel měrné tepelné vodivosti	$W.m^{-1}.K^{-1}$
λ_{ek}	ekvivalentní součinitel měrné tepelné vodivosti	$W.m^{-1}.K^{-1}$
ν	kinematická viskozita	$m^2 s^{-1}$
π	Ludolfovo číslo = 3,141593	
Θ	oteplení	Κ
Θ_{10}, Θ_{20}	uzlová oteplení $\Theta_{10}, \Theta_{20}, \dots, \Theta_{(n-1)0}$.	Κ
\varTheta_{∞}	oteplení okolí	K, °C
ρ	měrný elektrický odpor	$\Omega.m$
ρ_A	měrná hmotnost	kg.m ⁻³
σ	proudová hustota	$A.m^{-2}$
ξ, ξ1,ξ2	pomocné proměnné, odvozeno v textu	
A	pomocná proměnná	
а	rozměry prvků	m
A_p	poměrná tepelná pohltivost (absorpce)	
\dot{b}	rozměry prvků	m
В	pomocná proměnná	
С	rozměry prvků	m
\mathcal{C}_A	je měrné skupenské teplo	J.kg ⁻¹ .K ⁻¹
c_h	měrné teplo (hmotnostní)	$m^2 s^{-2} K^{-1}$
C_{ε}	tekutinová konstanta	
C_k	tekutinová konstanta	
$C_{k\varepsilon}$	tekutinová konstanta pro různé teploty	
C_{kk}	Opravný činitel, zachycuje vliv přestupu tepla	
<i>~кк</i>	mezerou v okolí kontaktních stykových plošek	
d	šířka, tloušťka, průměr	m

^z yzikální veličiny		Jednotky	
а	šířka vzorku měřeného materiálu	m	
b	výška vzorku měřeného materiálu	m	
с	rychlost světla $c = 299\ 792\ 458\ \mathrm{m}\cdot\mathrm{s}^{-1}$	m·s⁻¹	
\boldsymbol{B}_0	vektor indukce základního magnetického pole	Т	
\boldsymbol{B}_{l}	vektor indukce vysokofrekvenčního magnetického pole	Т	
B_S	vektor indukce statického magnetického pole ve vzorku	Т	
\boldsymbol{B}_{ef}	vektor efektivní indukce magnetického pole	Т	
$\Delta \boldsymbol{B}$	magnetická indukce reakčního pole	Т	
С	délka vzorku měřeného materiálu	m	
С	Curieova konstanta	Κ	
d	šířka vybuzené vrstvy	m	
е	elementární náboj $e = 1.602 \cdot 10^{-19}$	С	
f_0	rezonanční kmitočet jader v magnetickém poli B_0	Hz	
f_1	kmitočet vf budicího impulsu	Hz	
J1 £4		V	
JI	signal excitacino impulsu	V	
$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{\omega})$	spektrum signalu excitacniho impulsu	V	
g	Landeuv faktor, empiricka korekce kvantovani momentu atomu	- -	
G_r	gradient magnetického pole v obecném směru r	T·m ⁻¹	
$G_{x, v, z}$	gradient magnetického pole ve směru osy x resp. y a z	T·m ⁻¹	
G_P	kódovací fázovací gradient magnetického pole	$T \cdot m^{-1}$	
$G_{ m R}$	kódovací čtecí gradient magnetického pole	T·m ⁻¹	
$G_{\rm S}$	vymezovací gradient magnetického pole	T·m⁻¹	
h	Planckova konstanta	J∙s	
ħ	redukovaná Planckova konstanta	J·s	
$oldsymbol{H}_0$	vektor intenzity základního magnetického pole	$A \cdot m^{-1}$	
ΔH	intenzita reakčního pole	$A \cdot m^{-1}$	
J	moment hybnosti jádra	kg·m ² ·s	
$k_{\rm B}$	Boltzmannova konstanta	J·K-1	
т	magnetický moment atomu nebo molekuly	$A \cdot m^2$	
$\Delta m_{\rm i}$	indukovaný magnetický moment atomu	$A \cdot m^2$	
m _e	klidová hmotnost elektronu $m_e = 9,109 \cdot 10^{-31}$	kg	
m _p	klidová hmotnost protonu $m_{\rm p} = 1.673 \cdot 10^{-27}$	kg	
$m_{\rm s}$	jaderné spinové kvantové číslo	-	
Ň	obecný vektor magnetizace	$A \cdot m^{-1}$	
M_{θ}	rovnovážná hodnota vektoru magnetizace	$A \cdot m^{-1}$	
M_{z}	podélný vektor magnetizace ve směru osy z	$A \cdot m^{-1}$	
M.		A 1	
N	prichy vektor magnetizace	A·m	
IN	pocet atomu	-	
r	prostorova souradnice ve smeru jednom že smeru x, y, z	m	
r_0	polona stredu vybuzene vrstvy	m 2	
S	plocha	m ⁻	
S(t)	signal MR	V	
S (ω)	spektrum MR signalu	V	
t T	časová proměnná	S	
T_1	spin-mřížková relaxační doba	S	
T_2	spin-spinová relaxační doba	S	
T_2^*	efektivní spin-spinová relaxační doba	S	
$T_{ m E}$	echo čas	S	
$T_{\rm R}$	opakovací perioda excitačních impulsů	S	
u _r	jednotkový vektor v obecném směru r	-	
	ى ئ		

Fyzikální veličiny		Jednotky	
x', y', z'	prostorové souřadnice rotující soustavy	m	
Γ	hranice oblasti geometrického modelu		
ε	dosah reakčního pole	m	
Θ	absolutní teplota	K	
Θ_{c}	Curieova teplota	K	
Θ_{D}	Debyeova teplota	K	
$\Theta_{_{ m N}}$	Néelova teplota	K	
γ	gyromagnetický poměr jádra	rad·s ⁻¹ ·T	
<i>¥</i>	redukovaný gyromagnetický poměr jádra	$Hz \cdot T^{-1}$	
μ	permeabilita	H·m ⁻¹	
μ_0	magnetická konstanta,	$H \cdot m^{-1}$	
$\mu_{ m r}$	relativní permeabilita	SI	
$\mu_{ m B}$	Bohrův magneton	$A \cdot m^2$	
$\mu_{ m j}$	jaderný magneton	$A \cdot m^2$	
$\mu_{\scriptscriptstyle 1}$	orbitální magnetický moment elektronu	$A \cdot m^2$	
μ_{n}	spinový magnetický moment jádra	$A \cdot m^2$	
μ_{s}	spinový magnetický moment elektronu	$A \cdot m^2$	
ρ	měrná hmotnost	kg⋅m ⁻³	
$\sigma_{_{ m m}}$	plošná hustota magnetického náboje	$A \cdot m^{-1}$	
τ	doba trvání excitačního impulsu	S	
$\varphi_{\scriptscriptstyle m}$	skalární magnetický potenciál	А	
${\it \Phi}$	magnetický indukční tok	Wb	
$\chi_{ m m}$	magnetická susceptibilita	SI	
${\widetilde \chi}_{ m m}$	měrná magnetická susceptibilita	m ³ ·kg ⁻¹	
${\mathcal X}_{\Delta}$	diferenciální magnetická susceptibilita	SI	
ψ	fáze komplexního signálu MR	rad	
ω_{0}	úhlový kmitočet rezonance jader – Larmorův kmitočet	s^{-1}	
ω_1	úhlový kmitočet vysokofrekvenčního magnetického pole	s ⁻¹	
Ω	oblast v geometrickém modelu		

Zkratky

FT	Fourierova transformace (Fourier Transform)
FFT	rychlá Fourierova transformace (Fast Fourier Transform)
FID	signál volné precese (Free Induction Decay)
GE	technika MR zobrazování (Gradient Echo, někdy též FE – Field Echo)
MHP	metoda hraničních prvků
MKO	metoda konečných objemů
MKP	metoda konečných prvků
MR	magnetická rezonance (také NMR - nukleární magnetická rezonance)
MRI	zobrazovací technika využívající MR (Magnetic Resonance Imaging)
MRT	synonymum pro MRI (Magnetic Resonance Tomography)
SE	technika MR zobrazování (Spin Echo)
	kvantový detektor magnetického indukčního toku (Superconducting Quantum
SQUID	Interference Device)
vf	vysokofrekvenční

2 Úvod

Vznik počítačů, rozvoj kybernetiky a rostoucí matematizace oborů ovlivnily téměř všechny významné obory lidské činnosti. Počítače jsou nejčastěji využity jako prostředku hromadného zpracovaní dat a řízení a jsou i nástrojem pro modelovaní a simulace procesů a systémů. Vedle počítačových modelů (např. [1], [2], [3], [4], [5]) se vyskytují technicky se stále zdokonalující fyzikální modely a fyzikální analogie. V závislosti na stupni technického vývoje má model své stalé místo v systému zvláštních experimentálních prostředků, neustále se rozšiřuje a zdokonaluje. Základní podmínkou pro efektivní využívání modelu jako experimentálního prostředku je uvědomit si existenci různých modelů, jejich osobitých vlastností, vyloučit nadřazenost v pohledu na různé modely a pochopit zákonitosti vývoje v modelování.

Habilitační práce [6] se zabývá hybridními numerickými metodami spojujícími v sobě výhody analytického řešení a možnosti metod experimentálního a numerického modelování (zejména metody konečných prvků (MKP), konečných diferencí (MKD), konečných objemů (MKO), hraničních prvků (MHP), atd.) a fyzikálních analogií pro řešení praktických úloh materiálového inženýrství. V práci je jak úvod do problematiky využití hybridních modelů (kapitola 4), tak i příklady způsobu řešení konkrétních zadání pomocí hybridních metod *numericko - numerické* (v kapitole 5), *numericko - analytické* (v kapitole 7) a *numericko - experimentální* (v kapitole 8).

3 Základní rovnice matematické fyziky

Pro vytvoření matematického modelu existují **dva hlavní přístupy** (Obr. 1). V **prvním přístupu** se vychází ze souhrnu vědomostí o chování *zkoumaného objektu* získaných identifikací i jako výsledek rozvoje vědomostí v příslušném oboru. V **druhém přístupu** se informace získávají nepřímo z fyzikálního modelu. Výsledky experimentu jsou představovány souhrnem poznatků, vyjádřených nejčastěji ve tvaru fenomenologického popisu fyzikálního modelu, a v důsledku modelového přirazení, i popisu zkoumaného objektu. K získání obecného matematického modelu je nutná podrobná analýza fyzikální podstaty problému a informací získaných modelováním. Pak lze po transformaci přejít na simulační model a získat z něj věrohodnou informaci o chování systému. Informace je soubor údajů o libovolném objektu, procesu nebo jevu. Fyzikálním nositelem informace je signál. Pravidla pro přiřazení informace a signálu vyjadřuje kód. Kvantování je způsobem zkoumání obsahu informací, při kterém se spojitá veličina nahrazuje veličinou o konečném počtu diskrétních hodnot. Ukázky matematických modelů jsou např. v literatuře [7] a [8].

Síla matematiky jako vědy je v tom, že umí vyjadřovat složité myšlenky a vazby symbolicky, ale při tom zachovávat racionalitu, jednoduchost a jistou eleganci. Matematický model je vyjádření problému symbolickou formou, má známé vlastnosti (omezení) a lze jím interpretovat rozsáhlou oblast fyzikálních efektů v reálných geometrických provedeních.

Matematické modely jsou například:

- Algebraické relace (rovnice)
- Obyčejné diferenciální relace (rovnice)
- Parciální diferenciální relace (rovnice)
- Soustavy rovnic
- Relace mezi množinami
- Relace z oblasti algebry, pravděpodobnosti, matematické logiky, stochastiky,....

Matematický model může vzniknout jako výsledek:

- Přímého výzkumu, zkušenosti (experiment, pozorování,...) fenomenologický
- Dedukce- popis dílčího řešení asymptotický

Podle stavu a četnosti používání typů matematických modelů se dá usuzovat na fázi vědního oboru a disciplíny. Například "moderní fyzika" stagnovala na soustavě matematických asymptotických modelů, ale od roku 2008 dochází k zásadním změnám. Díky mnoha vědním oborům z oblasti velmi vysokých frekvencí se dochází k přestupu z částicového (integrální model) modelu hmoty (A. Einstein, R. P. Feynmann,...) a difúzní rovnice na model vlnové teorie hmoty (diferenciální model De Broglie), telegrafní rovnice a solitony - obecná definice částice.



Obr. 1 Strukturní schéma postupu modelování



Obr. 2 Postup v modelování

Matematické modelování je pouze jednou částí procesu návrhu a řešení vědeckého problému (viz Obr. 1 strukturní schéma postupu modelování a v Obr. 2 je naznačen postup v modelování). Další základní význam má zjištění fyzikálních

vlastností, struktury a parametrů zkoumaného systému a v něm probíhajících procesů. Ke zjišťování informace o zkoumaném objektu a ověření výsledků simulace se využívá experimentální technika (měřicí, výpočetní a řídicí).

Obecnou rovnici matematické fyziky (unitární model vesmíru) vyjadřuje vztah

$$\sum_{i,j=1}^{n} a_{ij} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} + \sum_{i=1}^{n} b_i \frac{\partial u}{\partial x_i} + c \ u + d = et + f \frac{\partial u}{\partial t} + g \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + h \frac{\partial^3 u}{\partial t^3}$$
3.1

kde a_{ij} , b_i , c, d, e, f, g, h jsou obecné spojité nebo po částech spojité (nespojité - diskrétní) funkce proměnné u a nezávisle proměnných $x_1, ..., x_n$. Podle charakteru, váhy a stavu koeficientů se mění základní relace matematicko - fyzikálního modelu.

lineární model

nelineární model

Koeficienty a_{ij} , b_i , c, d, e, f, g, h

- nejsou funkcemi závisle proměnné *u*
- jsou funkcemi závisle proměnné *u*
- jsou funkcemi závisle proměnné *x*,*y*,*z*,*t* anizotropní model
- $a_{ii}=k_1, b_i=k_2, c=k_3, i, j=1,..,4,$ *izotropní model*

Eliptické rovnice

$$A\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2B\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = m(x, y, z, \frac{du}{dx}, \frac{du}{dy})$$
3.2

Laplaceova rovnice zachycuje statické úlohy, ustálená řešení bez vnitřních zdrojů (vírový, zřídlový).

$$\nabla^2 u = 0 \tag{3.3}$$

Poissonova rovnice může popisovat úlohy s vnitřním zdrojem, ale v ustáleném stavu (statické).

$$\nabla^2 u - f_c(x, y, z) = 0 \tag{3.4}$$

Tricomiho rovnice

$$y\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

$$3.5$$

Cauchyova formulace

det = 0

Parabolická rovnice

$$A\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2B\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = m(x, y, z, \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}, \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}y})$$
3.7

Fourierova rovnice

$$\nabla^2 u + F \frac{\partial u}{\partial t} = 0 \tag{3.8}$$

Difúzní rovnice vedení tepla

$$\nabla^2 u + F \frac{\partial u}{\partial t} - f_c(x, y, z, t) = 0$$
3.9

3.6

Rozšířená difúzní rovnice vedení tepla (ztrátové prostředí)

$$\nabla^2 u + Cu + F \frac{\partial u}{\partial t} - f_c(x, y, z, t) = 0$$
3.10

Fourier-Kirchhoffova rovnice

$$\nabla^2 u + F \frac{\partial u}{\partial t} \pm p \nabla u - f_c(x, y, z, t) = 0$$
3.11

Difúzní rovnice částic v plynech

$$q\nabla^2 u + F\frac{\partial u}{\partial t} + p\nabla u = 0$$
3.12

Tyto modely mohou popisovat kvazistatické a kvazistacionární. Fourierova rovnice a difúzní rovnice částic v atmosféře opět popisují úlohy bez vnitřních zdrojů.

Hyperbolické rovnice

$$A\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2B\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = m(x, y, z, \frac{du}{dx}, \frac{du}{dy})$$
3.13

jsou vhodné modely pro popis úloh na základě vlnové teorie ale také k popisu stavů například kvantové mechaniky.

Helmholtzova rovnice

$$\nabla^2 u + Cu = 0, \forall C(x, y, z) \neq 0$$
3.14

je vhodná k vyjádření amplitudy u periodického kmitání, úplná vlnová rovnice postihuje tlumení, ztrátové prostředí.

Schrödingerova rovnice

$$\nabla^2 u + Cu = 0$$
, $\forall C = f_c(x, y, z)$
3.15

Neúplná vlnová rovnice je vhodná k popisu úlohy netlumeného bezeztrátového vlnění.

$$\nabla^2 u + g \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0, \forall g(x, y, z) < 0$$
3.16

d'Allambertova rovnice

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} u + g \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0, \forall g(x) < 0$$
3.17

Úplná vlnová rovnice

$$\nabla^2 u + g \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - f_c(x, y, z, t) = 0, \forall g(x, y, z) < 0$$
3.18

Rozšířená vlnová rovnice

$$\nabla^2 u + f \frac{\partial u}{\partial t} + g \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - f_c(x, y, z, t) = 0, \forall g(x, y, z) < 0$$
3.19

Telegrafní rovnice v zapsané formě popisuje přenos signálů a event. energie podél tras.

$$\nabla^2 u + cu + f \frac{\partial u}{\partial t} + g \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0$$
3.20

Zkrácená telegrafní rovnice se liší o člen ztrát podél trasy.

$$\nabla^2 u + cu + g \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0$$
 3.21

Rovnice vyšších řádů nebo vlastní formulace slouží ke speciálním hlediskům, při kterých nám nevyhovují výše popsané a známé úlohy.

$$g_1 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \nabla^2 u + f_1 \frac{\partial}{\partial t} \nabla^2 u + \nabla^2 u = 0$$
3.22

Obecná rovnice matematické fyziky vyšších řádů

$$\sum_{i,j,k,l=1}^{n} z_{ijk} \frac{\partial^4 u}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k \partial x_l} + \sum_{i,j,k=1}^{n} y_{ijk} \frac{\partial^3 u}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k} + \sum_{i,j=1}^{n} a_{ij} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} + \sum_{i=1}^{n} b_i \frac{\partial u}{\partial x_i} + c \ u + d$$

$$= et + f \frac{\partial u}{\partial t} + g \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + h \frac{\partial^3 u}{\partial t^3}$$

3.23

kde a_{ij} , b_i , c, d, e, f, g, h, y, z jsou obecné spojité nebo po částech spojité (nespojité - diskrétní) funkce proměnné u a nezávisle proměnných $x_1,...x_n$. Podle charakteru, váhy a stavu koeficientů se mění základní relace matematicko-fyzikálního modelu.

$$\nabla^{4} u = \frac{\partial^{4} u}{\partial x^{4}} + 2 \frac{\partial^{4} u}{\partial x^{2} \partial y^{2}} + \frac{\partial^{4} u}{\partial y^{4}} \qquad \nabla^{4} u + f \frac{\partial u}{\partial t} + g \frac{\partial^{2} u}{\partial t^{2}} = f_{c}(x, y, t) \qquad 3.24$$

$$\nabla^4 u = 0 \tag{3.25}$$

$$\nabla^4 u + cu = f_c(x, y) \tag{3.26}$$

$$\nabla^4 u + c \frac{\partial u}{\partial t} = f_c(x, y, t)$$
3.27

$$\nabla^4 u + g \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = f_c(x, y, t)$$
3.28

Parciální diferenciální rovnice 4. řádu se používají zejména v dynamice a pevnosti - pružnosti řešení vnitřních energií systému, vlastní kmitání soustav. Více se parciální diferenciální rovnice používají při formulování rychlých deformací (dlouhých), dynamických systémů impulsních dějů mechaniky. Obecně se mohou použít u komplikovaných sdružených fyzikálních úloh. Rozbor základních pojmů modelování je v [6].

3.1 Modelování a simulace technických systémů v současné době

Modelování a simulace technických systémů představuje v současné době podstatnou část celé sítě modelovaných problémů (např. [5] až [62]. Mezi řešené úlohy patři problémy z energetiky, strojírenství technologie hutnictví, elektrotechniky (např. [63], [64], [65] až [80]), kosmické a jaderné techniky, v nichž je tempo rozvoje a uplatňovaní modelovaní nejvyšší.

Využití numerických modelů se týká všech oblastí lidské činnosti, např. ve výrobních technologiích v řízení technologických procesů např. [38] až [40], v dopravě např. [81], v chemii např. [58] až [60], v lingvistice např. [110] vytváření různých fonologických modelů řeči, v překladatelství, ve školství např. [111], v elektrotechnice např. 10, [64], [24], [30], v pojišťovnictví např. [112], ve stavitelství např. [108], [109], v ekonomii např. [43] až [45], [61], v ekologii např. [49], [50], [57], [106], [107], v biologii např. [41], [42], v sociologii např. [46],

[47], [51] až [56], v biologii, sociologii, psychologii, lékařství např. [12] až [22], [41], [42]. Fyzikální analogie je rozšířením pojmu fyzikální podobnosti na fyzikálně různé jevy, mající podobný matematický popis např. [64], [24], [30], [34] používané např. v hydromechanice, termomechanice, pružnosti, elektrotechnice, aplikované matematice i netechnických oborech. Při volbě analogie rozhoduje obvykle vedle uvedených vlastností i přesnost, dostupnost, charakter úlohy a měřitelnost veličin.

Obecné matematické modely mají největší ve schopnosti vyjádřit myšlenky a složité vztahy symbolicky a přitom zachovávat ve vyjádřeních jednoduchost a racionálnost. Matematický model může vzniknout výsledkem:

— **zkoumání a pozorování** — model fenomenologický, vyjadřující analyticky nebo numericky výsledky empirického zkoumaní,

— **dedukce**, kdy model vzniká jako dílčí případ obecnějšího popisu modelu asymptotického, vyjadřujícího jednoznačný matematický zákon chování systému nebo procesu, přičemž zákon se chápe jako dílčí případ obecné vědní teorie (např. Laplaceova rovnice jako nejjednodušší případ obecné teorie fyzikálního pole).

Převaha určitých typů modelů charakterizuje současně i stupeň vývoje vědní disciplíny. Fyzika je svázána se soustavou matematických asymptotických modelů, pro kybernetiku jsou charakteristické modely komplexové. Přesně analytické řešení úloh s okrajovými podmínkami je možné jen ve velmi omezené míře. Platí to zejména o úlohách popisovaných rovnicemi matematické fyziky. Proto se používají různé přibližné metody (např. v literatuře [82], [92], [93], [95], [96]). Podrobněji v [6].

4 Hybridní modely

Hybridní modelování nabývá v současnosti na významu (např. [82], [31] až [37], [113]). Pojmem hybridizace se rozumí pronikání prvků jedné simulační techniky do druhé. V hybridním zařízení je zastoupena jak analogová, tak číslicová simulační technika v různé míře. Hybridizace se ubírá dvěma směry. Pronikání číslicové techniky do techniky analogové (levá větev Obr. 3) začíná doplněním analogového počítače diskrétními logickými prvky pro individuální řízení integrátorů a analogových pamětí. Číslicové počítače se doplňují analogovými prvky k provádění některých operací (pravá větev Obr. 3). Používají se speciální programy pro vytváření číslicového modelu chování analogových operačních prvků (sumátorů, integrátorů aj.) navzájem propojených. Programy umožňují kontrolu a ověřeni analogového modelu.

Hybridní metody se dělí podle způsobu řešení problémových zadání na:

Numericko-numerické

Patří mezi ně např. Metoda konečných prvků (MKP), Metoda konečných diferencí (MKD), Metoda konečných objemů (MKO), Metoda hraničních prvků (MHP),..., a také kombinace metod např. MKP/MHP, MKP/MKO....MKP/MKD,... V práci je příklad řešení numericko – numerickou hybridní metodou uveden v kapitole 5.

Numericko - analytické

Patří mezi ně např. řešení Metodou konečných prvků (MKP), Fourierovou transformací, využití principu Superpozice. V práci je příklad řešení numericko – analytickou hybridní metodou uveden v kapitole 7.

Numericko experimentální

Patří mezi ně např. Nukleární magnetická rezonance (NMR) v kombinaci s MKP. V práci je příklad řešení numericko – experimentální hybridní metodou uveden v kapitole 8.



Obr. 3 Hybridizace metod a prostředků simulace A – číslicové zpracování

informace a logické řízení, B - analogové zpracování informace

Při vytváření hybridních simulačních modelů se kombinují modely analogové a číslicové ve snaze využít výhodných vlastností obou. Zpracovávají se informace zobrazené různým způsobem. Mezi analogovým a číslicovým modelem dochází v průběhu simulace k jednosměrnému nebo obousměrnému předávání informací, které se spojovacím zařízením převádějí z číslicového tvaru do tvaru analogového a naopak. Analogové a číslicové zpracování modelové informace je sice zcela odlišné, ale v konstrukci hybridních simulačních systémů se podařilo využít výhod obou způsobů. V systému jsou však spojeny dva nesourodé podsystémy, informace vyměňující se mezi nimi musí být neustále konvertovány z jednoho způsobu zobrazení na druhý [6].

4.1 Hybridní simulační modely a systémy

Hybridní simulační systém je univerzálním prostředkem umožňujícím kombinovat sériově pracující číslicové modely s paralelně pracujícími modely analogovými a řídit je jednak programem, jednak speciálně vytvořenou logickou řídicí sítí.



Obr. 4 Strukturní schéma hybridního simulačního systému

Analogový podsystém dovoluje rychlé paralelní zpracování informací, spojitost veličin může být zachována, řešitel má možnost vstupovat do procesu simulace a měnit nastavení operačních prvků i strukturu počítací a řídicí logické sítě.



Obr. 5 Strukturní schéma vytváření analogového simulačního modelu

Číslicový podsystém zajišťuje zejména přesné zpracování diskrétních nebo diskretizovaných veličin, uchování hodnot a řízení simulace.



Obr. 6 Schéma univerzálního hybridního systému

Vyvážený hybridní simulační systém má oba podsystémy, číslicový i analogový rovnocenné co do kapacity, vybavení vstupními a výstupními zařízeními i možností při řešení úloh. Strukturní schéma vyváženého hybridního simulačního systému naznačuje Obr. 4.

Informace mohou téci oběma směry, tedy kolovat v systému. Vyvážený hybridní systém završuje proces hybridizace simulačních prostředků a dává předpoklady k hybridizaci simulačních metod tím, že volba číslicové nebo analogové metody závisí na charakteru řešeného problému a není ovlivněna omezeními technického rázu. Obecné strukturní schéma hybridního simulačního systému je na Obr. 4 a jeho podrobnější uspořádání je na Obr. 6. Na Obr. 7 je blokové schéma typického jednoúčelového hybridního systému. Podrobnější informace jsou uvedeny v literatuře [6].



Obr. 7 Schéma jednoúčelového hybridního simulačního systému

5 Hybridní numericko - numerická metoda teplotně radiační

Podrobné rozbory oteplení v ustáleném stavu, obecná difúzní rovnice, tepelného pole, základních zákonů tepelného toku, principu tepelné sítě, ochlazování povrchu, sálání v volném prostoru, sálání v omezeném prostoru, stínění okolními tělesy, konvekce, přirozená konvekce, přirozená konvekce v omezeném prostoru, chlazení konvekcí v omezeném prostoru, přirozená konvekce ve volném prostoru jsou v [6].

6 Metody řešení tepelného hybridního modelu

6.1 Metoda uzlových oteplení

Tepelná úloha je formulovaná pomocí dílčích řešení parciální diferenciální rovnice 4.4 a 4.5 v literatuře [6], při kterých jsou parciální derivace nahrazeny diferencemi (MKD) a po částech homogenní úloha je nahrazena sítí s konstantními parametry. Získáme tak úlohu se soustředěnými parametry se silně nelineárními průběhy funkcí. Tato nelinearita je způsobena nelineární teplotní závislostí úseků úlohy, například vztahy v příloze 9 v literatuře [6]. Pro řešení nelineární úlohy je zvolena prostá iterační metoda [92]. V iteračním procesu se sleduje změna oteplení ve vybraném

uzlu sítě modelu vzhledem k předchozímu iteračnímu kroku. Platí vztah pro ukončení iteračního procesu kroku k

$$\left| \Theta_i^k - \Theta_i^{k+1} \right| \le \varepsilon_k \tag{6.1}$$

kde ε_k je zvolené dostatečně malé číslo, *j* je číslo uzlu sítě MKD modelu.



Obr. 8 K vysvětlení MUO

Řešení lineárního obvodu na základě metody uzlových oteplení probíhá ve třech krocích:

1) Vybere se jeden z uzlů obvodu za tzv. referenční uzel, zpravidla se mu přiřazuje pořadové číslo 0. Jeho oteplení pokládáme za rovné nule. Očíslujeme ostatní, tzv. nezávislé uzly, a označíme v kladném smyslu jejich oteplení vzhledem k referenčnímu uzlu (tzv. uzlová oteplení) jako Θ_{10} , Θ_{20} , ... $\Theta_{(n-1)0}$.

2) Pro jednotlivé nezávislé uzly formulujeme rovnice podle 1. Kirchhoffova zákona. Tepelné toky tekoucí z uzlu bereme s kladným znaménkem, tepelné toky tekoucí do uzlu se záporným znaménkem. Řešením soustavy rovnic obdržíme velikosti uzlových oteplení v obvodu.

3) Vypočítáme tepelné toky a oteplení na jednotlivých prvcích obvodu.

Metoda uzlových oteplení vyžaduje, aby zdroje v obvodu (nezávislé i řízené) byly výhradně zdroje tepelného toku. Zdroje oteplení nahradíme ekvivalentními zdroji tepelného toku. Příklady řešení jsou uvedeny v literatuře [6].

6.2 Modifikovaná metoda uzlových oteplení

Modifikovaná metoda uzlových oteplení vychází z klasické metody uzlových napětí, tj. vektor neznámých veličin obsahuje především uzlová oteplení, orientovaná od jednotlivých nezávislých uzlů k referenčnímu uzlu. Vektor neznámých veličin je však rozšířen o některé uzlové tepelné toky, jmenovitě o oteplení ideálních zdrojů. Podrobněji v literatuře [6].

Příklad řešené úlohy

Jako příklad řešení uvedeno řešení rozložení teploty u elektrotechnického rozvaděče, skládajícího se pro danou konfiguraci ze tří variant.



Obr. 9 Schéma řešené testované Obr. 10 Příklad výsledného rozložení sítě v rozvaděči úlohy s rozložením teplot

První varianta řešena pro uzavřený prostor (přirozená cirkulace vzduchu, radiace, konvekce), druhá varianta je model s ventilačními otvory s přirozeným prouděním vzduchu (turbulentní cirkulace, radiace, konvekce) a třetí varianta s nuceným prouděním vzduchu (turbulentní cirkulace, vyzařování, konvekce). Model byl navržen podle úseků a fyzikálních dějů (konvekce, kondukce, radiace,...), navrženy soustředné parametry, sestaven MKD model a iterační solver. Na obrazovce jsou sledovány jak všechny uzly sítě modelu- oteplení, tak sledované tři body T_1 , T_2 a T_3 . Po ukončení iteračního procesu se uzlové hodnoty porovnaly s modelem a modelem řešeným MKP.



Obr. 11 Příklad výsledného rozložení teploty skříně a přístroje v rozvaděči

Obr. 12 Příklad rozložení rychlosti [m/s]

Podrobné řešení a další výsledky jsou uvedeny v literatuře [10].

7 Hybridní numericko – analytická metoda, přechodová analýza stacionárního elmg. pole

Jiným typem hybridního modelu je model nestacionární úlohy přechodového stavu. Jako příklad řešení poslouží model rozšířené vlnové rovnice z odst. 3. Numerický výsledek známe, ale řešení je velmi náročné na tvorbu modelu a dobu řešení. Lze s výhodou využít hybridní model, který zrychlí a zjednoduší celou analýzu, přičemž nedojde k částečné ztrátě přesnosti, jak se stalo u předchozího tepelného modelu.



7.1.1 Algoritmus odrazu a lomu elektromagnetické vlny



Obr. 14. Vlny na povrchu heterogenního materiálu po odrazu od několika vrstev.

Odvození a sestavení algoritmu lomu a odrazu EMG vlny na rozhraní pomocí koeficientu odrazu a koeficientu prostupu bylo provedeno s využitím literatury [93], [94] a [30], algoritmus testovaný v programu Matlab, problematika publikována v [23] až [25]. Program generuje matici paprsků, které se šíří ze zdroje. Jsou vyhodnoceny průsečíky paprsků s objekty v modelu a určen nový směr odraženého a prostupujícího paprsku. Program je koncipován pro analýzu a vyhodnocení vypočítat jakékoliv množství odražených paprsků. Počet odrazů každého paprsku výrazně zvyšuje časovou náročnost analýzy. Odrazy a prostup jsou řešeny na základě Snellových zákonů pro elektromagnetické vlny [93] a [94]. Podrobněji v literatuře [1].

Odvození a upravení algoritmu analýzy šíření EMG vlny tak, aby vyhodnocoval odraz a lom na jednom rozhraní přímo z formulace EMG vlny ve tvaru:

$$\boldsymbol{E}_{1} = \boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{e}^{-j\left(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{u}_{n} \cdot \boldsymbol{r}\right)} \cdot \boldsymbol{e}^{-j\left(\omega t + \varphi\right)}$$
7.1

Tento postup odladit pro vícevrstvý heterogenní materiál. Odrazy EMG vlny od heterogenního materiálu a její prostup je řešen pomocí numerických metod (pro vícevrstvé prostředí na Obr. 13).

Algoritmus zpracovává odraz až od 10 vrstev. Odraz od n vrstev generuje n primárních (jednou odražených) EMG vln (na Obr. 14 dopadá EMG vlna na 5 vrstev a na povrchu je 5 odražených EMG vln), které se ve vícevrstvém prostředí odrážejí. Vyhodnocení šíření EMG vlny na vícevrstvém prostředí vede na vztahy:

$$E_{r0} = E_{i0}\rho_{E0} \cdot e^{-jk_{1}u_{nr0}\cdot r_{0}}$$

$$E_{t0} = E_{i0}\tau_{E0} \cdot e^{-jk_{2}u_{nt0}\cdot r_{0}}$$

$$E_{rl} = E_{il}\rho_{El} \cdot e^{-jk_{l}(l+1)u_{nrl}\cdot r_{l}}$$

$$E_{tl} = E_{il}\tau_{El} \cdot e^{-jk_{l}(l+2)u_{ntl}\cdot r_{l}}$$
7.3

kde E_{rl} a E_{tl} jsou odražená a prostupující EMG vlna na rozhraní l (l = 0, ..., max) (podle Obr. 13), E_{il} je amplituda intenzity elektrického pole v místě rozhraní l, ρE_l a τE_l jsou činitelé odrazu a prostupu na rozhraní l, k_l je vlnové číslo vrstvy, r_l je polohový vektor dopadu EMG vlny na rozhraní l a u_{ntl} a u_{nrl} jsou jednotkové vektory směru šíření.



Obr. 15 Odraz od difúzního povrchu [99]. Obr. 16 Kolmý dopad na vrstevné rozhraní.

Dále se upraví testovací model metody ray-tracing pro modelování odrazu na *n* vrstvách, postup vyhodnotí odraz od zrcadlového, polodifúzního a difúzního povrchu. Situace při odrazu od difúzního povrchu je naznačena na Obr. 15. Vytvořené algoritmy zpracovávající pouze postupnou EMG vlnu jsou dále rozšířeny o výpočet zpětné EMG vlny. Zjednodušená situace na kolmý dopad EMG vlny je na Obr. 16.



Obr. 17 Šikmý dopad na vrstevné rozhraní.

Podle odvození [100] platí pro \vec{E}_A dopadající a \vec{E}_A odraženou EMG vlnu, které se šíří kolmo na rozhraní

$$\vec{E}_{A} = \frac{e^{jk_{2}d} + \rho_{12}\rho_{23} \cdot e^{-jk_{2}d}}{\tau_{12}\tau_{23}} \vec{E}_{D}$$
7.4

$$\bar{E}_{A} = \frac{\rho_{12}e^{jk_{2}d} + \rho_{23}e^{-jk_{2}d}}{\tau_{12}\tau_{23}}\bar{E}_{D}$$
7.5

kde ρ_{12} je činitel odrazu vlny šířící se vnějším prostředím rozhraní 1 a odrážející se od rozhraní 1, ρ_{21} je činitel odrazu vlny šířící se vnitřním prostředím a odrážející se od rozhraní 1. Analogicky jsou indexovány činitelé prostupu τ . k_2 je vlnové číslo prostředí 2 a *d* je vzdálenost rozhraní. Šikmý dopad EMG vlny je znázorněn na Obr. 17. Protože je vyhodnocení šíření EMG vln na vrstvách a při uvažování zpětné vlny časově náročné, je nutné algoritmy omezit podmínkou, která ukončí výpočet při velkém utlumení vlny.

Intenzita elektrické složky EMG vlny vyzářené ze zdroje je u testovaných algoritmů v čase konstantní (E(t) = konst.). Zdroj bude změněn tak, aby intenzita elektrické složky byla proměnná v čase.

7.1.2 Numerické metody pro automatizovaný výpočet

Pro automatizovaný výpočet fyzikálních úloh existuje v současné době celá řada numerických přístupů a komerčně dostupných programů. Velmi často využívanými metodami jsou především Ray – tracing, metoda Radiozity a Metoda konečných prvků (MKP). Podrobněji v literatuře [6].

8 Hybridní numericko-experimentální metoda, Modelování vlivu magnetické susceptibility na MR obraz MKP

8.1 Úvod do numerického modelování vlivu magnetické susceptibility

Nukleární magnetická resonance (NMR) je známa jako nedestruktivní a neinvazivní diagnostická metoda [9] a [14] používaná pro vyšetřování materiálových vlastností. Jednou z oblastí nejčastějšího využití NMR jsou medicínské aplikace [16], [17]. Prostorová analýza MR představuje nejdokonalejší lékařskou diagnostickou metodu poskytující formou zobrazení důležité informace o stavbě a složení lidského organizmu. Na rozdíl od jiných zobrazovacích metod (RTG, CT) nevyužívá MR ionizujícího záření a nevyvolává proto vedlejší účinky na organizmus. Doposud nebyly při běžných expozičních časech aplikace magnetických polí při vyšetření pozorovány žádné negativní biologické účinky.





Velkou výhodou NMR tomografického zobrazení je vysoký kontrast, především měkkých tkání. Obrazy relaxačních vlastností jader a MR spektra z vymezených oblastí nelze jinými technikami získat. V lékařské MR tomografii má zásadní význam přítomnost kovu v lidském těle, například zubní implantáty, inlaye, endoprotézy apod. Tyto materiály svou susceptibilitou natolik ovlivňují magnetické pole, že dochází ke zkreslení detailů a v extrémním případě ztrátě informace ze získaného obrazu (více v literatuře [10]).

Jinou možností měření susceptibility je využití jevu magnetické rezonance. Stanovení neznámé magnetické susceptibility slabě magnetických látek je jednoduše možné u materiálů dávajících MR signál, např. získáním obrazu s kontrastem způsobeným změnou indukce magnetického pole, jak je popsáno např. v literatuře [77], [80], [21], [22]. Vhodnou zobrazovací metodou je použití sekvence gradientního echa. Obraz získaný touto metodou má fázově zakódovanou informaci o změně magnetické indukce.

U materiálů, které MR signál nedávají (například diamagnetické a paramagnetické kovy), existuje možnost měření v MR spektrografu porovnáním s materiálem se známou hodnotou susceptibility (voda, aceton, benzen, atd.) v MR spektrometru [78].

Zobrazení technikami magnetické resonance (MRI) se ve svém vývoji zaměřuje k možnosti neinvazivní cestou sledovat mikro nástroje navržené k vykonávání zákroků ve vzdálených a nepřístupných místech např. v kardiovaskulárním systému člověka. Matematický model takovéhoto systému je popsán např. v literatuře [11]. Jsou v něm brány v úvahu takové parametry jako je velikost krevní cesty, rychlost a viskozita krve, magnetické vlastnosti materiálů, charakteristické rozměry gradientních cívek MRI nebo poměr mezi průměrem sférického jádra a průměrem krevní cesty. Dalším příkladem využití MRI uvedeném v literatuře [12] je mikromanipulátor, který se může být využít k provedení medicínských a biologických výzkumů. Jeho schopností je současně manipulovat a měřit objekty velikosti mikronů uvnitř MRI platformy. Sestává ze dvou prstů mikroruky, do nichž může uchopit mikroobjekty. Další aplikací využívající NMR je materiálové inženýrství. Příkladem je NMR sběr dat jako pokročilá metoda při určování ohodnocení a těžbě ropy. Dokáže rozeznat pórovitost, permeabilitu, vázanou vodu v objemu, propustnost, volný tekutý objem a viskozitu. NMR sběr dat hraje vzrůstající úlohu ve vyhledávání nalezišť ropy a zemního plynu.

Výsledky z NMR metody a zpracování signálu jsou citlivé na použité materiály, zejména když jsou tyto materiály naprosto odlišné v atributech jako je susceptibilita, vodivost a permeabilita. Vede k deformacím obrazu a NMR se tak stává nevyužitelnou (příklad ztráty informace ukazuje [17]).

Kapitola 8 popisuje hybridního numericko – experimentální inversní metodu, která umí zredukovat vliv extrémně odlišných materiálových vlastností.

Inverzní metoda je využívána v různých aplikacích [10], [20]. Zde řeší úlohu nelinearity, která je podrobněji např. v [20], kde autoři ukazují dvě nelineární inverzní metody rekonstrukce vodivostního profilu z měření pomocí elektromagnetické indukce (EMI) : *vylepšenou dvoukrokovou inverzní metodu* založenou na rozšířené Bornově aproximaci (EBA) a *kombinaci EBA a metody kontrastní inverze zdroje* (CSI). V první metodě je nelineární problém převeden na dvoukrokovou inverzní metodu a řešen Bornovou aproximací. Aplikace inverzní metody v NMR technice sestává z teplotního

měření : metoda vhodná pro přímou identifikaci povrchového teplotního toku. Teplotní měření není vždy možné uskutečnit, zvláště např. v případech jako jsou agresivní prostředí nebo nepřístupné zóny. To je důvod, proč byla inverzní metoda rozvinuta : přímý problém s neznámými hraničními podmínkami (teplotní tok zdi) je řešen v literatuře [10] s přidáním rovnice teplotního měření na protilehlém povrchu zdi.

Dalším krokem je nalezení jednoduchého numerického modelu a ověření výsledků NMR měřením. Materiálové vlastnosti mohou být měněny a dále experimentálně měřeny. Pro řešení jsou v numerickém modelu využity experimentálně (MRI) získaná data. Aplikací numerických výsledků do následného zpracování výsledků NMR vzroste značně kvalita konečného obrazu.

Pokračující rozvoj rychlosti a výkonnosti výpočetní techniky a vývoj vhodného softwarového vybavení mají za následek rozšiřující se možnosti numerického modelování a tím řešení komplikovaných úloh ze všech oblastí lidské činnosti. Mezi významné výhody analýza a řešení problematických úloh pomocí simulací je nepopíratelně nedestruktivnost, opakovatelnost a možnost modifikovatelnost, které umožňují zajímavou úsporu v průběhu vývoje, testování a pozdější výrobě prototypů a funkčních vzorků. V procesu numerického se při řešení nevyskytují interference měřících chyb dané chybou měřicí metody, měřicích přístrojů nebo obsluhy. V současné době je jednou z nejpoužívanějších numerických metod metoda konečných prvků (MKP). V oblasti materiálového inženýrství působí řada simulací, které pracují v procesu průzkumných řešení při testování materiálových vlastností vzorků.

V kapitole 8 popsána možnost numerického modelování deformace magnetického pole v okolí měřených diamagnetických a paramagnetických vzorků pro účely studia deformací MR obrazů vlivem susceptibility heterogenních materiálů (objektů). Pro ověření zvolena jednoduchá konfigurace vzorku a porovnány numericky modelované řezy s experimentálním měřicím průběhem magnetického pole měřeného MR technikou gradientního echa.

8.2 Experimentální metoda měření vlivu magnetické susceptibility na MR obraz

Podrobněji o nukleární magnetické rezonanci a technikách MR zobrazování a měření v literatuře [6], [66] až [68], [71], [72], [77] až [80], [17] a [18].

8.2.1 Experimentální měření

Z důvodu snadného ověření výsledků měření bylo uspořádání vzorků a experimentu bylo zvoleno s jednoduchou geometrií, ale podobnou reálným úlohám :

 rovinné, u kterého se snadno volily měřené řezy deformace magnetického pole v okolí materiálů s rozdílnou susceptibilitou. Z tohoto průběhu se stanovila magnetická susceptibilita materiálů vzorku Obr. 19.



Obr. 19 Měřený přípravek pravoúhlé soustavy vzorku



Obr. 20 Měřený přípravek s nehomogenitou

 sférické, u kterého byla do práškového jílu vložena skleněná kulová nádobka naplněná vodou pro stanovení průběhu magnetického pole v dutinách např. pro výpočty uvnitř porézních materiálů, protože jádra vody dávaly velmi dobrý MR signál a bylo možno stanovit průběh magnetického pole uvnitř dutiny v jílovém vzorku Obr. 20.

Experimentální měření proběhlo na MR tomografu ÚPT AV ČR. Základní pole tomografu $B_0 = 4,7000$ T je generováno supravodivým solenoidálním horizontálním magnetem firmy Magnex Scientific. Odpovídající rezonanční kmitočet pro jádra 1H je 200 MHz. Detail držáku vzorku je na Obr. 22. Přípravek je naplněný vodou jako referenčním prostředím s vloženým měřeným vzorkem Cu. Vyobrazení experimentu s rozměry je na Obr. 23. Jak ukazuje Obr. 20 referenčním prostředím vzorku byla krychlová nádoba naplněná jílem s $\chi = -8,85$. 10⁻⁶ uvnitř se skleněnou kuličkou (nehomogenitou) o průměru 10 mm naplněnou vodou s $\chi = -9,04$. 10⁻⁶.





Obr. 21 Pohled na přístroje pro sběr dat a na řídicí centrum tomografu.



Obr. 22 Náhled na usazení přípravku pravoúhlé soustavy vzorku v tomografu.





Zpracování experimentálních dat je podrobněji popsáno v literatuře [6], [69], [73].

V praxi je vzorek umístěn v referenčním prostředí poskytujícím MR signál (a majícím susceptibilitu χ_{m2}) a proto je ve vztazích

$$\boldsymbol{B}_{S} = \boldsymbol{B}_{0} \left(1 + \chi_{m1} \right)$$

$$a$$

$$\chi_{m1} \simeq -\frac{\int_{-\varepsilon}^{-a/2} \Delta \boldsymbol{B}_{z} \, dx + \int_{a/2}^{\varepsilon} \Delta \boldsymbol{B}_{z} \, dx}{a \, \boldsymbol{B}_{0}}$$

$$8.2$$

potřeba uvažovat namísto susceptibility χ_{m1}

$$\frac{\chi_{m2}-\chi_{m1}}{2\pi(\chi_{m1}+\chi_{m2}+2)} \bigoplus_{\substack{\Gamma\\\mathbf{r}\in\Gamma,\mathbf{r}\neq\mathbf{r}'}} \frac{\sigma_{m}(\mathbf{r}')}{R(\mathbf{r},\mathbf{r}')} d\Gamma \ \boldsymbol{u}_{R} \cdot \boldsymbol{u}_{n} + \frac{\sigma_{m}(\mathbf{r})}{2} = -\frac{\chi_{m2}-\chi_{m1}}{\chi_{m1}+\chi_{m2}+2} \boldsymbol{H}_{0} \ \boldsymbol{u}_{z} \cdot \boldsymbol{u}_{n} \quad 8.3$$

diferenční susceptibilitu vzorku

$$\chi_{\Delta} = \frac{\chi_{m1} - \chi_{m2}}{\chi_{m1} + \chi_{m2} + 2}$$
8.4

Pro měření různých vzorků byl nejčastěji použit jako referenční materiál vodný roztok síranu nikelnatého s $\chi_{m1} = -13 \cdot 10^{-6} \chi_{m1} = -13 \cdot 10^{-6}$. Získaný obraz je funkcí rozdílové susceptibility 8.4, proto je nutné v případě, že měřený vzorek má susceptibilitu přibližně shodnou, volit odlišný referenční materiál. Při experimentech byl vyzkoušen pro měření susceptibility mědi aceton. Podrobnější odvození vztahů je v literatuře [66], [6].

8.2.2 Odvození numerického modelu

Pro numerické modelování bylo využito metody konečných prvků ve spojení se systémem Ansys. Jako hraniční podmínka byl zadán φ_m skalární magnetický potenciál řešením Laplaceovy rovnice

 $\Delta \varphi_{\rm m} = div \,\mu \left(-grad \,\varphi_{\rm m}\right) = 0 \tag{8.5}$

s Dirichletovou hraniční podmínkou

 $\varphi_{\rm m} = konst.$ na oblastech Γ_1 a Γ_2 8.6

a Neumannovou hraniční podmínkou

 $\boldsymbol{u}_{n} \cdot \operatorname{grad} \varphi_{m} = 0$ na oblastech Γ_{3} a Γ_{4} 8.7

Spojitost tečných složek intenzity magnetického pole na rozhraní oblasti vzorku je vyjádřena výrazem

$$\boldsymbol{u}_{n} \times \text{grad } \boldsymbol{\varphi}_{m} = 0$$
 8.8

Popis MKP quazistacionárního modelu vychází z redukovaných Maxwellových rovnicrot H = J8.9div B=08.10

kde H je vektor intenzity magnetického pole, B je vektor indukce magnetického pole, J je vektor proudové hustoty. Pro případ statického magnetického nevírového pole se rovnice 8.9 zjednoduší na výraz

 $rot \mathbf{H} = 0 \tag{8.11}$

Materiálové vztahy jsou reprezentovány rovnicí

$$\boldsymbol{B} = \mu_0 \mu_r \boldsymbol{H}$$
 8.12

kde μ_0 je permeabilita vakua, $\mu_r(\boldsymbol{B})$ je relativní permeabilita feromagnetického materiálu. Uzavřená oblast Ω , na které budou rovnice 8.10 a 8.11 řešeny, je rozdělena na oblast vzorku Ω_1 a oblast okolí Ω_2 . Platí pro ně $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$. Pro intenzitu magnetického pole \boldsymbol{H} v oblasti Ω platí vztah 8.11. Vyjádření rozložení magnetického pole z vinutí je pomocí Biot - Savartova zákona formulovaného jako

$$T = \frac{1}{4\pi} \int \frac{J \times R}{\Omega} d\Omega$$
8.13

kde R je vzdálenost mezi bodem v němž je hledaná intenzita magnetického pole T a bodem v němž je uvažována proudová hustota J. Intenzitu magnetického pole H v oblasti lze vyjádřit jako

$$H=T-\operatorname{grad}\phi_m \qquad \qquad 8.14$$

kde T je předchozí nebo odhadnutá intenzita magnetického pole, ϕ_m je magnetický skalární potenciál. Okrajové podmínky jsou zapsány jako

$$\boldsymbol{u}_{n} \cdot \boldsymbol{\mu} (\boldsymbol{T} - grad \phi_{m}) = 0$$
 na oblastech Γ_{3} a Γ_{4} . 8.15

kde u_n je normálový vektor, Γ_{Fe-0} je rozhraní mezi oblastí Ω_{Fe} a $\Omega_0 \cup \Omega_W$. Oblast Ω_0 je prostor vzduchu v modelu, oblast Ω_W je prostor s vinutím. Spojitost tečných složek intenzity magnetického pole na rozhraní oblasti s feromagnetickém materiálem je vyjádřen

$$\boldsymbol{u}_{n} \times (\boldsymbol{T} - grad\phi_{m}) = 0 \qquad 8.16$$

Aplikací vztahu 8.14 ve vztahu 8.15 se získá výraz $div \mu_0 \mu_r T$ - $div \mu_0 \mu_r \text{grad} \phi_m = 0$ 8.17

Diskretizaci rovnice 8.17 lze provést pomocí aproximace skalárního magnetického potenciálu

$$\varphi_{\rm m} = \sum_{j=1}^{NN} \varphi_j W_j(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) \qquad \text{pro } \forall (\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) \subset \Omega, \qquad 8.18$$

kde je φ_j hodnota skalárního magnetického potenciálu v *j*-tém uzlu, W_j aproximační funkce, *NN* počet uzlů diskretizační sítě. Aplikací aproximace 8.18 do vztahu 8.17 a minimalizací reziduí podle Galerkinovy metody se získá semidiskrétní řešení

Soustavu rovnic 8.19 lze zkráceně zapsat

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{k}_{ij} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varphi}_i \end{bmatrix}^T = 0, \ i, j \in \{1, \dots, NN\}$$
8.20

Soustavu 8.20 lze rozdělit na

$$\boldsymbol{K}\begin{bmatrix}\boldsymbol{U}_{1}\\\boldsymbol{U}_{D}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{\theta}\\\boldsymbol{\theta}\end{bmatrix}$$
8.21

kde $\boldsymbol{U}_{\mathrm{I}} = \left[\varphi_{1}, \dots, \varphi_{NI}\right]^{\mathrm{T}}$ je vektor neznámých vnitřních uzlů oblasti $\boldsymbol{\Omega}$ včetně bodů na plochách Γ_{3} a Γ_{4} . $\boldsymbol{U}_{\mathrm{D}} = \left[\varphi_{1}, \dots, \varphi_{ND}\right]^{\mathrm{T}}$ je vektor známých potenciálů na plochách Γ_{1} a Γ_{2}

(Dirichletovy hraniční podmínky). *NI* v indexu značí počet vnitřních uzlů diskretizační sítě, *ND* je počet hraničních uzlů sítě. Soustavu pak můžeme rozepsat na 4 submatice

$$\begin{bmatrix} \mathbf{k}_{11} & \mathbf{k}_{12} \\ \mathbf{k}_{21} & \mathbf{k}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}_1 \\ \mathbf{U}_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$
8.22

a dostáváme soustavu se zavedenými hraničními podmínkami, která se v MKP řeší $k_{11}U_1 + k_{12}U_D = 0$ 8.23

Koeficienty k_{ij} submatice k jsou nenulové pokud element sítě obsahuje oba uzly *i* a *j*. Příspěvek prvku e ke koeficientu k_{ij} je

$$\boldsymbol{k}_{ij}^{e} = \int_{\Omega^{e}} \mu^{e} \operatorname{grad} \boldsymbol{W}_{i}^{e} \cdot \operatorname{grad} \boldsymbol{W}_{j}^{e} d\Omega, \quad e = 1, \dots NE$$
8.24

kde je Ω_e je oblast elementu diskretizační sítě, μ_e je permeabilita prostředí zvoleného elementu, *NE* je počet elementů diskretizační sítě. Prvky matice **k** jsou pak součty příspěvků jednotlivých elementů

$$\boldsymbol{k}_{ij} = \sum_{e=1}^{NE} \boldsymbol{k}_{ij}^{e}$$
8.25

Soustavu rovnic 8.20 lze řešit pomocí standardních algoritmů. Z hodnoty skalárního magnetického potenciálu se pak stanoví intenzita magnetického pole podle 8.14

8.2.3 Geometrický model

Pro ověření výsledků experimentálního měření (viz kapitola 8.2.1) byly vytvořeny geometrické modely MKP.

Geometrický model pravoúhlé soustavy vzorku





Obr. 24 Geometrie vzorku pro vytvoření numerického modelu



Geometrie vzorku pro vytvoření numerického modelu je na Obr. 24. Vzorek je obklopen z obou stran referenčním prostředím. V reálném experimentu je touto referencí voda, která je ideální pro získání MR signálu. Jak ukazuje Obr. 24, v modelu jsou definovány čtyři objemy s různou susceptibilitou. Materiály jsou definovány jejich permeabilitou : *materiál č. 1* - prostředí vně krychle (vzduch), $\chi = 0$, *materiál č. 2* - stěny krychle (sodíkové sklo), $\chi = -11,67 \cdot 10^{-6}$, *materiál č. 3* je materiál vzorku

(sodíkové sklo) $\chi = -11,67 \cdot 10^{-6}$, křemenné sklo, $\chi = -8,79 \cdot 10^{-6}$, sklo s obchodním názvem simax, $\chi = -8,82 \cdot 10^{-6}$, *materiál č. 4* je prostředí uvnitř krychle (voda s roztokem síranu nikelnatého NiSO₄, $\chi = -12,44 \cdot 10^{-6}$. Velikost permeability byla zadána pomocí vztahu

 $\mu = 1 + \chi$

8.26

Pro geometrii vzorku podle Obr. 24 byl vytvořen v programu Ansys geometrický model Obr. 25. V modelu bylo použito diskretizační sítě s 133584 uzly a 126450 prvky typu Solid96 (Ansys, [105]). Okrajové podmínky 8.6 byly voleny tak, aby hodnota indukce statického základního pole byla $B_0 = 4,7000$ T ve směru souřadnice z (osa krychle) – odpovídá reálnému experimentu na MR tomografu ÚPT AV ČR Brno. Výsledky numerického řešení zobrazení modulu magnetické indukce *B* podél definované cesty a jsou zobrazené na Obr. 26.

Pro vysíťování modelu, byla zvolena jako optimální velikost elementu $0.5 \cdot 10^{-3}$ m. Okrajové podmínky $\pm \varphi/2$ byly zadány na hrany modelu, na vnější levý a pravý okraj vzduchového prostředí, jak je znázorněno na Obr. 24. Velikost buzení $\pm \varphi/2$ nabývá pro tento případ závislosti dle vztahu 8.30. Ta se odvodí pro předpoklad, že v celé oblasti neexistují budící proudy, platí tedy rot H = 0 a pole je nevírové. Proto pro skalární magnetický potenciál φ_m platí

$$\boldsymbol{H} = -grad\varphi_m \qquad \qquad 8.27$$

Potenciál budícího statického pole

$$\varphi_m = \int \boldsymbol{H}_0 \cdot \boldsymbol{u}_z d\boldsymbol{z} = \boldsymbol{H}_0 \cdot \boldsymbol{z}$$
8.28

s intenzitou H_0

$$H_0 = \frac{B}{\mu_0 \cdot \mu_r}$$
8.29

je potom

$$\pm \frac{\varphi}{2} = \frac{B \times z}{2\mu_0} = \frac{4,7000 \,\mathrm{T} \times 90 \mathrm{mm}}{2\mu_0}$$
 8.30

kde z je celková délka hrany modelu.



Obr. 26 Rozložení modulu magnetické indukce průřezem vzorku s $\chi_m = -8,79 \cdot 10^{-6}$

Geometrický model sférické soustavy vzorku s izolovanou nehomogenitou

Geometrie vzorku pro vytvoření numerického modelu je na Obr. 27.





Obr. 27 Geometrie vzorku pro vytvoření numerického modelu



Vzorek je obklopen z obou stran referenčním prostředím. V reálném experimentu je touto referencí voda, která je ideální pro získání MR signálu. Jak ukazuje Obr. 27 v modelu jsou definovány čtyři objemy s různou susceptibilitou. Materiály jsou definovány jejich permeabilitou. Velikost permeability byla zadána pomocí vztahu μ =1+ χ ze susceptibilit : *materiál č.1* - prostředí vně krychle (vzduch), χ = 0, *materiál č.2* – nehomog. vzorek, (jíl) χ = - 8,6. 10⁻⁶, *materiál č.3* – materiál nehomogenit uvnitř vzorku (vzduch), χ = 0.

Pro geometrii vzorku podle Obr. 27 byl vytvořen v systému geometrický model Obr. 28. V modelu bylo použito sítě prvků typu Solid96 (Ansys,[105]). Okrajové podmínky 8.6 byly voleny tak, aby hodnota indukce statického základního pole byla $B_0 = 4,7000$ T ve směru souřadnice z (osa krychle) – odpovídá reálnému experimentu na MR tomografu ÚPT AV ČR Brno.





Obr. 29 Rozložení modulu magnetické indukce řezem vzorku s $\chi_m = -8,79 \cdot 10^{-6}$

Obr. 30 Měřená spektrální charakteristika izolované nehomogenity, $\Delta f = 657$ Hz (rezonanční frekvence bez jílu je 155 Hz)

Výsledky numerického modelování jsou zobrazené na Obr. 29. Výsledky numerického řešení byly poté použity k zobrazení modulu magnetické indukce *B* podél definované cesty.

Pro vysíťování modelu, byla zvolena jako optimální velikost elementu $0,5.10^{-3}$ m. Okrajové podmínky $\pm \varphi/2$ byly zadány na hrany modelu, na vnější levý a pravý okraj vzduchového prostředí, jak je znázorněno na Obr. 27. Velikost buzení $\pm \varphi/2$ bylo opět zadáno vztahem 8.31. Ten se odvodí pro předpoklad, že v celé oblasti neexistují budící proudy, platí tedy rot H = 0 a pole je nevírové. Proto pro skalární magnetický potenciál φ_m platí 8.27. Potenciál budícího statického pole s intenzitou H_0 je použitím 8.28, kde H_0 je dáno 8.29.

$$\pm \frac{\varphi}{2} = \frac{B \cdot z}{2\mu_0} = \frac{4,7000 T \cdot 30mm}{2\mu_0}$$
 8.31

kde z je celková délka hrany modelu.

Pravoúhlé soustavě příčné sekce odpovídá měřená spektrální charakteristika Obr. 26. Byla vybrána jednoduchá geometrie pro snazší porovnání průběhů indukce pole. Aby bylo urychleno měření, byl relaxační čas vody T_2 zkrácen přidáním 1 molekuly sulfátu nikelnatého NiSO₄ a soli NaCl. Díky těmto příměsím byl relaxační čas vody $T_2 \approx 900$ ms zkrácen na 175 ms. Efekt způsobený příměsmi by také uveden při řešení susceptibility, která se změnila na $\chi = -12,44.10^{-6}$.

Souhrnné výsledky experimentálního ověření izolované nehomogenity a mnohonásobné nehomogenity

Na Obr. 30 je MR spektrum izolované nehomogenity z Obr. 27 které bylo měřeno jako spektrum objemu vzorku pouze s vodou. V tomto případě je nezbytné ukázat, že byla měřena všechna jádra vody rozprostřena v jílu. Jíl představuje původce změny magnetického pole ve vodě, z tohoto důvodu dochází k posunu rezonanční čáry o $\Delta f = 657$ Hz. Tento posun odpovídá změně indukce magnetického pole $\Delta B = 15,44 \,\mu\text{T}$ (vztah 8.32). Při numerickém modelování úlohy Obr. 41 byla vypočtená hodnota $\Delta B = 14,76 \,\mu\text{T}$. Vztah pro přepočet spektrální charakteristiky Δf na změnu ΔB rozložení modulu magnetické indukce z Obr. 30 je vztah 8.32.

$$\Delta B = \frac{2\pi \Delta f}{\gamma} = \frac{2\pi \Delta f}{2,67 \,\mathrm{e}^8} \tag{8.32}$$

kde f [Hz] je frekvence, γ [T⁻¹.s⁻¹] je gyromagnetický poměr vody a ΔB [T] je změna rozložení modulu magnetické indukce ve vzorku.

Pološířka spektrální čáry (šířka spektrální čáry odečtená v polovině její velikosti) je 400 Hz, což odpovídá maximu změny magnetické indukce $\Delta B = 9.4 \ \mu T$.

Výsledek numerického výpočtu změny magnetické indukce pole uvnitř kuličky (nehomogenity) naplněné vodou je $\Delta B = 14,76 \ \mu\text{T}$ (Obr. 38 až Obr. 41). Rozdíl mezi výsledky změn rozložení indukce magnetického pole pro numerické modelování a MR měřicí metodu je $\Delta B = 0,68 \ \mu\text{T}$, což je 4,53 % z měřené hodnoty.



Obr. 31 Fáze MR obrazu kruhového výběru o průměru 10 mm a) mapa magnetického pole, b) ve svislé rovině elementárního pole procházejícího přes střed nehomogenity.

Čísla bodů z Obr. 31 b	$\Delta B \left[\mu T\right]$
2	7,14
3	4,50
4	0
5	7,77

Obr. 32 Velikost indukce magnetického pole vybraných bodů uvnitř nehomogenity

Obr. 33 Mapa indukce magnetického pole ve svislé rovině elementárního pole procházející středem koule o průměru 10 mm. Ekvipotenciály jsou po $\Delta B_e = 1 \ \mu T$.

Byl vytvořen numerický model úlohy s mnohonásobnou nehomogenitou uvnitř vzorku, který ukazuje deformace modulu indukce magnetického pole vzájemným působením mezi odlišnými nehomogenitami a také deformace modulu indukce magnetického pole pórovitého materiálu uvnitř pórů s vodou uvnitř.

Na Obr. 31 a) je MR fázová obraz získaný GE metodou s $T_{\rm E} = 5$ ms pro vzorek jílu s nehomogenitou ve tvaru kuličky o průměru 10 mm. Změna fáze o 2π odpovídá změně indukce magnetického pole o $\Delta B = 4,7 \mu$ T. Po převedení náhlých fázových změn programem Matlab pomocí dvojrozměrné unwrap funkce obdržíme mapu magnetického pole v kolmé rovině ve středu kuličky (nehomogenity). Velikosti indukce magnetického pole ve vybraných bodech jsou uvedeny v tabulce na Obr. 32. Maximální rozdíl $\Delta B = 7,77 \mu$ T odpovídá spektrální čáře o velikosti 330 Hz. Na Obr. 33 zobrazena mapa magnetického pole ve stejné zobrazovací rovině jako je na Obr. 31 b) s rozpětím ekvipotenciál po $\Delta B = 1 \mu$ T. Maximální změna magnetického pole uvnitř kuličky (nehomogenity) je 8 μ T a přesně odpovídá hodnotě zobrazené na Obr. 32.



-0.2 -0 P0-delta B 80- ~ 80- 2 ١N -11 180 200 220 60 80 100 120 140 160 ->x [body]

Obr. 34 Průběh indukce magnetického pole B, numerický model, bez vzorku



Obr. 36 Indukce magnetického pole B, numerický model, křemenné sklo, $\Delta B=17 \ \mu T$

Obr. 35 Změřený průběh indukce magnetického pole B prostředím, bez vzorku



Obr. 37 Změřený průběh magnetické indukce B prostředím, křemenné sklo, *ΔB*=3,19 μT



Porovnání výsledků numerického modelování a měření pro sférickou soustavu vzorku s izolovanou nehomogenitou



Obr. 38 Výsledky numerické analýzy rozložení modulu indukce magnetického pole *B* v systému Ansys pro nehomogenitu s vodou ($\chi = -12,44.10^{-6}$)



Obr. 39 Výsledky numerické analýzy rozložení modulu indukce magnetického pole *B* v systému Ansys pro jílové pozadí s $\chi = -8,85.10^{-6}$



Obr. 40 Výsledky numerické analýzy rozložení modulu indukce magnetického pole *B* v systému Ansys pro nehomogenitu s vodou po odečtu jílového pozadí $\Delta B = 14,765281 \ \mu\text{T}$





a) jíl ve skleněné krychli (bez nehomogenity s vodou)

b) jíl ve skleněné krychli (zadána nehomogenita s vodou)

Obr. 41 Numerická analýza MKP pro rozložení modulu B (T)

Pro izolovanou nehomogenitu podle Obr. 27 hodnota změny modulu indukce magnetického pole přečtená z Obr. 41 $\Delta B = 14,765281 \,\mu\text{T}.$





Obr. 42 Naměřené hodnoty pro nehomogenní vzorek, jíl

Numerické modelování a analýza úloh potvrdily experimentální výsledky a díky modifikovatelnosti numerického modelu se podařilo v experimentech na pracovišti AV ČR postoupit v kvalitativním zpracování obrazu NMR.

9 Závěr

Některé typy úloh nelze běžnými metodami efektivně řešit. Hybridní numerické metody při řešení praktických úloh materiálového inženýrství spojují výhody analytického řešení, možnosti metod experimentálního modelování, numerického modelování a využití fyzikálních analogií.

V habilitační práci byl rozebrán způsob využití hybridních numerických metod a fyzikálních analogií pro řešení praktických úloh materiálového inženýrství, přechodové analýzy stacionárního elmg. pole, experimentální metody měření vlivu magnetické susceptibility na MR obraz, numerického modelování vlivu magnetické susceptibility na MR obraz MKP a úloze řešené hybridní teplotně radiační metodou.

Byly vytvořeny popisy řešených úloh a přímo uvedeny přístupy k hybridním modelům na třech různých typech úloh (řešení numericko – numerickou hybridní metodou uveden v kapitole 5, řešení numericko – analytickou hybridní metodou uveden v kapitole 7, numericko – experimentální hybridní metodou uveden v kapitole 8).

Výsledky úloh řešených hybridními numerickými metodami a fyzikálními analogiemi vykazují velmi dobrou shodu s výsledky získanými experimentálním ověřením.

10 Literatura

- Žára, J., Beneš, B., Felkel, P. Moderní počítačová grafika. Praha : Computer Press 1998Fiala, P., Kroutilová, E., Bachorec, T. Modelování teplotních poměrů v rozvaděči. Výzkumná zpráva. VUT v Brně, FEKT, UTEE, Brno 2007
- [2] Sochor, J., Žára, J., Beneš, B. : Algorytmy počítačové grafiky. ČVUT Praha 1998, Zikova 4, Praha 6, ISBN 80-01-01406-1
- [3] Frigg, R., Hartmann, S., Models in Science, The Stanford Encyclopedia of Philosophy, 2006
- [4] Kvasnička, V.; Pospíchal, J.: Informatika pre sociálne vedy. Bratislava: Univerzita Komenského, 2005, str. 192, ISBN 80-223-1941-4.
- [5] D. E. Knuth: The Art of Computer Programming, Vol 1–3, Addison Wesley 1998. ISBN 0-201-48541-9.
- [6] Kroutilová, E. Hybridní numerické metody. Habilitační práce. VUT v Brně, FEKT, UTEE, 04/2011
- [7] Khoshnevis, B. Discrete systems simulation. USA McGraw-Hill, 1994. ISBN 0-07-833302-4.
- [8] Curry, G. L. Discrete simulation. Oakland, USA : Holden-Day, 1989. ISBN 0-8162-2060-3.
- [9] Trakic, A. Wang, H. Liu, F. Lopez, H.S. Crozier, S Analysis of Transient Eddy Currents in MRI Using a Cylindrical FDTD Method, Applied Superconductivity, IEEE Transactions on, Sept. 2006, Vol. 16, Issue 3, pp. 1924 - 1936, ISSN: 1051-8223
- [10] Mathieu, J. B. Beaudoin, G. Martel, S., Method of propulsion of a ferromagnetic core in the cardiovascular system through magnetic gradients generated by an MRI system. Biomedical Engineering, IEEE Transactions on, Feb. 2006, Vol. 53, Issue 2, pp. 292 - 299, ISSN: 0018-9294
- [11] Yoshihiko, K. Tanikawa, Tamio, T. Kiyoyuki, C. MRI-compatible Micromanipulator; Design and Implementation and MRI-compatibility Tests. Engineering in Medicine and Biology Society, 2007. EMBS 2007. 29th Annual International Conference of the IEEE,22-26 Aug. 2007,pp. 465 - 468, Lyon, France, ISSN: 1557-170X
- [12] Arima, H. Kato, S. Maehata, K. Ishibashi, K. Nakamoto, T. Shintomi, T. Multipole analysis for absolute magnetic field measured by multi-probe pulsed-NMR method. Applied Superconductivity, IEEE Transactions on, March 2000, Vol. 10, Issue 1, pp. 1450 - 1453, ISSN: 1051-8223
- [13] Long, Hu Fa Li Zhi, Xiao Zhong, Zhang Yuan, Numerical Simulation of NMR Logging Tools. Antenna, Antennas, Propagation & EM Theory, 2006. ISAPE '06. 7th International Symposium on ,Oct. 2006, pp. 1 - 3, China
- [14] Reulet, P. Nortershauser, D. Millan, P. Inverse method using infrared thermography for surface temperature and heat flux measurements. Instrumentation in Aerospace Simulation Facilities, 2003. ICIASF '03. 20th International Congress on, 25-29 Aug. 2003, pp. 118 - 126.
- [15] Vaughan J. Thomas, David N. Haupt, Paul J. Noa, J. Michael Vaughn, and Gerald M. Pohost, *RF Front End for a 4.1 Tesla Clinical NMR Spectrometer*, IEEE TRANSACTIONS ON NUCLEAR SCIENCE, Vol. 42, Issue. 4, August 1995, pp.1333-1337.
- [16] Huston (USA): Ansys User's Manual. Svason Analysys System, Inc., 1994-2006.
- [17] Kroutilová, E., Steinbauer, M., Batrusek, K. Measurement and simulation of material influence in MR tomography. In Proceedings of the International Workshop ISEP - UTEE 3. - 6. 9. 2006 Paris. L'Institut Supérieur d'Electronique de Paris, Paris, France: L'Institut Supérieur d'Electronique de Paris, Paris, France, 2006. s. 87-92. ISBN: 80-214-3250-0.
- [18] Steinbauer, M. Měření magnetické susceptibility technikami tomografie magnetické rezonance. zkrácená verze Ph.D. Thesis vyd. VUT v Brně, FEKT, Údolní 53, 602 00, Brno, 2007, ISBN 978-80-214-3382-3
- [19] Vlaardingerbroek, M. T., Den Boer, J. A. Magnetic resonance imaging, theory and practice. Springer (Berlin, New York), 2003. ISBN 3540436812.
- [20] Zhang Z.Q, Liu,Q.H Two nonlinear inverse methods for electromagnetic induction measurements, Geoscience and Remote Sensing, IEEE Transactions on, June 2001, Vol. 39, Issue 6, pp. 1331 -1339 ISSN: 0196-2892
- [21] WANG, Z.J., LI, S., HASELGROVE, J. C. Magnetic resonance imaging measurement of volume magnetic susceptibility using a boundary condition. Journal of Magnetic Resonance. 1999, vol. 142, p. 477-481. ISSN 1090-7807

- [22] HWANG, S.N., WEHRLI, F.W. Experimental Evaluation of Surface Charge Metod for Computing the Induced Magnetic Field in Trabecular Bone. Journal of Magnetic Resonance. 1999, vol. 139, p. 35-45. ISSN 1090-7807.
- [23] Kadlec, R.; Fiala, P.; Kroutilová, E. Improving of Raytracing Method for Numerical Modeling of Lighting Systems. In PIERS 2009. Progress In Electromagnetics. Cambridge: The Electromagnetic Academy, 2009. s. 161164. ISSN: 15599450.
- [24] Kadlecová, E., Fiala, P.: New Directions in Modeling the Lighting Systems. Radioengineering, 2004, roč. Volume 13, č. Number 4, s. 75-80. ISSN: 1210-2512
- [25] Kadlec, R.; Fiala, P.; Kroutilová, E. Numerical Modeling by Raytracing. In Proceedings of the International Workshop on Teleinformatics and Electromagnetic Field. Paris: UTEE, FEKT VUT v Brně, 2008. s. 14. ISBN: 9788021437180.
- [26] Zhang, J, Kong, J, et al. *Cloak Changing with Background*. In PIERS Proceedings. 0000. s. 730-734.
- [27] Nešpor, D. *Studie šíření elektromagnetické vlny v heterogenních strukturách.* 2009. 20 s. Vedoucí semestrální práce Doc. Ing. Pavel Fiala, Ph.D.
- [28] Wikipedia : *Diffuse reflection [online]*. 6.3.2009 [cit. 2009-04-20]. Dostupný z WWW: http://en.wikipedia.org/wiki/Diffuse_reflection>.
- [29] Nováček, Z. *Elektromagnetické vlny, antény a vedení : Přednášky.* 2008. 144 s. Dostupný z WWW: https://www.feec.vutbr.cz/et/skripta/urel/Elektromagneticke_vlny_anteny_a_vedeni_S.pdf>.
- [30] Kadlec, R. Nové směry výpočtů v osvětlovací technice. [s.l.], 2005. 57 s. VUT Brno, FEKT. Bakalářská práce.
- [31] Hespanha, J., Tiwari, A. Hybrid Systems: Computation and Control. 9th International Workshop, HSCC 2006, Santa Barbara, CA, USA, March 29-31, 2006, Proceedings (Lecture Notes in Computer Science), Springer 2006, ISBN 3540331700
- [32] Wang, L.; J., Steven L. Hybrid model of Monte Carlo simulation and diffusion theory for light reflectance by turbid media. J. Opt. Soc. Am. A 10, Issue 8, pp. 1746-1752, (1993), http://www.opticsinfobase.org/josaa/abstract.cfm?URI=josaa-10-8-1746
- [33] Flekkøy, E., G., Wagner, G., Feder, J. Hybrid model for combined particle and continuum dynamics. Europhys. Issue 3, 1 November 2000, s. 271-276, http://www.iop.org/EJ/abstract/0295-5075/52/3/271/
- [34] Lorenz, G., Greiner, K., Breit, S. A Hybrid Approach to Modeling Multi-Physics Système. http://www.coventor.com/pdfs/HybridModeling.pdf
- [35] Golias, N., A.; Kriezis, Em. E., Tsiboukis, T. D. Hybrid finite-element-analytical method for the analysis of diffraction from metallic gratings of arbitrary profile. JOSA A, Vol. 12 Issue 5, pp.1147-1151 (1995), http://www.opticsinfobase.org/josaa/abstract.cfm?URI=josaa-12-5-1147
- [36] Mosterman, P.,J. A Hybrid Modeling and Simulation Methodology for Dynamic Physical. Systeme. Simulation 2002, Vol. 78, No. 1, 5-17
- [37] Yang, X., Dai, H., Sun, Y. A hybrid modeling method based on mechanism analysis, identification and RBF neural network. Systems, Man and Cybernetics, 2003. IEEE International Conference on 5-8 Oct. 2003, On page(s): 1310-1315 vol.2, ISSN: 1062-922X, ISBN: 0-7803-7952-7
- [38] Noskievič, P. Modelování a identifikace systémů. Montanex a.s., 1999.
- [39] Vlach, J. *Řízení a vizualizace technologických procesů*. BEN technická literatura, 2002, ISBN: 808605666X
- [40] Miles, R. E., Snow, Ch. C., Meyer A. D., Coleman, H.J, Jr. Organizational Strategy, Structure, and Process. The Academy of Management Review, Vol. 3, No. 3 (Jul., 1978), pp. 546-562. http://www.jstor.org/pss/257544
- [41] Starfinger, C., Hann, C., Chase, J., Desaive, T., Ghuysen, A., Shaw, G. Model-based cardiac diagnosis of pulmonary emboliim. Computer Methods and Programs in Biomedicine, 2007, Volume 87, Issue 1, Pages 46-60
- [42] Fernando C. Coelli, Rodrigo B. Ferreira, Renan Moritz V.R. Almeida, Wagner Coelho A. Pereira, Computer simulation and discrete-event models in the analysis of a mammography clinic patient flow. Computer Methods and Programs in Biomedicine, 2007, Volume 87, Issue 3, Pages 201-207
- [43] Swan, J. Practical Financial Modelling. London 2005, CIMA Publishing, ISBN 0-750-66356-1.
- [44] Tjia, J. Building Financial Models. New York 2003, McGraw-Hill. ISBN 0-071-40210-1.

- [45] Benninga, S. Financial Modeling. Cambridge 1997, MA: MIT Press. ISBN 0-585-13223-2.
- [46] Hegselmann, R. et al., Modelling and Simulation in the Social Sciences from the Philosophy of Science Point of View, Theory and Decision Library. Dordrecht: Kluwer 1996, 77-100.
- [47] Humphreys, P., *Extending Ourselves: Computational Science, Empiricism, and Scientific Method.* Oxford: Oxford University Press, 2004.
- [48] Peierls, R., Model-making in physics. Contemporary Physics, Vol. 21 (1), January 1980, 3-17
- [49] Gershenfeld, N. The Nature of Mathematical Modelling. Cambridge University Press, 1998, ISBN 0521570956
- [50] Yang, X.S., Mathematical Modelling for Earth Science. Dudedin Academic 2008, ISBN 1903765927
- [51] Korotayev A., Malkov A., Khaltourina D., Introduction to Social Macrodynamics: Compact Macromodels of the World System Growth. Moscow 2006: Editorial URSS. ISBN 5-484-00414-4
- [52] Davidsson, P., Multi Agent Based Simulation: Beyond social simulation. Multi Agent Based Simulation, LNCS Vol. 1979, Springer Verlag 2000
- [53] Sylvan, D., Modeling the rise and fall of states. Mershon International Studies Review (42): 377– 379, 1998
- [54] Silverman, E.; Bryden, J. From artificial societies to new social science theory. Advances in Artificial Life: 565-574, 2007
- [55] Sun, R., Cognition and Multi-Agent Interaction: From Cognitive Modeling to Social Simulation. Cambridge University Press, New York, 2006
- [56] Gintautas, V., Hubler, A. W., *Experimental evidence for mixed reality states in an interreality systém.* Phys. Rev. E 75, 057201, 2007
- [57] Sato, T. The Earth Simulator: Roles and Impacts. Nuclear Physics B Proceedings Supplements 129: 102. doi:10.1016/S0920-5632(03)02511-8, 2004
- [58] Tersoff, J. Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems. Phys. Rev. 1989, B 39: 5566.
- [59] Paci, E; M., Vendruscolo, M., Karplus, Validity of Go Models: Comparison with a Solvent-Shielded Empirical Energy. Decomposition. Biophys J 83: 3032–3038, 2002
- [60] D. J. Švand, G. P. Morriss, Statistical Mechanics of Nonequilibrium Liquids, Second Edition. Cambridge University Press 2008, ISBN 978-0-521-85791-8
- [61] Dlouhý, M.; Fábry, J.; Kuncová, M.: Simulace pro ekonomy. Praha: VŠE, 2005. str. 152, ISBN 80-245-0973-3.
- [62] J. David Powell, Gene F. Franklin, Abbas Emami-Naeini: Feedback Control of Dynamic Systems. Prentice Hall, 5th ed., 2006, ISBN: 0131499300
- [63] Fiala, P. Modeling of current transformers on a short-circuit. Phd Thesis, Technical University Brno, FEI, 11. 6. 1999, pp.41, ISBN 80-214-1346-8.
- [64] Kadlecová, E. Disertační práce Automatizovaný systém výpočtu odrazné plochy svítidel. VUT v Brně, FEKT, Brno, 2004.
- [65] Fiala, P., Kroutilová, E., Bachorec, T. Modelování elektromagnetických polí, počítačová cvičení. vyd. Brno: VUT v Brně, FEKT, Údolní 53, 602 00, Brno, 2005. s. 1 - 69.
- [66] Steinbauer, M. *Měření magnetické susceptibility technikami tomografie magnetické rezonance*. vyd. Brno: VUT v Brně, FEKT, Údolní 53, 602 00, Brno, 2006
- [67] Vlaardingerbroek, M. T., Den Boer, J. A. 1999. Magnetic resonance imaging. Heidelberg (Germany): Springer-Verlag, 1999. ISBN 3-540-64877-1.
- [68] Levitt, M. H. Spin Dynamics: Basics of nuclear magnetic resonance. John Wiley & Sons, 2001. ISBN 0-471-48921-2.
- [69] Haacke, E.M., Brown, R.W., Thompson, M.R., Venkatesan, R. Magnetic resonance imaging physical principles and sequence design. John Wiley & Sons, 2001. ISBN 0-471-48921-2.
- [70] J.R. Zimmermann, J.R., Foster, M.R. Standardization of N.M.R. high resolution spektra. Journal of Physical Chemistry, 1957, vol. 61, p. 282. ISSN 1090-7807.
- [71] Wang, Z.J., LI, S., Haselgrove, J. C. Magnetic resonance imaging measurement of volume magnetic susceptibility using a boundary condition. Journal of Magnetic Resonance. 1999, vol. 142, p. 477-481. ISSN 1090-7807.

- [72] Bartušek, K. Generace a měření gradientů magnetického pole pro nukleární magnetickou resonanci. Doktorská disertační práce, Ústav přístrojové techniky AV České republiky, 1998.
- [73] Slichter, C. P. Principles of magnetic resonance. Second revised and expanded edition, corrected second printing. Berlin (Germany): Springer-Verlag, 1980.
- [74] Ernst, R. R., Bodenhausen, G., Wokaun, A. Principles of NMR in one and two dimensions. Oxford (England): Oxford Science Publishing, 1987. ISBN 0-198-55647-0.
- [75] Blumlich, B. NMR imaging of materials. Oxford (England): Clarenton Press, 2000. ISBN 0-19-850683-X.
- [76] Liang, Z., Lauterbur, P.C. Principles of magnetic resonance imaging a signal processing perspective. New York (USA): IEEE Press, 2000. ISBN 0- 7803-4723-4.
- [77] Sepúlveda, N.G., Thomas, I.M., Wikswo jr., J.P. Magnetic Susceptibility Tomography for Three-Dimensional Imaging of Diamagnetic and Paramagnetic Objects. IEEE Transaction on Magnetics. 1994, vol. 30, No. 6, p. 5062-5069.
- [78] Zeman, V. Měření magnetické susceptibility pomocí NMR. Brno: Tesla Brno, interní zpráva, 1981.
- [79] Starčuk jr., Z. Možnost vyhodnocování NMR-kompatibility dentálních slitin. Brno: Ústav přístrojové techniky Akademie věd ČR, interní zpráva, 2003.
- [80] Duh, A., Stepišnik, J., Serša, I. The elimination of magnetic susceptibility artifacts in the microimage of liquid-solid interfaces: internal gradient modulation by the CPMG RF train. Journal of Magnetic Resonance. 2003, vol. 160, p. 47-51. ISSN 1090-7807.
- [81] Scott, Durelle T., Gooseff, Michael N., Bencala, Kenneth E., Runkel, Robert L. Automated calibration of a stream solute transport model: implications for interpretation of biogeochemical parameters. Journal of the North American Benthological Society 2003 22: 492-510
- [82] Kuneš, J., Vavroch, O., Franta, V. Základy modelování. SNTL Praha 1989, ISBN 80-03-00147-1
- [83] Havelka, O., Vávra, Z., Svoboda, D. Podklady a příklady pro navrhování elektrických přístrojů I. VUT v Brně 1985. č. 55-555/1-85
- [84] Havelka, O. Stavba elektrických přístrojů I. VUT v Brně 1988. č. 55-569/1-88
- [85] Černoch, S. Strojně technické příručka II. SNTL Praha 1968. č. 04-224-68
- [86] Černoch, S. Strojně technické příručka I. SNTL Praha 1968. č. 04-224-68
- [87] List, V. Elektrické teplo. 1969
- [88] Cigánek, L. Elektrické přístroje spínací, ochranné a řídící: působení, provedení, navrhování: celostátní celoškolská učebnice. 1953
- [89] Cigánek, L. Elektrické stroje a přístroje: Určeno posluchačům průmyslových škol elektrotechnických – čtyřletých, konstruktérům elektrických strojů a přístrojů. 1955
- [90] Kalčík, J. Technické mechanika. 1973
- [91] Rédr, M. Základy tepelné techniky. 1991
- [92] Rektorys, K. Přehled užité matematiky. Praha : SNTL 1968
- [93] Stratton, J.A. Teorie elektromagnetického pole. Praha : SNTL 1961
- [94] Dědek, L., Dědková, J. Elektromagnetismus. VUTIUM, VUT Brno 1998. ISBN 80-214-1106-6. 229 stran
- [95] Rektorys, K. Přehled užité matematiky. II. Prometheus Praha : 2000. ISBN 80-7196-181-7. 874 stran
- [96] Rektorys, K. Přehled užité matematiky. I. Prometheus Praha : 2000. ISBN 80-7196-180-9. 870 stran
- [97] Cohen, M. F., Greenberg, D. P. The Hemi-Cube: A Radiosity Solution for Complex Environments. Computer Graphics (ACM SIGGRAPH '85 Proceedings), 19(3), pp. 31-40.1985
- [98] Vranek D., LU Decomposition of the Radiosity Matrix. International Journal of Lighting Research and Technology, 32(1), pp. 41-44. 2000
- [99] Ward, G .J, *The Radiance Lighting Simulation and Rendering System*. Computer Graphics Proc. Annual Conference series 94, pp. 459-472. 1994
- [100] Tregenz, P.R. The Monte Carlo method in lighting calculations. International Journal of Lighting Research & Technology, 15(4), pp. 163-170. 1983
- [101] Vitásek, E. Numerické metody. Praha : SNTL 1987, 514 stran, 04 009 87
- [102] Moon, P., Spencer, D.E. Lighting Design. Addison-Wesley. Cambridge WA. 1948

- [103] Goral, C.M. Modelling the Interaction of Light Between Diffuse Surfaces. Computer Graphics (ACM SIGGRAPH '84 Proceedings), 18(2), pp. 212-222. 198
- [104] Meškov, V., Jepenešnikov, M.M. Osvětlovací soustavy. Praha : SNTL 1979, 366 stran, 04 527 79
- [105] Svason analysys system Inc., Ansys User's Manual., USA registered ISO 9001: 2000, Huston 2003
- [106] Vijay P. Singh, Computer Models of Watershed Hydrology. Water Resource Publications, pgs. 563-594 (1995)
- [107] Steven Grant, I K Iskandar, Contaminant Hydrology. CRC Press 2000, ISBN 1-56670-476-6
- [108] Gibson, Ian; Kvan, Thomas & Ming, Ling Wai; *Rapid prototyping for architectural models*. University of Hong Kong, Rapid Prototyping, Volume 8, Number 2, 2002, Pages 91–99
- [109] Gary Fisher, Application Portability Profile : The U.S. Government's Open System Environment Profile. OSE/1 Version 2.0. NIST Special Publication 500-210, June 1993.
- [110] John Hutchins, *Retrospect and prospect in computer-based translation*. Proceedings of MT Summit VII, 1999, pp. 30–44.
- [111] Janírek, M. S. *Analýza tepelné ztráty větráním pro různě definovaná množství větracího vzduchu*. Fakulta strojního inženýrství, Vysoké učení technické v Brně, 2008. 76 s.
- [112] T. Gerstner, M. Griebel, M. Holtz, R. Goschnick, M. Haep, Numerical Simulation for Asset-Liability Management in Life Insurance. Springer Berlin Heidelberg 2008, Technology for the Future, ISBN 978-3-540-77202-6
- [113] Goebel, Rafal; Sanfelice, Ricardo G.; Teel, Andrew R. Hybrid dynamical système. IEEE Control Systems Magazine 2009 / 29 (2): 28–93, doi:10.1109/MCS.2008.931718

Abstrakt

Habilitační práce se zabývá způsobem využití hybridních numerických metod a fyzikálních analogií pro řešení praktických úloh materiálového inženýrství, přechodové analýzy stacionárního elektromagnetického pole, experimentální metody měření vlivu magnetické susceptibility na MR obraz, numerického modelování vlivu magnetické susceptibility na MR obraz MKP a příkladu řešeném hybridní teplotně radiační metodou.

Práce ukazuje využití hybridních modelů na třech různých typech úloh řešení numericko – numerickou hybridní metodou v kapitole 5, numericko – analytickou hybridní metodou v kapitole 7 a numericko – experimentální hybridní metodou v kapitole 8. Výsledky úloh řešených hybridními numerickými metodami a fyzikálními analogiemi vykazují velmi dobrou shodu s výsledky získanými experimentálním ověřením.

Abstract

Habilitation thesis deals with the way of hybrid numerical methods and physical analogy can be used for solving practical problems the materials engineering, the transient analysis of stationary electromagnetic fields, experimental measurement methods for magnetic susceptibility effects in the MR image, numerical modeling of magnetic susceptibility in the MR image solved by FEM method and example of the hybrid heat radiation method solution.

The work shows a hybrid models solution on three different types of problems numerical - numeric hybrid method in Chapter 5, numerical – analytic hybrid method in chapter 7 and numerical - experimental hybrid method in chapter 8. The hybrid numerical methods and physical analogies of the tasks were verified the experimental results and shows very good agreement.