



KATEDRA TECHNOLOGII
INFORMATYCZNYCH
W INŻYNIERII

75 LAT
WYDZIAŁU
INŻYNIERII
LĄDOWEJ

Wybrane zastosowania metod obliczeniowych w inżynierii lądowej

pod redakcją
Marka Słońskiego



Kraków 2021

PRZEWODNICZĄCY KOLEGIUM REDAKCYJNEGO WYDAWNICTWA POLITECHNIKI KRAKOWSKIEJ
Tomasz Kapecki

PRZEWODNICZĄCY KOLEGIUM REDAKCYJNEGO WYDAWNICTW NAUKOWYCH
Jacek Pietraszek

REDAKTOR SERII
Wydział Inżynierii Lądowej
Andrzej Winnicki

REDAKTOR PROWADZĄCY
Witold Cecot

RECENZENCI
Wojciech Sumelka
Zdzisław Więckowski

SEKRETARZ SEKCJI
Marta Wlazło

OPRACOWANIE REDAKCYJNE
Dorota Sapek

SKŁAD I ŁAMANIE
Marek Słoński

PROJEKT OKŁADKI
Karolina Szafran

© Copyright by Politechnika Krakowska

ISBN 978-83-66531-89-5

Wydawnictwo PK, ul. Skarżyńskiego 1, 31-866 Kraków; tel. 12 628 37 25, fax 12 628 37 60
e-mail: wydawnictwo@pk.edu.pl www.wydawnictwo.pk.edu.pl
Adres do korespondencji: ul. Warszawska 24, 31-155 Kraków

Druk i oprawę wykonano w Dziale Poligrafii Politechniki Krakowskiej.
Ark. wyd. 6,5

SPIS TREŚCI

M. SŁOŃSKI

Wstęp 5

J. PAMIN, M. MUCHA

Analiza MES wybranych zagadnień wyboczenia konstrukcji7

S. MILEWSKI

Wybrane kombinacje metod obliczeniowych i ich zastosowania w inżynierii27

M. PAZDANOWSKI

Wybrane aspekty niektórych zastosowań uogólnionej metody różnic skończonych
w analizie naprężeń resztkowych67

J. MAGIERA

Zbieżność iteracyjnej estymacji błędu *a posteriori* danych eksperymentalnych
metodą aproksymacji fizycznie uzasadnionej95

WSTĘP

Niniejsza monografia zawiera rozdziały przygotowane przez pracowników Katedry Technologii Informatycznych w Inżynierii (L-10) z okazji 75. rocznicy powstania Politechniki Krakowskiej oraz podobnego jubileuszu Wydziału Inżynierii Lądowej, do którego należy Katedra L-10. Rozdziały te dobrze charakteryzują profil podstawowej aktywności naukowej Katedry, dotyczący rozwijania zastosowań metod obliczeniowych w mechanice materiałów i konstrukcji oraz inżynierii lądowej w ostatnich latach.

Metody obliczeniowe takie jak metoda elementów skończonych (MES), metoda różnic skończonych oraz ich różne kombinacje i warianty mają liczne zastosowania w nauce i przemyśle. Te metody pozwalają na tworzenie oprogramowania służącego do symulacji zjawisk fizycznych opisanych przez zaawansowane modele fizyczne i matematyczne. Dzięki takim symulacjom możemy lepiej zrozumieć otaczający nas świat materialny a także przewidywać rozwój zjawisk fizycznych i procesów technologicznych oraz poszukiwać optymalnych rozwiązań projektowych.

W pierwszym rozdziale niniejszej monografii zajęto się analizą trzech wybranych zagadnień utraty stateczności przez wyboczenie metodą elementów skończonych. Najpierw przedstawiono krótki przegląd literatury przedmiotu i omówiono dwa podstawowe algebraiczne formaty analizy wyboczenia. Następnie przedstawiono wyniki rozwiązania numerycznego klasycznego zadania liniowego wyboczenia pręta ściskanego, rezultaty geometrycznie nieliniowej symulacji ściskanej radialnie powłoki walcowej z imperfekcją oraz porównanie wyników liniowej i nieliniowej analizy zagadnienia ściskania prostokątnej tarczy modelami dwuwymiarowymi (2D) i trójwymiarowymi (3D).

Tematykę drugiego rozdziału stanowi analiza numeryczna rozmaitych zagadnień termicznych (stacjonarnych i niestacjonarnych), mechanicznych (liniowych) oraz sprzężonych problemów termomechanicznych, z uwzględnieniem efektów czasowych za pomocą wybranych kombinacji metod obliczeniowych. Są to metoda elementów skończonych (MES), bezsiatkowa metoda różnic skończonych (BMRS), algorytmy genetyczne i metoda Monte Carlo. Rozwiązywane zagadnienia mają bezpośrednie odniesienia do analizy problemów napotykaných w inżynierii lądowej.

W rozdziale zostały opisane cztery kombinacje metod obliczeniowych:

1. Połączenie MES i BMRS typu równoległego na poziomie dyskretyzacji zadania.
2. Połączenie sprzężone MES i BMRS na poziomie aproksymacji zadania.
3. Połączenie MES i algorytmów genetycznych w procesie optymalizacji.
4. Połączenie BMRS i metody Monte Carlo dla zadań wprost i odwrotnych.

Dla każdej kombinacji, oprócz jej ogólnej charakterystyki, zaprezentowano także wyniki przykładowych analiz numerycznych.

W trzecim rozdziale niniejszej monografii przedstawiono analizę naprężeń resztkowych powstających w szynach kolejowych w trakcie eksploatacji. W tym celu wykorzystano wariant Metody Różnic Skończonych uogólnionej na dowolnie nieregularne siatki węzłów (UMRS). W niniejszym rozdziale opisano oryginalny model mechaniczny oraz model obliczeniowy UMRS. Przedstawiono również sposoby poprawy zbieżności rozwiązywanego finalnie zadania minimalizacji. Część praktyczna rozdziału zawiera obliczenia testowe oraz przykładową analizę naprężeń resztkowych w typowej szynie kolejowej.

Czwarty rozdział zawiera wybrane wyniki badania zbieżności iteracyjnej metody oszacowania błędu *a posteriori* danych eksperymentalnych z wykorzystaniem aproksymacji fizycznie uzasadnionej zastosowanej do pól naprężeń resztkowych analizowanych w szynach kolejowych badanych metodą neutronografii. W pracy podjęto próbę wykazania zbieżności oszacowań iteracyjnej metody estymacji błędu *a posteriori* i uzyskano jej numeryczne potwierdzenie.

Marek Słoński

Edytor

Jerzy PAMIN*, Marzena MUCHA**

ANALIZA MES WYBRANYCH ZAGADNIĘ WYBOCZENIA KONSTRUKCJI

FE ANALYSIS OF SELECTED PROBLEMS OF STRUCTURAL BUCKLING

Streszczenie

W pracy zajęto się analizą trzech wybranych zagadnień utraty stateczności przez wyboczenie metodą elementów skończonych. Najpierw przedstawiono krótki przegląd literatury przedmiotu i omówiono dwa podstawowe algebraiczne formaty analizy wyboczenia. Następnie przedstawiono wyniki rozwiązania numerycznego klasycznego zadania liniowego wyboczenia pręta ściskanego, rezultaty geometrycznie nieliniowej symulacji ściskanej radialnie powłoki walcowej z imperfekcją oraz porównanie wyników liniowej i nieliniowej analizy zagadnienia ściskania prostokątnej tarczy modelami dwu- i trójwymiarowymi. Zwrócono uwagę na interpretacje zaskakujących wyników obliczeń.

Słowa kluczowe: MES, wyboczenie, analiza nieliniowa, imperfekcje

Abstract

The paper deals with finite element analysis of three selected problems of loss of stability via buckling. First a short overview of relevant literature and discussion of two algebraic formats of buckling analysis are presented. Then the results of simulations are shown for: the classical linear buckling analysis of a bar in compression, the geometrically nonlinear analysis of imperfect cylindrical shell under radial pressure, and the comparison of linear and nonlinear analysis of buckling of a rectangular panel using two- and three-dimensional models. Particular attention is paid to surprising results of computations.

Keywords: FEM, buckling, nonlinear analysis, imperfections

*Prof. dr hab. inż., e-mail Jerzy.Pamin@pk.edu.pl Katedra Technologii Informatycznych w Inżynierii, Wydział Inżynierii Łądowej, Politechnika Krakowska

**Mgr inż., e-mail Marzena.Mucha@pk.edu.pl Katedra Technologii Informatycznych w Inżynierii, Wydział Inżynierii Łądowej, Politechnika Krakowska.

1. Wprowadzenie

Analiza stateczności konstrukcji była przez dziesięciolecia w centrum uwagi naukowców i inżynierów, bowiem nie tylko jest to tematyka niezwykle interesująca i trudna, ale także niedostateczna wiedza w tym zakresie prowadziła w historii do katastrof. Na tym polu badań w II połowie XX wieku, kiedy burzliwie rozwijały się modele i narzędzia analizy numerycznej, wyróżnili się naukowcy z Politechniki Krakowskiej, por. np. [6, 11, 17, 18]. Ten wątek pojawia się także w kontekście konstrukcji powłokowych w niedawno wydanej książce [12].

W ostatnich latach zaznaczył się wzrost zainteresowania badaniami naukowymi dotyczącymi niestatecznego zachowania materiałów niesprężystych, cf. [2, 3, 5, 9, 10]. Natomiast w tej publikacji zajęto się modelowaniem numerycznym wyboczenia układów sprężystych, posługując się albo rozwiązaniem uogólnionego problemu własnego, albo analizą geometrycznie nieliniową (dużych deformacji). Zwrócono uwagę na wpływ imperfekcji na zagadnienie wyboczenia, por. np. [14].

W tym pierwszym przypadku rozwiązuje się problem własny:

$$(\mathbf{K}_0 + \lambda \mathbf{K}_\sigma) \mathbf{v} = \mathbf{0} \quad (1)$$

gdzie \mathbf{K}_0 to macierz liniowej sztywności układu, \mathbf{K}_σ to macierz geometryczna (sztywności naprężeniowej) zależna od naprężeń w stanie przedwyciecznym wywołanym tzw. obciążeniem konfiguracyjnym. Rozwiązaniem jest zbiór wartości własnych λ_i i odpowiednich wektorów własnych \mathbf{v} , określających formy deformacji powycieczniowej, przy czym w rozwiązaniach numerycznych oblicza się tylko kilka najniższych wartości λ_i . Zazwyczaj inżyniera interesuje minimalna wartość własna, która jest krytycznym mnożnikiem obciążenia λ_{kr} , oraz odpowiadająca jej postać wyboczenia, opisana z dokładnością do skalarnego mnożnika przez wyznaczony wektor \mathbf{v}_{kr} .

Alternatywnie w zadaniu geometrycznie nieliniowym rozwiązuje się metodą Newtona-Raphsona sekwencję przyrostów obciążenia, w których poszukuje się spełnienia z wymaganą dokładnością równania równowagi:

$$\mathbf{K}_T \Delta \mathbf{u} = \Delta \mathbf{f} \quad (2)$$

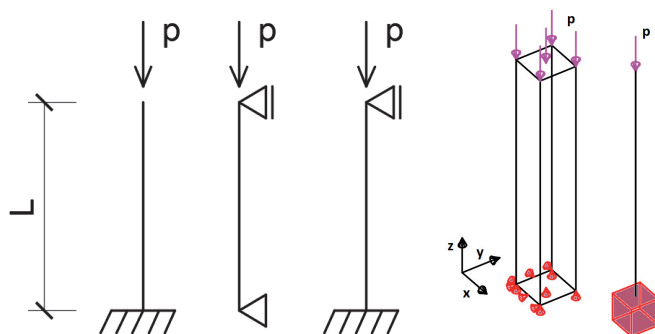
w którym \mathbf{K}_T to macierz styczna będąca sumą trzech macierzy: liniowej, geometrycznej i wstępnych przemieszczeń (ta ostatnia zależy od gradientów przemieszczenia w stanie przedwyciecznym), $\Delta \mathbf{f}$ to residuum, czyli różnica pomiędzy wektorem sił zewnętrznych i wewnętrznych, a $\Delta \mathbf{u}$ to poszukiwany przyrost wektora przemieszczenia (dla układu zdyskretyzowanego \mathbf{u} zawiera przemieszczenia węzłowe). Można udowodnić [17], że warunkiem stanu krytycznego, czyli albo punktu bifurkacji (utruty jednoznaczności rozwiązania), albo punktu granicznego (osiągnięcia nośności układu) jest osobliwość macierzy stycznej modelu:

$$\det \mathbf{K}_T = 0 \quad (3)$$

W tej publikacji założono, że materiał jest sprężysty, przy czym w punktach 2–4 założono liniowe związki Hooke’a, a w punkcie 5 porównano wyniki dla sprężystości liniowej i modelu dużych odkształceń z materiałem typu Neo-Hooke. W punkcie 2 zajęto się najprostszym zagadnieniem wyboczenia, a mianowicie prętem prostym, porównując wyniki symulacji różnymi modelami MES. W punkcie 3 przedstawiono wyniki analizy geometrycznie nieliniowej modelu powłoki walcowej z imperfekcjami. W punkcie 4 przedstawiona została symulacja wyboczenia konfiguracji nazwanej tarczą. Zależnie od wymiaru modelu możliwa była analiza wyboczenia z płaszczyzny tarczy lub jedynie w jej płaszczyźnie. Wreszcie w punkcie 5 dla dwuwymiarowej reprezentacji tarczy zastosowano model nieliniowej sprężystości Neo-Hooke zaimplementowany w pakiecie Ace w środowisku Mathematica. W analizie przykładów skupiono się na kontrowersyjnych wynikach. Celem pracy jest między innymi pokazanie, że nawet uznany pakiet MES może produkować wyniki niepoprawne (niezgodne z rozwiązaniem analitycznym) i konieczne jest krytyczne podejście do wyników symulacji numerycznych.

2. Analiza numeryczna wyboczenia pręta prostego

W tym punkcie zajęto się najprostszą analizą wyboczenia, czyli rozwiązaniem uogólnionego problemu własnego (1) za pomocą pakietu MES Abaqus [13]. W takiej analizie zakłada się, że ustrój liniowo-sprężysty jest idealny, a obciążenie jest zachowawcze (niezależne od deformacji) i jednoparametrowe.



Rys. 1. Warianty warunków brzegowych dla analizy Eulera pręta prostego oraz trójwymiarowy i prętowy model MES

Na rys. 1 przedstawiono warunki brzegowe dla słupa prostego w klasycznej analizie wyboczenia Eulera [15] oraz schematy modeli MES 3D i 1D. Analiza ma charakter studialny, więc nie podajemy jednostek fizycznych. Słup 1D ma długość 13 i kwadratowy przekrój poprzeczny o wymiarach 1×1 . Model 2D to model płaskiego stanu napręż-

nia o takiej samej geometrii, w którym wyboczenie może nastąpić tylko w płaszczyźnie modelu. W przypadku modelu 3D oprócz powyżej zdefiniowanej geometrii rozważono geometrię słupa krępego o wymiarach $4 \times 4 \times 13$ i smukłego o wymiarach $1 \times 1 \times 130$.

Założone parametry materiałowe mają arbitralne wartości: moduł Younga $E = 1000$, współczynnik Poissona $\nu = 0$. Siła ściskająca przyłożona jako obciążenie konfiguracyjne wynosi $P = 100$. Elementy 1D dostępne w Abaqusie są oparte na teorii belek Timoshenki [15] z liniową aproksymacją (element o symbolu B31) lub klasycznej teorii Bernoulliego-Eulera z aproksymacją sześcienną (B33). W przypadku słupa o wymiarach $1 \times 1 \times 13$ zbadano wpływ wymiarowości modelu i warunków podparcia na wyniki.

W obliczeniach 2D i 3D zastosowano początkowo elementy skończone o liniowej interpolacji (odpowiednio CPS4R i C3D8R). Przyjęto siatki elementów o rozmiarze $h = 0.2$. W modelu 3D zbadano też wpływ wariantu całkowania, wzbogacenia aproksymacji i zagęszczenia siatki ($h = 0.1$) na wyniki przy trzech proporcjach wymiarów słupa. W testach słupa smukłego i krępego zastosowano elementy o rozmiarze $h = 0.5$.

W Tabelach 1–3 przedstawiono otrzymane w obliczeniach MES krytyczne mnożniki obciążenia (pierwsza wartość własna). W Tabeli 1 porównano ich wartości dla modeli 1D w zestawieniu z analitycznie obliczonymi siłami krytycznymi według teorii Eulera P_E i Timoshenki P_T . Zgodnie z [15] wiąże je następujący wzór:

$$P_T = \frac{P_E}{1 + \frac{\kappa P_E}{GA}} \quad (4)$$

gdzie G to moduł Kirchhoffa, A to pole przekroju pręta, a dla przekroju kwadratowego współczynnik $\kappa = 1.2$. W przypadku modelu zdyskretyzowanego elementami B31 użyto trzech gęstości siatki: 4, 13 i 65 elementów. Wyniki otrzymane za pomocą modeli 1D dobrze zgadzają się z rozwiązaniami analitycznymi, a element o liniowej aproksymacji wykazuje zbieżność od góry do rozwiązania dla teorii Timoshenki niezależnie od warunków brzegowych.

Tabela 1. Krytyczne mnożniki obciążenia dla modeli 1D słupa o wymiarach $1 \times 1 \times 13$ i różnych warunkach brzegowych

Rodzaj podparcia	T(4)	T(13)	T(65)	P_T	E(13)	P_E
utwierdzenie	1.235	1.215	1.213	1.213	1.217	1.217
swobodne podparcie	5.175	4.844	4.813	4.810	4.867	4.867
utw.+podp. przesuwna	11.30	9.844	9.712	9.701	9.956	9.932

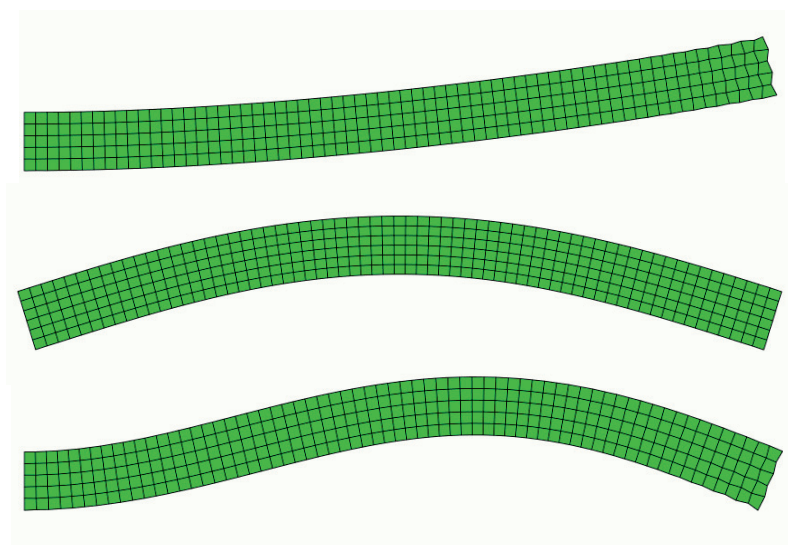
W Tabeli 2 porównano wartości siły krytycznej dla modeli 2D i 3D, zestawiając je z rozwiązaniami według dokładniejszej teorii Timoshenki. W modelu 3D użyto domyślnych elementów ośmiowęzłowych C3D8R ze zredukowanym całkowaniem. Modele

Tabela 2. Krytyczne mnożniki obciążenia dla proporcji wymiarów słupa $1 \times 1 \times 13$ i różnych warunków brzegowych, obliczone elementami 2D i 3D ze zredukowanym całkowaniem

Rodzaj podparcia	2D	3D($h = 0.2$)	3D($h = 0.1$)	P_T
utwierdzenie	-1.937	-2.205	-2.431	1.213
swobodne podparcie	4.695	4.586	4.705	4.810
utw.+podp. przesuwna	9.324	9.348	9.611	9.701

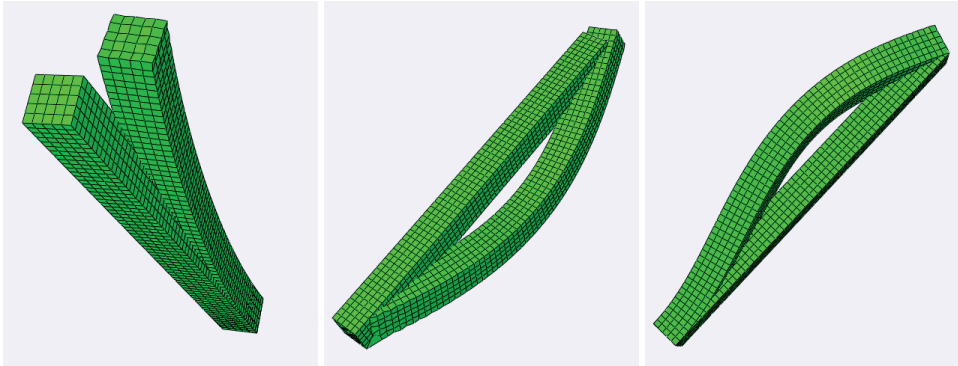
Tabela 3. Wyniki dla różnych wymiarów słupa utwierdzonego i wariantów elementów skończonych – model 3D

Wymiary	H8 RI	H8 FI	H8 IM	H20	P_T
1x1x13	-2.205	-2.735	-2.712	-2.625	1.213
1x1x130	$-2.139 \cdot 10^{-2}$	$-2.937 \cdot 10^{-2}$	$-2.839 \cdot 10^{-2}$	$-2.828 \cdot 10^{-2}$	$1.217 \cdot 10^{-2}$
4x4x13	$-4.753 \cdot 10^2$	$-5.759 \cdot 10^2$	$-5.7155 \cdot 10^2$	$-5.341 \cdot 10^2$	$2.976 \cdot 10^2$



Rys. 2. Formy wyboczenia otrzymane w modelu 2D dla 3 wariantów warunków brzegowych

2D i 3D dają wyniki dość odległe od rozwiązania analitycznego. Na rys. 2 przedstawiono formy wyboczenia uzyskane dla modelu 2D przy różnych wariantach warunków brzegowych. Przy prawym końcu można zauważyć formy klepsydrowe wynikające z zasto-



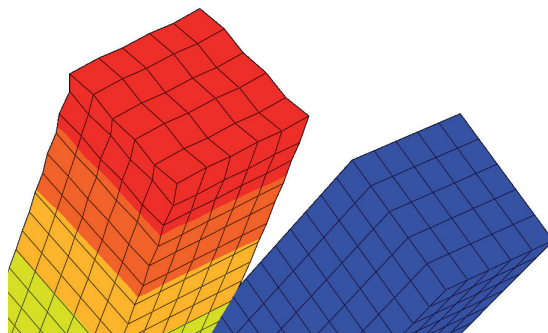
Rys. 3. Formy wyboczenia otrzymane w modelu 3D dla 3 wariantów warunków brzegowych

sowania RI. Jak pokazano w Tabeli 2, pierwsza wartość własna obliczona za pomocą modelu 3D zależy też znacząco od gęstości siatki MES, choć dla swobodnego podparcia pręta i warunków brzegowych typu utwierdzenie–swobodne podparcie wyniki wykazują zbieżność od dołu do rozwiązania analitycznego.

Dla wspornika pakiet Abaqus oblicza niepoprawną ujemną pierwszą wartość własną (niezależnie, czy stosowany jest algorytm Lanczosa, czy iteracji podprzestrzennych). Standardowo oznacza to albo że w modelu nie uwzględniono wymaganej liczby więzów, albo że powinno być przyłożone obciążenie przeciwnego znaku. Żaden z tych dwóch przypadków nie występuje w analizowanym modelu wspornika (model jest geometrycznie niezmienny, a obciążenie nie może być rozciągające). Należy wspomnieć, że w przypadku wspornika ze względu na symetrię przekroju i warunków brzegowych pierwsza i druga obliczona wartość własna są sobie równe.

Poszukując wyjaśnienia przyczyny niepoprawnych wyników, wykonano obliczenia wsporników o trzech geometriach dla różnych opcji elementów 3D, a wyniki zestawiono w Tabeli 3. W tej tabeli H8 RI (ang. *reduced integration*) oznacza element ośmiowęzłowy ze zredukowanym całkowaniem (C3D8R), tj. z 1 punktem Gaussa i kontrolą klepsydrowych form deformacji (ang. *hourglass control*), H8 FI (ang. *full integration*) element z pełnym całkowaniem $2 \times 2 \times 2$ (C3D8), H8 IM (ang. *incompatible modes*) element niedostosowany z pełnym całkowaniem, ale wzbogaconą o funkcje kwadratowe aproksymacją przemieszczeń (C3D8I), a H20 to dwudziestowęzłowy element o kwadratowej interpolacji i zredukowanym całkowaniu (C3D20R). Należy zauważyć, że przedostatni element H8 IM (C3D8I) bywa zalecany użytkownikom Abaqusa przy analizie zagadnień zginania, ale nie nadaje się do analizy zagadnień nieliniowych.

Na rys. 3 przedstawiono dyskretyzację i formy wyboczenia uzyskane przy użyciu modelu 3D, a na rys. 4 powiększenie sąsiedztwa swobodnego końca wspornika, na którym



Rys. 4. Zaburzenie deformacji słupa przy zredukowanym całkowaniu

widać zaburzenie deformacji modelu o charakterze form zeroenergetycznych, podobne jak w modelu 2D przy obciążonym końcu na rys. 2. Należy zaznaczyć, że efekt ten ma charakter lokalny i nie wydaje się wpływać na otrzymaną wartość mnożnika krytycznego oraz formę wyboczenia.

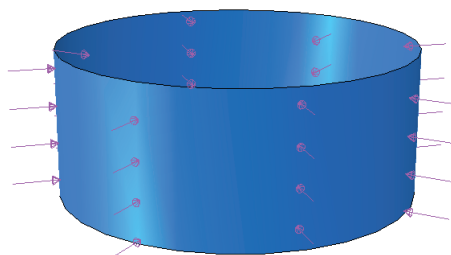
3. Symulacja wyboczenia powłoki walcowej z imperfekcjami

Drugie rozważane zagadnienie jest znacznie trudniejsze. Przedmiotem badań jest powłoka walcowa nieidealna, w której imperfekcja geometrii jest narzucona przez przeskalowany pierwszy wektor własny otrzymany z analizy problemu własnego. Przy implementacji w pakiecie Abaqus zastosowano podejście przedstawione w [1].

Analizowany model to powłoka cylindryczna o średnicy 34 m i wysokości 14 m. Założono stałą grubość powłoki 10 mm. Dolny brzeg powłoki jest utwierdzony, a górny usztywniono na całym obwodzie pierścieniem brzegowym, por. [4]. Przyjęto dane materiałowe stali: moduł Younga $E = 210$ GPa i współczynnik Poissona $\nu = 0.3$.

Najpierw został rozwiązany problem własny (1) przy założeniu obciążenia konfiguracyjnego stałym ciśnieniem zewnętrznym 1 kPa, przedstawiony na rys. 5. Siatka MES składa się z 214 elementów czworokątnych powłokowych S4R wzdłuż obwodu i 28 elementów wzdłuż wysokości, por. [4]. Element S4R jest zdegenerowanym elementem trójwymiarowym, uwzględniającym skończone odkształcenia membranowe i duże obroty, zredukowane całkowanie i kontrolę form klepsydrowych, por. [13]. Obliczony krytyczny mnożnik obciążenia to 2.62, a odpowiednia forma wyboczenia jest przedstawiona na rys. 6. Widoczny jest wpływ usztywnienia górnego brzegu belką obwodową.

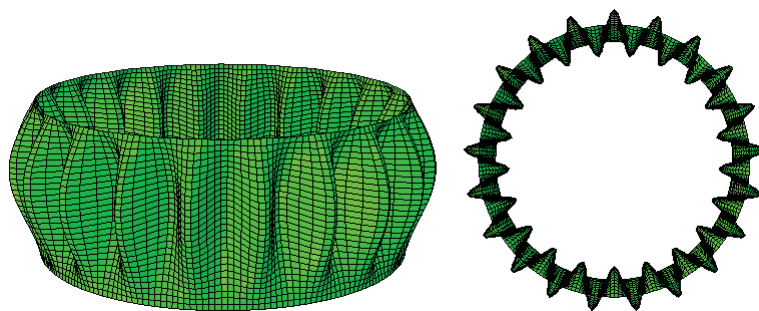
Na rys. 7 przedstawione zostały wykresy zależności mnożnika ciśnienia radialnego (oznaczonego LPF) od maksymalnego przemieszczenia prostopadłego do powłoki. Symulacje prowadzono algorytmem Newtona-Raphsona ze sterowaniem parametrem łuku (ang. *arc length control*, czyli algorytmem Riksa).



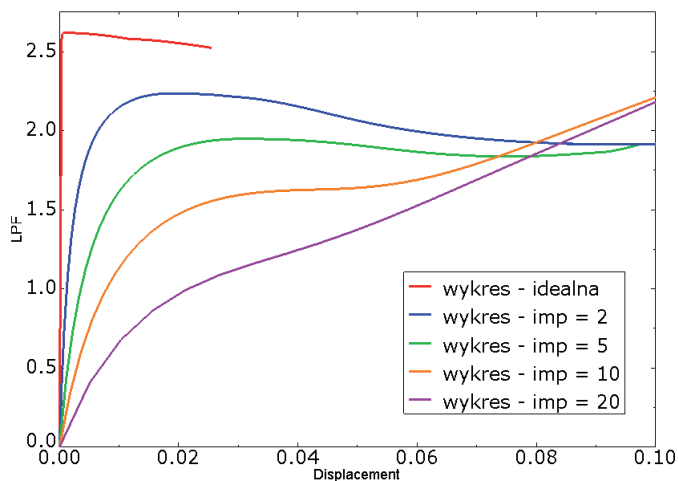
Rys. 5. Model powłoki walcowej z ciśnieniem radialnym

Dla modelu bez imperfekcji, zwanego nieprecyzyjnie powłoką idealną (oczywiście zawsze występuje w niej zaburzenie brzegowe) otrzymany wykres przybliży się zgodnie z oczekiwaniem do wartości krytycznej będącej rozwiązaniem problemu własnego 2.62. Pozostałe krzywe dotyczą przypadków rosnącej amplitudy imperfekcji: 2 mm, 5 mm, 10 mm (czyli równa grubości powłoki), 20 mm. Jak należało oczekiwać, zwiększanie się imperfekcji powoduje coraz większe przemieszczenia normalne ze wzrostem obciążenia. Dla amplitudy imperfekcji równej grubości powłoki zanika efekt osłabienia (ang. *snap through*), a przy dalszym wzroście imperfekcji symulowana ścieżka równowagi jest taka, jakby powłoka miała nieskończoną nośność, tzn. zależność obciążenia od przemieszczenia w stanie membranowo-giętnym zbliża się do odpowiedzi słabo nieliniowej. Ten wynik, zgodny z założoną w elementach S4R teorią dużych odkształceń membranowych, odbiega od racjonalności, ponieważ w modelu nie uwzględniono nieliniowości fizycznych (w przypadku powłoki stalowej uplastycznienia materiału).

Na rys. 8 przedstawione zostały formy deformacji powłoki symulowane dla imperfekcji 2 mm. Górny rysunek pokazuje deformacje przed osiągnięciem punktu granicznego (granicy nośności), a dolny pod koniec symulacji, gdy pojawia się lokalizacja wybo-



Rys. 6. Pierwsza forma wyboczenia idealnej powłoki walcowej



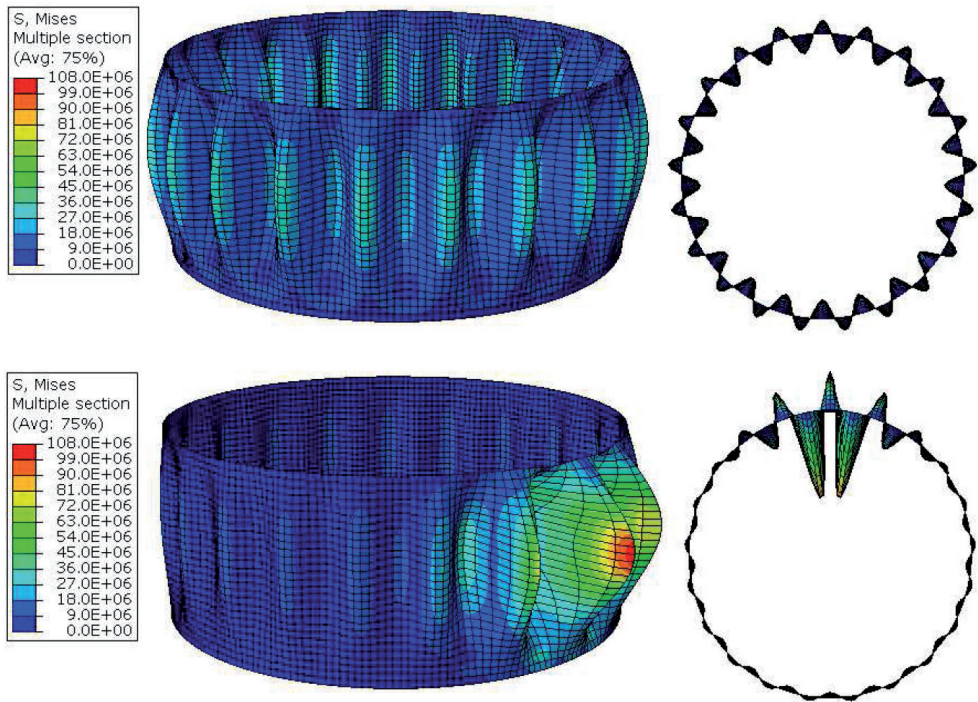
Rys. 7. Wykresy zależności mnożnika obciążenia od przemieszczenia normalnego do powłoki

czenia. Miejsce koncentracji przemieszczeń normalnych do powłoki i w konsekwencji maksymalnych naprężeń zredukowanych Hubera-Misesa-Hencky'ego (HMH) jest przypadkowe i wynika z błędów zaokrągleń w procedurze numerycznej.

4. Wyboczenie ściskanej tarczy

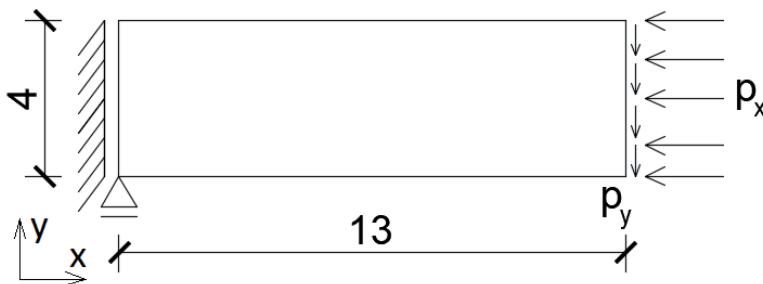
W tym punkcie zajęto się zagadnieniem wyboczenia prostokątnej tarczy wspornikowej jak na rys. 9. Obliczenia zostały przeprowadzone pakietem Abaqus przy użyciu modeli dwu- i trójwymiarowych. Warunki brzegowe po lewej stronie nie ograniczają efektu Poissona. W modelu 3D translacja w kierunku x jest niemożliwa, ponadto przekrój podporowy jest podparty na dwóch krawędziach, aby uniemożliwić translacje w kierunkach osi y i z . Wymiary tarczy to $L = 13$ i $H = 4$, grubość jest równa 1, moduł Younga $E = 1000$, a współczynnik Poissona $\nu = 0$ (ze względu na studialny charakter przykładu nie są podawane jednostki).

W teście wartości konfiguracyjnych obciążeń powierzchniowych to: $p_x = 100$ (to daje wypadkową siłę ściskającą $P = 400$) i $p_y = 2$ (wypadkowa obciążenia poprzecznego jest równa 8). Pierwszy analizowany przypadek to wyboczenie symulowane modelem 3D przy działaniu samego obciążenia p_x . Rozwiązanie problemu własnego daje dla trzech typów elementów skończonych: H8 RI (element sześciocienny o liniowej interpolacji ze zredukowanym całkowaniem i kontrolą form klepsydrowych), H8 FI (ten sam element z pełnym całkowaniem) i H20 (element o kwadratowej interpolacji) wartości własne przedstawione w kolumnach 2–4 Tabeli 4. Podobnie jak dla testu słupa, pierwsza wartość



Rys. 8. Deformacje modelu powłoki z imperfekcją o amplitudzie 2 mm dla dwóch stanów: przed punktem granicznym i pod koniec ścieżki równowagi (kolory oznaczają wartości naprężenia zstępczego zgodnie z hipotezą HMM)

własna jest ujemna. Dodatkowo zestawiono w tej tabeli wartości własne dla wyboczenia giętno-skrętnego pod działaniem obciążenia p_y zginającego tarczę w jej płaszczyźnie



Rys. 9. Geometria tarczy i konfiguracja obciążenia

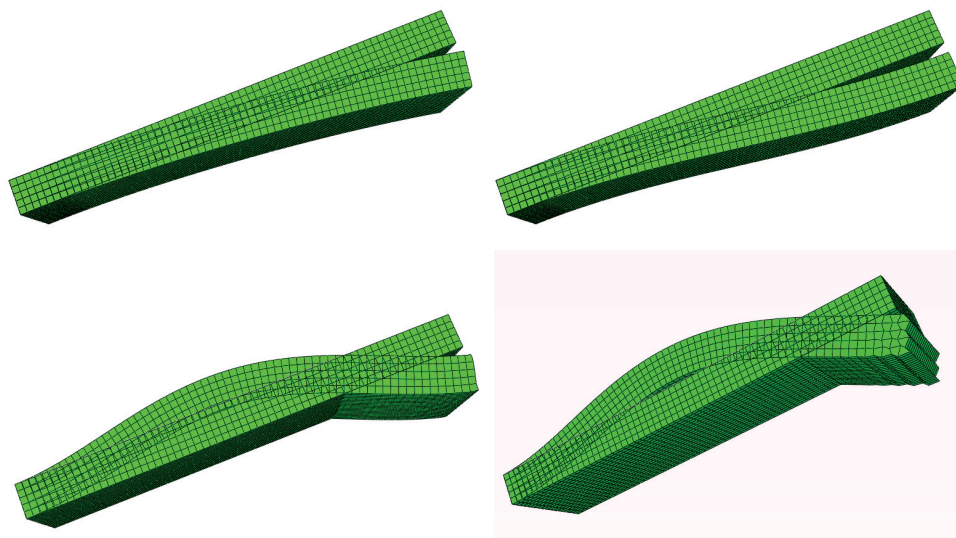
Tabela 4. Krytyczne mnożniki obciążenia dla modeli 3D wyboczenia giętnego dla obciążenia p_x i giętno-skrętnego dla obciążenia p_y , a także dla modeli 2D wyboczenia w płaszczyźnie

Wartość własna	H8 RI	H8 FI	H20	H20(p_y)	Q4 RI	Q8
pierwsza	-2.205e-2	-2.736e-2	-2.625e-2	1.3614	-0.2577	-0.2977
druga	3.607e-2	4.668e-2	4.442e-2	-1.3620	0.3986	0.4667
trzecia	0.1218	0.1459	0.1402	-2.3965	1.2035	1.3444

(kolumna 5) oraz dla wyboczenia w płaszczyźnie tarczy analizowanego modelem 2D (kolumny 6–7).

Oczywiście klasyczne wyboczenie modelu 3D wiąże się ze sprzężeniem ściskania ze zginaniem z płaszczyzny tarczy, która staje się płytą. Odpowiadające trzem wartościom własnym formy wyboczenia otrzymane za pomocą elementu H20 są przedstawione na rys. 10.

Z perspektywy analizy kolejnych form wyboczenia dla ustrojów prętowych mogłaby się pojawić wątpliwość, czy forma nr 2 jest jakościowo różna od formy nr 1. Jednak forma nr 1 wykazuje stały znak krzywizny, a forma nr 2 zmienny. Podobnie jak dla słupa, analiza zagadnienia modelami continuum dostarcza wyników jakościowo innych niż analiza

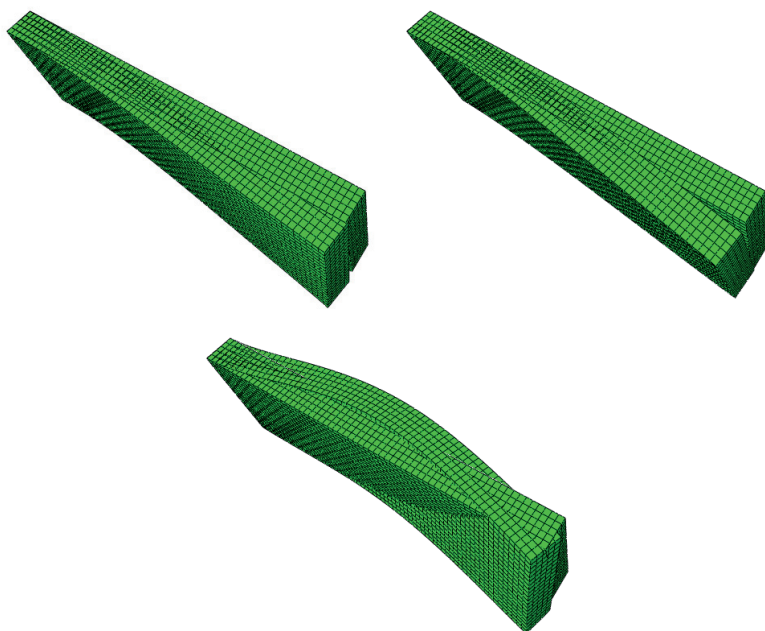


Rys. 10. Trzy pierwsze formy wyboczenia giętnego otrzymane w modelu 3D dla tarczy: w górnym rzędzie formy pierwsza i druga obliczone elementem H20, w dolnym rzędzie trzecia forma dla elementu H20 i dla elementu H8 RI

ustroju prętowego. Siła krytyczna Eulera dla wyboczenia giętnego modelu 3D wynosi 4.867 (obliczona numerycznie siła mieści się w przedziale 8.82–10.5), a dla wyboczenia giętnego modelu 3D jest 16 razy większa, tj. równa 77.87 (z symulacji 103.08–119.08).

Dodatkowo w rzędzie dolnym po prawej pokazano trzecią formę wyznaczoną przy interpolacji liniowej i zredukowanym całkowaniu. Na swobodnym końcu widać zniekształcenie deformacji przez formy zeroenergetyczne o charakterze klepsydrowym, choć zgodnie z dokumentacją pakietu ABAQUS element H8 RI jest wyposażony w kontrolę tych form i nie powinien ich wykazywać.

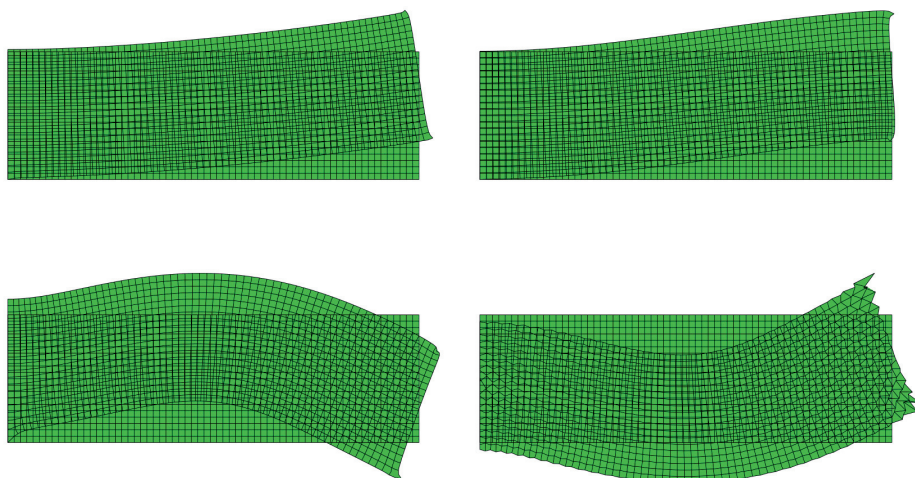
Giętno-skrętne formy wyboczenia odpowiadające czwartej kolumnie wyników w Tabeli 4 są przedstawione na rys. 11. Należy zwrócić uwagę, że w tym przypadku pierwsza wartość własna jest dodatnia, w pozostałe dwie ujemne. Pierwsza i druga mają w przybliżeniu równe moduły, a odpowiadające im formy zwichrzenia są podobne (wykazują odwrotne znaki skręcania).



Rys. 11. Trzy pierwsze formy wyboczenia giętno-skrętnego otrzymane przy użyciu elementu H20

Następnie wykonano obliczenia 2D przy założeniu płaskiego stanu naprężenia. Użyto elementów o liniowej interpolacji ze zredukowanym całkowaniem (Q4 RI) oraz elementów o kwadratowej interpolacji (Q8). Jak wspomniano, obliczone przez pakiet Abaqus wartości własne są zestawione w dwóch ostatnich kolumnach Tabeli 4. Formy wybo-

czenia otrzymane za pomocą elementu Q8 są przedstawione na rys. 12. W narożnikach widoczne są niefizyczne deformacje, a ponadto, jak dla przypadku 3D, pokazano zaburzoną formami zeroenergetycznymi trzecią formę wyboczenia dla elementu Q4 RI.



Rys. 12. Trzy pierwsze formy wyboczenia w płaszczyźnie tarczy otrzymane w modelu 2D przy użyciu elementu Q8 oraz trzecia forma wyboczenia dla elementu Q4 RI

5. Analiza 2D deformacji tarczy przy ściskaniu ze zginaniem

Następne obliczenia dla testu tarczy zostały przeprowadzone za pomocą pakietów numerycznych stworzonych na bazie programu Wolfram Mathematica [7, 8]. Pierwszy pakiet, AceGen, jest generatorem kodów, gdzie równania zapisywane są w metajęzyku, a następnie przetwarzane w kod, który może być użyty w innych programach. AceGen tworzy kody m.in. w językach C/C++/C#, Fortran (dla Abaqusa, Elfena oraz FEAP), a także w językach pakietów matematycznych Mathematica lub Matlab. Podstawową zaletą generatora AceGen jest automatyczne różniczkowanie oraz optymalizacja wyrażeń. Pozwala on na znaczącą efektywność pracy badacza przy generowaniu modeli. Drugi pakiet, AceFEM, jest silnikiem obliczeniowym metody elementów skończonych, w którym mogą zostać wykorzystane kody wygenerowane za pomocą AceGena w obrębie jednego środowiska.

Poniżej rozwiązano test tarczy prostokątnej opisany w poprzednim punkcie za pomocą dwóch modeli materiałowych. Pierwszy z nich to zwykły model Hooke'a dla małych

deformacji, drugi to model Neo-Hooke'a dla dużych deformacji sprężystych. Ten drugi model został szczegółowo opisany np. w rozdziale 5 w [8], dlatego poniżej podano tylko podstawowe informacje o nim.

Dla odkształcalnego ciała izotropowego o ciągłym rozkładzie masy wektor \mathbf{X} oznacza lokalizację początkową cząstki ciała w czasie t_0 , natomiast wektor \mathbf{x} oznacza położenie aktualne cząstki \mathbf{X} w chwili t . Funkcja $\mathbf{x} = \varphi(\mathbf{X}, t)$ opisuje ruch ciała. Gradient deformacji \mathbf{F} jest zdefiniowany standardowo jako:

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \varphi(\mathbf{X}, t)}{\partial \mathbf{X}} \quad (5)$$

W modelu Neo-Hooke energia sprężysta Hemholtza jest dana równaniem:

$$\psi(\mathbf{C}) = \frac{1}{2}\mu(\text{tr}\mathbf{C} - 3) + \frac{1}{4}\lambda(J^2 - 1) - (\mu + \frac{1}{2}\lambda)\ln J \quad (6)$$

gdzie μ i λ są stałymi Lamégo, \mathbf{C} to lewy tensor deformacji Cauchy–Greena, a J to wyznacznik gradientu deformacji \mathbf{F} .

Drugi tensor Pioli-Kirchhoffa jest dwukrotnością pochodnej potencjału sprężystego $\psi(\mathbf{C})$ po \mathbf{C} , zatem związek konstytutywny jest następujący:

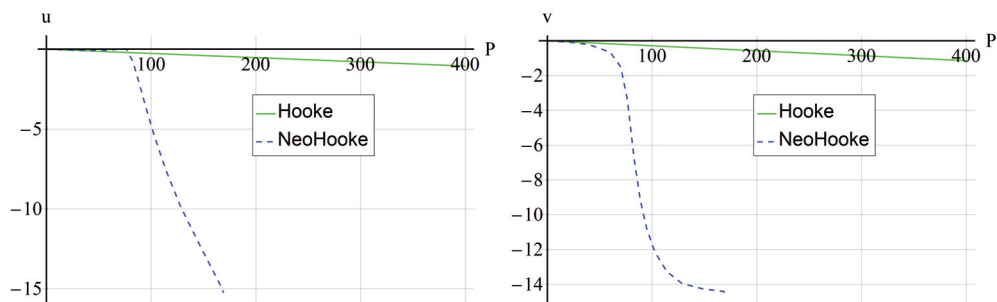
$$\mathbf{S} = \frac{\lambda}{2}(J^2 - 1)\mathbf{C}^{-1} + \mu(\mathbf{1} - \mathbf{C}^{-1}) \quad (7)$$

W teście przedstawionym na rys. 9 grubość tarczy jest jednostkowa, jak poprzednio moduł Younga $E = 1000$, współczynnik Poissona $\nu = 0$. Wartość konfiguracyjnego obciążenia powierzchniowego, ściskającego wspornik, wynosi $p_x = 100$, a wartość obciążenia poprzecznego wywołującego zginanie $p_y = 2$.

Zbadano dwa przypadki wzrostu obciążenia. W pierwszym oba obciążenia rosną proporcjonalnie, czyli ich wzrost jest skalowany jednym mnożnikiem. W drugim przypadku najpierw przyłożone zostaje tylko obciążenie p_x , a następnie p_x pozostaje stałe i przykładana jest siła p_y (oczywiście dla liniowej sprężystości można to zrobić w 2 krokach, ale dla modelu nieliniowego w procesie przyrostowym).

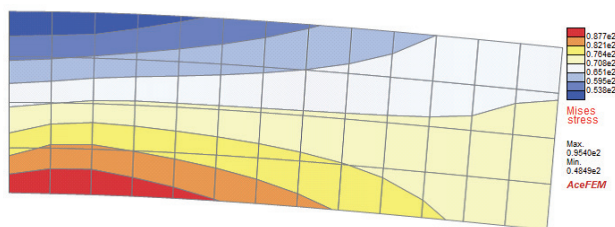
W przypadku pierwszym na rys. 13 przedstawiono zależności siły wypadkowej ściskającej P od przemieszczenia poziomego u i pionowego v prawego górnego wierzchołka tarczy, otrzymane dla stosowanych modeli.

Na rys. 14 przedstawiona została forma deformacji i naprężenia zredukowane otrzymane dla końcowego stanu liniowo sprężystych symulacji (por. rys. 13). Na rys. 15 po lewej przedstawiony został wykres zależności pierwszego współczynnika tensora Cauchy'ego oznaczonego S_{xx} od pierwszego współczynnika tensora Greena E_{xx} , otrzymany dla jednoosiowego ściskania. Natomiast na rys. 15 po prawej przedstawiona została deformacja i rozkład naprężeń zredukowanych otrzymanych dla końcowych stanów



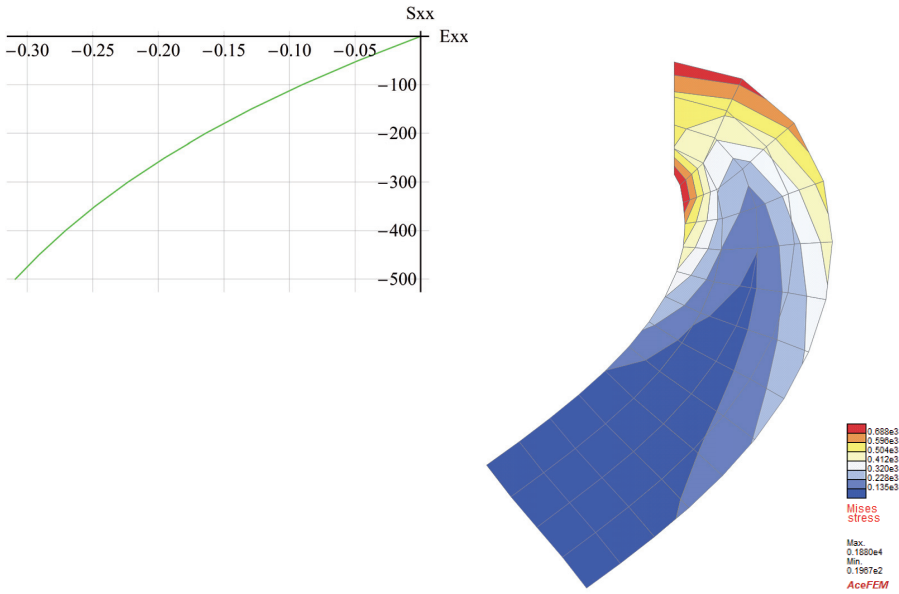
Rys. 13. Porównanie wykresu wypadkowej P obciążenia ściskającego p_x w funkcji przemieszczenia poziomego u i pionowego v prawego końca wspornika dla modeli liniowego i nieliniowego

z wykresów nieliniowych na rys. 13. Gwałtowny wzrost przemieszczeń dla modelu nieliniowego widoczny na tych wykresach jest związany z wyboczeniem, a modelowanie dużych deformacji umożliwia symulację ekstremalnego wygięcia wspornika. Należy zaznaczyć, że w modelu nie jest uwzględniona niestateczność materiałowa, por. np. [16].

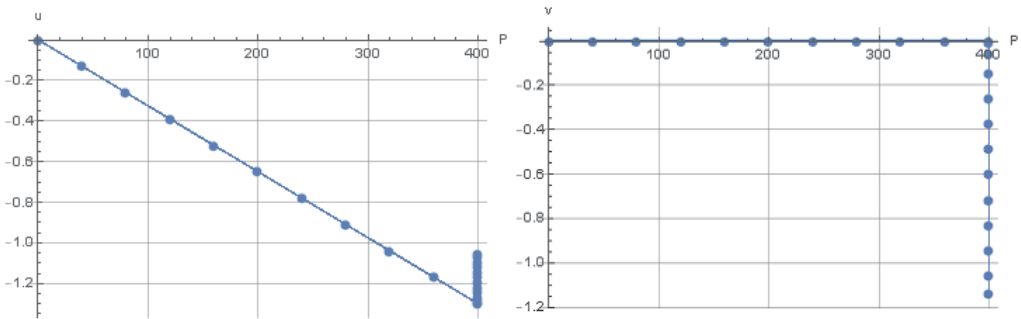


Rys. 14. Deformacja modelu liniowego wywołana ściskaniem sprzężonym ze zginaniem

W przypadku drugim, zależności siły wypadkowej ściskającej od przemieszczenia poziomego i pionowego prawego końca belki otrzymane dla modelu Hooke'a pokazano na rys. 16, natomiast dla modelu Neo-Hooke na rys. 17. Na rys. 18-19 widać różne zachowania wspornika w zależności od użytego modelu materiału. Dla modelu Hooke'a (przy małych deformacjach) po przyłożeniu obciążenia p_y tarcza zgina się w dół tak jak można oczekiwać. Natomiast dla modelu z dużymi deformacjami prawa część wspornika niespodziewanie unosi się w górę przy obciążeniu p_y działającym w dół. Wynika to z faktu, że sztywność materiału w geometrycznie nieliniowym modelu Neo-Hooke rośnie wraz z deformacją (por. rys. 15), więc bardziej podatna staje się mniej ściskana górna część wspornika. To przykład nieoczekiwanego wyniku symulacji numerycznej zachowania próbki z dominującymi naprężeniami ściskającymi.



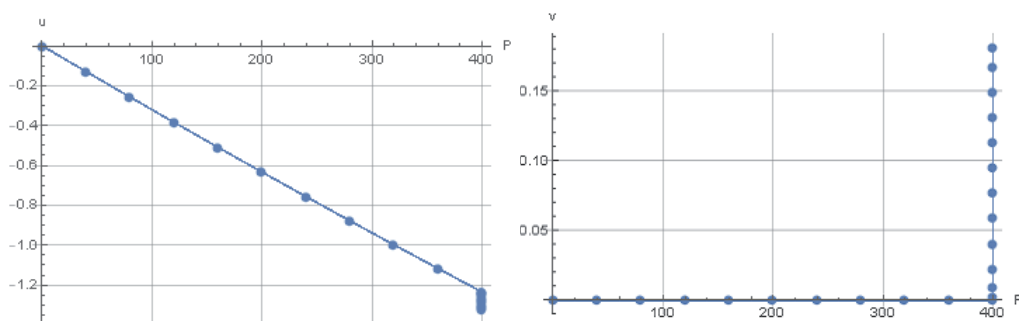
Rys. 15. Wykres zależności S_{xx} od E_{xx} w modelu Neo-Hooke i forma nieliniowej deformacji wywołanej ścisaniem sprzężonym ze zginaniem



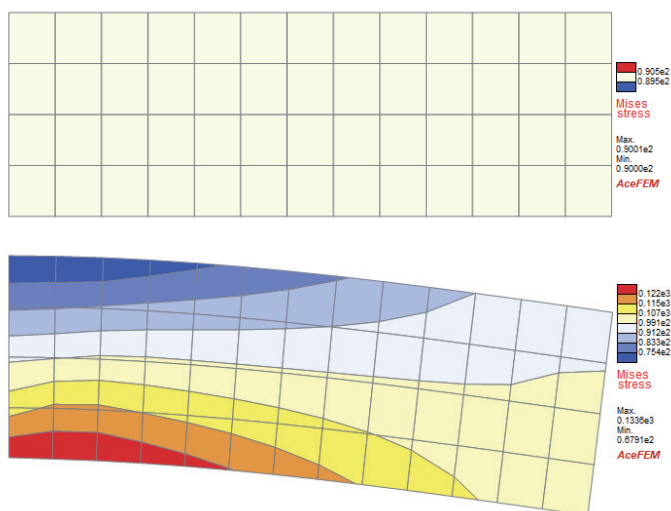
Rys. 16. Zależności wypadkowej P obciążenia ściskającego p_x od przemieszczenia poziomego u i pionowego v prawego końca wspornika dla modelu Hooke'a

6. Podsumowanie

W pracy zajęto się analizą MES trzech zagadnień niestatecznego zachowania się konstrukcji w postaci wyboczenia pręta prostego, powłoki walcowej i tarczy. Założono sprężyste zachowanie materiału. W pierwszym przypadku użyto modeli 1D, 2D i 3D, w drugim elementów powłokowych, a w trzecim porównano wyniki dla modeli 2D i 3D. Obliczenia zostały wykonane pakietami Abaqus i AceFEM.



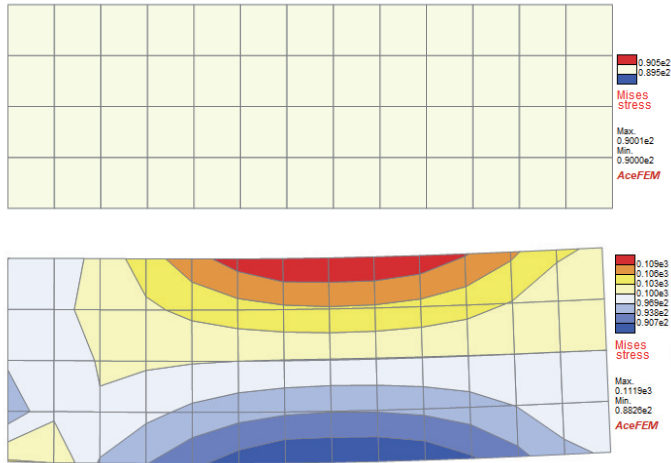
Rys. 17. Zależności wypadkowej P obciążenia ściskającego p_x od przemieszczenia poziomego u i pionowego v prawego końca wspornika dla modelu Neo-Hooke



Rys. 18. Wyniki dla modelu liniowego: rozkład naprężeń zredukowanych Hubera-Misesa dla tarczy poddanej ściskaniu tuż przed przyłożeniem siły p_y , a następnie na końcu procesu zginania

Z przedstawionych analiz można wyciągnąć następujące wnioski:

1. Pierwsze wartości własne obliczone dla modeli słupa 1D dobrze aproksymują rozwiązanie analityczne niezależnie od zastosowanej teorii belek i warunków podparcia, natomiast otrzymane modelami 2D i 3D są niższe od analitycznych dla swobodnego podparcia i warunków mieszanych (zamocowanie+przegub), a niepoprawne dla wspornika; zaskakujący jest szczególnie brak zgodności nawet dla smukłego wspornika o proporcjach $1 \times 1 \times 130$.



Rys. 19. Wyniki dla modelu z dużymi deformacjami: rozkład naprężeń zredukowanych Hubera-Misesa dla tarczy poddanej ścisnaniu tuż przed przyłożeniem siły p_y , a następnie na końcu procesu zginania

2. Niezależnie od algorytmu rozwiązania problemu własnego Abaqus liczy dla geometrii wspornika reprezentowanej modelem 2D lub 3D ujemną pierwszą wartość własną, co oczywiście nie oznacza, że należy przyłożyć obciążenie konfiguracyjne o odwrotnym znaku; otrzymane w przypadku tych modeli wartości krytycznego mnożnika obciążenia są niepoprawne.
3. Wartości własne zależą od typu interpolacji i całkowania w elemencie, a nie tylko od gęstości siatki MES.
4. Eliminacja form deformacji elementów zwana *hourglass control* przy zredukowanym całkowaniu (użyciu jednego punktu Gaussa w elementach czworobocznych i sześciokątnych) nie sprawdza się dostatecznie w zagadnieniach wyboczenia.
5. W geometrycznie nieliniowej analizie powłoki walcowej z zaburzeniem geometrii proporcjonalnym do pierwszej formy wyboczenia pojawia się zjawisko lokalizacji wyboczenia.
6. Analiza problemu własnego wyboczenia tarczy modelami 3D i 2D dostarcza giętych, giętko-skrętnych i płaskich form wyboczenia, przy czym Abaqus ponownie pokazuje niekiedy ujemne wartości własne, nie mające fizycznego uzasadnienia. Zapewne jest to wina solwera dla zagadnienia własnego, ale nie znaleziono na to jednoznacznego dowodu.

7. Symulacja testu ściskanej tarczy pokazuje, że obliczenia przeprowadzane różnymi modelami mogą dać nie tylko różne jakościowo rozwiązania, ale też wyniki zaskakujące. Różnice pomiędzy wynikami dla modelu Hooke'a i Neo-Hooke wynikają z faktu, że sztywność materiału w modelu Neo-Hooke rośnie wraz z deformacją. Z tego powodu bardziej podatna staje się część wspornika, która jest mniej ściskana, i wspornik wybacza się w kierunku odwrotnym niż przyłożona niewielka siła poprzeczna.

Należy także zwrócić uwagę, że wyniki przedstawionych analiz zmieniłyby się całkowicie, gdyby zrezygnowano z założenia o (liniowej) sprężystości materiału. Dopuszczenie w symulacjach uplastycznienia umożliwiłoby bardziej kompleksową i realistyczną ocenę obciążenia granicznego (nośności) badanych konfiguracji, a także analizę niestatecznego zachowania przy rozciąganiu w postaci szyjkowania. Ten ostatni typ analizy ma już jednak raczej charakter niestateczności materiałowej, por. np. [16].

Podziękowanie

Autorzy tej pracy wyrażają podziękowanie Marcinowi Chojnackiemu, autorowi pracy dyplomowej magisterskiej [4], za zgodę na wykorzystanie rysunków z tej pracy. Ponadto dziękujemy prof. Andrzejowi Winnickiemu za wskazówki dotyczące obliczeń obciążenia krytycznego zgodnie z teorią Timoshenki.

L i t e r a t u r a

- [1] E.J. Barbero. *Finite Element Analysis of Composite Materials*. CRC Press, Boca Raton, 2007.
- [2] Z. P. Bažant and L. Cedolin. *Stability of Structures: Elastic, Inelastic, Fracture and Damage Theories*. Oxford University Press, Oxford, 1991.
- [3] D. Bigoni. *Nonlinear Solid Mechanics: Bifurcation Theory and Material Instability*. Cambridge University Press, Cambridge, 2012.
- [4] M. Chojnacki. *Projekt zbiornika stalowego i nieliniowa analiza wyboczenia powłoki z imperfekcjami*. Praca dyplomowa magisterska, Politechnika Krakowska, Kraków, 2014.
- [5] R. de Borst and E. van der Giessen, editors. *Material Instabilities in Solids*, Chichester, 1998. IUTAM, John Wiley & Sons.
- [6] A. Gajewski and M. Życzkowski. *Optimal Structural Design under Stability Constraints*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht/Boston, 1988.

- [7] J. Korelc. Automation of the finite element method. In P. Wriggers, editor, *Non-linear finite element methods*, pages 483–508. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2008.
- [8] J. Korelc and P. Wriggers. *Automation of Finite Element Methods*. Springer International Publishing Switzerland, 2016.
- [9] Q.S. Nguyen. *Stability and nonlinear solid mechanics*. John Wiley & Sons, Chichester, 2000.
- [10] H. Petryk, editor. *Material instabilities in elastic and plastic solids*, Wien - New York, 2000. CISM Course Lecture Notes No. 414, Springer-Verlag.
- [11] M. Radwańska. *Ustroje powierzchniowe. Podstawy teoretyczne oraz rozwiązania analityczne i numeryczne*. Wydawnictwo Politechniki Krakowskiej, Kraków, 2009.
- [12] M. Radwańska, A. Stankiewicz, A. Wosatko, and J. Pamin. *Plate and Shell Structures. Selected Analytical and Finite Element Solutions*. Wiley, 2017.
- [13] SIMULIA. Abaqus Theory Manual (6.11). Dassault Systemes, Providence, RI, USA, 2011.
- [14] A. Steinboeck, X. Jia, G. Heofinger, and H.A. Mang. Conditions for symmetric, antisymmetric, and zero-stiffness bifurcation in view of imperfection sensitivity and insensitivity. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 197:3623–3636, 2008.
- [15] S. Timoshenko and J.M. Gere. *Theory of Elastic Stability*. McGraw-Hill, New York, second edition, 1961.
- [16] V. Tvergaard. Studies of elastic-plastic instabilities. *ASME J. Appl. Mech.*, 66:3–9, 1999.
- [17] Z. Waszczyszyn, Cz. Cichoń, and M. Radwańska. *Stability of Structures by Finite Element Method*. Elsevier, Amsterdam, 1994.
- [18] M. Życzkowski. *Combined Loadings in the Theory of Plasticity*. PWN-Nijhoff, Warszawa, 1981.

Sławomir MILEWSKI*

WYBRANE KOMBINACJE METOD OBLICZENIOWYCH I ICH ZASTOSOWANIA W INŻYNIERII

SELECTED COMBINATIONS OF COMPUTATIONAL METHODS AND THEIR APPLICATIONS IN ENGINEERING

Streszczenie

W pracy przedstawiono wybrane kombinacje metod obliczeniowych oraz rezultaty obliczeń dla wybranych zagadnień inżynierskich o charakterze termicznym, mechanicznym i termomechanicznym. Wśród kombinacji można wyróżnić rozmaite sposoby łączenia metody elementów skończonych oraz metody różnic skończonych w wersji bezsiatkowej, jak też połączenie podejść stochastycznych typu Monte Carlo czy algorytmy genetyczne z wyżej wymienionymi. Takie połączenia pozwalają na lepsze wykorzystanie zalet tych metod, jak mniej czasochłonna generacja dyskretyzacji obszaru, większa dokładność rozwiązania lub/i jego pochodnych, estymacja rozwiązania w punkcie, przy jednoczesnym zredukowaniu bądź wyeliminowaniu ich wad. Na szczególną uwagę zasługuje możliwość znacznie bardziej efektywnej analizy problemów odwrotnych, w których nieznanne jest obciążenie konstrukcji oraz problemów nieustalonych, w których historia zmian rozwiązania w czasie może być ograniczona tylko do jednego punktu.

Słowa kluczowe: kombinacje metod obliczeniowych, MES, metody bezsiatkowe, zagadnienia termomechaniczne, metoda Monte Carlo, algorytmy genetyczne

Abstract

The paper presents selected combinations of computational methods as well as the results of selected engineering problems of a thermal, mechanical and thermo-mechanical nature. Those combinations include various techniques of combining the finite element method and the finite difference method in the meshless version as well as the combination of stochastic approaches, like Monte Carlo or genetic algorithms with the above-mentioned ones. Such couplings allow for a more effective use of the advantages of these methods, namely less time-consuming generation of problem discretization, better accuracy of the solution and/or its derivatives, solution estimation at a selected point. On the other hand, reducing or eliminating their disadvantages is possible. Particularly noteworthy is the possibility of a much more

*Dr hab. inż., e-mail Sławomir.Milewski@pk.edu.pl Katedra Technologii Informatycznych w Inżynierii, Wydział Inżynierii Ładowej, Politechnika Krakowska.

effective analysis of inverse problems, in which the load subjected to the structure is unknown, and of transient problems, in which the history of solution changes in time may be limited to only one point.

Keywords: combinations of computational methods, FEM, meshless methods, termomechanical problems, Monte Carlo methods, genetic algorithms

1. Wprowadzenie

Rzeczywiste zjawiska termomechaniczne, zachodzące w konstrukcjach inżynierskich, możemy skutecznie analizować, budując ich odpowiednie modele. Podstawowym modelem, od którego zaczyna się ten złożony na ogół proces, jest model mechaniczny. Stanowi on zbiór hipotez i założeń upraszczających, odnoszących się do materiału, geometrii, warunków podparcia czy obciążenia. Im prostszy model, tym łatwiejsza jego późniejsza analiza, ale też większy błąd (zwany błędem nieuniknionym), jaki popełniamy już na tym wstępnym etapie.

Kolejnym modelem jest model matematyczny. Jest to opis modelu mechanicznego w formalizmie matematyki, czyli relacje pomiędzy różnymi polami fizycznymi, wynikające ze wszystkich powyższych założeń modelu mechanicznego. Modelem matematycznym może być zarówno równanie wariacyjne, zagadnienie minimalizacji funkcjonału czy też układ równań różniczkowych cząstkowych, wszystkie z odpowiednimi warunkami brzegowymi (tzw. zagadnienie początkowo-brzegowe), jak i zadanie optymalizacji nieliniowej w obszarze ograniczonym. Bardzo rzadko daje się tak postawione zagadnienie rozwiązać, stosując metody i przekształcenia analityczne (jak np. bezpośrednie całkowanie równań). Jest to możliwe tylko przy wyjątkowo prostej postaci samego równania oraz kształcie obszaru zadania. Najczęściej takie zadanie musimy rozwiązywać numerycznie w sposób przybliżony.

Końcowym rezultatem jest zatem model numeryczny, który stanowi dyskretny (skończony) odpowiednik modelu matematycznego i może przykładowo prowadzić do układu równań algebraicznych (liniowych bądź nieliniowych) czy też uogólnionego problemu własnego. Błąd, jaki popełniamy na tym etapie, może być związany zarówno z dyskretyzacją obszaru zadania (czyli jego zamianą na zbiór węzłów lub/i elementów), jak i aproksymacją nieznanej funkcji ukrytej pod znakiem odpowiedniego operatora różniczkowego. Można go kontrolować o wiele łatwiej niż błąd nieunikniony, polepszając obydwie wymienione aspekty modelowania numerycznego (tzn. zagęszczając siatkę lub/i podnosząc stopień aproksymacji). W dalszej kolejności mówi się też o modelu informatycznym, którym jest program komputerowy (własny lub komercyjny) potrzebny do uruchomienia obliczeń i bazujący na modelu numerycznym. Pamiętać należy, iż każdy uzyskany wynik liczbowy musi zostać poddany krytycznej analizie, by zminimalizować ryzyko źle przyjętych parametrów modeli oraz zwykłego błędu ludzkiego.

Metody obliczeniowe, służące do budowy modelu numerycznego danego zjawiska, możemy klasyfikować na różne sposoby. Jedną z takich możliwych klasyfikacji dotyczy postępowania z obszarem zadania. Metody pseudoanalityczne lub półanalityczne zakładają ciągłą postać rozwiązania przybliżonego i jego pochodnych na całym obszarze, w postaci kombinacji funkcji bazowych, spełniających *a priori* warunki brzegowe (co jest wykonalne tylko dla prostych geometrycznych kształtów) oraz nieznanymi współczynnikami (metody energetyczne, metody residuów ważonych, metody bazujące na rozwinięciu w szereg Fouriera [30]). Drugą grupę stanowią tzw. metody siatek, w których to metodach aproksymację funkcji buduje się na podobnych zasadach, ale nie na całym obszarze, tylko na zbiorze podobszarów, powstałych z podziału obszaru na określony sposób. Funkcje bazowe nie spełniają warunków brzegowych, które wymusza się na inne sposoby, ale podstawowym problemem jest zapewnienie ciągłości funkcji (i jej pochodnych) na styku podobszarów. Właśnie ta grupa metod, pozwalająca na analizę obszarów o dowolnie złożonych geometriach, stała się powszechnie wykorzystywana w świecie inżynierii obliczeniowej.

Najstarszą metodą siatek sięgającą końca XIX wieku jest metoda różnic skończonych (MRS [28]). U jej podstaw leży zamiana obszaru zadania na siatkę węzłów (w klasycznej wersji metody, tylko regularną) oraz zamiana operatorów różniczkowych na różnicowe. Mimo swojej prostoty, wersja klasyczna MRS mogła służyć jedynie do rozwiązywania prostych liniowych zagadnień, sformułowanych na prostych obszarach. Dlatego już od połowy XX wieku była ona stopniowo wypierana przez rodzącą się wtedy metodę elementów skończonych (MES [35]), o wiele bardziej ogólną i dającą się łatwiej zautomatyzować. Dość powiedzieć, że ogromny wysiłek, który włożono w rozwijanie MES, zaowocował tym, iż metoda ta jest podstawą zdecydowanej większości systemów obliczeniowych inżynierii wszelkiego rodzaju, w tym oczywiście inżynierii lądowej. Warto nadmienić, iż MES ma bardzo dobrze opracowane podstawy matematyczne, w tym kryteria zbieżności rozwiązania przybliżonego, ale także analizę błędów, którą można przeprowadzić bez znajomości rozwiązania ścisłego.

Mimo swojej ogólności i wielu zalet, takie wady MES, jak przykładowo czasochłonna generacja i przebudowa siatki elementów, mała dokładność pochodnych rozwiązania, zjawisko blokady (usztywnienia) rozwiązania dla zadań mechanicznych czy też słaba dokładność rozwiązania dla zadań geometrycznie nieliniowych, poskutkowało poszukiwaniami nowych metod obliczeniowych, zazwyczaj bardziej skutecznych w określonych zastosowaniach. Koniec lat 70. XX wieku przyniósł gwałtowny rozwój metody elementów brzegowych (MEB [4, 33]), w której dyskretyzacji podlega brzeg obszaru (co pozwala na redukcję wymiaru zadania o jeden). Już od wczesnych lat 70. XX wieku rozwijana była nowatorska wersja MRS ([29, 34], także w Polsce [15]), uogólniona na siatki dowolnie nieregularne. W latach 90. XX wieku zaliczona została ona do szerokiej klasy metod bezsiatkowych (MB [14, 16, 17]) i zyskała nazwę bezsiatkowa metoda różnic skończonych

(BMRS [21, 28]). W metodach bezsiatkowych aproksymację funkcji buduje się, wykorzystując same węzły, bez struktury regularnej, elementu skończonego czy ograniczeń rzutowania. Dzięki temu wszelkie operacje na węzłach, typu przesuwanie, dodawanie, odejmowanie, nie wpływają na topologię całej dyskretyzacji, jak ma to miejsce w MES. Dodatkowo metody bezsiatkowe wykorzystują różne techniki aproksymacji nieznanej funkcji, jak podział jedności, kriging, funkcje sklejjane, czy też technikę lokalnej aproksymacji za pomocą najmniejszych ważonych ruchomych kwadratów (*Moving Weighted Least Squares* MWLS [12, 13], która jest powszechnie stosowana w BMRS [20, 21, 28]).

Inny sposób podziału metod obliczeniowych wykorzystywany w tym opracowaniu to metody twarde (deterministyczne) i metody miękkie (stochastyczne lub probabilistyczne). W metodach twardych (MRS, MES, MEB, MB) dla ustalonego zbioru parametrów zadania (obciążenie, materiał, geometria), przechodząc przez dyskretyzację obszaru i aproksymację nieznanej funkcji, otrzymujemy jedno rozwiązanie odpowiadające temu zbiorowi. W metodach miękkich (metoda Monte Carlo (MC [5, 19, 22, 32]), algorytmy genetyczne (AG [6, 18, 23]) i ewolucyjne (AE [2]), zbiory rozmyte [26], sieci neuronowe [31]) brana jest pod uwagę losowość i niepewność parametrów modelu, wykorzystywane są procesy stochastyczne oraz metody estymacji rezultatów, co prowadzi do rodziny rozwiązań, z której należy wyłonić najlepsze rozwiązanie, przyjmując odpowiednie kryteria.

Algorytmy genetyczne (AG) są grupą probabilistycznych metod przeszukiwania przestrzeni dopuszczalnych rozwiązań w celu znalezienia optymalnego rozwiązania odpowiedniego zagadnienia optymalizacji [30]. Chociaż charakteryzują się powolną zbieżnością, pozwalają na skuteczne rozwiązywanie problemów wypukłych i niewypukłych (związanych z postacią funkcji celu). Funkcjonowanie AG nieprzypadkowo przypomina zjawiska ewolucji biologicznej, ponieważ ich twórca, J.H. Holland [8], czerpał inspirację z nauk biologicznych. W AG problem definiowany jest jako środowisko, w którym istnieje pewna populacja jednostek. Każdemu z osobników przypisuje się pewien zestaw informacji stanowiących jego genotyp, który jest podstawą do stworzenia fenotypu. Fenotyp jest zbiorem cech pozwalających na oszacowanie wartości funkcji celu modelującej środowisko. Innymi słowy, genotyp opisuje proponowane rozwiązanie zadania, a funkcja celu (fenotyp) ocenia, jak dobre jest to rozwiązanie. Sam genotyp składa się z chromosomów, w których kodowany jest fenotyp i ewentualnie niektóre informacje pomocnicze dla algorytmu genetycznego. W najprostszym przypadku chromosom składa się z genów, które są cyframi binarnymi (tj. bitami 0 lub 1). Ponadto w szerszej klasie algorytmów ewolucyjnych (AE) chromosomy mogą również reprezentować liczby dziesiętne. Początkowa populacja jest generowana losowo lub tworzona na podstawie wstępnych informacji dotyczących środowiska. Populacja ta podlega ciągłym modyfikacjom, poprzez określoną z góry bądź kontrolowaną na bieżąco liczbę pokoleń genetycznych za pomocą operatorów genetycznych, przykładowo selekcji, krzyżowania, mutacji i innych.

Z kolei idea podejścia probabilistycznego, nazwanego metodą Monte Carlo i opracowanego przez S. Ulama i J. von Neumanna [19], bazuje na wykonaniu szeregu symulacji (prób), reprezentujących analizowane zagadnienie z losowo wybranymi wartościami wejściowymi. Liczba prób zakończonych powodzeniem odniesiona do liczby wszystkich prób, przeskalowana przez wielkość wymiarową (długość, powierzchnia, objętość, wartość funkcji) pozwala na oszacowanie nieznanego rozwiązania, pod warunkiem że liczba prób jest wystarczająco duża. Ta prosta koncepcja została wykorzystana w różnych zagadnieniach algebraicznych i różniczkowych, w których określenie rozwiązania może być kłopotliwe (np. w dużych przestrzeniach) lub nawet praktycznie niemożliwe przy użyciu analitycznych metod i deterministycznych narzędzi numerycznych.

W niniejszym opracowaniu metoda Monte Carlo znajduje zastosowanie w oszacowaniu rozwiązywania zagadnień brzegowych w wybranych punktach wewnętrznych obszaru zadania. Seria prób przeprowadzana jest za pomocą techniki stochastycznej, zwanej losowymi ścieżkami (*random walks*), a mianowicie losowego wyboru trasy prowadzącej od rozważanego punktu wewnętrznego (z nieznaną wartością rozwiązania) do punktów położonych na brzegu obszaru, gdzie rozwiązanie jest znane (z warunków brzegowych podstawowego typu). Przykładowo całkowita suma wszystkich liczbowych wskazań brzegowych (trafienia brzegowe), przeskalowana przez dane wartości brzegowe i odniesiona do liczby wszystkich losowych ścieżek, szacuje rozwiązanie równania Laplace'a w tym konkretnym punkcie. W rzeczywistości jest ona zbieżna do rozwiązania MRS, pod warunkiem iż liczba losowych ścieżek jest wystarczająco duża. Co więcej każda ścieżka składa się z serii losowych ruchów od węzła do węzła, które można uznać za elementy łańcucha Markowa.

W najprostszym przypadku wszystkie kierunki ruchu i rozmiar kroku (odległość pomiędzy sąsiednimi węzłami) są wstępnie zdefiniowane (np. w przypadku użycia regularnej siatki punktów), co prowadzi do tzw. ustalonej losowej ścieżki. Ta prosta koncepcja została w późniejszych latach udoskonalona i rozszerzona na większą liczbę zagadnień. W tym opracowaniu uwagę poświęcono połączeniu MC z BMRS, co skutkuje algorytmem pozwalającym na oszacowanie rozwiązania w punkcie, dla szerszej klasy zadań brzegowych, z nieregularnymi chmurami węzłów, wygenerowanymi dla obszarów o złożonej geometrii.

2. Sformułowanie zagadnienia termomechanicznego

Tematykę opracowania stanowi analiza numeryczna rozmaitych zagadnień termicznych (stacjonarnych i niestacjonarnych), mechanicznych (liniowych) oraz sprzężonych zagadnień termomechanicznych, z uwzględnieniem efektów czasowych. Najbardziej ogólne sformułowanie takiego sprzężonego zadania można podać w następujący sposób: znaleźć skalarną funkcję temperatury (T) i wektorową funkcję przemieszczeń (\mathbf{u}), które

spełniają odpowiednie równania różniczkowe i warunki początkowo-brzegowe natury termicznej

$$\begin{aligned} c\rho\dot{T} + \operatorname{div} \mathbf{q} &= f \quad \text{w } \Omega \\ T &= \bar{T} \quad \text{na } \partial\Omega_T, \quad \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = \bar{q} \quad \text{na } \partial\Omega_q, \quad T = 0 \quad \text{dla } t = 0 \end{aligned} \quad (1)$$

i mechanicznej (przy założeniu małych przemieszczeń, gdy $\|\mathbf{u}\| \ll |\Omega|$)

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} &= \mathbf{0} \quad \text{w } \Omega \\ \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} &= \bar{\mathbf{t}} \quad \text{na } \partial\Omega_t, \quad \mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{na } \partial\Omega_u, \quad \mathbf{u} = \mathbf{0} \quad \text{dla } t = 0 \end{aligned} \quad (2)$$

W powyższych równaniach ρ oznacza gęstość masy, c ciepło właściwie, $T = T(\mathbf{x}) \in \mathfrak{R} \subset C^2$ nieznaną funkcję temperatury, \bar{T} temperaturę przypisaną do brzegu, \mathbf{q} nieznaną wektor strumienia ciepła, \bar{q} strumień ciepła przypisany do brzegu w kierunku normalnym, f intensywność generacji ciepła wewnątrz obszaru (tzw. źródło ciepła), $\boldsymbol{\sigma}$ tensor naprężenia drugiego rzędu wynikający z $\boldsymbol{\varepsilon}$ tensora odkształcenia drugiego rzędu, \mathbf{b} wektor sił masowych, $\bar{\mathbf{t}}$ wektor naprężenia, przypisany do brzegu, $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}) \in \mathfrak{R}^n \subset C^2$ nieznaną wektor przemieszczenia i $\bar{\mathbf{u}}$ wektor przemieszczenia przypisany do brzegu. Wymiar n może być równy 1 (przypadek 1D, przykładowo konstrukcje prętowe), 2 (przypadek 2D, przykładowo zadania płaskie (PSO lub PSN) i osiowo-symetryczne) lub 3 (ogólny przypadek 3D). Ponadto Ω oznacza dziedzinę (obszar) zadania, a $\partial\Omega_T$ i $\partial\Omega_q$ oraz niezależnie $\partial\Omega_t$ i $\partial\Omega_u$ są częściami brzegu obszaru $\partial\Omega$ z odpowiednio danymi warunkami brzegowymi, podczas gdy \mathbf{n} jest wektorem normalnym do brzegu i skierowanym na zewnątrz obszaru.

Równania (1) i (2) powinny być uzupełnione odpowiednimi związkami fizycznymi, przykładowo prawem Fouriera dla materiałów anizotropowych

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T \quad (3)$$

a także uogólnionym prawem Hooke'a dla materiałów sprężystych

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{E} : \boldsymbol{\varepsilon}^u \quad (4)$$

W powyższych równaniach, λ jest tensorem drugiego rzędu współczynników przewodzenia ciepła (w specjalnych przypadkach $\lambda = \lambda \mathbf{I}$, $\lambda \in \mathfrak{R}$ dla materiałów izotropowych i $\lambda = \operatorname{diag} \lambda_i$ dla materiałów ortotropowych, $i = 1, \dots, n$), a \mathbf{E} jest tensorem czwartego rzędu mechanicznych stałych materiałowych (przykładowo, moduł Younga E i współczynnik Poissona ν lub stałe Lamé'go, alternatywnie). Tensor całkowitego odkształcenia ($\boldsymbol{\varepsilon}$) może być poddany dekompozycji na część mechaniczną ($\boldsymbol{\varepsilon}^u$) oraz termiczną ($\boldsymbol{\varepsilon}^T$)

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^u + \boldsymbol{\varepsilon}^T \quad (5)$$

przy założeniu małych odkształceń. Co więcej część mechaniczna może zawierać wpływ efektów sprężystych i plastycznych ($\boldsymbol{\varepsilon}^u = \boldsymbol{\varepsilon}^e + \boldsymbol{\varepsilon}^p$), jednak tylko efekty sprężyste są rozważane w opracowaniu ($\boldsymbol{\varepsilon}^u = \boldsymbol{\varepsilon}^e$). Odkształcenie mechaniczne $\boldsymbol{\varepsilon}^u$ jest powiązane z wektorem przemieszczeń (\mathbf{u}) poprzez równania geometryczne, konsekwentnie

$$\boldsymbol{\varepsilon}^u = \nabla_s \mathbf{u} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \quad (6)$$

dla małych odkształceń ($\|\nabla \mathbf{u}\| < \varepsilon_{adm} \ll 1$, zazwyczaj $\varepsilon_{adm} = 10^{-3}$), podczas gdy

$$\boldsymbol{\varepsilon}^T = \alpha T \mathbf{I} \quad (7)$$

gdzie α jest współczynnikiem rozszerzalności termicznej, a \mathbf{I} jest tensorem jednostkowym drugiego rzędu.

Lokalne (mocne) sformułowanie sprzężonego zagadnienia, podane powyżej, może być zastosowane bezpośrednio do analizy MRS lub BMRS w wersji lokalnej, tj. analizy z aproksymacją budowaną jedynie na bazie punktów (węzłów), bez wymuszania struktury siatki i bez całkowania pomiędzy/dookoła węzłów. Jednak w przypadku metody elementów skończonych oraz wariacyjnej wersji BMRS należy wyprowadzić odpowiednie sformułowania globalne, najczęściej sformułowanie słabe (wariacyjne), dla obu typów modeli. Jest to dosyć złożone zagadnienie, dlatego zostało pominięte w niniejszym opracowaniu. Jednak więcej szczegółów na ten temat można znaleźć w pracach [11, 28, 35].

3. Ogólna charakterystyka kombinacji metod obliczeniowych

W literaturze naukowej z tej dziedziny, MES i inne alternatywne metody są najczęściej przedstawiane jako antagoniści, jednak z rzetelnym porównaniem ich zalet i wad. Mimo to rozmaite sprzężenia tych metod do obliczeniowej analizy zagadnień brzegowych mechaniki i inżynierii lądowej zostały zapoczątkowane już na początku lat dziewięćdziesiątych ubiegłego wieku. Od tego czasu, mimo iż temat ten został znacznie rozwinięty przez wielu badaczy, jest on nadal w fazie rozwoju. Główną ideą takiego sprzężenia metod jest wyeliminowanie lub zredukowanie wad jednej metody (np. czasochłonne generowanie siatki, niski stopień zbieżności pochodnych rozwiązania, złożoność obliczeniowa, czas obliczeń) lub/i wykorzystanie zalet innej metody (brak struktury węzłów, nadzbieżność pochodnych rozwiązania, wygładzanie za pomocą techniki aproksymacji najmniejszymi kwadratami, niezależna siatka całkowania, oszacowanie gradientu funkcji celu, istnienie stochastycznych rodzin rozwiązań, możliwość aproksymacji rozwiązania w punkcie itp.) w bardziej efektywny sposób. Przez lata wszystkie te badania zaowocowały różnymi możliwymi podejściami kombinowanymi, w których sprzężenie można zbudować na różnych poziomach analizy numerycznej, co prowadzi do następującej ich klasyfikacji:

1. Różne metody stosowane w rozłącznych podobszarach z odpowiednimi strefami przejściowymi (kombinacja równoległa), np. sprzężenie MES z metodami bezsiatkowymi, stosowane na poziomie dyskretyzacji, z dodatkowymi mechanizmami zapewniającymi ciągłość rozwiązania (i jego pochodnych) na warstwie stykowej (interfejsie), o charakterze numerycznym (specjalne funkcje kształtu, funkcja kary, mnożniki Lagrange'a [1]) czy też wynikającymi bezpośrednio ze sformułowania matematycznego zadania [10, 11].
2. Dyskretyzacja obszaru zadania za pomocą jednej metody i generowanie schematów aproksymacyjnych za pomocą technik innych metod (kombinacja łączona, kombinacja sprzężona), np. aproksymacja MES, po której następuje numeryczne różniczkowanie za pomocą metody MWLS (np. zunifikowana MES-BMRS [9] lub ulepszona MES-BMRS [24]) lub kombinowany algorytm MES-AG do rozwiązywania zagadnień odwrotnych [7, 23] i optymalizacji topologicznej [3].
3. Ogólne przetwarzanie końcowe wyników jednej metody, za pomocą schematów aproksymacyjnych typowych dla innych metod (kombinacja szeregową), np. zastosowanie MWLS (typowego dla BMRS) w analizie *a posteriori* błędów rozwiązania MES [9].
4. Kombinacja wybranych aspektów i zasad dwóch lub więcej różnych metod numerycznych w celu opracowania zupełnie nowego oryginalnego podejścia (kombinacja rozszerzona), np. bezsiatkowa metoda Monte Carlo, służąca do aproksymacji rozwiązania zagadnień brzegowych w wybranym punkcie [22], znajdująca praktyczne zastosowanie w analizie zagadnień odwrotnych [25].

W opracowaniu bardziej szczegółowo zostały opisane cztery wybrane kombinacje metod obliczeniowych. Należą do nich:

1. Połączenie MES i BMRS typu równoległego na poziomie dyskretyzacji zadania (rozdział 4).
2. Połączenie sprzężone MES i BMRS na poziomie aproksymacji zadania (rozdział 5).
3. Połączenie MES i algorytmów genetycznych w procesie optymalizacji (rozdział 6).
4. Połączenie BMRS i metody Monte Carlo dla zadań wprost i odwrotnych (rozdział 7).

Dla każdej kombinacji, prócz jej ogólnej charakterystyki, zaprezentowano także wyniki analizy numerycznej dla różnych zagadnień termicznych, mechanicznych i termomechanicznych, których ogólne sformułowanie dyskutowano w poprzednim rozdziale. Ograniczono jednak większość technicznych szczegółów z nimi związanych, odsyłając czytelnika do prac źródłowych. Wszystkie zaprezentowane algorytmy i wyniki są efektem prac autora opracowania oraz jego współpracy z innymi naukowcami (J. Orkisz, J. Jaśkowicz, R. Putanowicz) z ostatnich 10 lat. Oprócz przeglądu najciekawszych, ale wcześniej

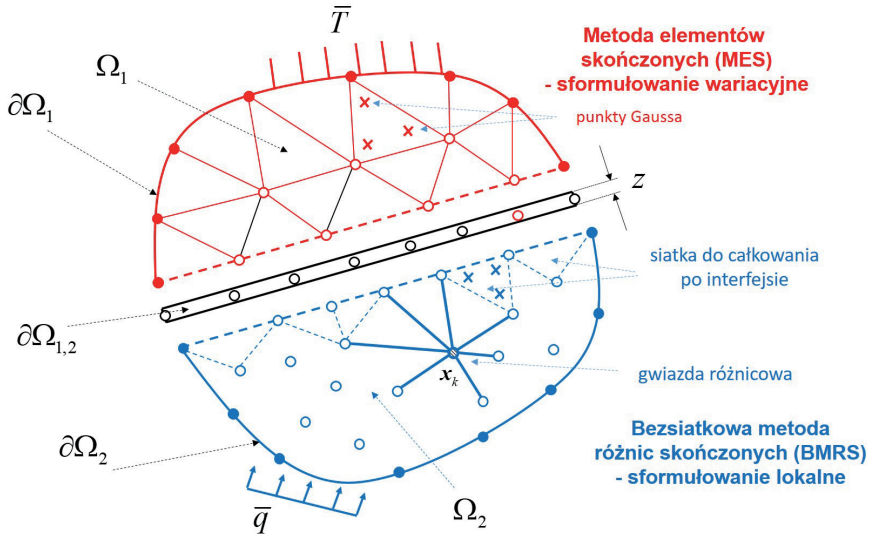
opublikowanych wzorów i wyników [10, 11, 22–25], pokazano też najnowsze wyprowadzenia oraz rezultaty obliczeń uzyskane dla pierwszego i dwóch ostatnich wariantów. Pracę zwięźle podsumowano w rozdziale 8 oraz wskazano kierunki przyszłych prac.

4. Połączenie MES i BMRS na poziomie dyskretyzacji obszaru

Obszar zadania jest podzielony na zbiór rozłącznych podobszarów (co najmniej dwóch), z różnymi metodami w każdym z nich. W celach ilustracyjnych założymy, że cały obszar zadania Ω jest podzielony na dwa podobszary: Ω_1 i Ω_2 ($\Omega_1 \cup \Omega_2 = \Omega$ i $\Omega_1 \cap \Omega_2 = \emptyset$). Podział ten jest wykonywany z określonych powodów, na przykład materiał przypisany do podobszaru Ω_1 jest znacznie bardziej wrażliwy na obciążenie termiczne (np. z powodu silniejszego przewodnictwa materiału) i dlatego wymaga bardziej dokładnego rozwiązania niż drugi, mniej ważny Ω_2 . Można zastosować całkowicie różne metody w obu podobszarach, z niezależnymi gęstościami dyskretyzacji, stopniami aproksymacji, siatkami niezgodnymi na interfejsie (części wspólnej podobszarów) i wymuszać warunki ciągłości rozwiązania na tym interfejsie. Idea sprzężenia opiera się na wprowadzeniu bardzo cienkiej (choć skończonej) warstwy materiału $\partial\Omega_{1,2}$, oddzielającej te dwa podobszary. Jej szerokość jest dobierana zgodnie z odpowiednimi założeniami heurystycznymi i zależy od parametrów dyskretyzacji i aproksymacji. Wzdłuż tej warstwy interfejsu jest obliczana dodatkowa całka krzywoliniowa (w 2D) lub powierzchniowa (w 3D). Wynika ona bezpośrednio ze słabego sformułowania (np. zasada wariacyjna) pierwotnego zadania. W związku z tym zarówno sformułowanie zadania, jak i jego rozwiązanie pozostają ciągłe, chociaż aproksymacja rozwiązania wykazuje nieciągłość, ograniczoną przez szerokość warstwy interfejsu.

W konsekwencji można sformułować jeden monolityczny schemat obliczeniowy, w którym stosowane są sprzężone dwupolowe (dla zagadnień termomechanicznych) elementy skończone i nieregularna chmura węzłów. Problem algebraiczny rozwiązuje się jednocześnie dla obu podstawowych niewiadomych, mianowicie temperatury węzłowej i wektora przemieszczenia. Odpowiednie schematy aproksymacji, powiązane z MES i/lub BMRS, są wprowadzane do równań wariacyjnych. Dodatkowe całki po wspólnej warstwie interfejsu można podzielić na dwie grupy, mianowicie całki, w których występuje odwrotność szerokości (zapewniają one ciągłość rozwiązania) oraz wszystkie pozostałe (z mnożnikami równymi 1 i samej szerokości), które zapewniają ciągłość pochodnych rozwiązania, a zatem mogą być traktowane jako składniki regularyzacyjne. Podstawy takiego połączenia oraz jego zastosowanie dla zagadnień termicznych, sformułowanych w sposób wariacyjny, zostały zaprezentowane w [10], rozszerzenie dla wariacyjnych zagadnień termomechanicznych w [11], a w pracy [25] pokazano technikę łączenia podobszarów dla MES i metody Monte Carlo. W niniejszym opracowaniu dyskutowany jest nowatorski pomysł łączenia podobszarów dla metod korzystających z różnych sfor-

mułowań (mocnego i wariacyjnego) tego samego zagadnienia, na przykładzie ustalonego zadania termicznego (1), dla izotropowego materiału.



Rys. 1. Schemat połączenia MES i BMRS na poziomie dyskretyzacji obszaru

Dla uproszczenia założymy, iż Ω_1 podlega dyskretyzacji wg zasad MES, podczas gdy BMRS zastosowano w Ω_2 (rys. 1). Punktem wyjścia dla odpowiedniego sformułowania wariacyjnego jest prosta globalna forma, otrzymana bezpośrednio z (1) poprzez pomnożenie przez skalarną funkcję testową v i scałkowanie po obszarze Ω , mianowicie

$$-\int_{\Omega} v \lambda \Delta T d\Omega = \int_{\Omega} v f d\Omega \quad (8)$$

w której wszystkie całki mogą zostać rozłożone na sumę całek po dwóch podobzarach i ich wspólnym interfejsie (założywszy, iż $\int_{\Omega} = \int_{\partial\Omega_{1,2}} z$ na interfejsie $z \partial\Omega_{1,2}$, gdzie z oznacza jego grubość)

$$\begin{aligned} & -\int_{\Omega_1} v_1 \lambda \Delta T d\Omega - \int_{\Omega_2} v_2 \lambda \Delta T d\Omega - \int_{\partial\Omega_{1,2}} z v_{1,2} \Delta T d\partial\Omega = \\ & = \int_{\Omega_1} v_1 f d\Omega + \int_{\Omega_2} v_2 f d\Omega + \int_{\partial\Omega_{1,2}} z v_{1,2} f d\partial\Omega \end{aligned} \quad (9)$$

Poprzez całkowanie przez części powyższe równanie może być przeformułowane na formę globalną słabą (dla Ω_1 i $z\partial\Omega_{1,2}$), z dodatkowym członem brzegowym na $\partial\Omega_1$ i ponownie na formę globalną mocną (dla Ω_2)

$$\begin{aligned} - \int_{\partial\Omega_1} v_1 \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \, d\partial\Omega + \int_{\Omega_1} \nabla v_1 \cdot \mathbf{q} \, d\Omega - \int_{\Omega_2} \lambda v_2 \Delta T \, d\Omega + \int_{\partial\Omega_{1,2}} z \nabla v_{1,2} \cdot \mathbf{q} \, d\partial\Omega = \\ = \int_{\Omega_1} v_1 f \, d\Omega + \int_{\Omega_2} v_2 f \, d\Omega + \int_{\partial\Omega_{1,2}} z v_{1,2} f \, d\partial\Omega \end{aligned} \quad (10)$$

w której $T = \Theta + \bar{T}$ jest nieznaną (próbną) funkcją temperatury w Ω_1 , podczas gdy $v_1, v_2, v_{1,2} \in H_0^1(\Omega)$ są funkcjami testowymi. Dodatkowo $\Theta \in V_0$ i $\bar{T} \in V$, gdzie $V_0 = \{\Theta \in H^1(\Omega) : \Theta = 0 \text{ na } \partial\Omega_T\}$ i $V = \{\Theta \in H^1(\Omega) : \Theta = \hat{T} \text{ na } \partial\Omega_T\}$. Przestrzeń H_0^k jest przestrzenią Sobolewa k -tego rzędu funkcji, które spełniają jednorodny warunek brzegowy na $\partial\Omega_T$ i których k -te pochodne są całkowne z kwadratem. Mimo iż wszystkie funkcje i ich pochodne pozostają ciągłe w równaniu (10), ich odpowiedniki aproksymacyjne, pojawiające się w całkach po interfejsie $\partial\Omega_{1,2}$, będą wykazywały nieciągłość. Dlatego też wprowadzono dwa dodatkowe operatory skalarne

$$\langle v \rangle_{1,2} = 0.5 \cdot (v_1 + v_2), \quad [[v]]_{1,2} = v_1 - v_2 \quad (11)$$

które pozwalają na obliczenie średniego rozwiązania na interfejsie. W ten sposób otrzymuje się ostateczne sformułowanie wariacyjne zadania z równoległą dyskretyzacją i aproksymacją

$$\begin{aligned} - \int_{\partial\Omega_1} v_1 \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \, d\partial\Omega + \int_{\Omega_1} \nabla v_1 \cdot \mathbf{q} \, d\Omega - \int_{\Omega_2} \lambda v_2 \Delta T \, d\Omega + \int_{\partial\Omega_{1,2}} \frac{\lambda}{z} [[v_{1,2}]] [[T]] \, d\partial\Omega + \\ + \int_{\partial\Omega_{1,2}} z \lambda \langle \nabla^T v_{1,2} \cdot \mathbf{s} \cdot \mathbf{s}^T \cdot \nabla T \rangle \, d\partial\Omega = \int_{\Omega_1} v_1 f \, d\Omega + \int_{\Omega_2} v_2 f \, d\Omega + \int_{\partial\Omega_{1,2}} z \langle v_{1,2} \rangle f \, d\partial\Omega \end{aligned} \quad (12)$$

gdzie $\mathbf{s} = [s_1, s_2]$ jest wektorem stycznym do interfejsu.

Założmy, iż standardowe podejście MES zastosowano do podobszaru Ω_1 (dla modelu 2D) i $\partial\Omega_{1,2}$ (dla modelu 1D). Dlatego też obydwie funkcje testowe $v_1, v_{1,2}$ oraz funkcja temperatury T mogą być aproksymowane za pomocą tych samych funkcji bazowych (kształtu) \mathbf{N}_1 (zgodnie z podejściem Bubnova-Galerkina), przykładowo $T = \mathbf{N}_1 \mathbf{T}_1$ i $\nabla T = \mathbf{B}_1 \mathbf{T}_1$, gdzie $\mathbf{B}_1 = \nabla \mathbf{N}_1$, a \mathbf{T}_1 oznacza wektor węzłowych stopni swobody (tj. temperatury w węzłach obszaru Ω_1). Jednak dla Ω_2 , gdzie pracuje lokalna BMRS, funkcja testowa v_2 jest przyjęta w formie pseudo-funkcji (dystrybucji) Diraca ($v_2 = \delta$). Zgodnie z jej własnością wybierającą, takie jej przyjęcie prowadzi do oryginalnego lokalnego sformułowania zagadnienia przepływu ciepła (1), które może być rozwiązane

za pomocą metody kolokacji równań różnicowych w węzłach, bez potrzeby całkowania po obszarze. Standardowe funkcje kształtu \mathbf{N}_2 i ich pochodne $\mathbf{B}_2 = \nabla \mathbf{N}_2$ są jednak wymagane dla tych elementów skończonych z Ω_2 , których krawędzie są zlokalizowane na interfejsie $\partial\Omega_{1,2}$. Innymi słowy, szczytkowa strukturalna siatka jest potrzebna w Ω_2 , blisko interfejsu (rys. 1). Biorąc to wszystko pod uwagę, końcowy układ równań algebraicznych może mieć następującą postać

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{1,1} & \mathbf{K}_{1,2} \\ \mathbf{K}_{2,1} & \mathbf{K}_{2,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{T}_1 \\ \mathbf{T}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_1 \\ \mathbf{F}_2 \end{bmatrix} \quad (13)$$

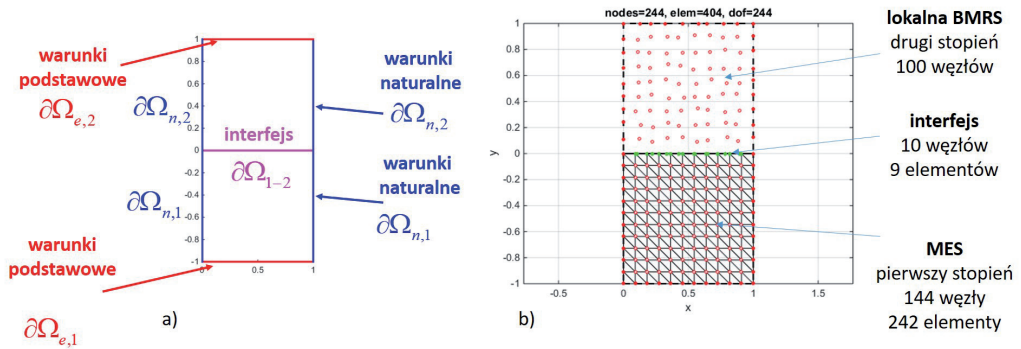
w którym możemy wyróżnić następujące podmacierze i podwektory

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{1,1} &= \int_{\Omega_1} \lambda \mathbf{B}_1^T \mathbf{B}_1 \, d\Omega + \int_{\partial\Omega_{1,2}} \frac{\lambda}{z} \mathbf{N}_1^T \mathbf{N}_1 \, d\partial\Omega + \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega_{1,2}} z \lambda \mathbf{B}_1^T \cdot \mathbf{s} \cdot \mathbf{s}^T \cdot \mathbf{B}_1 \, d\partial\Omega \\ \mathbf{K}_{1,2} &= - \int_{\partial\Omega_{1,2}} \frac{\lambda}{z} \mathbf{N}_1^T \mathbf{N}_2 \, d\partial\Omega + \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega_{1,2}} z \lambda \mathbf{B}_1^T \cdot \mathbf{s} \cdot \mathbf{s}^T \cdot \mathbf{B}_2 \, d\partial\Omega \\ \mathbf{K}_{2,1} &= - \int_{\partial\Omega_{1,2}} \frac{\lambda}{z} \mathbf{N}_2^T \mathbf{N}_1 \, d\partial\Omega + \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega_{1,2}} z \lambda \mathbf{B}_2^T \cdot \mathbf{s} \cdot \mathbf{s}^T \cdot \mathbf{B}_1 \, d\partial\Omega \\ \mathbf{K}_{2,2} &= -\lambda \mathbf{M}(\mathbf{X}_2) + \int_{\partial\Omega_{1,2}} \frac{\lambda}{z} \mathbf{N}_2^T \mathbf{N}_2 \, d\partial\Omega + \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega_{1,2}} z \lambda \mathbf{B}_2^T \cdot \mathbf{s} \cdot \mathbf{s}^T \cdot \mathbf{B}_2 \, d\partial\Omega \\ \mathbf{F}_1 &= \int_{\Omega_1} \mathbf{N}_1^T f \, d\Omega + \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega_{1,2}} z \mathbf{N}_1^T f \, d\partial\Omega + \int_{\partial\Omega_{n_1}} \mathbf{N}_1^T \bar{q} \, d\partial\Omega \\ \mathbf{F}_2 &= f(\mathbf{X}_2) + \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega_{1,2}} z \mathbf{N}_2^T f \, d\partial\Omega \end{aligned} \quad (14)$$

gdzie \mathbf{M} oznacza macierz pasmową wzorów różnicowych dla operatora Laplace'a, używaną metodą kolokacji węzłowej, a \mathbf{X}_2 oznacza wektor współrzędnych węzłów z podobszaru Ω_2 .

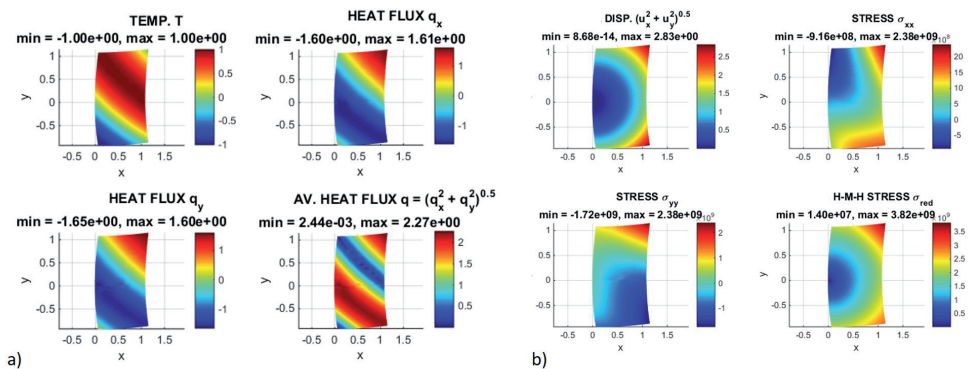
W podobny sposób można wyprowadzić zależności dla zadania mechanicznego (2) oraz sprzężonego, termomechanicznego (1) i (2). Jednak końcowe wzory są bardziej złożone z powodu funkcji przemieszczeń o wektorowej postaci [11].

Podjęcie równoległe MES/BMRS zastosowano do testowego ustalonego zadania termomechanicznego, którego rozwiązanie ściśle jest opisane funkcją trygonometryczną \bar{T} (dla temperatury) oraz wielomianem stopnia drugiego \bar{u} (dla przemieszczenia). Obszar ma kształt prostokąta (rys. 2 a), z warunkami brzegowymi podstawowymi (dana temperatura i przemieszczenie) na brzegach poziomych i naturalnymi (dany strumień ciepła i obciążenie krawędziowe) na brzegach pionowych. Dyskretyzację obszaru, uwzględniającą podział na połowy, pokazano na rys. 2 b. W górnej połowie obszaru zastosowano



Rys. 2. Obszar prostokątny z interfejsem poziomym (a) oraz jego równoległa dyskretyzacja za pomocą BMRS i MES (b)

lokalną wersję BMRS, stąd dyskretyzacja za pomocą węzłów nieregularnie rozłożonych i przyjęty drugi stopień aproksymacji. Z kolei dolna połowa ma przypisaną MES, z liniowymi funkcjami kształtu, o gęstości siatki różniącą się od siatki w górnej połowie. Dodatkowo niezależna regularna siatka do całkowania została wygenerowana na interfejsie, który stanowi warstwę materiału o grubości $z = 3.63 \cdot 10^{-4}$ m, którą dobrano na bazie parametrów aproksymacji i dyskretyzacji w obydwu połowach. Zadanie rozwiązano dla następujących parametrów materiałowych: $\lambda = 1$ J/(M · s · C°), $E = 10^9$ Pa, $\nu = 0.16$, $\alpha = 12 \cdot 10^{-6}$ 1/C°.



Rys. 3. Wyniki obliczeń dla zadania termomechanicznego z równoległą kombinacją BMRS i MES: a) część termiczna (temperatura T , składowa strumienia ciepła q_x , składowa strumienia ciepła q_y , całkowity strumień q), b) część mechaniczna (przemieszczenie względne, naprężenie σ_{xx} , naprężenie σ_{yy} , naprężenie zredukowane σ_{red} według hipotezy Hubera-Misesa-Hencky'ego)

Wyniki obliczeń zaprezentowano graficznie na rys. 3 a dla części termicznej (temperatura T , składowe strumienia ciepła $\mathbf{q} = \nabla T$, strumień całkowity $\|\mathbf{q}\|$) oraz na rys. 3 b dla części mechanicznej (norma przemieszczenia $\|\mathbf{u}\|$, składowe naprężenia $\boldsymbol{\sigma}$, naprężenie zredukowane według hipotezy Hubera-Misesa-Hencky'ego σ_{red}), za każdym razem na zdeformowanym kształcie obszaru. Dodatkowo obliczono normy ścisłego błędu względnego (w odniesieniu do znanego rozwiązania analitycznego) obydwu rozwiązań ($e_T = T - \bar{T}$, $\mathbf{e}_u = \mathbf{u} - \bar{\mathbf{u}}$) w trzech normach, mianowicie L^2 (norma średnio-kwadratowa $\sqrt{\int_{\Omega} \mathbf{e} \cdot \mathbf{e} \, d\Omega}$), H^1 (semi-norma $\sqrt{\int_{\Omega} \nabla \mathbf{e} \cdot \nabla \mathbf{e} \, d\Omega}$) i L^{inf} (norma maksimum, $\max |\mathbf{e}|$). Obliczono też normę L^2 nieciągłości (skoku) rozwiązania numerycznego na interfejsie. Względne normy błędu temperatury są następujące: $L^2 = 2.40 \cdot 10^{-3}$, $L^{\text{inf}} = 1.57 \cdot 10^{-2}$, $H^1 = 5.43 \cdot 10^{-2}$ oraz na interfejsie $L^2 = 1.21 \cdot 10^{-3}$. Natomiast względne normy błędu dla przemieszczenia są następujące: $L^2 = 2.83 \cdot 10^{-3}$, $L^{\text{inf}} = 7.46 \cdot 10^{-2}$, $H^1 = 2.82 \cdot 10^{-2}$ oraz na interfejsie $L^2 = 1.24 \cdot 10^{-3}$. Można zauważyć, iż rząd nieciągłości jest niski i odpowiada on rzędowi błędu samego rozwiązania w podobszarach. Mimo zastosowania podobnych parametrów aproksymacji dla obydwu pól fizycznych (temperatura, przemieszczenie), na ogół błąd przemieszczenia jest większy niż błąd temperatury. Podobnie rząd zbieżności przemieszczenia jest niższy niż rząd zbieżności temperatury, co spowodowane jest wektorowym charakterem pola przemieszczenia. Jednak poprzez zastosowanie techniki aproksymacji podwyższonego rzędu, opisaney w kolejnym podrozdziale, można tę różnicę efektywnie zniwelować.

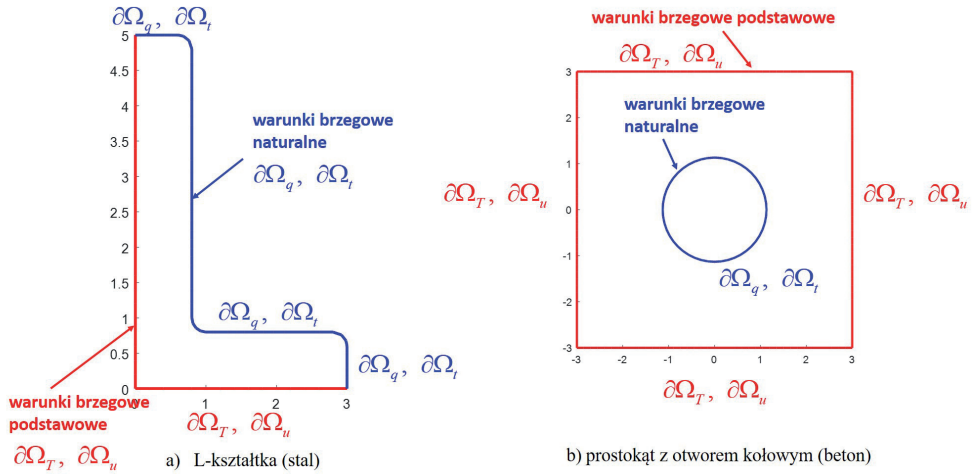
5. Połączenie MES i BMRS na poziomie aproksymacji funkcji

Generowanie schematów aproksymacyjnych wysokiego rzędu w MES wymaga modyfikacji wyjściowej siatki węzłów i elementów, wprowadzenia dodatkowych uogólnionych stopni swobody lub odpowiedniej projekcji z obszaru odniesienia do rzeczywistego. Może to być kłopotliwe, gdy wymagane są częste modyfikacje dyskretnego modelu (wstawianie, usuwanie i przesuwanie dowolnych węzłów ma silny wpływ na topologię siatki). Ponadto aproksymacja może być rozpięta na różnych typach elementów skończonych, co komplikuje podział i unifikację tych elementów (np. w zadaniach z ruchomym brzegiem). We wszystkich wariantach parametry całkowania numerycznego muszą być wybrane w odpowiedni sposób, aby uniknąć osobliwości w macierzach sztywności elementów, jak również zjawiska blokady objętościowej. Podejście MES-BMRS, tym razem z połączeniem na etapie aproksymacji funkcji, pozwala na wyeliminowanie wszystkich tych wad. Dyskretyzacja obszaru oraz aproksymacja w elementach skończonych, przy użyciu prostej bazy wielomianowej stopnia p^L , odpowiadającej rzędowi operatora różniczkowego $p^L = p$, są zachowane w całym procesie rozwiązania i pozwalają na otrzymanie rozwiązania podstawowego. Następnie rozważane są dodatkowe wyrazy wyższego

rzędu (do stopnia wielomianowego $p^H > p^L$ włącznie). Te wyrazy pochodzą z rozwinięcia wartości nieznannej funkcji w szereg Taylora, w punktach całkowania numerycznego. Mogą składać się z pochodnych wyższego rzędu, jak również mogą odpowiadać za redukcję nieciągłości i/lub osobliwości rozwiązania. Pochodne wyższych rzędów są obliczane za pomocą składania formuł różnicowych (generowanych w sposób bezsiatkowy w węzłach) i podstawowego rozwiązania MES, odpowiadającego standardowym funkcjom kształtu. Wyrazy korekcyjne modyfikują tylko prawą stronę równań MES, prowadząc do prostej procedury iteracyjnej. Warto podkreślić, że ostateczne rozwiązanie nie zależy od jakości pierwotnej interpolacji. To rozwiązanie jest obciążone tylko błędem obcięcia wynikającym z rozwinięcia w szereg Taylora.

W przeciwieństwie do różnych technik wyższego rzędu stosowanych w MES, MRS i metodach bezsiatkowych, zaproponowane podejście [24], które pozwala na uzyskanie rozwiązania wielomianowego w ramach interpolacji wysokiego rzędu p^H , ma wiele zalet, a mianowicie:

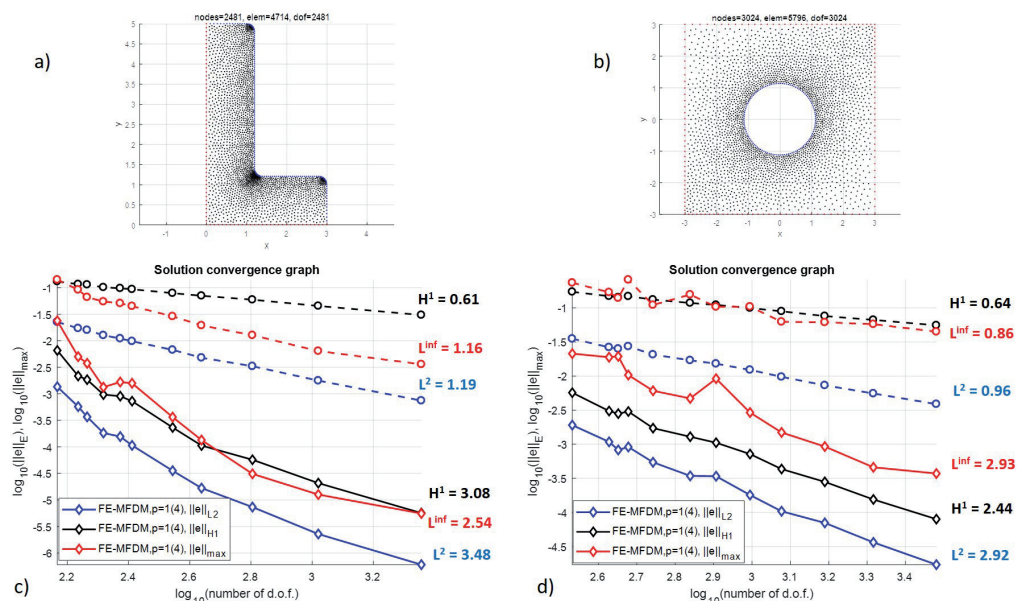
- nie wymaga wprowadzania dodatkowych węzłów ani uogólnionych stopni swobody o nieznanach wartościach do standardowych schematów MES, ani żadnych modyfikacji istniejącej struktury dyskretyzacji i/lub aproksymacji,
- nie wymaga wprowadzania wiszących węzłów (tzn. węzłów wierzchołkowych jednego elementu, ale należących do krawędzi elementów sąsiednich) ani statycznej kondensacji dodatkowych wewnętrznych stopni swobody (ponieważ takich nie ma),
- może być zastosowana najprostsza interpolacja MES niskiego rzędu $p^L < p^H$ (np. trójkąty ze standardowymi funkcjami liniowymi), bez względu na końcowy rząd interpolacji p^H ,
- nie jest wymagane odwzorowanie między obszarem rzeczywistym a obszarem odniesienia, ani użycie żadnych specjalnych (ortogonalnych) funkcji kształtu,
- zastosowanie najprostszych funkcji kształtu pozwala na uniknięcie źle uwarunkowanych i osobliwych schematów aproksymacji,
- numeryczne parametry całkowania odpowiadają podstawowemu rzędowi interpolacji (p^L), co prowadzi do zmniejszenia liczby wymaganych punktów całkowania (np. tylko 3 punkty na każdy element trójkątny z liniowymi funkcjami kształtu),
- globalna macierz sztywności \mathbf{K} jest generowana i agregowana, jak również odwracana (\mathbf{K}^{-1}) lub rozkładana na czynniki trójkątne ($\mathbf{K} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$) tylko raz dla całego procesu rozwiązania,
- pochodne niskiego rzędu ($1, \dots, p^L$) są obliczane na etapie przetwarzania wyników z wykorzystaniem interpolacji MES (dla gładkich rozwiązań) lub aproksymacji MWLS, a także bieżącego rozwiązania \mathbf{T} , na przykład \mathbf{T}^L odpowiadającego p^L ,



Rys. 4. Obszary przyjęte do obliczeń dla sprzężonej MES-BMRS, a) kształt L, b) prostokąt z kołowym otworem

- pochodne wyższego rzędu ($p^L + 1, \dots, p^H$) są obliczane za pomocą składania formuł różnicowych odpowiadających niskiemu rzędowi aproksymacji,
- tylko prawa strona (wektor obciążenia \mathbf{F}) globalnego układu równań algebraicznych ($\mathbf{KT} = \mathbf{F} + \mathbf{\Delta}$) jest modyfikowana za pomocą odpowiedniej korekty $\mathbf{\Delta}$ składającej się z pochodnych wyższego rzędu,
- cała procedura rozwiązania bazuje na iteracyjnym rozwiązaniu układu równań algebraicznych, z tą samą macierzą sztywności, choć z prawą stroną modyfikowaną na każdym kroku iteracji; ten system może być rozwiązany, na przykład, za pomocą rozkładu \mathbf{L} i \mathbf{L}^T określonego *a priori*, a mianowicie rekursywnych formuł "krok wstecz" i "krok wprzód",
- wysoka jakość rozwiązania wyższego rzędu z bardzo wysokim tempem zbieżności,
- ze względu na cechę nadzbieżności, pochodne rozwiązania charakteryzuje wysoka dokładność i tempo zbieżności, w pełni konkurencyjne wobec samego rozwiązania,
- rozwiązanie wyższego rzędu może być stosowane jako wysokiej jakości rozwiązanie referencyjne do celów szacowania błędów *a posteriori*, jak również w technikach adaptacyjnych.

Przykładowe obliczenia przeprowadzono dla dwóch obszarów pokazanych na rys. 4 a, b i zadania termicznego z trygonometrycznym rozwiązaniem analitycznym. Dla każdego obszaru wygenerowano ciąg silnie nieregularnych siatek adaptacyjnych, na podstawie kryterium szacowanego błędu rozwiązania, którego estymator zbudowano na róż-



Rys. 5. Wyniki obliczeń dla sprzężonej MES-BMRS: a) końcowa siatka MES dla obszaru L, b) końcowa siatka MES dla prostokąta z otworem, c) wykresy zbieżności rozwiązań dla obszaru L, d) wykresy zbieżności rozwiązań dla prostokąta z otworem

niczy pomiędzy rozwiązaniem podstawowym (dla rzędu $p^L = 1$) i ulepszonym (dla rzędu $p^H = 4$). Dzięki temu koncentracje węzłów pojawiły się tam, gdzie można spodziewać się dużego błędu rozwiązania, przykładowo w okolicach zaokrąglonych naroży, gdzie schematy różnicowe bazują na lokalnych nieregularnych konfiguracjach węzłów. Dodatkowo zbadano tempo zbieżności temperatury w normach L^2 , L^{inf} i H^1 dla obydwu rzędów aproksymacji. Wyniki pokazano na rys. 5 c, d. Wykresy zbieżności dla rozwiązania podstawowego (linia przerywana dla $p^L = p = 1$ pierwszego stopnia interpolacji, odpowiadającego operatorowi rzędu pierwszego z równania wariacyjnego, w postaci trójkątnych ES) noszą wyraźne piętno MES, mianowicie tempo zbieżności pochodnej (semi-norma H^1) jest wyraźnie słabsze niż samego rozwiązania, a błędy większe. Z kolei tempo zbieżności pochodnej dla rozwiązania ulepszonego (dla $p^H = 4$) jest w pełni konkurencyjne w stosunku do tempa zbieżności samego rozwiązania, które jest około 3 razy (w skali logarytmicznej) większe niż dla p^L , a błędy o wiele mniejsze. Tak wiele uzyskano bez żadnej modyfikacji wyjściowej siatki MES, bazując tylko i wyłącznie na istniejących węzłach elementach i stopniach swobody.

6. Połączenie MES i AG dla zadań optymalizacji

W zadaniu termomechanicznym sformułowanym wprost (jak to zostało przedstawione w rozdziale 2.) nieznanne pole skalarne (temperatura T), pola wektorowe (strumień ciepła \mathbf{q} , przemieszczenie \mathbf{u}) oraz pola tensorowe (odkształcenie ε i naprężenie σ) podlegają wyznaczeniu w obszarze zadania Ω oraz na jego brzegu $\partial\Omega$, na podstawie znanych parametrów materiałowych (λ , \mathbf{E}) oraz parametrów obciążenia, do których należą zadana temperatura brzegowa \bar{T} , strumień brzegowy \bar{q} , przemieszczenie brzegowe $\bar{\mathbf{u}}$, ciśnienie brzegowe \bar{t} , a w przypadku zadań nieustalonych także wartości początkowe temperatury i przemieszczenia. Jednak jeżeli którakolwiek z tych wielkości (geometria, materiał, obciążenie) jest również nieznaną, mamy do czynienia z zadaniem odwrotnym. Jeżeli nieznaną jest geometria obszaru, takie zadanie nazywamy zadaniem optymalizacji topologicznej, polegającym na takim dobraniu geometrii, by spełnione były odpowiednie dodatkowe kryteria, przykładowo kryterium najmniejszej masy konstrukcji przy zapewnieniu określonej wytrzymałości jej elementów (np. optymalny dobór połączeń prętowych w konstrukcjach kratowych czy ramowych) czy też maksymalnej nośności konstrukcji. Jeżeli nieznanne są parametry materiałowe, mówimy o zadaniu identyfikacji materiałowej, do której wymagana jest znajomość odpowiedzi konstrukcji (przemieszczenia, temperatura, odkształcenie) w wybranych jej punktach, której źródłem są najczęściej pomiary eksperymentalne. Z kolei jeżeli nieznanne jest obciążenie działające na istniejącą konstrukcję, to również na podstawie pomiarów wielkości wyjściowych jego parametry podlegają wyznaczeniu w zadaniu identyfikacji obciążenia. Zadania tego typu należą do szerokiej klasy zagadnień SHM (ang. *Structural Health Monitoring*, czyli monitorowanie żywotności konstrukcji), której bardzo gwałtowny rozwój można zaobserwować w ostatnich latach.

Dla skupienia uwagi, rozważmy ustalone (niezależne od czasu) zagadnienie mechaniczne (2) z obciążeniem danym na brzegu ($\bar{\mathbf{u}}$, \bar{t}) oraz w postaci sił masowych \mathbf{b} . Załóżmy, iż wybrane parametry tych obciążeń (w liczbie m_p) są nieznanne ($\mathbf{P} = [\bar{\mathbf{u}}_?, \bar{t}_?, \bar{\mathbf{b}}_?]$) i muszą być wyznaczone na podstawie dodatkowych informacji, mianowicie pomiarów składowych odkształceń $\hat{\varepsilon}_i$ lub/i przemieszczeń \hat{u}_j , w odpowiednio m_ε i m_u wyizolowanych punktach wewnętrznych lub/i brzegowych $\hat{\mathbf{x}}_i$ i $\hat{\mathbf{x}}_j$

$$\hat{\varepsilon}(\hat{\mathbf{x}}_i) = \hat{\varepsilon}_i \pm \Delta\varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, m_\varepsilon, \quad \hat{u}(\hat{\mathbf{x}}_j) = \hat{u}_j \pm \Delta u_j, \quad j = 1, 2, \dots, m_u \quad (15)$$

z przypisanymi tolerancjami pomiarowymi $\Delta\varepsilon_i$ i Δu_j w każdym punkcie pomiarowym. Podstawowy model matematyczny takiego zadania odwrotnego identyfikacji obciążenia stanowi nieliniowe zagadnienie optymalizacji

$$\mathbf{P}^{(\text{opt})} = \arg \min_{(\mathbf{P})} F(\mathbf{P}) \quad (16)$$

z funkcją celu

$$F = \sqrt{\frac{1}{m_\varepsilon} \sum_{i=1}^{m_\varepsilon} \left(\frac{\varepsilon(\hat{\mathbf{x}}_i, \mathbf{P}) - \hat{\varepsilon}_i}{\Delta\varepsilon_i} \right)^2 + \frac{1}{m_u} \sum_{j=1}^{m_u} \left(\frac{u(\hat{\mathbf{x}}_j, \mathbf{P}) - \hat{u}_j}{\Delta u_j} \right)^2} \quad (17)$$

a także z obszarem ograniczonym przez wartości graniczne $P_i^{(\min)}$ i $P_i^{(\max)}$ każdej współrzędnej wektora \mathbf{P} , mianowicie

$$P_i \in \left[P_i^{(\min)} \quad P_i^{(\max)} \right], \quad i = 1, 2, \dots, m_p \quad (18)$$

oraz z warunkami ograniczającymi typu nierównościowego

$$|\varepsilon(\hat{\mathbf{x}}_i, \mathbf{P}) - \hat{\varepsilon}_i| \leq \Delta\varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, m_\varepsilon, \quad |u(\hat{\mathbf{x}}_j, \mathbf{P}) - \hat{u}_j| \leq \Delta u_j, \quad j = 1, 2, \dots, m_u \quad (19)$$

w którym współrzędne wektora \mathbf{P} to zmienne decyzyjne, a bezwymiarowa skalarna funkcja celu F sformułowana jest na podstawie średniego błędu kwadratowego między zmierzonymi i obliczonymi wartościami. Należy zwrócić uwagę na wysokie ryzyko złego uwarunkowania zadania odwrotnego, jeżeli liczba danych pomiarowych $m_\varepsilon + m_u$ będzie niewiele większa niż liczba zmiennych decyzyjnych m_p .

Różne metody optymalizacji typu deterministycznego, probabilistycznego i złożonego mogą być zastosowane do rozwiązania (17) z (18) i (19), przykładowo bezgradientowe metody wyszukiwania (algorytmy genetyczne AG lub ewolucyjne AE) lub metody półanalityczne typu gradientowego (bisekcja, gradienty sprzężone, kierunki dopuszczalne). Niezależnie jednak od rodzaju metody numerycznej rozwiązanie rozważanego zagadnienia optymalizacyjnego wymaga wielu rozwiązań pomocniczych zadań brzegowych (2) dla ustalonego \mathbf{P} . Dlatego złożoność obliczeniowa metody silnie zależy od wyboru metod pośrednich, a także od liczby zmiennych decyzyjnych. Została opracowana następująca strategia numeryczna łącząca metodę elementów skończonych oraz podejście bazujące na algorytmach genetycznych (MES/AG):

1. Generacja algebraicznego modelu MES

$$\mathbf{KU}(\mathbf{P}) = \mathbf{F}(\mathbf{P}) \quad (20)$$

rozważanego zadania, z macierzą sztywności \mathbf{K} końcowego układu równań, po agregacji. Mimo iż wektor obciążeń węzłowych \mathbf{F} (który zawiera \mathbf{P}) podlega ciągłej modyfikacji, \mathbf{K} pozostaje niezmienną. Dlatego też, jej odpowiednia dekompozycja \mathbf{LL}^T może być przeprowadzona tylko raz, podczas gdy w ramach kolejnych pokoleń genetycznych wykonuje się tylko krok-wstecz i krok-wprzód ($\mathbf{LV}(\mathbf{P}) = \mathbf{F}(\mathbf{P})$ i $\mathbf{L}^T\mathbf{U}(\mathbf{P}) = \mathbf{V}(\mathbf{P})$), co prowadzi do uzyskania wektora węzłowych przemieszczeń \mathbf{U} . W ten sposób wyznaczenie $\mathbf{U}(\mathbf{P})$ wymaga dwóch prostych algebraicznych operacji macierzowych.

2. Generacja startowej populacji $\mathbf{S}^{(0)} = \{s_{j(i)}^{(0)}, i = 1, 2, \dots, M, j = 1, 2, \dots, m\}$ składającej się z ciągu M liczb binarnych s_j z losową selekcją m bitów $\{0, 1\}$ dla każdego osobnika tej populacji. Liczba M jest przyjmowana, podczas gdy liczba m jest dobierana jako najmniejsza liczba całkowita spełniająca poniższą nierówność

$$\left(P_i^{(\max)} - P_i^{(\min)}\right) \cdot 10^c \leq 2m - 1, \quad i = 1, 2, \dots, M \quad (21)$$

gdzie $c = 1, 2, 3, \dots$ oznacza liczbę pozycji znaczących każdego osobnika populacji (czyli liczbę cyfr świadczących o rozdzielczości pomiarowej).

3. Wyznaczenie wartości rozwiązania $\mathbf{P}^{(k)}$, $k = 0, 1, 2, \dots$, odpowiadających bieżącej populacji $\mathbf{S}^{(k)}$, za pomocą prostej transformacji liczb binarnych na dziesiętne

$$P_i^{(k)} = P_i^{(\min)} + \frac{\left(P_i^{(\max)} - P_i^{(\min)}\right) \sum_{j=1}^m 2^{j-1} \cdot s_{j(i)}^{(k)}}{2^m - 1}, \quad i = 1, 2, \dots, M \quad (22)$$

4. Wyznaczenie wartości funkcji celu (17) dla każdego osobnika populacji $\mathbf{P}^{(k)}$, za pomocą agregacji wektora prawej strony $\mathbf{F}(\mathbf{P}^{(k)})$, po której następuje rozwiązanie układu równań (20) i odpowiedni *post processing* rozwiązania MES (obliczenie pochodnych rozwiązania).
5. Ciągłe przetwarzanie populacji rozwiązań $(\mathbf{S}^{(k)}, \mathbf{P}^{(k)}) \implies (\mathbf{S}^{(k+1)}, \mathbf{P}^{(k+1)})$ za pomocą trzech podstawowych operatorów genetycznych, mianowicie

- selekcja (typu ruletkowego), w której każdy osobnik populacji ma przypisane prawdopodobieństwo wyboru

$$p_i = \frac{F^{-1}(\mathbf{P}_i^{(k)})}{\sum_{j=1}^M F^{-1}(\mathbf{P}_j^{(k)})} \quad (23)$$

które jest odwrotnie proporcjonalne (AG poszukują maksimum funkcji) do jego udziału w sumie wartości funkcji celu (17); w ten sposób, losowo wybrane osobniki (zgodnie z rozkładem p_i) przechodzą do kolejnego etapu,

- krzyżowanie, w którym losowo wybrane pary osobników $(\mathbf{s}_i^{(k)}, \mathbf{s}_j^{(k)}) \in \mathbf{S}^{(k)}$ wymieniają części łańcuchów bitowych, przykładowo

$$\{101|_{m_1}1001|_{m_2}1\} \leftrightarrow \{111|_{m_1}0101|_{m_2}1\} \quad (24)$$

gdzie punkty graniczne m_1 i m_2 są również losowo dobierane; prawdopodobieństwo krzyżowania jest zwykle na poziomie $0.6 \leq p_c \leq 0.9$,

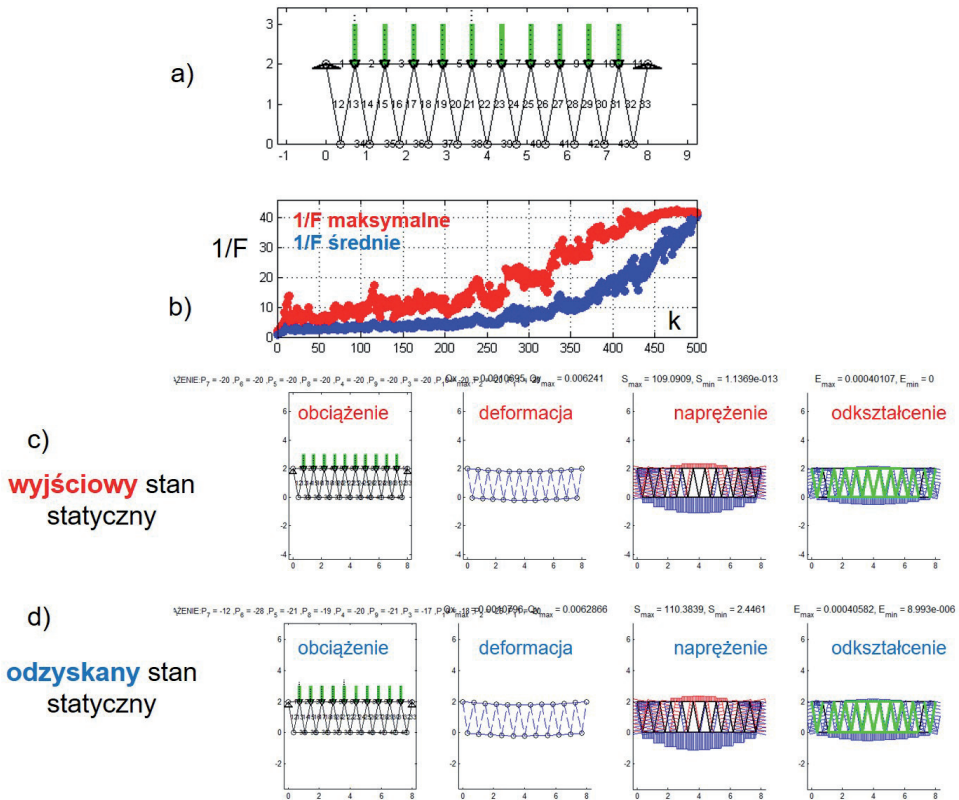
- mutacja, w której każdy bit ma przypisaną liczbę losową $r \in [0, 1]$, zgodnie z założonym prawdopodobieństwem mutacji $p_m \leq \frac{1}{(m+1) \cdot M}$. Jeżeli $r \leq p_m$, to ten wybrany bit zmienia się z 0 na 1, lub z 1 na 0.

Podczas gdy operator selekcji wzmacnia najsilniejsze jednostki $\mathbf{S}^{(k)}$, nie tworzy on żadnych nowych. Z drugiej strony nowe osobniki (nowe kombinacje bitów) mogą być dostarczane przez dwa pozostałe operatory; istnieje jednak ryzyko, że już ustalone optymalne rozwiązanie ulegnie pogorszeniu, a w konsekwencji spadnie ogólna jego jakość. W związku z tym zarówno p_c , jak i p_m powinny maleć w miarę kontynuowania procesu optymalizacji.

6. Zastosowanie kryterium zatrzymania obliczeń, które opiera się na kontroli założonego procentu osobników \mathbf{P} , które maksymalizują (17). W obliczeniach praktycznych, jeżeli nie ma poprawy jakości rozwiązania po określonej liczbie populacji, proces zatrzymuje się. Brane są ponadto pod uwagę ograniczenia nierównościowe (19). Jeżeli jednak kryteria zatrzymania obliczeń nie są spełnione, należy wrócić do trzeciego etapu.
7. Uzyskanie ostatecznego rozwiązania MES dla $(\mathbf{u}, \varepsilon, \sigma)$ na podstawie najlepszego osobnika ostatniej ustalonej populacji $\mathbf{P}^{(\text{opt})}$ lub, częściej, najlepszego osobnika w ogóle (jaki tylko pojawił się w czasie procesu).

W pierwszej kolejności zastosujemy powyżej opisany algorytm do zadania odwrotnego płaskiej kratownicy, a mianowicie odzyskania jej pełnego stanu statycznego (przemieszczenia, odkształcenia, naprężenia) na podstawie pomiarów odkształceń w wybranych prętach, wykonywanych za pomocą czujników odkształcenia zamocowanych do elementów konstrukcyjnych. Co więcej, dane te mogą być uzupełnione pomiarami przemieszczenia, jeśli są one dostępne. Algorytm MES jest stosowany jako narzędzie dyskretyzacji i aproksymacji rozwiązania ustalonego zadania kratownicy ze znaną lokalizacją i wartością sił. Z drugiej strony AG są odpowiedzialne za zorientowane na zagadnienie przeszukanie dopuszczalnej przestrzeni rozwiązań (osobników populacji) przez określoną liczbę pokoleń genetycznych. Obliczenia są przeprowadzane do momentu spełnienia odpowiednich kryteriów ich zatrzymania. Zaproponowany algorytm rozwiązania został przeanalizowany pod kątem różnych zadań związanych z kratownicą, z różnymi parametrami dotyczącymi dokładności rozwiązania, dopuszczalnej przestrzeni rozwiązań, liczby nieznanych sił, a także liczby czujników. Za każdym razem porównania między pierwotnym stanem statycznym (który służył jako źródło symulowanych danych eksperymentalnych) a odzyskanym wskazywały na bardzo dobrą zgodność ostatecznych wyników. Poza określeniem zewnętrznej obciążenia kratownicy, algorytm ten został zastosowany do nowatorskiej identyfikacji uszkodzonych czujników odkształcenia, jak również do

nowatorskiego projektu optymalnej liczby czujników odkształcenia, dla określonego rozmiaru kratownicy [23].



Rys. 6. Wyniki obliczeń łączonej MES-AG dla zadania odwrotnego kratownicy płaskiej: a) wyjściowy i odzyskany układ sił, b) wykres maksymalnej i średniej wartości funkcji celu, c) wyjściowy stan statyczny, d) odzyskany stan statyczny

Reprezentatywne wyniki dla symulacji numerycznej procesu odzyskiwania obciążenia i stanu statycznego kratownicy pokazano na rys. 6. Punktem wyjścia jest konfiguracja 10 sił pionowych, o wartości 20 kN każda, działających w dół i przyłożonych w węzłach pasa górnego kratownicy (zielone wektory, rys. 6 a) oraz odpowiadający jej stan statyczny (deformacja, rozkład naprężeń i odkształceń, rys. 6 c). Na podstawie takiego obciążenia rozwiązywane jest zadanie statyki (przy założeniu sztywności na rozciąganie $EA = 10^9$ kN) i obliczane są odkształcenia każdego z prętów. Odkształcenia wszystkich 22 krzyżulców (prętów ukośnych) podlegają losowemu zaburzeniu z amplitudą 10%

i traktowane są jako symulowane pomiary $\varepsilon_i \pm 0.1\varepsilon_i$, $i = 1, 2, \dots, m_\varepsilon = 22$. Następnie uruchamiany jest właściwy algorytm metody MES-AG, opisany powyżej. Do obliczeń przyjęto populację złożoną z $M = 40$ osobników, o $m = 14$ bitach każdy oraz $p_c = 0.8$ i $p_m = 0.1$. Wartość każdej z 10 sił jest niezależną zmienną decyzyjną, dobieraną z przedziału dopuszczalnego od $P_{\min} = 0$ do $P_{\max} = 100$ kN. Populacja startowa dobierana jest w sposób całkowicie losowy, bez jakiegokolwiek przesłanki odnośnie do rozwiązania wyjściowego. Przeprowadzono 500 generacji genetycznych. Na rys. 6 b pokazano zmianę średniej (na całą bieżącą populację) i maksymalnej odwrotności wartości funkcji celu F w odniesieniu do numeru generacji k . Po zakończeniu procesu, względne średnie błędy, w odniesieniu do obciążenia i odkształcenia, wynoszą odpowiednio 10% i 11%. Na rys. 6 d, pokazano odzyskany stan statyczny na podstawie wyznaczonego obciążenia. Cały proces obliczeniowy, który zajął 7 minut i 30 sekund, wymagał rozwiązania $500 \cdot 40 = 20\,000$ pojedynczych zadań za pomocą MES. Warto nadmienić, iż to samo zadanie rozwiązywane za pomocą najprostszej metody przeszukiwań, z podziałem przedziału dopuszczalnego co 1 kN, wymagałoby rozwiązania kratownicy dla 10^{20} kombinacji obciążenia, co znacznie przekracza dzisiejsze możliwości obliczeniowe.

Innym przykładem zastosowania podejścia MES-AG może być optymalizacja trasy ciągną sprężającego w konstrukcjach mostowych. Modelem mechanicznym mostu jest belka wieloprzęsłowa o długości L i sztywności na zginanie EI , z kablem o wstępnym naprężeniu σ_t , którego modelem matematycznym jest funkcja sklejana (typu *spline*) drugiego rzędu. Algorytm MES dla obciążenia belki pod wpływem sprężenia sprowadza się do zamiany oddziaływania kabla (siły sprężającej N_t) na zastępcze obciążenie ciągłe oraz siły i momenty skupione [27], na poziomie elementu skończonego, podobnie jak to ma miejsce dla ciężaru własnego i obciążeń użytkowych. Na długości belki wprowadza się n_t punktów konstrukcyjnych kabla, których położenia poziome $x_{t(i)}$ są ustalone, natomiast położenia pionowe $z_{t(i)}$, stanowiące zmienne decyzyjne dla zadania optymalizacji, mogą sięgać od górnej do dolnej krawędzi belki, z uwzględnieniem otuliny betonowej. Zadanie polega na takim doborze położen pionowych tych punktów, aby spełnione było określone kryterium projektowe, przykładowo minimalne ugięcie belki, maksymalna jej nośność lub minimalna reakcja hiperstatyczna (dla konstrukcji dwu- i wieloprzęsłowych), co pozwala na zmniejszenie ryzyka zerwania kabla w okolicy podparcia. Dla kryterium minimum ugięcia modyfikacji ulega funkcja celu F oraz postać wektora \mathbf{P} (od którego zależy tylko prawa strona równań MES), mianowicie

$$\mathbf{P} = [z_{t(1)} \quad z_{t(2)} \quad \dots \quad z_{t(n_t)}]^T, \quad F(\mathbf{P}) = \|\mathbf{U}(\mathbf{P})\| \quad (25)$$

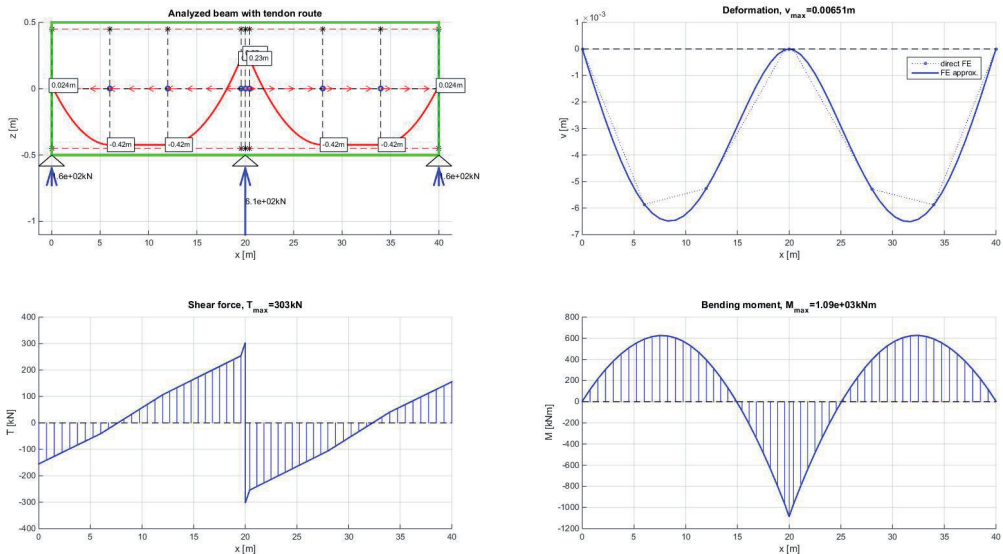
gdzie $\|\cdot\|$ oznacza normę Euklidesa (średnio-kwadratową). Wszystkie pozostałe składniki samego sformułowania oraz algorytmu łączonej MES-AG pozostają niezmiennione. Obliczenia przeprowadzono dla następujących danych:

- moduł Younga betonu $E = 35220.5$ MPa,

- przekrój poprzeczny prostokątny o polu powierzchni $A = 1 \text{ m}^2$ i momencie bezwładności $I = 8.3332 \text{ m}^4$,
- gęstość masy betonu $\rho = 2500 \text{ kg/m}^3$,
- typ konstrukcji: belka dwuprzęsłowa, swobodnie podparta, o całkowitej długości $L = 40 \text{ m}$, przęsła równej długości (po 20 m),
- pole powierzchni cięgna $A_t = 1.5 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$,
- siła sprężająca $N_t = \sigma_t A_t = 1476 \cdot 1.5 \cdot 10^{-4} \text{ kN} = 221.4 \text{ kN}$, naciąg dwustronny, pominięte straty siły sprężającej,
- 9 punktów konstrukcyjnych kabla sprężającego, o ustalonych położeniach poziomych

$$\mathbf{X}_t = [0 \ 6 \ 12 \ 19.57 \ 20 \ 20.43 \ 28 \ 34 \ 40]^T \text{ m} \quad (26)$$

- $N = 8$ elementów skończonych o funkcjach kształtu Hermite'a, dopasowanych do rozkładu punktów kabla (co nie jest wymogiem koniecznym).



Rys. 7. Wynik procesu optymalizacji trasy cięgna sprężonej belki dwuprzęsłowej z naciągiem dwustronnym: statyka dla współrzędnych cięgna otrzymanych z procedury optymalizacji za pomocą MES-AG

Wyniki procesu optymalizacji za pomocą MES-AG (z parametrami podobnymi jak dla zadania odwrotnego kratownicy), dla kryterium minimum ugięcia, pokazano na rys. 7.

Na pierwszym rysunku (górny lewy róg) pokazano przebieg trasy kabla po optymalizacji, który jest zgodny z ogólnie przyjętymi zasadami jej projektowania w przypadku tego typu konstrukcji. Na drugim rysunku (górny prawy róg) pokazano wykres przemieszczeń, na trzecim (dolny lewy róg) rozkład sił poprzecznych, a na czwartym (dolny prawy róg) rozkład momentów zginających. Warto zauważyć, iż uzyskana została symetria trasy ciągła, mimo iż nie została ona wymuszona w jego modelu.

7. Połączenie MC i BMRS dla zadań wprost i odwrotnych

W celu analizy szerszej klasy zagadnień eliptycznych (anizotropia materiałowa, obszary o złożonej geometrii, nieregularne siatki węzłów, mieszane warunki brzegowe, niezerowa intensywność obciążeń), konieczne jest przeformułowanie i rozszerzenie wybranych aspektów oryginalnego podejścia Monte Carlo (MC) z ustaloną losową ścieżką (rozdział 1).

Losowy wybór czterech zwrotów dla dwóch wzajemnie prostopadłych kierunków, z równym prawdopodobieństwem każdy, co jest naturalne dla regularnej siatki, nie obowiązuje w przypadku nieregularnych chmur węzłów. Należy zatem zastosować nowe kryteria wyboru kierunku, wykorzystując nieregularny rozkład węzłów (kryterium odległości, kryterium krzyża, kryterium sąsiadów Voronoi, typowe dla analizy BMRS). Zarówno całkowita liczba węzłów w takiej konfiguracji (nazywana gwiazdą lub matrycą w analizie MRS), jak i ich rozkład powinny być określone w taki sposób, aby wynikowy schemat aproksymacji pozostał dobrze uwarunkowany i nieosobliwy. Zatem liczba węzłów jest zwykle większa niż jest to wymagane ze względu na rząd operatora różniczkowego. Najprostsze kryterium opiera się tylko na odległości między węzłami. Z kolei w kryterium krzyża, dla przypadku 2D, najbliższe sąsiedztwo węzła centralnego jest podzielone na cztery strefy. Każda z czterech półosi jest przypisana do jednej z tych stref. Określona liczba węzłów (zwykle 2, 3, 4, w zależności od rzędu pochodnych), najbliższej węzła centralnego (punktu), jest wybierana z każdej strefy osobno, dlatego liczba węzłów w gwiazdzie MRS jest zawsze stała.

W konsekwencji równe prawdopodobieństwa kierunku ruchu, odpowiadające standardowemu podejściu MC, nie obowiązują przy heterogenicznym rozkładzie kierunków ruchu. Dlatego należy ustalić nowe zasady ich wyznaczania, biorąc pod uwagę nieregularności węzłów. Najbardziej intuicyjna koncepcja opiera się na odwrotnej proporcjonalności między długością mierzoną między dwoma węzłami, odłożoną w kierunku następnego ruchu, a prawdopodobieństwem jego wyboru. Innymi słowy, im dłuższa długość kroku w danym kierunku, tym mniejsze prawdopodobieństwo wyboru tego kierunku. Taka koncepcja może być wdrożona w sposób naturalny przy użyciu techniki aproksymacji MWLS, również typowej dla BMRS.

Podczas gdy potencjalne kierunki następnego ruchu i odpowiednie prawdopodobień-

stwa wyboru zostały przeformułowane, ogólne zasady procedury losowej ścieżki pozostają niezmiennie. Kolejny element ścieżki jest generowany losowo, do czasu aż osiągnięty zostanie pierwszy węzeł brzegowy, w którym znamy wartość rozwiązania. W konsekwencji nie wszystkie węzły brzegowe kończą losową ścieżkę, ponieważ mogą one odpowiadać naturalnym warunkom brzegowym, dla których znamy wartości pochodnych, zamiast samego rozwiązania. Ponadto należy zbudować odpowiednią statystykę trafień we wszystkie węzły (nie tylko brzegowe) odwiedzone w czasie prowadzenia ścieżki. Jest to wymagane z punktu widzenia ostatecznej formuły MC, którą można uznać za nieobciążoną estymację stochastyczną wszystkich znanych parametrów materiałowych i obciążeniowych zadania. Tak zbudowane podejście MC-BMRS ma wiele zalet, a mianowicie:

- nie wymaga dodatkowej przebudowy pierwotnego zagadnienia brzegowego,
- może być zastosowane do złożonych geometrii i zagadnień eliptycznych w bardziej ogólnej formie, ponieważ zarówno długość kroku, jak i kierunki ruchu są zmienne, a zatem skutecznie dostosowują się do lokalnego rozkładu węzłów i natury równania,
- bierze pod uwagę wszystkie dane *a priori* (np. parametry obciążenia, współczynniki materiałowe, wymiary obszaru),
- dostarcza wyraźną relację typu stochastycznego wiążącą wielkości wyjściowe (wartości nieznannej funkcji w wybranych punktach) i dane wejściowe (np. parametry obciążenia), dlatego jest szczególnie wygodne w zadaniach, w których wartości funkcji w wybranych punktach muszą być wielokrotnie obliczane (np. zagadnienia nieliniowe, rozwiązywane w sposób przyrostowo-iteracyjny, zagadnienia niestacjonarne, zadania odwrotne),
- może być dodatkowo sprzężone z dowolnymi metodami deterministycznymi i stochastycznymi, np. sprzężenie MC/MES w celu analizy tego samego zadania w kilku podobszarach; w każdym podobszarze obowiązuje inna metoda (np. zgodnie z wymogami dokładności i ograniczeniami geometrii) i jest ona stosowana oddzielnie, a następnie obliczana jest dodatkowa całka po wspólnym interfejsie, wymuszająca ciągłość rozwiązania i jego pochodnych,
- jest ono bardzo proste i szybkie, szczególnie gdy wysoka dokładność rozwiązania nie jest jednym z najważniejszych aspektów analizy (np. wstępna ocena rozwiązania dla przyszłych procedur iteracyjnych).

W kolejnych podrozdziałach zaprezentowano sposób obliczania prawdopodobieństw ruchów w ramach budowy losowej ścieżki po obszarze, a także sposób wyznaczania końcowej formuły MC, dla kilku przykładowych zadań termicznych oraz omówiono rezultaty wybranych przykładów obliczeniowych.

7.1. Jednowymiarowy ustalony przepływ ciepła

Sformułowanie lokalne zadania (1) dla przypadku jednowymiarowego sprowadza się do dwupunktowego zagadnienia brzegowego, w którym nieznaną funkcją temperatury $T \in C^2$ musi spełniać następujące równanie różniczkowe z mieszanymi warunkami brzegowymi

$$\left\{ \begin{array}{l} T(a) = T_a, \quad x = a, \\ -\frac{d\lambda}{dx} \frac{dT}{dx} - \lambda(x) \frac{d^2T}{dx^2} = f(x), \quad x \in (a, b) \\ \lambda(b) \frac{dT}{dx}(b) = q_b, \quad x = b. \end{array} \right. \quad (27)$$

Przyjęto niejednorodny materiał o funkcji przewodzenia ciepła $\lambda = \lambda(x) \in C^1$. Zna-
ne obciążenie termiczne stanowią temperatura brzegowa T_a , strumień brzegowy q_b oraz
funkcja źródła ciepła $f = f(x)$.

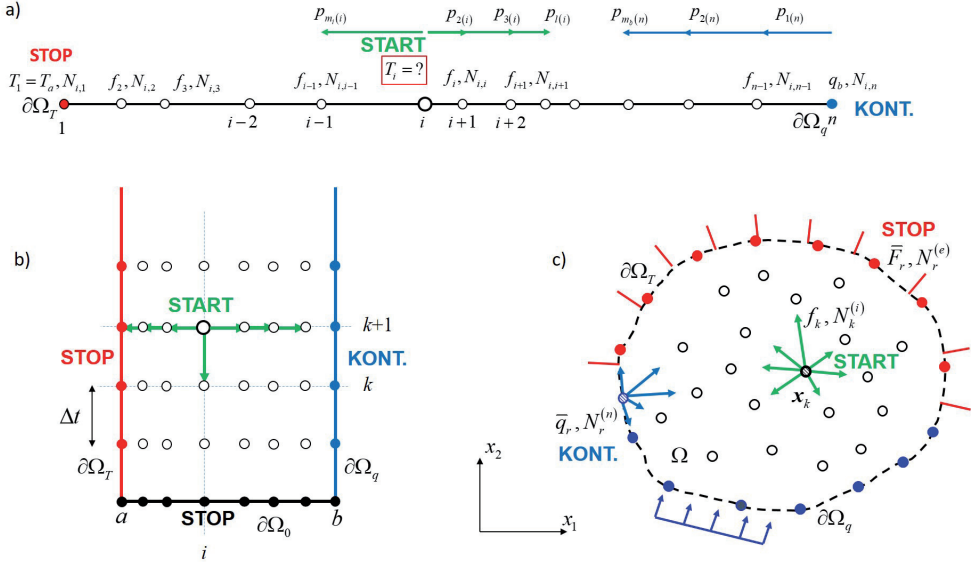
Założmy, iż obszar zadania (odcinek $[a, b]$) został poddany dyskretyzacji za pomocą
siatki węzłów nieregularnie rozłożonych o współrzędnych x_i , $i = 1, 2, \dots, n$. Równania
różnicowe są generowane w węzłach na podstawie (27) metodą kolokacji, co prowadzi
do układu równań algebraicznych

$$\left\{ \begin{array}{l} T_1 = T_a, \quad i = 1, \\ \sum_{l=1}^{m_s} (\lambda'_i M_{2,l}(x_i) + \lambda_i M_{3,l}(x_i)) T_{l(i)} = -f(x_i), \quad i = 2, \dots, n-1, \\ \lambda_b \sum_{l=1}^{m_s} M_{2,l}(x_n) T_{l(n)} = q_b, \quad i = n \end{array} \right. \quad (28)$$

Współczynniki różnicowe dla pierwszej $M_{2,l}$ i dla drugiej pochodnej $M_{3,l}$ pochodzą
z aproksymacji MWLS rozpiętej dla i -tego węzła siatki. Są one rozwiązaniem lokalnego
układu równań

$$\mathbf{M}(x) = (\mathbf{A}^T(x) \mathbf{W}^2(x) \mathbf{A}(x))^{-1} \mathbf{A}^T(x) \mathbf{W}^2(x) \quad (29)$$

gdzie \mathbf{A} jest macierzą o wymiarach $[3 \times m_s]$, współczynników rozwinięcia wartości
 $T(x_l)$ względem $T(x)$, w szereg Taylora do drugiego rzędu włącznie, zbudowany na
gwiazdzie różnicowej w x o m_s węzłach numerowanych $l = 1, 2, \dots, m_s$ (rys. 8 a). Na-
tomia \mathbf{W} jest diagonalną macierzą wagową o wymiarach $[m_s \times m_s]$, z osobliwymi
wagami przypisanymi każdemu węzłowi gwiazdy postaci $\omega_l(x) = \frac{1}{|x_l - x|^6 + \varepsilon}$, gdzie
 ε oznacza małą liczbę przeciwdziałającą dzieleniu przez zero (gdy $x \approx x_l$). Dla metody
MC-BMRS losowa ścieżka może rozpocząć się w dowolnym węzle x_i , w którym nie
znamy rozwiązania (węzły wewnętrzne $i = 2, 3, \dots, n-1$ oraz węzeł brzegowy $i = n$,



Rys. 8. Schematy budowy losowych ścieżek dla zadań termicznych: a) jednowymiarowego ustalonego, b) jednowymiarowego nieustalonego, c) dwuwymiarowego ustalonego

(rys. 8 a)). Dla ustalonego wewnętrznego węzła x_i , określamy sąsiednie węzły w liczbie $m_s - 1$ za pomocą odpowiedniego kryterium, a następnie wyznaczamy prawdopodobieństwa ruchu w ich kierunku na bazie drugiego równania z (28), czyli

$$T_i = \sum_{l=2}^{m_s} p_{l(i)} T_{l(i)} + s_i f(x_i), \quad i \in \{2, 3, \dots, n\} \quad (30)$$

gdzie prawdopodobieństwa $p_{l(i)}$ i czynnik skalujący s_i wynoszą

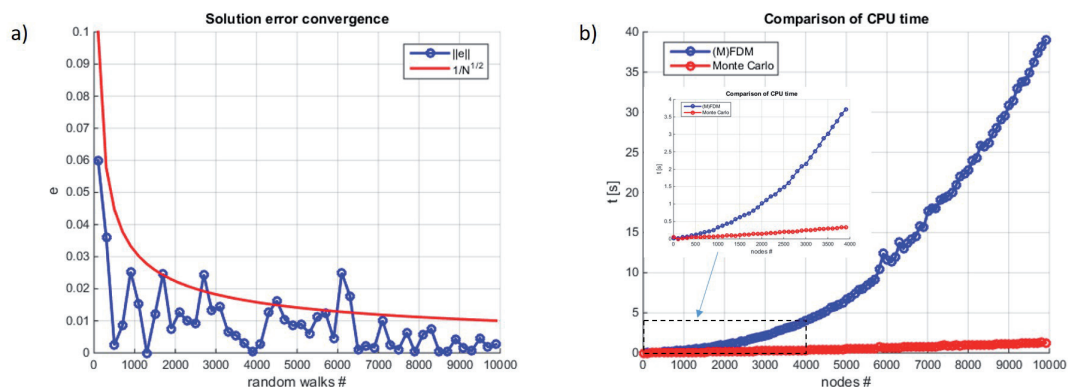
$$p_{l(i)} = -\frac{\lambda'_i M_{2,l}(x_i) + \lambda_i M_{3,l}(x_i)}{\lambda'_i M_{2,1}(x_i) + \lambda_i M_{3,1}(x_i)}, \quad s_i = -\frac{1}{\lambda'_i M_{2,1}(x_i) + \lambda_i M_{3,1}(x_i)} \quad (31)$$

oraz oczywiście $\sum_{l=2}^{m_s} p_{l(i)} = 1$. Podobnie czynimy w prawym węzle brzegowym, gdzie na bazie trzeciego równania z (28) mamy

$$T_{l(n)} = \sum_{l=2}^{m_s} p_{l(n)} T_{l(n)} + s_n q_b \quad (32)$$

gdzie

$$p_{l(n)} = -\frac{M_{2,l}(x_n)}{M_{2,1}(x_n)}, \quad s_n = \frac{1}{\lambda_b M_{2,1}(x_n)} \quad (33)$$



Rys. 9. Wyniki zastosowania metody MC-BMRS dla ustalonego zadania termicznego 1D: a) zbieżność rozwiązania w funkcji N , b) czas obliczeniowy w funkcji n

Ostatecznie końcowa formuła dla wyznaczenia pojedynczej wartości T_i , zgodnie z regułami metody Monte Carlo, jest następująca

$$\begin{aligned}
 T(x_i) = T_i &\approx \frac{1}{N} \left(N_{i,1}T_a + \sum_{l=2}^{n-1} N_{i,l}slf(x_l) + N_{i,n}snqb \right) = \\
 &= T_a + \frac{1}{N} \left(\sum_{l=2}^{n-1} N_{i,l}slf(x_l) + N_{i,n}snqb \right)
 \end{aligned} \tag{34}$$

gdzie N oznacza liczbę wszystkich losowych ścieżek wyznaczonych dla węzła x_i , a $N_{i,j}$ oznaczają indykacje (trafienia) węzłowe.

W celu zilustrowania działania algorytmu MC-BMRS, rozwiązano zadanie (27) dla $a = 1$, $b = 4$, $\lambda(x) = x$, rozwiązania ścisłego $T(x) = \sin\left(\frac{2x}{b-a}\right)$ (dla którego wyznaczono obciążenie termiczne) i $n = 17$. Przeprowadzono obliczenia klasyczną BMRS oraz MC-BMRS w celu oszacowania wartości znajdującej się w środku obszaru (dla $x = 2.5$). Na rys. 9 a pokazano zbieżność ścisłego względnego błędu rozwiązania w tym punkcie w funkcji liczby losowych ścieżek N , wraz z teoretycznym oszacowaniem błędu $\frac{1}{\sqrt{N}}$, typowym dla MC, w które wyniki numeryczne bardzo dobrze się wpisują. Na rys. 9 b pokazano porównanie czasu obliczeń potrzebnego do wyznaczenia tego rozwiązania za pomocą BMRS poprzez rozwiązanie układu (28) oraz MC-BMRS za pomocą wzoru jawnego (34) i $N = 1000$ (co daje błąd $\approx 3\%$), w odniesieniu do liczby węzłów n . Można zaobserwować wyraźną przewagę proponowanego podejścia, jeżeli rozwiązanie potrzebne jest jedynie w kilku wybranych punktach obszaru.

W dalszej kolejności założmy, iż funkcja źródła ciepła $f(x)$ jest nieznaną. Dlatego zastąpimy ją jej interpolacją zbudowaną na trzech równo rozłożonych punktach

$$\mathbf{x}_f = \left[a \quad \frac{a+b}{2} \quad b \right] \quad (35)$$

postaci

$$f(x) = \sum_{j=1}^3 L_j(x) f_j = \mathbf{L}(x) \mathbf{f} \quad (36)$$

gdzie L_i oznaczają funkcje bazowe (wielomiany Lagrange'a drugiego stopnia), a f_j nieznanne wartości funkcji f w punktach \mathbf{x}_f , które są stopniami swobody modelu źródła ciepła. Dodatkowo przyjmujemy dane pomiarowe w postaci odczytów temperatury

$$\hat{T}_i \pm \Delta T_i, \quad i = 1, 2, \dots, m_t \quad (37)$$

w m_t punktach pomiarowych. Tak sformułowanie zadanie jest zadaniem odwrotnym identyfikacji obciążenia termicznego, które sprowadza się do zadania optymalizacji

$$\mathbf{P}^{(\text{opt})} = \arg \min_{(\mathbf{P})} F(\mathbf{P}), \quad F(\mathbf{P}) = \sqrt{\frac{1}{m_t} \sum_{i=1}^{m_t} \left(\frac{T(\hat{x}_i, \mathbf{P}) - \hat{T}_i}{\Delta T_i} \right)^2} \quad (38)$$

w którym wektor zmiennych decyzyjnych \mathbf{P} to wektor wartości funkcji f , czyli $\mathbf{P} = \mathbf{f}$.

Stosując standardowe metody optymalizacji otrzymamy złożone i czasochłonne algorytmy przeszukiwania obszaru bądź iteracyjne metody gradientowe, których zbieżność silnie zależna jest od punktu startowego. Wysoki czas obliczeń związany jest z potrzebą wielokrotnego rozwiązywania układu równań (28) dla różnych wartości \mathbf{f} . Pierwszym sposobem przewyciężenia tego ograniczenia może być zastąpienie rozwiązywania układu równań jawnym wzorem (34) na temperaturę obliczaną tylko i wyłącznie w punktach pomiarowych \mathbf{x}_t . Przyspieszy to proces rozwiązywania zadania, chociaż nie uwolni nas od pozostałych jego mankamentów. Jednak można postąpić jeszcze inaczej, budując jawne wzory na parametry \mathbf{P} , wykorzystując fakt, iż temperatura w punktach pomiarowych $T(\hat{x}_i, \mathbf{P})$ może być niezależnie obliczona dla każdego punktu pomiarowego z osobna z wykorzystaniem wzoru (34). W takim przypadku można analitycznie różniczkować funkcję celu (warunek konieczny istnienia minimum), a wynikający z tego liniowy układ równań algebraicznych

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m_t} S_{i,1}^2 & \sum_{i=1}^{m_t} S_{i,1}S_{i,2} & \sum_{i=1}^{m_t} S_{i,1}S_{i,3} \\ \sum_{i=1}^{m_t} S_{i,2}S_{i,1} & \sum_{i=1}^{m_t} S_{i,2}^2 & \sum_{i=1}^{m_t} S_{i,2}S_{i,3} \\ \sum_{i=1}^{m_t} S_{i,3}S_{i,1} & \sum_{i=1}^{m_t} S_{i,3}S_{i,2} & \sum_{i=1}^{m_t} S_{i,3}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{bmatrix} = \\
& = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m_t} S_{i,1} \left(\hat{T}_i - m_t T_a - s_n N_{i,n} q_b \right) \\ \sum_{i=1}^{m_t} S_{i,2} \left(\hat{T}_i - m_t T_a - s_n N_{i,n} q_b \right) \\ \sum_{i=1}^{m_t} S_{i,3} \left(\hat{T}_i - m_t T_a - s_n N_{i,n} q_b \right) \end{bmatrix} \quad (39)
\end{aligned}$$

można łatwo rozwiązać, wykorzystując jego małe rozmiary, symetrię i dodatnią określoność. Pomocniczą zmienną $S_{i,j}$ należy obliczać jako

$$S_{i,j} = -\frac{1}{N} \sum_{l=2}^{n-1} N_{i,l} s_l L_j(x_l), \quad i = 1, 2, \dots, m_t, \quad j = 1, 2, 3 \quad (40)$$

Dla tego samego zadania ustalonego (ale tym razem o nieznannej postaci funkcji f) przyjęto $m_t = 5$ pomiarowych temperatur pochodzących z symulacji numerycznej (wartości analityczne, zaburzone z losową amplitudą do 10% wartości oryginalnej). Przeprowadzono analizę zadania optymalizacji (17) za pomocą kilku metod standardowych oraz nowej metody MC-BMRS, według (39). W przypadkach, w których udało się wyznaczyć parametry źródła ciepła metodami standardowymi (na co ogromny wpływ miały przyjęty obszar dopuszczalny, czyli zakres wartości f_i oraz punkt startowy), czasy obliczeń sięgały od kilku do kilkunastu minut. Natomiast zastosowanie metody MC-BMRS, w której najkosztowniejszym etapem jest generacja losowych ścieżek, wymagało czasu poniżej sekundy. Wszystkie obliczenia przeprowadzono na komputerze o 16GB RAM i procesorze 1.8 GHz, wykorzystując autorski program napisany w środowisku Matlab.

7.2. Jednowymiarowy nieustalony przepływ ciepła

Sformułowanie lokalne zadania (1) dla nieustalonego przypadku jednowymiarowego sprowadza się do zagadnienia parabolicznego (początkowo-brzegowego), w którym nie-

znana funkcja temperatury $T \in C^2$ musi spełniać następujące równanie różniczkowe z mieszanymi warunkami brzegowymi i z warunkiem początkowym

$$\left\{ \begin{array}{l} T(a, t) = T_a(t), \quad x = a, \quad t \geq 0 \\ \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{\partial T}{\partial t} = f(x, t), \quad x \in (a, b), \quad t \geq 0 \\ \lambda \frac{\partial T}{\partial x}(b, t) = q_b(t), \quad x = b, \quad t \geq 0 \\ T(x, 0) = T_0(x), \quad x \in [a, b], \quad t = 0 \end{array} \right. \quad (41)$$

Dla uproszczenia przyjęto jednorodny materiał o współczynniku dyfuzji cieplnej α , który zależy od współczynnika przewodzenia ciepła λ , ciepła właściwego c oraz gęstości masy ρ . Znane obciążenie termiczne stanowią temperatura brzegowa $T_a(t)$, strumień brzegowy $q_b(t)$, temperatura początkowa $T_0(x)$ oraz funkcja źródła ciepła $f = f(x, t)$. Zastosowanie BMRS z aproksymacją MWLS i techniką kolokacji w węzle o numerze $(i, k + 1)$ oraz niejawnego (bezwarunkowo stabilnego) schematu całkowania po czasie, dla nieregularnej siatki n węzłów i poziomów czasowych o module Δt (rys. 8 b), prowadzi do następujących równań różnicowych dla węzłów wewnętrznych

$$\alpha \sum_{l=1}^{m_s} M_{3,l}(x_i) T_{l(i),k+1} - \frac{T_{i,k+1} - T_{i,k}}{\Delta t} = f(x_i, t_{k+1}), \quad i = 2, \dots, n-1, \quad k \geq 1 \quad (42)$$

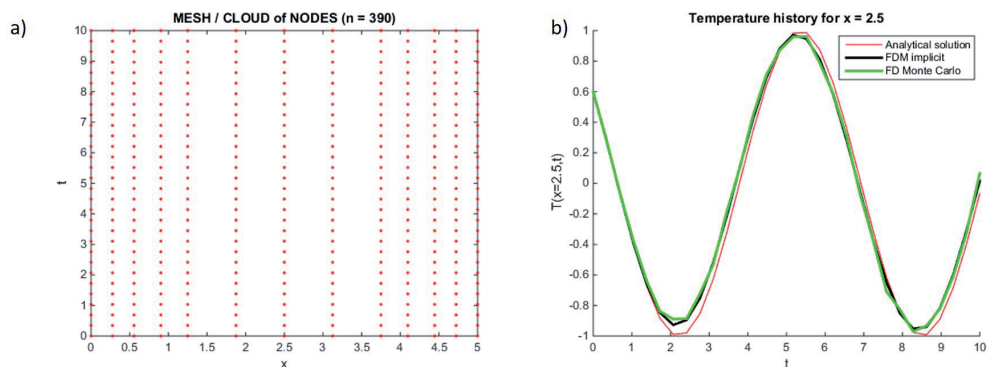
Na tej podstawie określamy relacje

$$T_{i,k+1} = \sum_{l=2}^{m_s} p_{l(i),k+1} T_{l(i),k+1} + p_{i,k} T_{i,k} + s_i f(x_i, t_{k+1}) \quad (43)$$

w której prawdopodobieństwa wyboru kierunków losowych ścieżek oraz mnożniki skalarnie wynoszą

$$p_{l(i),k+1} = \frac{\alpha \Delta t M_{3,l}(x_i)}{1 - \alpha \Delta t M_{3,1}(x_i)}, \quad p_{i,k} = \frac{1}{1 - \alpha \Delta t M_{3,1}(x_i)}, \quad s_i = -\frac{\Delta t}{1 - \alpha \Delta t M_{3,1}(x_i)} \quad (44)$$

Z uwagi na postać naturalnego warunku brzegowego, postępowanie dla $i = n$ czyli $x = x_n = b$ oraz $t = t_{k+1}$ jest identyczne, jak dla zadania ustalonego, czyli zgodnie z wzorami (32) i (33).



Rys. 10. Wyniki zastosowania metody MC-BMRS dla niustalonego zadania termicznego 1D: a) siatka BMRS, b) historia temperatury T dla środka przedziału, w funkcji czasu dla rozwiązania analitycznego, BMRS oraz MC-BMRS

Ostateczny wzór metody MC-BMRS dla obliczenia wartości $T_{i,k+1}$ jest następujący

$$T_{i,k+1} = \frac{1}{N} \left(\sum_{r=2}^{k+1} (N_{(i,k+1),(1,r)} T_a(t_r) + N_{(i,k+1),(n,r)} s_n q_b(t_r)) + \sum_{l=2}^{n-1} N_{(i,k+1),(l,1)} T_0(x_l) + \sum_{l=2}^{n-1} \sum_{r=2}^{k+1} N_{(i,k+1),(i,r)} s_{lf}(x_l, t_r) \right), \quad i = 2, 3, \dots, n, \quad k \geq 1 \quad (45)$$

Podjęcie przetestowano na modelowym matematycznym przykładzie, dla którego przyjęto $a = 0$, $b = 5$, $\alpha = 1$, $\lambda = 1$, a obciążenie termiczne określono na podstawie rozwiązania analitycznego $\bar{T}(x, t) = \sin(x + t)$. Założono 30 poziomów czasowych o $\Delta t = 0.3448$ oraz nieregularną siatkę o $n = 13$ węzłach na każdym poziomie (rys. 10a) oraz $N = 5000$ losowych ścieżek. Na rys. 10b pokazano historię temperatury dla punktu środkowego ($x = 2.5$) w funkcji czasu, dla rozwiązania analitycznego, standardowego BMRS ze schematem niejawnym oraz opisywanego powyżej MC-BMRS, z zastosowaniem wzoru (45). Można zauważyć, iż rozwiązanie MC-BMRS stanowi dobre przybliżenie rozwiązania BMRS (ale bez potrzeby rozwiązywania zadania na całej siatce), które z kolei stanowi dobre przybliżenie rozwiązania ścisłego.

7.3. Dwuwymiarowy ustalony przepływ ciepła

Sformułowanie lokalne zadania (1) dla przypadku dwuwymiarowego sprowadza się do zagadnienia Poissona, mianowicie znaleźć funkcję temperatury $T \in C^2$, taką iż $T : (x_1, x_2) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, która spełnia następujące równanie brzegowe dla materiału anizotropowego

$$-\frac{\partial}{\partial x_1} \left(\lambda_1(x_1, x_2) \frac{\partial T}{\partial x_1}(x_1, x_2) \right) - \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\lambda_2(x_1, x_2) \frac{\partial T}{\partial x_2}(x_1, x_2) \right) = f(x_1, x_2) \quad \text{w } \Omega \quad (46)$$

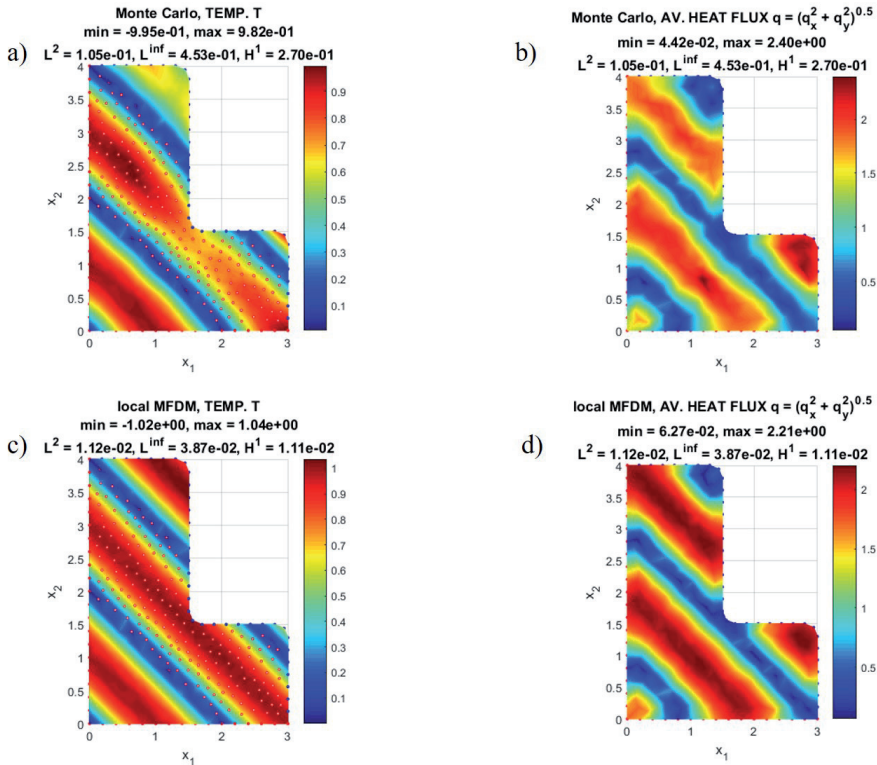
z odpowiednimi warunkami brzegowymi typu podstawowego

$$T(x_1, x_2) = \bar{T}(x_1, x_2) \quad \text{na } \partial\Omega_T \quad (47)$$

i naturalnego

$$-\lambda_n(x_1, x_2) \frac{\partial T}{\partial n}(x_1, x_2) = \bar{q}(x_1, x_2) \quad \text{na } \partial\Omega_q \quad (48)$$

Podobnie jak w przypadku jednowymiarowym, stosując dyskretyzację BMRS, aproksy-



Rys. 11. Rezultaty analizy ustalonego przepływu ciepła dla L-kształtu; a) temperatura wg metody Monte Carlo, b) strumień ciepła wg metody Monte Carlo, c) temperatura wg BMRS, d) strumień ciepła wg BMRS

mację MWLS oraz technikę kolokacji dla węzłów wewnętrznych $\mathbf{x}_k \in \Omega$ i dla węzłów brzegowych z warunkiem naturalnym $\mathbf{x}_r \in \partial\Omega_q$ (rys. 8c), otrzymujemy

$$\left\{ \begin{array}{l} T_k = \\ = \sum_{j=1}^m p_j T_{j(k)} - \frac{f_k}{\frac{\partial \lambda_1}{\partial x_1} \Big|_k M_{k_{2,0}} + \lambda_{1|k} M_{k_{4,0}} + \frac{\partial \lambda_2}{\partial x_2} \Big|_k M_{k_{3,0}} + \lambda_{2|k} M_{k_{6,0}}}, \quad \mathbf{x}_k \in \Omega \\ T_r = \sum_{j=1}^m p_j T_{j(r)} + \frac{\bar{q}_r}{\lambda_{1|r} n_{1|r} M_{r_{2,0}} + \lambda_{2|r} n_{2|r} M_{r_{3,0}}}, \quad \mathbf{x}_r \in \partial\Omega_q \end{array} \right. \quad (49)$$

gdzie $f_k = f(\mathbf{x}_k)$, $\bar{q}_r = \bar{q}(\mathbf{x}_r)$, $\lambda_{1|r} = \lambda_1(\mathbf{x}_r)$, $\lambda_{2|r} = \lambda_2(\mathbf{x}_r)$, $\lambda_{1|k} = \lambda_1(\mathbf{x}_k)$, $\lambda_{2|k} = \lambda_2(\mathbf{x}_k)$, $\frac{\partial \lambda_1}{\partial x_1} \Big|_k = \frac{\partial \lambda_1}{\partial x_1}(\mathbf{x}_k)$, $\frac{\partial \lambda_2}{\partial x_2} \Big|_k = \frac{\partial \lambda_2}{\partial x_2}(\mathbf{x}_k)$, $n_{1|r} = n_1(\mathbf{x}_r)$, $n_{2|r} = n_2(\mathbf{x}_r)$ a $\mathbf{n} = [n_1, n_2]$ jest wektorem normalnym do brzegu $\partial\Omega_q$, zorientowanym na zewnątrz obszaru. Prawdopodobieństwa wyboru kierunku ruchu są równe

$$p_j = \left\{ \begin{array}{l} - \frac{\frac{\partial \lambda_1}{\partial x_1} \Big|_k M_{k_{2,j}} + \lambda_{1|k} M_{k_{4,j}} + \frac{\partial \lambda_2}{\partial x_2} \Big|_k M_{k_{3,j}} + \lambda_{2|k} M_{k_{6,j}}}{\frac{\partial \lambda_1}{\partial x_1} \Big|_k M_{k_{2,0}} + \lambda_{1|k} M_{k_{4,0}} + \frac{\partial \lambda_2}{\partial x_2} \Big|_k M_{k_{3,0}} + \lambda_{2|k} M_{k_{6,0}}}, \quad \mathbf{x}_k \in \Omega \\ - \frac{\lambda_{1|r} n_{1|r} M_{r_{2,j}} + \lambda_{2|r} n_{2|r} M_{r_{3,j}}}{\lambda_{1|r} n_{1|r} M_{r_{2,0}} + \lambda_{2|r} n_{2|r} M_{r_{3,0}}}, \quad \mathbf{x}_r \in \partial\Omega_q \end{array} \right. \quad (50)$$

dla $j = 1, 2, \dots, m$, podczas gdy ostateczna formuła MC jest dana za pomocą następującego jawnego wzoru

$$\left\{ \begin{array}{l} T_k \approx \frac{1}{N} \sum_r^{n^{(e)}} \bar{T}_r N_r^{(e)} - \frac{1}{N} \sum_r^{n^{(n)}} \frac{\bar{q}_r N_r^{(n)}}{\lambda_{1|r} n_{1|r} M_{r_{2,0}} + \lambda_{2|r} n_{2|r} M_{r_{3,0}}} + \\ - \frac{1}{N} \sum_k^{n^{(i)}} \frac{f_k N_k^{(i)}}{\frac{\partial \lambda_1}{\partial x_1} \Big|_k M_{k_{2,0}} + \lambda_{1|k} M_{k_{4,0}} + \frac{\partial \lambda_2}{\partial x_2} \Big|_k M_{k_{3,0}} + \lambda_{2|k} M_{k_{6,0}}} \\ T_r = \bar{T}_r, \quad r = 1, 2, \dots, n^{(e)} \end{array} \right. \quad (51)$$

dla $k = 1, 2, \dots, n^{(i)} + n^{(n)}$.

Reprezentatywne wyniki przedstawiono na rys. 11, dla obszaru w kształcie litery L, z warunkami brzegowymi zarówno typu podstawowego, jak i naturalnego. Ponadto

zastosowano model dyskretyzacji za pomocą nieregularnie rozłożonych węzłów, o liczbie $n = 348$. Funkcje obciążenia termicznego (\bar{T}, f, \bar{q}) zostały utworzone na podstawie rozwiązania analitycznego $\bar{T}(x, y) = \sin\left(\frac{\pi x}{2} + \frac{\pi y}{2}\right)$; przyjęto też funkcje materiałowe $\lambda_x = x^2$ i $\lambda_y = y^2$. Liczba losowych ścieżek została ustawiona na $N = 3000$. Zaprezentowano następujące wykresy: rozwiązania metody Monte Carlo dla temperatury i średniego strumienia ciepła oraz równoważne rozwiązania BMRS. Dodatkowo ściśle błędy rozwiązania numerycznego (w odniesieniu do analitycznych rozwiązań) zostały oszacowane w normach L^2 , L^{inf} oraz semi-normie H^1 i przedstawione w postaciach liczbowych. Chociaż wyniki metody Monte Carlo są mniej precyzyjne, ogólna jakość rozwiązania jest rozsądna, szczególnie w porównaniu do założonego rozwiązania analitycznego \bar{T} i odpowiednich rozwiązań BMRS. Dodatkowo ich otrzymanie jest znacznie prostsze (jedna formuła na każdy węzeł z nieznaną wartością temperatury).

8. Podsumowanie

W opracowaniu zaprezentowano wybrane kombinacje różnych metod obliczeniowych oraz ich przykładowe zastosowania w zagadnieniach mechaniki i inżynierii lądowej. Szczególną uwagę zwrócono na możliwość lepszego, bardziej efektywnego wykorzystania zalet łączonych metod, przy jednoczesnej redukcji ich wad. Jako modelowy przykład wskazano ogólną klasę nieustalonych zadań termomechanicznych oraz ich szczególne przypadki.

Dla ustalonego zadania termomechanicznego zastosowano równoległe podejście MES-BMRS pozwalające na stosowanie różnych metod dyskretyzacji w podobszarach, z odpowiednim scaleniem aproksymacji nieznanymi pól fizycznych na interfejsie. Po raz pierwszy zaproponowano połączenie dwóch różnych sformułowań zadania brzegowego, mianowicie sformułowania wariacyjnego (typowego dla MES) oraz lokalnego, które może być wykorzystane w BMRS.

Ustalone zadanie termiczne poddano analizie numerycznej, wykorzystując metodę sprzężoną MES-BMRS, w której rząd interpolacji w elementach skończonych podnoszony jest bez potrzeby wprowadzania dodatkowych węzłów i stopni swobody, na sposób różnicowy, poprzez obliczanie dodatkowych wyrazów wynikających z rozwinięcia funkcji w szereg Taylora. Dzięki temu posunięciu można znacznie obniżyć błąd rozwiązania oraz przyspieszyć jego zbieżność. Dodatkowo istnienie dwóch rozwiązań dla jednej siatki MES, podstawowego i ulepszanego, jest podstawą do stworzenia efektywnego estymatora błędu, który może być wykorzystany w procedurze adaptacyjnej siatki MES.

Zadania optymalizacji, związane z identyfikacją obciążenia konstrukcji inżynierskiej, analizowano za pomocą łączonej MES-AG. Algorytm MES odpowiada za budowę układu równań algebraicznych, w którym prawa jego strona zawiera nieznane parametry

obciążenia. Są one wyznaczone za pomocą stochastycznej metody przeszukiwań (AG), która służy do minimalizacji określonej funkcji błędu. Podejście zastosowano do zadania odwrotnego kratownicy płaskiej oraz, po raz pierwszy, do optymalizacji trasy cięga sprężającego w konstrukcjach belkowych.

Zadania wprost i odwrotne realizowano za pomocą łączonej metody MC-BMRS. Algorytm BMRS odpowiada za sposób budowy tras węzłowych (losowych ścieżek) prowadzących od wybranego węzła z niewiadomą wartością rozwiązania, poprzez inne węzły siatki aż do węzła, w którym rozwiązanie jest znane. Rozkład węzłów może być dowolnie nieregularny, a rozważane zagadnienie liniowe może być w miarę ogólne. Podejście zastosowano dla trzech wariantów zadania termicznego, w tym odwrotnego oraz, po raz pierwszy, do zadania nieustalonego.

Plany przyszłej pracy badawczej są przede wszystkim związane z rozwijaniem podejścia MC-BMRS dla zagadnień odwrotnych, zwłaszcza zagadnień identyfikacji obciążeń typu mechanicznego. Uzyskane już wyniki dla zadań termicznych (skalnych) nie pozwalają wprawdzie wyciągać bardzo ogólnych wniosków, ale potwierdzają jego potencjał w zadaniach, w których niewiadoma jest wektorem. Metoda powinna pozwolić na uzyskiwanie nieznanych parametrów obciążenia w sposób półanalityczny, bez potrzeby stosowania metod optymalizacji numerycznej, kosztownych i czułych na dobór parametrów.

Podziękowanie

Badania uzyskały wsparcie finansowe Narodowego Centrum Nauki (NCN) w ramach projektu własnego 2015/19/D/ST8/00816 pt. Komputerowa analiza inżynierskich nieustalonych zagadnień termosprężystych i termoplastycznych, za pomocą sprzężonej MES / bezsiatkowej MRS.

L i t e r a t u r a

- [1] T. Belytschko, D. Organ, Y. Krongauz, Coupled Finite Element/Element Free Galerkin Method Computational Mechanics, vol. 17, 1995, pp. 186-195.
- [2] T. Burczyński, P. Orantek, Evolutionary and hybrid algorithms, in: R.R. Gajewski (Ed.), Neural Networks, Genetic Algorithms, Fuzzy Sets [in Polish], BEL, Rzeszów, 1999, pp. 99-117.
- [3] R. Cazacu, L. Grama, Steel Truss Optimization Using Genetic Algorithms and FEA, Procedia Technology, vol.12 (C), 2014, pp. 339-346.

- [4] Ch. Constanda, D. Doty, W. Hamill, *Boundary Integral Equation Methods and Numerical Solutions: Thin Plates on an Elastic Foundation*, New York: Springer, 2016.
- [5] R. Eckhardt, Stan Ulam, John von Neumann, and the Monte Carlo method, *Los Alamos Science, Special Issue (15)*, 1987, pp. 131-137.
- [6] D. Goldberg, *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*, Reading, MA: Addison-Wesley Professional, 1989.
- [7] P.C. Hansen, *The L-Curve and its Use in the Numerical Treatment of Inverse Problems*, *Computational Inverse Problems in Electrocardiology, Advances in Computational Bioengineering*, WIT Press, 2000, pp. 119-142.
- [8] J.R. Holland, *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, MIT Press, 1975.
- [9] J. Krok, J. Orkisz, *A Unified Approach to the FE and Generalized Variational (FD) Methods in Nonlinear Mechanics, Concepts and Numerical Approach, Discretization Methods in Structural Mechanics*, vol. 1, 1990, pp. 353-362.
- [10] J. Jaśkowiec, S. Milewski, *The effective interface approach for coupling of the FE and meshless FD methods and applying essential boundary conditions*, *Computers and Mathematics with Applications*, vol. 70(5), 2015, pp. 962-979.
- [11] J. Jaśkowiec, S. Milewski, *Coupling finite element method with meshless finite difference method in thermomechanical problems*, *Computers and Mathematics with Applications* vol. 72(9), 2016, pp. 2259-2279.
- [12] P. Lancaster, K. Salkauskas, *Surfaces generated by moving least-squares method*, *Math Comp*, vol. 155(37), 1981, pp. 141-158.
- [13] P. Lancaster, K. Salkauskas, *Curve and surface fitting*, Academic Press Inc, 1990.
- [14] S. Li, W.K. Liu, *Meshfree and particle methods and their applications*, *Applied Mechanics Review*, vol. 55, 2002, pp. 1-34.
- [15] T. Liszka, J.Orkisz, *The finite difference method at arbitrary irregular grids and its application in applied mechanics*, vol. 11, *Computers and Structures*, 1980, pp. 83-95.
- [16] G.R. Liu, *Mesh Free Methods: Moving Beyond The Finite Element Method*, CRC Press, 2003.
- [17] W.K. Liu, S. Jun, Y.F. Zhang, *Reproducing kernel particle methods*, *Int. J. Numer. Methods Eng.* vol. 20, 1995, pp. 1081-1106.
- [18] G.C. Luh, C.Y. Wu, *Non-linear system identification using genetic algorithms*, *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part I: Journal of Systems and Control Engineering*, vol. 213(2), 1999, pp. 105-118.

- [19] N. Metropolis, S. Ulam, The Monte Carlo Method, *Journal of the American Statistical Association*. American Statistical Association., vol. 44(247), 1949, pp. 335-341.
- [20] S. Milewski, Meshless Finite Difference Method with Higher Order Approximation - Applications in Mechanics, *Archives of Computational Methods in Engineering*, vol. 19(1), 2012, pp. 1-49.
- [21] S. Milewski, Selected computational aspects of the meshless finite difference method, *Numerical Algorithms*, vol. 63(1), 2013, pp. 107-126.
- [22] S. Milewski, Combination of the meshless finite difference approach with the Monte Carlo random walk technique for solution of elliptic problems, *Computers & Mathematics with Applications*, vol. 76(4), 2018, pp. 854-876.
- [23] S. Milewski, Determination of the truss static state by means of the combined FE/GA approach, on the basis of strain and displacement measurements, *Inverse Problems in Science and Engineering*, vol. 27(11), 2019, pp. 1537-1558.
- [24] S. Milewski, R. Putanowicz, Higher order meshless schemes applied to the finite element method in elliptic problems, *Computers & Mathematics with Applications*, vol. 77(3), 2019, pp. 779-802.
- [25] S. Milewski, Application of the Monte Carlo method with meshless random walk procedure to selected scalar elliptic problems, *Archives of Mechanics*, vol. 71(4-5), 2019, pp. 337-375.
- [26] B. Moller, M. Beer, *Fuzzy Randomness, Uncertainty in Civil Engineering and Computational Mechanics*, Springer-Verlag, 2004.
- [27] J. Navrátil, *Prestressed concrete structures*, Technical University of Ostrava, Ostrava 2014.
- [28] J.Orkisz, *Finite Difference Method (part III)*, *Handbook of Computational Solid Mechanics*, Springer-Verlag, 1998, pp. 336-431.
- [29] N. Perrone, N. and R. Kao, A general finite difference method for arbitrary meshes, *Computers and Structures*, vol. 5, 1975, pp. 45-58.
- [30] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery, *Numerical Recipes, The art of Parallel Scientific Computing*, Cambridge University Press, 1999.
- [31] B.D. Ripley, *Pattern Recognition and Neural Networks*, Cambridge University Press, 2007.
- [32] K.K. Sabelfeld, *Monte Carlo Methods in Boundary Value Problems*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1991.
- [33] G. Wang, F. Guo, A stochastic boundary element method for piezoelectric problems, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, vol.95, pp. 248-254, 2018.

- [34] M.J. Wyatt, G. Davies, C. Snell, A new difference based finite element method, Proceedings of the Institution of Civil Engineers, vol. 59(2), 1975, pp. 395-409.
- [35] O.C. Zienkiewicz, R.L. Taylor, Finite Element Method Its Basis and Fundamentals, Elsevier, 2005.

Michał PAZDANOWSKI*

WYBRANE ASPEKTY NIEKTÓRYCH ZASTOSOWAŃ UOGÓLnionej METODY RÓŻNIC SKOŃCZONYCH W ANALIZIE NAPRĘŻEŃ RESZTKOWYCH

SELECTED ISSUES OF CERTAIN APPLICATIONS OF GENERALIZED FINITE DIFFERENCE METHOD IN THE ANALYSIS OF RESIDUAL STRESSES

Streszczenie

W pracy przedstawiono dwa modele mechaniczne będące podstawą zbudowania modelu numerycznego UMRS służącego do analizy naprężeń resztkowych w ciałach poddanych obciążeniom cyklicznie zmiennym powodującym ich lokalne uplastycznienie. Przedstawiono wybrane wyniki testów służących ustaleniu parametrów modelu numerycznego oraz wyniki obliczeń przeprowadzonych dla rzeczywistego obiektu, jakim jest szyna kolejowa. Zaproponowano dwa sposoby prowadzące do przyspieszenia procesu obliczeniowego.

Przedstawione wyniki wydają się wskazywać, że uzyskano model obliczeniowy pozwalający na sprawne i bardzo konkurencyjne czasowo w stosunku do pełnej sprężysto-plastycznej analizy przyrostowej wyznaczanie rozkładów naprężeń resztkowych w ciałach pryzmatycznych poddanych obciążeniom cyklicznie zmiennym. W szczególności potwierdzono efektywność metody ortogonalizacji przestrzeni zmiennych decyzyjnych przy rozwiązywaniu zadania nieliniowej minimalizacji oraz zasadność stosowania w trakcie obliczeń nieregularnych siatek węzłów o właściwie zlokalizowanych strefach koncentracji.

Słowa kluczowe: naprężenia resztkowe, Uogólniona Metoda Różnic Skończonych, minimalizacja

Abstract

Two mechanical models, which may be used to develop a Generalized Finite Difference Method (GFDM) based numerical model to analyze residual stresses in bodies subjected to cyclic loads resulting in localized yielding of the material are presented in this chapter. Selected results of tests, which have been used to determine certain parameters of the numerical model, and the results of calculations performed for a real engineering object, i.e. railroad rail have been presented as well. Two approaches leading to substantial speedup of calculations have been proposed as well.

The results shown seem to indicate, that the obtained numerical model should allow for an efficient analysis of residual stresses in prismatic bodies subjected to cyclic loads. This type of analysis should be very time competitive with respect to the full standard incremental elasto-plastic calculations. In particular the efficiency of the decision variables space orthogonalization method in the solution of the nonlinear minimization problem has been confirmed as well as the legitimacy of application of irregular nodal meshes with properly located concentration zones.

Keywords: residual stresses, Generalized Finite Difference Method, minimization

* Dr inż, e-mail: Michal.Pazdanowski@pk.edu.pl, Katedra Zastosowań Informatyki w Inżynierii Lądowej, Wydział Inżynierii Lądowej Politechniki Krakowskiej.

1. Wstęp

Rozwój transportu szynowego wiąże się nierozdzielnie z postępem technologicznym w produkcji podstawowych materiałów wykorzystywanych do budowy samych środków transportu (lokomotywy, wagony osobowe i towarowe o różnym przeznaczeniu) oraz do budowy dróg szynowych, po których te środki transportu mają się w bezpieczny sposób poruszać. Początkowo [30] stal wykorzystywana do produkcji szyn charakteryzowała się niską twardością przy wysokiej ciągliwości [17], co skutkowało stosunkowo niską odpornością na zużycie wynikające z kontaktu tocznego. Przy niewielkim nacisku jednostkowym kół taboru kolejowego nie był to jednak czynnik krytycznie wpływający na koszt utrzymania szlaków kolejowych. Ciągłe dążenie do poprawy ekonomiki transportu kolejowego powodowało podnoszenie dopuszczalnego nacisku na oś, a to z kolei skutkowało przyspieszonym zużywaniem szyn. Aby rozwiązać ten problem, zaczęto powszechnie stosować szyny wykonywane ze stali o coraz wyższej wytrzymałości, a co za tym idzie podwyższonej odporności na ścieranie. Jednak towarzysząca wysokiej wytrzymałości twardość, przy coraz dłuższym czasie eksploatacji spowodowała pojawienie się nowego zagrożenia dla bezpieczeństwa transportu szynowego, mianowicie pękania szyn na skutek zmęczenia materiału wynikającego z powtarzającego się kontaktu tocznego. Pęknięcie zmęczeniowe było przyczyną wielu wykolejeń [35, 40] skutkujących śmiercią pasażerów i znacznymi stratami materialnymi [2]. Badania prowadzone na fragmentach szyn pozyskanych w miejscach katastrof [7] i z torów testowych [14] pokazały, że naprężenia wywołane w szynach kolejowych w trakcie procesu produkcyjnego (prostowanie na prostownicy rolkowej), układania w torze i eksploatacji mogą stanowić jeden z istotniejszych czynników wpływających na inicjalizację i propagację szczelin [16, 33].

Naprężenia całkowite istniejące w dowolnej chwili w szynie kolejowej mogą być traktowane jako suma naprężeń chwilowych (sprężystych) – wywołanych przez aktualnie działające obciążenia oraz naprężeń resztkowych (sprężysto-plastycznych) będących skutkiem niesprężystych odkształceń występujących w części główki szyny kolejowej. Przeprowadzone badania eksperymentalne [7] wskazują, że naprężenia resztkowe wywołane w szynie kolejowej w trakcie produkcji (obróbka cieplna wraz z następującym po niej prostowaniem na prostownicy rolkowej [32]) i eksploatacji mogą osiągnąć wartości porównywalne z wartością naprężeń chwilowych, tak więc stanowią one istotny komponent naprężeń całkowitych.

Dążenie do poprawnego oszacowania bezpiecznego czasu eksploatacji szyn kolejowych spowodowało potrzebę stworzenia niezawodnej metody analizy naprężeń resztkowych, pozwalającej na uzyskanie dostatecznie dokładnych dla celów praktycznych wyników w rozsądnym czasie i racjonalnym kosztem. Niestety

wszystkie eksperymentalne metody wyznaczania naprężeń resztkowych (zarówno niszczące [15, 31], jak i nieniszczące [39]) wymagają długiego czasu i dostępu do specjalistycznego sprzętu. Są zatem kosztowne i dodatkowo obarczone znaczącym błędem doświadczalnym, w szczególności jeżeli pożądana jest informacja o rozkładzie naprężeń w całym przekroju szyny. Standardowe metody analizy sprężysto-plastycznej [np. 18] pozwalają wprawdzie uzyskać pełną informację o rozkładzie naprężeń resztkowych i całkowitych w dowolnym przekroju szyny kolejowej, ale wymagają dużego nakładu pracy obliczeniowej [5] (trójwymiarowa analiza sprężysto-plastyczna zależna od czasu, w trakcie której należy rozważyć wiele cykli obciążenia), co z kolei skutkuje długim czasem obliczeń albo koniecznością korzystania z dostępu do komputerów o dużej mocy obliczeniowej. Dodatkowo sama natura procesu obciążania przez kontakt toczny powoduje problemy z jego precyzyjnym odwzorowaniem w toku analizy (nie jest znany ani dokładny rozkład ciśnienia w strefie kontaktu, ani nawet ścisła lokalizacja tej strefy na powierzchni główki szyny w trakcie pojedynczego analizowanego zdarzenia rozumianego jako przejazd jednego koła).

Ponieważ w wielu przypadkach wystarczająca do celów praktycznych jest znajomość jedynie oszacowania rzeczywistego rozkładu naprężeń resztkowych wywołanych w trakcie eksploatacji, zaproponowano model mechaniczny [19, 20], który pozwala na bardzo sprawne numeryczne znalezienie takiego oszacowania po przyjęciu następujących założeń upraszczających:

- 1) problem jest traktowany jako quasi-statyczny, powtarzające się niecyklicznie obciążenia kontaktowe są symulowane przez obciążenia powierzchniowe o odpowiednio dobranym rozkładzie, a program obciążenia $p_\alpha(t)$ zmienia się cyklicznie i jest ograniczony przez $p_\alpha^-(t) \leq p_\alpha(t) \leq p_\alpha^+(t)$;
- 2) materiał jest idealnie sprężysto-plastyczny, dopuszcza się aby jego własności zmieniały się w trakcie eksploatacji, jednak pod warunkiem, że po dostatecznie dużej liczbie cykli obciążenia ustabilizują się i pozostaną niezmiennie do końca efektywnego czasu życia konstrukcji.

Przy tak przyjętych założeniach proponowany model obliczeniowy pozwala na wyznaczenie rozkładu naprężeń resztkowych stanowiącego oszacowanie od góry (w sensie energii uzupełniającej) rzeczywistych naprężeń resztkowych generowanych w analizowanym ciele przez rozpatrywany program obciążenia.

Dalsze prace [3, 23] pozwoliły na osłabienie drugiego z wymienionych powyżej założeń, tak że zaktualizowana wersja modelu mechanicznego pozwala na uwzględnienie materiału sprężysto-plastycznego wykazującego wzmocnienie kinematyczne. Jako produkt uboczny analizy prowadzonej z zastosowaniem tego modelu, oprócz oszacowania rozkładu naprężeń resztkowych, uzyskuje się również oszacowanie rozkładu odkształceń plastycznych wywołanych w ciele przez rozważany program obciążenia.

Model mechaniczny opisany w pracach [3, 19, 20, 23] i skrótowo przedstawiony poniżej jest ogólny i może być zastosowany do analizy zachowania dowolnej bryły trójwymiarowej pod wpływem obciążeń cyklicznie zmiennych powodujących uplastycznienie materiału. Jednak ze względu na potrzeby praktyczne, w niniejszej pracy będzie rozważane jedynie jego zastosowanie do analizy zachowania się ciał pryzmatycznych (szyna kolejowa) i ciał wykazujących obrotową symetrię (koła taboru kolejowego). W takich przypadkach zadanie jest dalej traktowane jako trójwymiarowe, ale tensor naprężeń resztkowych nie zależy od jednej z trzech zmiennych przestrzennych (to jest zmiennej z w kierunku osi podłużnej w przypadku szyny lub zmiennej obwodowej θ w przypadku koła taboru kolejowego). Ostatecznie w dalszych rozważaniach przyjmuje się, że $\sigma_{ij}^r = \sigma_{ij}^r(x, y)$ w przypadku szyny kolejowej i $\sigma_{ij}^r = \sigma_{ij}^r(r, z)$ w przypadku koła taboru kolejowego.

2. Model mechaniczny

Oryginalny model mechaniczny [19] uogólniony na przypadek występowania wstępnych naprężeń resztkowych [20] (wywołanych na przykład prostowaniem szyny na prostownicy rolkowej) może być sformułowany następująco: *oszacowanie rozkładu naprężeń resztkowych wywołanych w ciele wykonanym z materiału idealnie sprężysto-plastycznego poddanym działaniu obciążeń cyklicznie zmiennych może zostać wyznaczone przez rozwiązanie następującego zadania nieliniowej minimalizacji:*

znajdź:

$$\min_{\sigma_{ij}^r} \Theta(\sigma_{ij}^r), \Theta(\sigma_{ij}^r) = \int_V (\sigma_{ij}^r - \sigma_{ij}^{r0}) C_{ijkl} (\sigma_{kl}^r - \sigma_{kl}^{r0}) dV, \quad (2.1)$$

przy:

$$\sigma_{ij,j}^r = 0 \quad \text{w } V, \quad (2.2)$$

$$\sigma_{ij}^r n_j = 0 \quad \text{na } \partial V, \quad (2.3)$$

$$\Phi(\sigma_{ij}^r + \sigma_{ij}^e(t)) \leq \sigma_y \quad \text{w } V. \quad (2.4)$$

Minimalizowane wyrażenie (2.1) reprezentuje całkowitą energię uzupełniającą rozważanego ciała, podczas gdy zależności (2.2)–(2.4) przedstawiają odpowiednio równania równowagi wewnętrznej, zerowe statyczne warunki brzegowe i warunek plastyczności. Wielkości występujące w powyższych wzorach oznaczają:

$\sigma_{ij}^e(t)$ – zależne od czasu naprężenia sprężyste (wyznaczone tak, jakby rozważane ciało odkształcało się wyłącznie sprężysto w czasie całego procesu obciążenia),

- σ_{ij}^r – niezależne od czasu naprężenia resztkowe spowodowane w rozważanym ciele przez dany program obciążenia,
 σ_{ij}^{r0} – wstępne naprężenia resztkowe istniejące w rozważanym ciele przed poddaniem go aktualnemu programowi obciążenia,
 σ_y – granica plastyczności,
 C_{ijkl} – macierz podatności sprężystej.

Model mechaniczny [19, 20], skrótowo zaprezentowany powyżej, został później rozwinięty tak, aby możliwe było uwzględnienie kinematycznego wzmocnienia materiału [3, 23]. Zmodyfikowany model może być przedstawiony następująco: *oszacowanie rozkładu odkształceń plastycznych i naprężeń resztkowych wywołanych w ciele wykonanym z materiału wykazującego kinematyczne wzmocnienie i poddanym obciążeniom cyklicznie zmiennym może być wyznaczone przez rozwiązanie następującego dwuetapowego zadania nieliniowej minimalizacji:*

etap I:

znajdź A_{ijkl} takie, że:

$$\sigma_{ij}^r = A_{ijkl} \varepsilon_{kl}^p, \quad (2.5)$$

rozwiązując zadanie nieliniowej minimalizacji z ograniczeniami w celu wyznaczenia samozrównoważonych naprężeń resztkowych σ_{ij}^r jako funkcji odkształceń plastycznych ε_{ij}^p :

$$\min_{\sigma_{ij}^r} \Theta(\sigma_{ij}^r), \Theta(\sigma_{ij}^r) = \int_V \sigma_{ij}^r C_{ijkl} \sigma_{kl}^r dV - \int_V \varepsilon_{ij}^p \sigma_{ij}^r dV, \quad (2.6)$$

przy:

$$\sigma_{ij,j}^r = 0 \quad \text{w } V, \quad (2.7)$$

$$\sigma_{ij}^r n_j = 0 \quad \text{na } \partial V, \quad (2.8)$$

etap II:

znajdź:

$$\min_{\varepsilon_{gh}^p} \Psi(\varepsilon_{gh}^p), \Psi(\varepsilon_{gh}^p) = \int_V \varepsilon_{gh}^p A_{ghij} C_{ijkl} A_{klmn} \varepsilon_{mn}^p dV - \int_V \varepsilon_{ij}^p \sigma_{ij}^r dV, \quad (2.9)$$

przy:

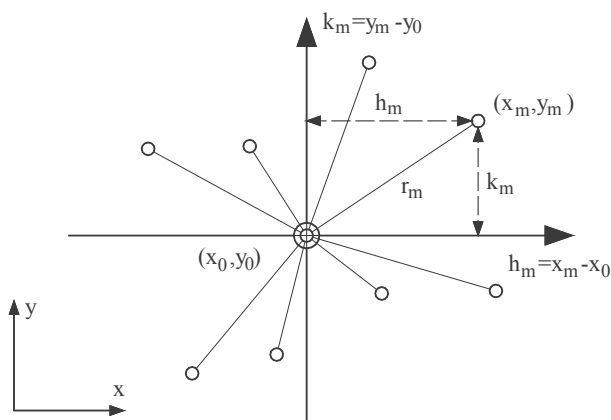
$$\Phi \left(\left(A_{ijgh} - I_{ijgh} \frac{E \cdot H}{E - H} \right) \varepsilon_{gh}^p + \sigma_{ij}^e(t) \right) \leq \sigma_y \quad \text{w } V. \quad (2.10)$$

Tak jak w sformułowaniu oryginalnym, zależności (2.6) i (2.9) przedstawiają całkowitą energię komplementarną rozważanego ciała, podczas gdy zależności (2.7), (2.8) i (2.10) reprezentują odpowiednio równania równowagi wewnętrznej,

zerowe statyczne warunki brzegowe i warunek plastyczności. Pozostałe oznaczenia nie występujące we wzorach (2.1)–(2.4) to:

- ε_{gh}^p – niezależne od czasu odkształcenia plastyczne spowodowane w danym ciele przez przyłożony program obciążenia,
- A_{ijkl} – macierz wiążąca odkształcenia plastyczne i naprężenia resztkowe w rozważanym ciele, wyznaczona jako rozwiązanie zadania (2.6)–(2.8),
- I_{ijgh} – macierz jednostkowa,
- E – moduł Younga,
- H – moduł wzmocnienia izotropowego.

3. Model obliczeniowy UMRS



Rys. 3.1. Nieregularna „gwiazda” operatora różnicowego

W celu numerycznego rozwiązania zagadnienia (2.1)–(2.4) lub (2.6)–(2.10) należy dokonać jego dyskretyzacji i zastosować jedną z metod analizy dyskretnej, np. Metodę Elementów Skończonych (MES) [4, 41], Metodę Różnic Skończonych (MRS) [8, 37] czy Metodę Catek Brzegowych (MCB) [1]. Przedmiotem niniejszego opracowania jest zastosowanie MRS uogólnionej na dowolnie nieregularne siatki węzłów (UMRS) [13]. Przyjmując uzasadnione merytorycznie założenie o niezależności stanu naprężeń resztkowych od jednej z trzech zmiennych przestrzennych odpowiednio zorientowanego układu współrzędnych we wskazanym przekroju analizowanego ciała (szyna lub koło taboru), wprowadza się dowolnie nieregularną siatkę węzłów. Następnie wybranym punktom rozpatrywanego obszaru, zwanymi „punktami centralnymi”, według określonych kryteriów [13] przypisuje się odpowiednią liczbę węzłów z ich sąsiedztwa tworzących „gwiazdy różni-

cowe” (rys.1). Liczba węzłów w gwieździe zależy od rzędu operatora różnicowego, który ma zostać utworzony oraz od pożądanego rzędu aproksymacji. W przypadku operatorów rzędu pierwszego występujących w sformułowaniach przedstawionych w punkcie 2 minimalna liczba węzłów w gwieździe jest równa trzy. Po utworzeniu gwiazd różnicowych we wskazanych punktach obszaru można wygenerować niezbędne wzory różnicowe jedną z wielu dostępnych metod [6, 9, 11, 13, 28]. W niniejszym opracowaniu stosowano metodę minimalizacji funkcjonału błędu zaproponowaną po raz pierwszy w [13] i dalej rozwijaną przez wielu autorów [24]. Zastosowanie tej metody pozwala na wyrażenie wszystkich składowych tensorów naprężenia i odkształcenia oraz ich niezbędnych pochodnych w arbitralnie wskazanych „punktach centralnych” jako kombinacji liniowych wartości węzłowych tych wielkości, zgodnie ze wzorami:

$$\sigma_{ij|P}^r = \sum_{m=1}^M \alpha_{m|P}^S \sigma_{ij|m}^r, \quad (3.1)$$

$$\sigma_{ij,x|P}^r = \sum_{m=1}^M \beta_{m|P}^S \sigma_{ij|m}^r, \quad (3.2)$$

$$\sigma_{ij,y|P}^r = \sum_{m=1}^M \gamma_{m|P}^S \sigma_{ij|m}^r, \quad (3.3)$$

$$\varepsilon_{ij|P}^p = \sum_{m=1}^M \alpha_{m|P}^S \varepsilon_{ij|m}^r, \quad (3.4)$$

w których przyjęto następujące oznaczenia:

$\alpha_{m|P}^S$ – współczynniki operatora różnicowego na wartość funkcji w punkcie centralnym P gwiazdy S ,

$\beta_{m|P}^S$ – współczynniki operatora różnicowego na wartość pierwszej pochodnej $\partial/\partial x$ w punkcie centralnym P gwiazdy S ,

$\gamma_{m|P}^S$ – współczynniki operatora różnicowego na wartość pierwszej pochodnej $\partial/\partial y$ w punkcie centralnym P gwiazdy S ,

$\sigma_{ij|m}^r$ – składowa tensora naprężeń resztkowych w węźle m gwiazdy S ,

$\varepsilon_{ij|m}^p$ – składowa tensora odkształceń plastycznych w węźle m gwiazdy S .

Sumowanie we wzorach (3.1)–(3.4) odbywa się po wszystkich węzłach m należących do gwiazdy S .

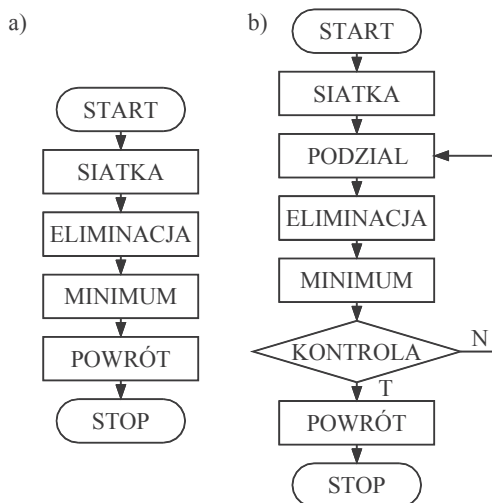
Ostatecznie sformułowanie zadania (2.1)–(2.4) lub (2.6)–(2.10) ma charakter mieszany, gdyż występują w nim zarówno elementy sformułowania słabego (minimalizacja funkcjonału energii uzupełniającej (2.1), (2.6), (2.9)), jak i mocnego (równania równowagi wewnętrznej (2.2) i (2.7), zerowe statyczne warunki brze-

gowe (2.3) i (2.8) oraz warunki plastyczności (2.4) i (2.10)) narzucone jedynie w wybranych punktach obszaru.

4. Redukcja rozmiaru zadania minimalizacji

Formalnie algorytm postępowania przy rozwiązaniu zadania (2.1)–(2.4) lub (2.6)–(2.10) jest prosty. Sposób postępowania w tym przypadku przedstawiono na schemacie blokowym rys. 4.1 a). Po wprowadzeniu siatki węzłów należy zbudować funkcjonal energii uzupełniającej naprężeń reszkowych w rozpatrywanym przekroju wyrażonej przez wartości węzłowe składowych tensora naprężeń reszkowych (2.1) lub odkształceń plastycznych (2.10) (SIATKA). Dalej należy zapisać równania równowagi wewnętrznej (2.2) i (2.7), zerowe statyczne warunki brzegowe (2.3) i (2.8) oraz warunki plastyczności (2.4) i (2.10) we wskazanych punktach obszaru, wyrażając je przez wartości węzłowe odpowiednich tensorów. Warunki równościowe (2.2) i (2.3) lub (2.7) i (2.8) definiujące zależności pomiędzy wartościami węzłowymi odpowiednich tensorów należy wykorzystać do zmniejszenia globalnej liczby niewiadomych zadania (ELIMINACJA). Następnie należy znaleźć rozwiązanie zadania nieliniowej minimalizacji zmodyfikowanego funkcjonału (2.2) lub (2.9) z ograniczeniami (2.4) lub (2.10) (MINIMUM). Po znalezieniu rozwiązania zadania minimalizacji należy powrócić do kompletu zmiennych podstawowych zadania (naprężenia reszkowe lub odkształcenia plastyczne) (POWRÓT). Niestety tak sformułowane zadanie charakteryzuje się znaczną liczbą niewiadomych (zmiennych decyzyjnych) i nieliniowych ograniczeń w zadaniu optymalizacji. Ponieważ czas rozwiązania zadania jest zdeterminowany przez czas rozwiązania zadania optymalizacji, takie postępowanie nie rokuje nadziei na sukces przy możliwym do zaakceptowania czasie obliczeń. Właściwsze jest tu postępowanie iteracyjne, związane z faktem występowania w rozpatrywanym ciele dwóch stref: strefy sprężystej, w której ograniczenia wynikające z warunku plastyczności z definicji są spełnione i strefy plastycznej, w której te ograniczenia są aktywne (rys. 4.1 b)). Niestety dokładne rozmiary, kształt ani położenie tych stref nie są znane *a priori*, choć w pewnym przybliżeniu można je oszacować na podstawie znajomości rozwiązania sprężystego zadania $\varepsilon_{ij}^e(t)$. Wobec tego bardziej racjonalne wydaje się być postępowanie następujące: po przyjęciu strefy plastycznej (PODZIAŁ) dokonuje się eliminacji zmiennych zależnych w obu strefach i minimalizacji bez ograniczeń funkcjonału (2.1) lub (2.9) w przyjętej strefie sprężystej ze względu na wszystkie zmienne niezależne występujące w tej strefie (ELIMINACJA), a następnie rozwiązuje się zadanie nieliniowej minimalizacji stosownego funkcjonału przy nieliniowych ograniczeniach (2.4) lub (2.10) (MINIMUM). Przy takim postępowaniu należy jednak bezwzględnie pamiętać po rozwiązaniu zadania nieliniowej minimalizacji o konieczności weryfikacji spełnienia warunków pla-

styczności w obszarze uprzednio przypisanym do strefy sprężystej (KONTROLA). Gdyby okazało się, że warunek plastyczności w jakimkolwiek punkcie analizowanego obszaru nie jest spełniony (N), to rozwiązanie zadania nieliniowej minimalizacji należy powtórzyć po uprzednim poszerzeniu strefy plastycznej o punkty, w których warunek plastyczności nie był spełniony (rys. 4.1 b)). Tak więc zadanie w tym przypadku rozwiązuje się iteracyjnie, w kolejnych iteracjach modyfikując zasięg obliczeniowej strefy plastycznej. Doświadczenie pokazało [26], że takie postępowanie zwykle prowadzi do uzyskania poprawnego oszacowania rozmiaru strefy plastycznej w 2–3 iteracjach, nawet jeżeli wstępne oszacowanie jej rozmiaru charakteryzowało się znaczącym niedomiarem.



Rys. 4.1. Strategia rozwiązania zadania minimalizacji

5. Poprawa zbieżności zadania minimalizacji

Nawet w przypadku zastosowania strategii redukcji wymiaru zadania minimalizacji przedstawionej na rys. 4.1 b) zadanie to charakteryzuje się stosunkowo dużym rozmiarem (od kilkuset do ponad tysiąca zmiennych decyzyjnych i od kilkudziesięciu do kilkuset nieliniowych ograniczeń). W przypadku rozwiązywania tego zadania jednym z wariantów Metody Kierunków Dopuszczalnych [21] znaczącą poprawę jego zbieżności można uzyskać poprzez właściwy dobór przestrzeni zmiennych decyzyjnych, w której prowadzona będzie minimalizacja. Jeżeli zwrócimy uwagę na fakt, że wyrażenia (2.1) i (2.9) są formami kwadratowymi ze względu na występujące w nich zmienne decyzyjne, podobnie jak równania ograniczeń nierównościowych (2.4) i (2.10), gdy zdecydujemy się na zastosowanie warunku plastyczności Hubera-Misesa-Hencky'ego, to uzyskujemy kolejną możli-

wość poprawy zbieżności zadania optymalizacji przez ortogonalizację przestrzeni zmiennych decyzyjnych i rozwiązywanie zadania minimalizacji w tej nowej przestrzeni. Zadanie minimalizacji (2.1) z ograniczeniami (2.4) lub (2.9) z ograniczeniami (2.10) w zapisie wektorowym można przedstawić następująco:

znaleźć:

$$\min_{\mathbf{x}} F(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}, \quad \mathbf{A} = \mathbf{A}^T, \quad (5.1)$$

przy ograniczeniach:

$$\Phi_i(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{G}_i \cdot \mathbf{x} + \mathbf{H}_i \cdot \mathbf{x} + K_i, \quad \text{dla } i = 1, 2, \dots, n, \quad (5.2)$$

gdzie:

\mathbf{x} – wektor zmiennych decyzyjnych zadania minimalizacji (niezależne składowe tensora naprężeń resztkowych lub odkształceń plastycznych w obliczeniowej strefie plastycznej),

\mathbf{A} – macierz podatności sprężystej,

\mathbf{G}_i – macierz kwadratowa współczynników ograniczenia nieliniowego,

\mathbf{H}_i – wektor współczynników ograniczenia nieliniowego,

K_i – wyraz wolny ograniczenia nieliniowego,

a indeks i numeruje punkty obszaru, w których narzucono ograniczenia nieliniowe.

Miarą jakości (czyli ortogonalności) przestrzeni, w której odbywa się minimalizacja jest wskaźnik uwarunkowania macierzy \mathbf{A} , który można wyrazić jako:

$$\kappa(\mathbf{A}) = \left| \frac{\lambda_{\max}(\mathbf{A})}{\lambda_{\min}(\mathbf{A})} \right|. \quad (5.3)$$

gdzie λ_{\max} i λ_{\min} oznaczają odpowiednio maksymalną i minimalną wartość własną macierzy \mathbf{A} .

Oczywiście z najlepszą sytuacją będziemy mieli do czynienia, jeżeli wskaźnik ten będzie równy 1. Jest to łatwe do uzyskania w przypadku zadania (2.1) z ograniczeniami (2.4), gdyż wówczas macierz \mathbf{A} jest dodatnio określona. W takiej sytuacji zastosowanie do niej rozkładu Choleskiego i prosta zmiana zmiennych [22] pozwala na uzyskanie optymalnego wskaźnika uwarunkowania.

Zagadnienie komplikuje się w przypadku zadania (2.9) z ograniczeniami (2.10), gdyż wówczas macierz \mathbf{A} jest jedynie nieujemnie określona, co wyklucza zastosowanie rozkładu Choleskiego. Jednak, wobec symetrii macierzy \mathbf{A} , można do niej zastosować rozkład SVD [12, 29, 36]:

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}^T \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{U}, \quad (5.4)$$

gdzie:

\mathbf{U} – macierz ortonormalna ($\mathbf{U}^T = \mathbf{U}^{-1}$),

\mathbf{D} – nieujemnie określona macierz diagonalna zawierająca wartości bezwzględne z wartości własnych macierzy \mathbf{A} .

Ponieważ \mathbf{D} jest diagonalna i nieujemnie określona, można ją dalej rozłożyć na iloczyn trzech macierzy:

$$\mathbf{D} = \mathbf{S} \cdot \mathbf{J} \cdot \mathbf{S}, \quad (5.5)$$

gdzie:

- \mathbf{S} – diagonalna macierz pierwiastków z wartości własnych macierzy \mathbf{D} , z wyjątkiem wartości równych 0, które zastępuje się przez 1,
- \mathbf{J} – macierz jednostkowa, w której w miejscach występowania zerowych wartości własnych macierzy \mathbf{D} podstawia się 0.

Tak więc ostatecznie macierz \mathbf{A} może zostać wyrażona przez iloczyn trzech macierzy, z których jedna jest ortonormalna, jedna jest diagonalna i nieosobliwa a jedna jest diagonalna i osobliwa:

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}^T \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{J} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{U}. \quad (5.6)$$

W ten sposób osobliwość macierzy \mathbf{A} zostaje zawarta w macierzy \mathbf{J} .

Jeżeli wprowadzimy podstawienie:

$$\mathbf{y} = \mathbf{S} \cdot \mathbf{U} \cdot \mathbf{x}, \quad (5.7)$$

i wyprowadzimy zależność odwrotną:

$$\mathbf{x} = \mathbf{S}^{-1} \cdot \mathbf{U}^T \cdot \mathbf{y}, \quad (5.8)$$

to zależności (5.1) i (5.2) możemy wyrazić jako:

$$\min_{\mathbf{y}} F(\mathbf{y}) = \frac{1}{2} \cdot \mathbf{y}^T \cdot \mathbf{J} \cdot \mathbf{y}, \quad (5.9)$$

przy:

$$\Phi_i(\mathbf{y}) = \left(\frac{1}{2} \cdot \mathbf{y}^T \cdot \mathbf{U} \cdot \mathbf{S}^{-1} \cdot \mathbf{G}_i + \mathbf{H}_i \right) \cdot \mathbf{S}^{-1} \cdot \mathbf{U}^T \cdot \mathbf{y} + K_i, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (5.10)$$

W takim przypadku gradienty funkcji celu $\nabla F(\mathbf{y})$ i ograniczeń $\nabla \Phi_i(\mathbf{y})$ (niezbędne, gdy zadanie minimalizacji jest rozwiązywane przy zastosowaniu Metody Kierunków Dopuszczalnych) można wyrazić w nowych zmiennych jako:

$$\nabla F(\mathbf{y}) = \mathbf{J} \cdot \mathbf{y} \quad (5.11)$$

$$\nabla \Phi_i(\mathbf{y}) = \left(\mathbf{y}^T \cdot \mathbf{U} \cdot \mathbf{S}^{-1} \cdot \mathbf{K}_i + \mathbf{L}_i \right) \cdot \mathbf{S}^{-1} \cdot \mathbf{U}^T$$

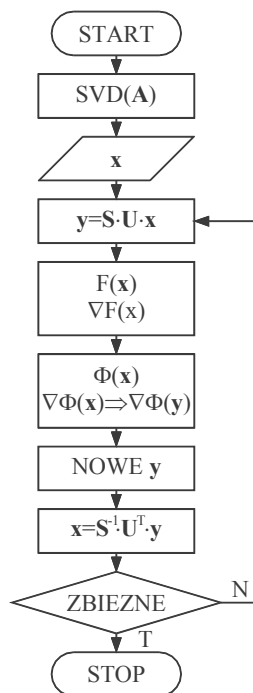
a gradienty ograniczeń mogą być zapisane w starych zmiennych jako:

$$\nabla \Phi_i(\mathbf{y}) = \left(\mathbf{x}^T \cdot \mathbf{G}_i + \mathbf{H}_i \right) \cdot \mathbf{S}^{-1} \cdot \mathbf{U}^T. \quad (5.12)$$

W przypadku zastosowania proponowanej powyżej metody, możliwe są dwie strategie postępowania. Strategia pierwsza polega na przeniesieniu obliczeń do nowej przestrzeni zmiennych decyzyjnych, prowadzeniu całości obliczeń w tej przestrzeni. Powrót do oryginalnych zmiennych decyzyjnych następuje dopiero po znalezieniu ostatecznego rozwiązania zadania minimalizacji. Druga strategia sprowadza się do prowadzenia obliczeń w obydwu przestrzeniach. Wówczas zasadnicze obliczenia (wyznaczanie wartości i gradientów ograniczeń) prowadzi się w przestrzeni oryginalnych zmiennych, a w przestrzeni nowych zmiennych wyznacza się jedynie kierunek przeszukiwania i długość kroku.

Obydwa sposoby postępowania mają zalety i wady. W pierwszym przypadku wszystkie ograniczenia muszą zostać wyrażone w nowych zmiennych decyzyjnych. Wprawdzie procedura ta musi być wykonana tylko raz, przed przystąpieniem do obliczeń, ale może być długotrwała. Korzyścią jest tu prowadzenie całości obliczeń jedynie w przestrzeni nowych zmiennych decyzyjnych. W drugim przypadku unika się konieczności wyrażania ograniczeń w nowych zmiennych, kosztem prowadzenia obliczeń w dwóch przestrzeniach zmiennych decyzyjnych.

Warto zauważyć, że w obydwu przypadkach najbardziej kosztowna czasowo operacja, czyli dokonanie rozkładu SVD macierzy \mathbf{A} , jest wykonywana jednokrotnie na początku obliczeń.



Rys. 5.1. Logika przepływu informacji w zadaniu minimalizacji

W przypadku stosowania drugiej strategii postępowania logikę przepływu informacji w programie można przedstawić jak wyżej, na rys. 5.1.

Obliczenia testowe przeprowadzone na kilku zadaniach nieliniowej minimalizacji różniących się liczbą zmiennych decyzyjnych i nieliniowych ograniczeń (Tabela 1) wykazały przydatność zaproponowanej metody.

Czas wykonania jednej iteracji w zadaniu minimalizacji z zastosowaniem ortogonalizacji jest około czterokrotnie dłuższy, co jest związane z koniecznością wykonywania transformacji (5.8) i (5.12) na każdym kroku obliczeń. Czas ten w przypadku niewielkiego rozmiaru zadania minimalizacji (pierwsze dwa wiersze Tabeli 1) nie jest rekompensowany przez zmniejszenie liczby wykonanych iteracji.

Dopiero przy dostatecznie dużym rozmiarze zadania zysk z tytułu znacznego zmniejszenia liczby wykonanych iteracji przeważa nad stratą wynikającą z wydłużenia czasu wykonania pojedynczej iteracji.

Tabela 1

Wyniki obliczeń testowych (czas obliczeń w sekundach)

Przypadek	Zmienne decyzyjne	Ograniczenia	Iteracje	Czas całkowity	Czas iteracji
STD	108	17	144	3.48	0.024
SVD	108	17	49	3.46	0.071
STD	256	44	5955	66.27	0.011
SVD	256	44	211	9.28	0.044
STD	396	76	47197	1081.59	0.023
SVD	396	76	1595	157.39	0.099

STD – standardowe procedury optymalizacji [21],

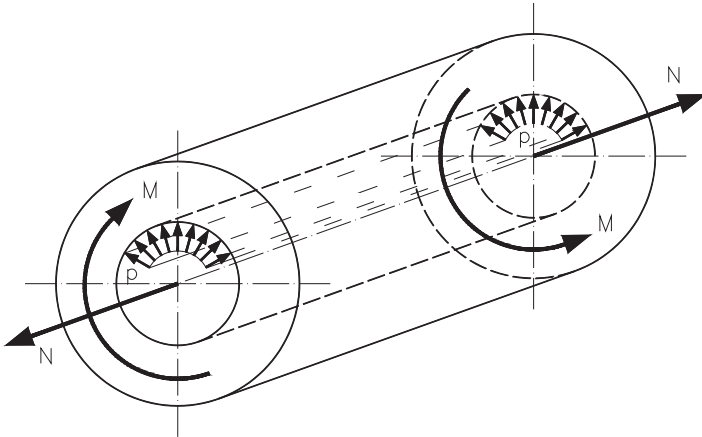
SVD – procedury optymalizacji [21] w ortogonalizowanej przestrzeni.

Należy tu podkreślić, że zastosowanie procedury ortogonalizacji przedstawionej powyżej nie wpływa w żadnym stopniu na jakość uzyskanych wyników. Jeżeli kryteria dokładności zakończenia obliczeń w obu przypadkach są takie same, to końcowy wynik zadania minimalizacji jest identyczny.

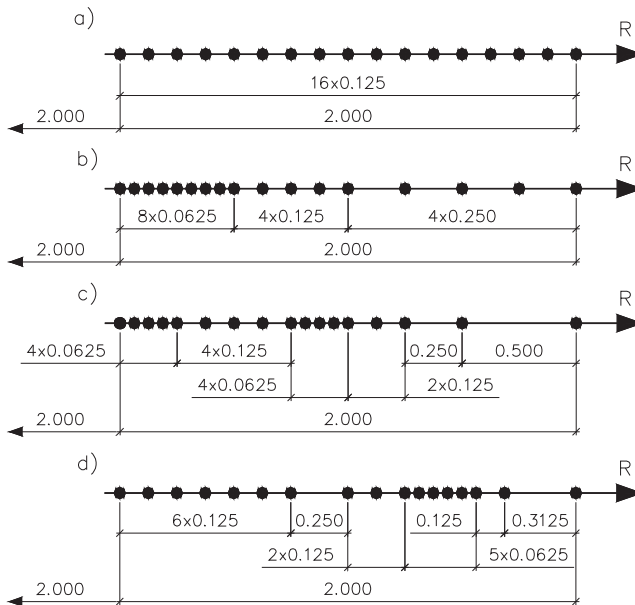
6. Obliczenia testowe

Zasadniczym celem prowadzenia obliczeń testowych było stwierdzenie jakości uzyskanego oszacowania rozkładu naprężeń resztkowych oraz ustalenie wybranych atrybutów modelu obliczeniowego, takich jak sposób całkowania (wokół węzła, czy między węzłami), rząd kwadratury numerycznego całkowania, miejsca narzucania warunków plastyczności i równań równowagi wewnętrznej (węzły czy punkty niebędące węzłami), sposób narzucania zerowych statycznych warunków brzegowych (w węzłach czy na odcinkach brzegowych), aproksymacja stanu naprężenia pomiędzy węzłami (liczba węzłów w gwiazdziej różnicowej i rząd funkcji wagowej w funkcjonałe błędu zastosowanym do wyznaczenia współczynników wzorów różnicowych). Przeanalizowano również wpływ postępowania z rozwiązaniem sprężystym na jakość uzyskanych wyników.

Podstawowym zadaniem testowym było zadanie cylindra grubościennego wykonanego z nieściśliwego materiału idealnie sprężysto-plastycznego poddanego obciążeniom cyklicznie zmiennym, takim jak pulsujące ciśnienie wewnętrzne i pulsujące rozciąganie ze skręcaniem. W obu przypadkach parametry obciążenia dobierano tak, aby uzyskać różny zasięg strefy plastycznej (od 25% do 100% grubości cylindra), a uzyskiwane wyniki każdorazowo porównywano ze znanymi rozwiązaniami analitycznymi [34, 42].



Rys. 6.1. Cylinder grubościenny poddany obciążeniom cyklicznym

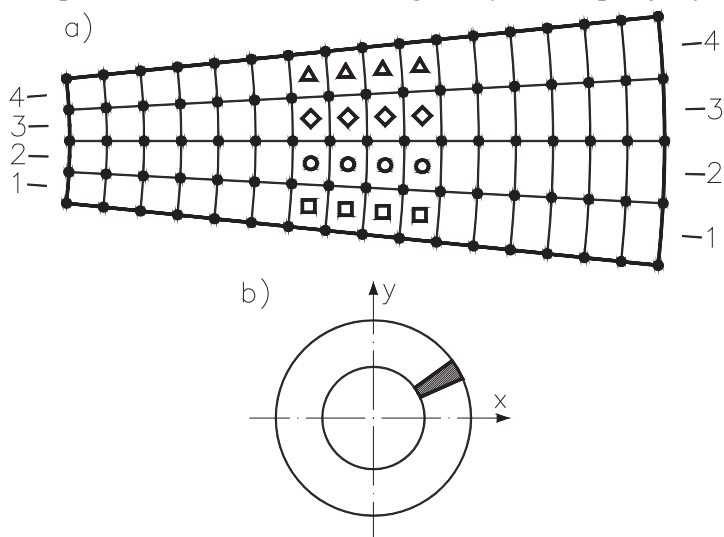


Rys. 6.2. Siatki różnicowe stosowane w trakcie analizy 1D

Zadanie rozwiązywano zarówno jako zagadnienie jednowymiarowe, korzystając z obrotowej symetrii, jak i dwuwymiarowe. W przypadku jednowymiarowym rozważano regularne i nieregularne siatki różnicowe (rys. 6.1.).

W przypadku dwuwymiarowym rozważano regularną siatkę różnicową i obciążenie cyklicznie zmiennym ciśnieniem wewnętrznym powodującym uplastycznienie 25% grubości cylindra. Analizowano wycinek cylindra o szerokości kątowej 12° umieszczony w globalnym układzie współrzędnych tak, aby jego oś symetrii była obrócona pod kątem 30° w stosunku do osi x globalnego układu współrzęd-

nych. Wszystkie obliczenia prowadzono w kartezjańskim układzie współrzędnych, jedynie wyniki przedstawiono w układzie biegunowym dla lepszej czytelności.



Rys. 6.3. Siatka różnicowa używana w analizie 2D:

- a) dyskretyzacja wycinka cylindra,
b) lokalizacja wycinka w globalnym układzie współrzędnych

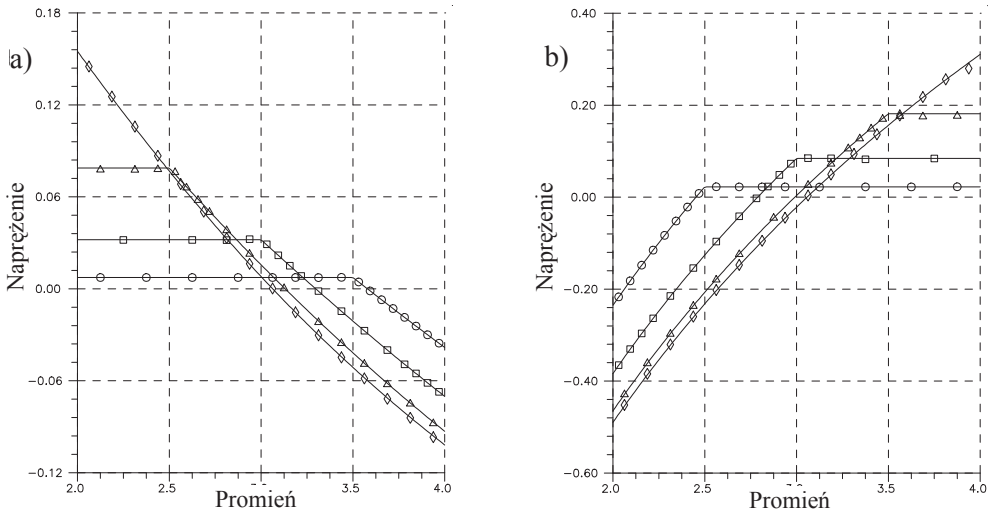
Dla siatek nieregularnych dobierano rozmieszczenie węzłów tak, aby uzyskać zagęszczenie siatki w strefie plastycznej przy jej małym zasięgu (rys. 6.2. b) – zasięg strefy plastycznej 25% grubości cylindra) lub przy granicy stref po stronie strefy plastycznej (rys. 6.2. c) i d) – zasięg strefy plastycznej to odpowiednio 50% i 75% grubości cylindra). Dzięki temu można było zbadać wpływ nieregularności siatki węzłów, rozmiaru strefy plastycznej, złożonego stanu naprężenia i położenia granicy sprężysto-plastycznej w stosunku do węzłów na jakość uzyskiwanych rozwiązań i tempo zbieżności rozwiązania do rozwiązania analitycznego.

Celem rozwiązania zadania 2D była weryfikacja poprawności wniosków wyciągniętych na podstawie rozwiązania zadań jednowymiarowych.

Przeprowadzone obliczenia testowe pozwoliły stwierdzić, że stosunkowo niskiego rzędu kwadratury typu Gaussa stosowane pomiędzy węzłami pozwalają uzyskać wyniki znacznie wyższej jakości niż uzyskiwane przy całkowaniu wokół węzłów. Ograniczenia równościowe (równania równowagi wewnętrznej, statyczne warunki brzegowe) i nierównościowe (warunki plastyczności) powinny być narzucane w punktach pomiędzy węzłami, gdyż wtedy wyniki są zdecydowanie wyższej jakości niż w przypadku narzucania tych warunków w węzłach. Zależność ta jest szczególnie widoczna w przypadku siatek nieregularnych. Uwidoczniła się silna odwrotna zależność jakości uzyskiwanego rozwiązania od rozmiaru gwiazd różnicowych i rzędu współczynników wagowych stosowanych w funkcjonale błędu do wyznaczenia niezbędnych wzorów różnicowych. Nieregularne siatki węzłów

z właściwie przyjętymi strefami ich koncentracji (sąsiedztwo granicy sprężysto-plastycznej wydaje się tu być szczególnie istotne) znacząco poprawiają zbieżność uzyskanego rozwiązania do rozwiązania analitycznego, przynajmniej w sensie energii uzupełniającej. Rozmiar strefy plastycznej, złożony stan naprężenia i lokalizacja granicy sprężysto-plastycznej nie wydają się znacząco wpływać na jakość wyznaczonych rozkładów naprężeń resztkowych, jak długo siatka węzłów jest wystarczająco gęsta, a węzły są właściwie rozmieszczone.

Dodatkowo warto zauważyć, że pomimo iż w ogólności model mechaniczny (2.1)–(2.4) pozwala na uzyskanie rozkładów naprężeń resztkowych w ciele idealnie sprężysto-plastycznym, które stanowią jedynie oszacowanie od góry w sensie energii uzupełniającej rzeczywistych naprężeń resztkowych w tym ciele, to wyniki obliczeń testowych przy właściwie dobranych parametrach modelu numerycznego są zadziwiająco dobrej jakości, jak to pokazano poniżej dla wybranych przypadków.

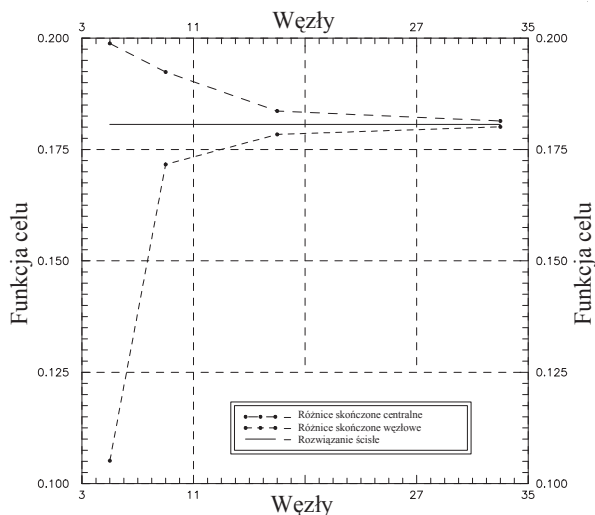


Rys. 6.4. Naprężenie resztkowe σ_{zz} (wzdłuż osi podłużnej cylindra) na siatce nieregularnej (przypadek 1D) wywołane przez pulsujące:
 a) siłę osiową i moment skrecający (uplastycznienie od zewnątrz),
 b) ciśnienie wewnętrzne (uplastycznienie od wewnątrz)

Na rysunku 6.4 naprężenia podane są w odniesieniu do granicy plastyczności materiału, symbole \circ , \square , \triangle , \diamond oznaczają zasięg strefy plastycznej przy jakim rozwiązywane było zadanie (odpowiednio 25%, 50%, 75%, 100%), a linią ciągłą oznaczono rozwiązanie analityczne.

Stwierdzono również, że w przypadku, gdy warunki plastyczności (2.4) są narzucane w punktach niebędących węzłami, w zależności od przyjętego sposobu postępowania z rozwiązaniem sprężystym $\sigma_{ij}^e(t)$ można uzyskać zbieżność rozwiązania resztkowego do wartości analitycznych od góry bądź od dołu w sensie

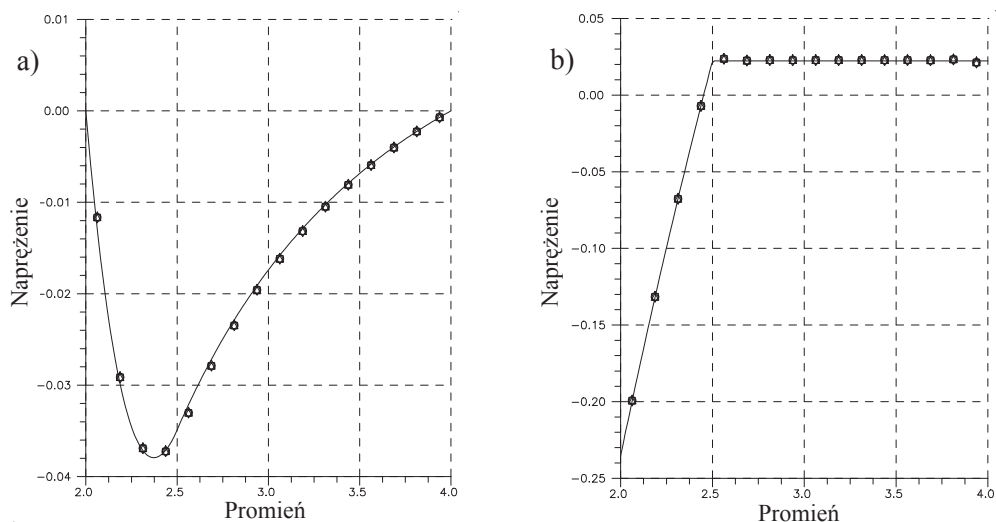
energii uzupełniającej (rys. 6.5) co może pozwolić na oszacowanie jakości uzyskanych rozkładów naprężeń resztkowych także w przypadkach, gdy rozwiązania analityczne nie będą dostępne.



Rys. 6.5. Zbieżność rozwiązania od góry i od dołu w sensie energii uzupełniającej

Na powyższym rysunku liniami przerywanymi oznaczono wyznaczone wartości energii uzupełniającej w funkcji liczby węzłów siatki dla zadania cylindra grubościennego poddanego pulsującemu ciśnieniu wewnętrznemu przy zasięgu strefy plastycznej równym 25%. Linia ciągłą oznaczono wartość analityczną energii, rozwiązanie zbieżne od dołu uzyskano, podstawiając w zależności (2.4) rozwiązanie sprężyste wyznaczone w węzłach, a następnie aproksymowane do punktów narzucenia warunków plastyczności w taki sam sposób, jak naprężenia resztkowe, natomiast rozwiązanie zbieżne od góry uzyskano podstawiając do zależności (2.4) naprężenia sprężyste bezpośrednio z zależności analitycznych.

Na rysunku 6.6 przedstawiono wybrane składowe tensora naprężeń resztkowych uzyskane przez rozwiązanie zadania 2D przedstawionego na rys. 6.3. Rozwiązując to zadanie, na podstawie wyników obliczeń testowych prowadzonych w 1D przyjęto, że równania równowagi wewnętrznej i warunki plastyczności zostaną narzucone w punktach niebędących węzłami, zerowe statyczne warunki brzegowe będą narzucone w środkach odcinków brzegowych, całkowanie będzie prowadzone pomiędzy węzłami przy użyciu kwadratur Gaussa 2×2 , a wyniki będą prezentowane w tych samych punktach, w których narzucano równania równowagi wewnętrznej.



Rys. 6.6. Cylinder grubościenny poddany pulsującemu ciśnieniu wewnętrznemu a) σ_{rr}^r , b) σ_{zz}^r

Uzyskane rozkłady naprężeń resztkowych na liniach 1 – 1 (○), 2 – 2 (□), 3 – 3 (◇), 4 – 4 (△) (rys. 6.3. a)) przedstawiono powyżej, linią ciągłą oznaczając rozwiązanie analityczne. Podobnie jak na rys. 6.4 naprężenia resztkowe odniesiono do granicy plastyczności.

Jak widać uzyskano bardzo dobrą zgodność rozwiązania numerycznego i analitycznego, jedynie w pobliżu granicy sprężysto-plastycznej i zewnętrznej poboczniccy cylindra składowa σ_{zz}^r nieznacznie odbiega od wartości analitycznych.

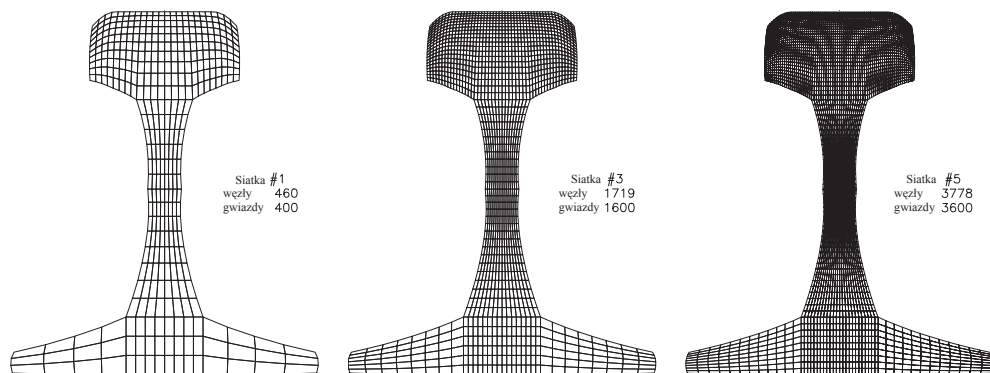
Opierając się na wynikach przedstawionych powyżej testów, ostatecznie utrzymano wszystkie parametry modelu numerycznego takie jak przedstawiono powyżej.

7. Analiza naprężeń resztkowych w szynie kolejowej

Analizę naprężeń resztkowych w szynie kolejowej poddanej symulowanym obciążeniom kołami taboru przeprowadzono dla szyny 132RE wykonanej ze stali charakteryzującej się granicą plastyczności 483 MPa, modułem wzmocnienia izotropowego 54,5 MPa, modułem Younga 210 GPa i stałą Poissona 0,3. Na podstawie badań [25] przyjęto, że z dostateczną do celów praktycznych dokładnością rozkład ciśnienia w strefie kontaktu można opisać biparabolą rozpiętą na prostokącie o wymiarach 12,5×20 mm, przy czym wymiar większy jest mierzony w kierunku długości szyny. Przyjmując maksymalny nacisk koła równy 150 kN, określono maksymalne ciśnienie w strefie kontaktu równe 1300 MPa.

W trakcie obliczeń posługiwano się dwoma metodami w celu wyznaczenia niezbędnych rozkładów naprężeń sprężystych pochodzących od obciążenia kołami: semianalityczną metodą zaproponowaną przez Timoshenkę i Langerę [38] oraz metodą czysto numeryczną wykorzystującą Uogólnioną Metodę Różnic Skończonych i rozwinięcie w szeregi Fouriera [10]. Obie metody umożliwiają znalezienie naprężeń sprężystych w dowolnym punkcie szyny kolejowej wywołanych przez normalne, podłużne i poprzeczne obciążenia przyłożone w strefie kontaktu o dowolnym kształcie. Wszystkie obliczenia prowadzono w układzie współrzędnych, w którym oś x jest osią poziomą, a oś y osią pionową w przekroju poprzecznym, natomiast oś z pokrywa się z osią podłużną szyny. W tym samym układzie współrzędnych prezentowane są wyniki.

W celu ustalenia gęstości obliczeniowej siatki UMRS w przekroju szyny kolejowej, niezbędnej do uzyskania rozkładów naprężeń resztkowych dostatecznej jakości, uwzględniającej fakt występowania znacznych gradientów naprężeń sprężystych i resztkowych w bezpośredniej bliskości strefy kontaktu przeprowadzono obliczenia testowe na pięciu różnych siatkach, z których trzy przedstawiono na rys. 7.1. Za każdym razem rozważano obciążenie kontaktem tocznym działającym w osi symetrii szyny.



Rys. 7.1. Siatki obliczeniowe stosowane w trakcie obliczeń

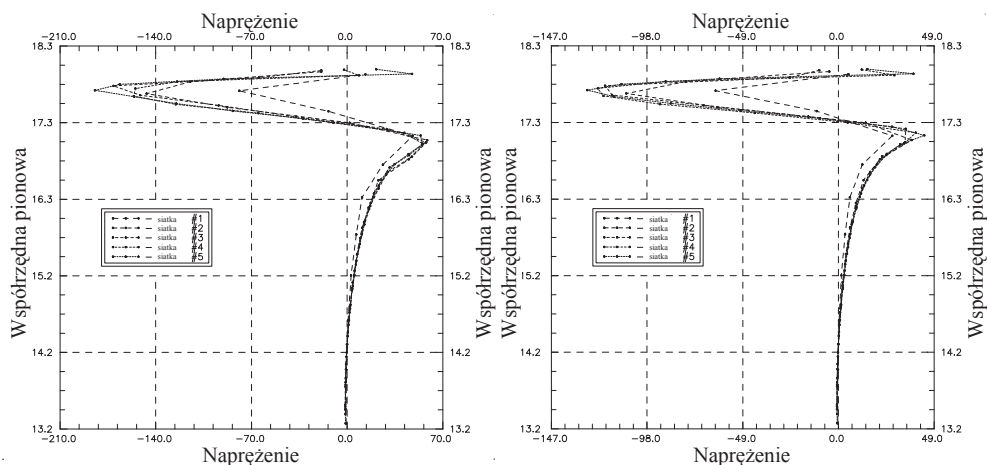
Obliczenia przeprowadzono dla obydwu modeli mechanicznych, to jest idealnie sprężysto-plastycznego i sprężysto-plastycznego ze wzmocnieniem. Uzyskane wyniki (Tabela 2, rys. 7.2 i 7.3) wydają się wskazywać, że siatka numer 3 oferuje racjonalny kompromis pomiędzy możliwie krótkim czasem obliczeń a dostateczną do celów praktycznych jakością uzyskanych wyników. Ze względu na ograniczoną objętość niniejszego opracowania, na rys. 7.2, 7.3 i w Tabeli 2 przedstawiono jedynie składową tensora naprężeń resztkowych działającą w kierunku osi podłużnej szyny, gdyż uważa się, że ta właśnie składowa tensora naprężeń resztkowych ma istotny wpływ na powstawanie i propagację szczelin w główce szyny. Na rys. 7.2 przedstawiono rozkład tej samej składowej tensora naprężenia resztkowego na osi

symetrii szyny w obu wariantach obliczeń. Współrzędna pionowa oznacza odległość mierzoną od stopki szyny w centymetrach.

Tabela 2

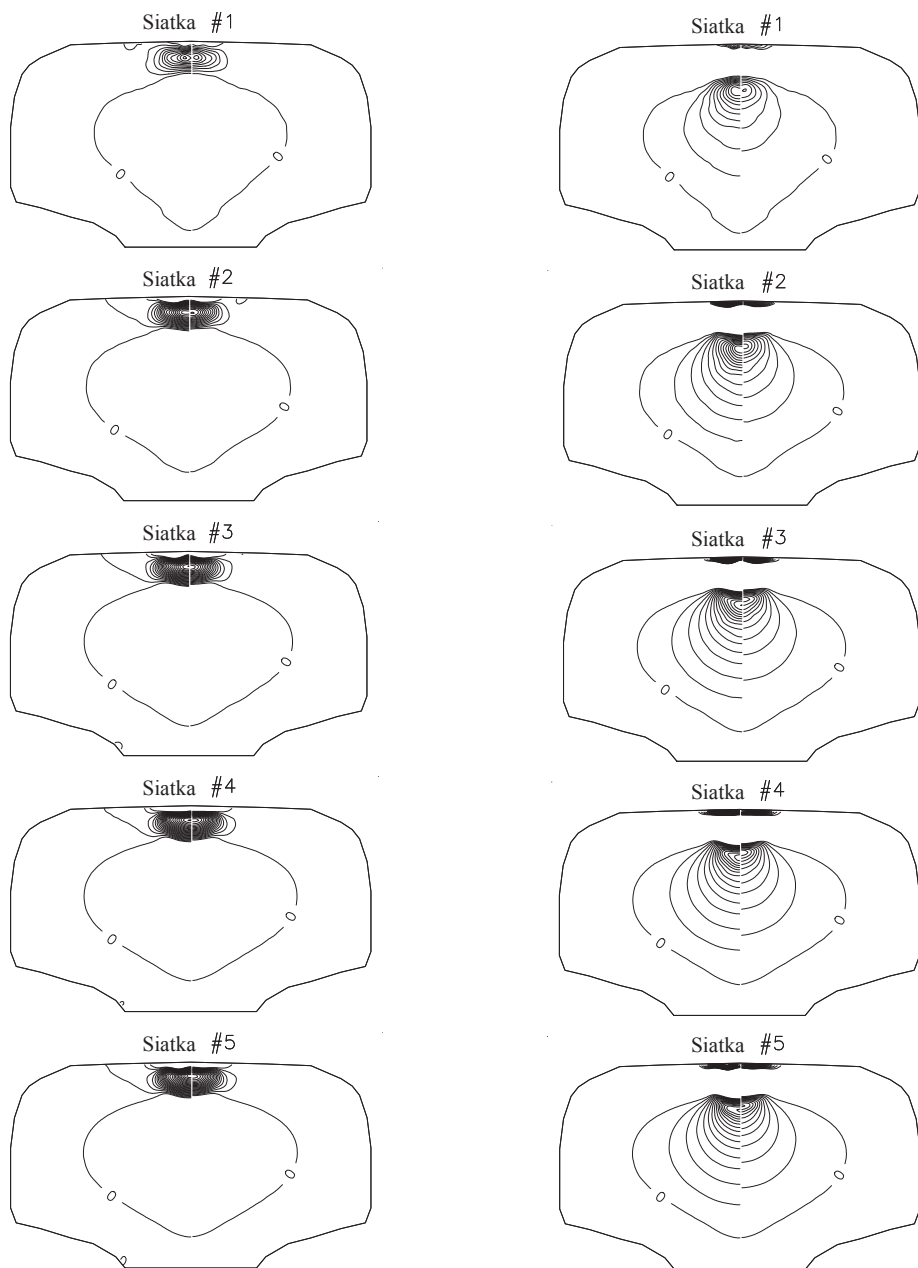
Siatka	Napężenie [MPa]	Model ¹⁾		Różnica ²⁾	
		standardowy	poszerzony	Całkowita	względna
1	min.	-70,897	-50,702	20,195	28,5%
	max.	37,112	20,872	16,240	43,8%
2	min.	-127,473	-97,132	30,341	23,8%
	max.	51,013	31,825	19,188	37,6%
3	min.	-152,079	-115,166	36,913	24,3%
	max.	51,924	36,208	15,716	30,3%
4	min.	-159,671	-127,390	32,281	20,2%
	max.	50,053	37,409	12,644	25,3%
5	min.	-176,436	-128,350	48,086	27,3%
	max.	52,331	38,796	13,535	25,8%

- 1) model standardowy – materiał idealnie sprężysto-plastyczny, model rozszerzony – materiał sprężysto-plastyczny ze wzmocnieniem izotropowym,
 2) całkowita = standardowy – rozszerzony, względna = (standardowy – rozszerzony)/standardowy*100



Rys. 7.2. Składowa wzdłużna tensora napężeń resztkowych w główce szyny, idealna sprężysto-plastyczność po lewej, plastyczność ze wzmocnieniem po prawej

Ze względu na czytelność planów warstwicowych napężeń na rys. 7.3 w lewej kolumnie przedstawiono ściskanie, a w prawej rozciąganie, przy czym po lewej stronie każdego rysunku mamy wyniki uzyskane dla sprężysto-plastycznego modelu materiału, a po prawej stronie dla modelu sprężysto-plastycznego ze wzmocnieniem.



Rys. 7.3. Wpływ gęstości siatki obliczeniowej i modelu materiału na składową wzdłużną tensora naprężeń resztkowych; na każdym rysunku idealna sprężysto-plastyczność po lewej, plastyczność ze wzmocnieniem po prawej:

lewa kolumna – ściskanie (warstwice co 21 MPa),
 prawa kolumna – rozciąganie (warstwice co 7 MPa)

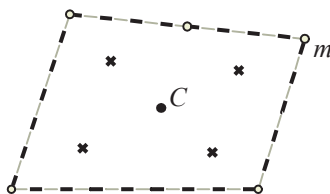
Aby zweryfikować możliwość dalszej poprawy jakości wyników obliczeń przy ograniczeniu rozmiaru zadania, przeanalizowano możliwość wprowadzenia nieregularnych siatek węzłów o zmiennej gęstości, lokalnie modyfikowanej w celu minimalizacji błędu wyznaczonych naprężeń resztkowych. W tym celu zaproponowano wskaźnik błędu rozwiązania wyrażonego w naprężeniach resztkowych i obliczany w środkach podobszarów całkowania jako:

$$e_i = \left| \frac{e_C - \frac{\sum_{m=1}^M e_m}{M}}{e_C} \right| \Phi(\sigma_{ij|C}^r), \quad (7.1)$$

w którym wartości e_m i e_C oznaczają odpowiednio energię sprężystą naprężeń resztkowych wyznaczoną w każdym z węzłów m (rys. 7.4) otaczających rozważany podobszar całkowania i tę samą energię obliczaną w środku C tego podobszaru (rys. 7.4.) zgodnie ze wzorami:

$$\begin{aligned} e_m &= \sigma_{ij|m}^r C_{ijkl} \sigma_{kl|m}^r \\ e_C &= \sigma_{ij|C}^r C_{ijkl} \sigma_{kl|C}^r \end{aligned} \quad (7.2)$$

przy czym naprężenia resztkowe w środku podobszaru całkowania są wyznaczone na podstawie wartości węzłowych według zależności (3.1). Sumowanie we wzorach (7.1) i (7.2) odbywa się po wszystkich węzłach $m \in M$ wyznaczających rozpatrywany podobszar całkowania (rys. 7.4.). Symbole \times na tym rysunku oznaczają punkty kwadratury Gaussa.



Rys. 7.4. Podobszar całkowania wraz z węzłami kwadratury Gaussa

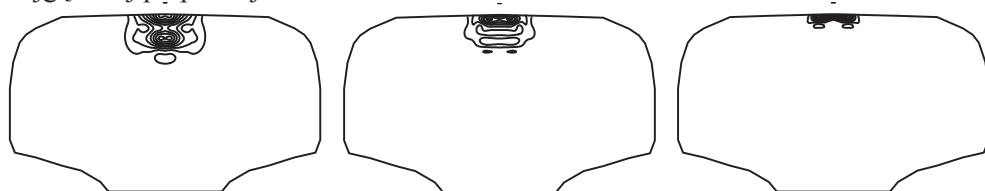
Wartości wskaźnika błędu wyznaczone w ten sposób dla każdego podobszaru całkowania są mnożone przez wartość funkcji plastyczności obliczonego dla naprężeń resztkowych w jego środku, aby uwzględnić większą wagę przypisywaną jakości rozwiązania w obszarach charakteryzujących się dużą intensywnością tych naprężeń. Wartości tak zdefiniowanego wskaźnika błędu są równe zero dla rozwiązania ścisłego, jeżeli podobszary całkowania są prostokątne.

Po obliczeniu wartości tak zdefiniowanego wskaźnika błędu dla każdego podobszaru całkowania użytkownik może zdecydować, które z nich powinny zostać podzielone. W zależności od przyjętej strategii postępowania można albo podzielić wszystkie podobszary całkowania, w których wskaźnik błędu przekracza przyjętą arbitralnie wartość progową, albo podzielić z góry określoną liczbę podobszarów

całkowania, w których wskaźnik błędu jest największy. W tej pracy przedstawione zostaną wyniki uzyskane przy zastosowaniu strategii drugiej.

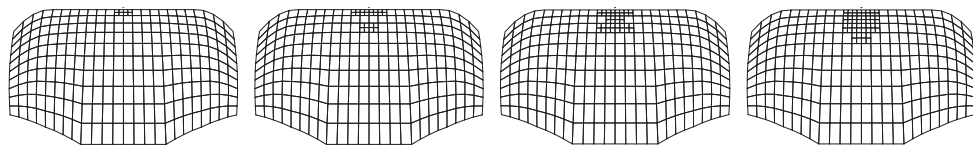
W celu uzyskania materiału do porównań zadanie (2.1)–(2.4) ze zdefiniowanymi powyżej obciążeniami rozwiązano na trzech siatkach, z których każda kolejna powstała przez czterokrotne zagęszczenie siatki poprzedniej, przy czym siatka pierwsza była identyczna z siatką pierwszą przedstawioną na rys. 7.1.

Na rys. 7.5. przedstawiono plany warstwicowe wskaźnika błędu w główce szyny kolejowej dla siatek 1–3 w kolejności od najrzadszej po lewej stronie do najgęstszej po prawej.



Rys. 7.5. Wskaźnik błędu w główce szyny kolejowej dla ciągu trzech siatek

Na podstawie wartości wskaźnika błędu wyznaczonego na siatce pierwszej zaproponowano podział 2, 6, 10 i 14 podobszarów całkowania na tej siatce charakteryzujących się jego największą wartością. W rezultacie z wyjściowej siatki o 400 podobszarach całkowania uzyskano siatki o 406, 418, 430 i 442 podobszarach, które przedstawiono na rys. 7.6 (jedynie główka szyny, w pozostałej części szyny siatka jest identyczna z siatką lewą na rys. 7.1). Na każdej z tych siatek powtórzone obliczenia naprężeń resztkowych w celu weryfikacji.

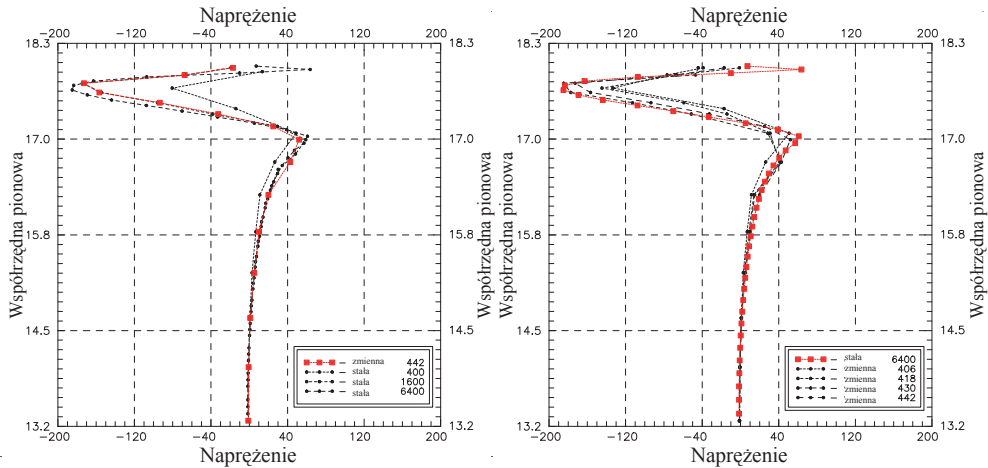


Rys. 7.6. Siatki zmodyfikowane na podstawie zaproponowanego wskaźnika błędu

Na rys. 7.7 przedstawiono wartości składowej wzdłużnej tensora naprężeń resztkowych na osi symetrii szyny. Po lewej stronie przedstawiono wartości porównawcze uzyskane na trzech siatkach regularnych (400, 1600, 6400 podobszarów całkowania) i najgęstszej z rozpatrywanych siatek nieregularnych, a po prawej stronie wyniki uzyskane na wszystkich rozpatrywanych siatkach nieregularnych i najgęstszej siatce regularnej. Na osi pionowej wykresów oznaczono odległości w centymetrach mierzone od stopki szyny, a na osi poziomej wartości naprężenia resztkowego w MPa.

W Tabeli 3 zebrano ekstremalne wartości naprężeń resztkowych wyznaczone na każdej z rozważanych siatek identyfikowane przez liczbę podobszarów całkowania, odniesione do wartości uzyskanych na siatce najgęstszej, traktowanych jako wartości odniesienia. Stąd kolumny tabeli oznaczone jako *błąd* zawierają błąd

względny procentowy danego rozwiązania w stosunku do rozwiązania na siatce 6400 podobszarów całkowania.



Rys. 7.7. Składowa wzdłużna naprężeń resztkowych na osi symetrii szyny

Tabela 3

Wartości ekstremalne składowych tensora naprężeń resztkowych na osi symetrii szyny

Siatka	Naprężenie resztkowe [MPa]					
	σ_{xx}^r	błąd [%]	σ_{yy}^r	błąd [%]	σ_{zz}^r	błąd [%]
406	-149.132	-28.67	-	-	-128.721	-27.96
	88.968	40.15	102.438	81.67	49.080	16.55
418	-153.735	-26.46	-3.628	-121.08	-139.829	-21.74
	95.339	35.87	68.756	21.93	39.707	32.49
430	-193.980	-7.21	-89.182	-5334.61	-178.343	-0.19
	78.797	46.99	99.710	76.83	40.961	30.36
442	-182.082	-12.91	-36.731	-2138.33	-166.848	-6.62
	119.571	19.57	67.555	19.80	50.264	14.54
400	-108.743	-47.99	-	-	-77.797	-56.46
	77.565	47.82	116.472	106.55	47.220	19.71
1600	-180.820	-13.51	-23.854	-1353.63	-168.439	-5.73
	127.965	13.92	67.917	20.45	57.074	2.96
6400	-209.063	-	-1.641	-	-178.675	-
	148.658	-	56.388	-	58.815	-

Należy tu zwrócić uwagę, że w każdym z rozważanych przypadków z siatką nieregularną uzyskano wskazanie lokalizacji ekstremów składowej wzdłużnej naprężeń resztkowych (najistotniejszej z praktycznego punktu widzenia) zgodne z lokalizacją na siatce najgęstszej, pomimo iż siatki nieregularne zawierają tylko około 6,5% podobszarów całkowania siatki najgęstszej.

Na podstawie analizy zawartości Tabeli 3 można również stwierdzić, że pierwsze trzy siatki nieregularne wydają się być zbyt rzadkie (maksymalny błąd względny procentowy wyznaczenia wartości ekstremalnych jest na poziomie 40%, jeżeli pominąć składową pionową, dla której pierwsze dwie siatki są ewidentnie

nieodpowiednie). Najgęstsza z siatek nieregularnych ma 442 podobszary całkowania (czyli tylko około 10,5% więcej niż najrzadsza z siatek regularnych) i pozwala na uzyskanie wyników zgodnych z wynikami uzyskiwanymi na pośredniej siatce regularnej, zwłaszcza jeżeli ograniczymy się do składowych poziomej i wzdłużnej tensora naprężeń resztkowych.

Tak więc wydaje się, że przedstawiony powyżej wskaźnik błędu może stanowić efektywne wsparcie w analizie naprężeń resztkowych, jeżeli jesteśmy zainteresowani oszacowaniem ekstremalnych wartości tych naprężeń w ciałach poddanych obciążeniom skupionym na niewielkich powierzchniach. Warto przy tym zwrócić szczególną uwagę na dobór podobszarów całkowania, które mają zostać podzielone, gdyż nawet niewielkie zmiany w ich liczbie znacząco wpływają na jakość końcowego rozwiązania.

8. Wnioski

W pracy przedstawiono dwa modele mechaniczne będące podstawą zbudowania modelu numerycznego UMRS służącego do analizy naprężeń resztkowych w ciałach poddanych obciążeniom cyklicznie zmiennym powodującym ich lokalne uplastycznienie. Przedstawiono wybrane wyniki testów służących ustaleniu parametrów modelu numerycznego oraz wyniki obliczeń przeprowadzonych dla rzeczywistego obiektu, jakim jest szyna kolejowa. Zaproponowano dwa sposoby prowadzące do przyspieszenia procesu obliczeniowego.

Przedstawione wyniki wydają się wskazywać, że uzyskano model obliczeniowy pozwalający na sprawne i bardzo konkurencyjne czasowo w stosunku do pełnej sprężysto-plastycznej analizy przyrostowej wyznaczanie rozkładów naprężeń resztkowych w ciałach pryzmatycznych poddanych obciążeniom cyklicznie zmiennym. W szczególności potwierdzono efektywność metody ortogonalizacji przestrzeni zmiennych decyzyjnych przy rozwiązywaniu zadania nieliniowej minimalizacji [21] oraz zasadność stosowania w trakcie obliczeń nieregularnych siatek węzłów o właściwie zlokalizowanych strefach koncentracji [27].

Literatura

- [1] Beer G., Smith I., Duenser Ch., *The Boundary Element Method with Programming: For Engineers and Scientists*, Springer, 2008.
- [2] Cannon D.F., Edel K-O, Grassie SL, Sawley K. *Rail defects: an overview*, Fatigue Fract. Engng Mater. Struct., vol. 26, 2003, 865–87.

- [3] Cecot W., Orkisz J., *Boundary Element Analysis of Actual Residual Stresses in Elastic-Plastic Bodies under Cyclic Loading*, Int.J.Engng Anal. with Boundary Elements, 9/4, 1992, 289-292.
- [4] Crisfield M.A, *Non-linear Finite Element Analysis of Solids and Structures*, Wiley&Sons, 1994.
- [5] Dang Van K., Maitournam M.H., Prasil B., *Elastoplastic analysis of repeated moving contact. Application to railways damage phenomena*, Wear, vol. 196, 1996, 77-81.
- [6] Dekker G., *Semi-discretization methods for partial differential equations on non-rectangular grids*, International Journal of Numerical Methods in Engineering, 15, 405-419, 1980.
- [7] Groom J.J., *Determination of residual stresses in rails*, Batelle Columbus Laboratories, Rpt. DOT/FRA/ORD-83-05, Columbus, OH, 1983.
- [8] Forsythe G.E., Wasow W.R., *Finite Difference Methods for Partial Differential Equations*, Wiley, New York 1960.
- [9] Jensen P.S., *Finite Difference techniques for variable grids*, Computers and Structures, 2, 1972, 17-29.
- [10] Krok J., Orkisz J., *3D elastic stress analysis in railroad rails and vehicle wheels by the Adaptive FEM/FDM and Fourier Series*, Proc. XII Conf. CMSM, Poznań, 1997, 661-668.
- [11] Kwok S.K., *An improved curvilinear Finite Difference (CFD) method for arbitrary mesh systems*, Computers and Structures, 18, 1984, 719-731.
- [12] *LAPACK users' guide*. SIAM, 1999.
- [13] Liszka T., Orkisz J., *The finite Difference at Arbitrary Irregular grids and it's applications in applied mechanics*, Computers and Structures, vol. 11, 1980, 109-121.
- [14] Lo K.H., Mummery P., Buttle D.J., *Characterization of residual principal stresses and their implications on failure of railway rails*, Engineering Failure Analysis, vol. 17, 2010, 1273-1284.
- [15] Magiera J., Orkisz J., Karmowski W., *Reconstruction of residual stresses in railroad rails from measurements made on vertical and oblique slices*, Wear, vol. 191, 1996, 78-89.
- [16] Marchenko H.P., *Influence of residual stresses on the stress intensity factors for a surface crack in the rail head*, Materials Science, vol. 46, 2010, 64-69.
- [17] Marin J., *Mechanical behavior of engineering materials*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1962.
- [18] Martin J.B., *Plasticity - fundamentals and general results*, The MIT Press Publ., 1975.
- [19] Orkisz J., Harris A., *Analysis of residual stresses at shakedown, a hybrid approach*, Theoretical and Applied Fracture Mechanics, vol. 9, 1988, 109-121.

- [20] Orkisz J., Orringer O., Hołowiński M., Pazdanowski M., Cecot W., *Discrete Analysis of Actual Residual Stresses Resulting from Cyclic Loadings*, Computer and Structures, vol. 35, 1990, 397-412.
- [21] Orkisz J., Pazdanowski M., *On a new Feasible Directions solution approach in constrained optimization*, w: *The Finite Element Method in the 1990's*, Springer Verlag, 1991, 621-632.
- [22] Orkisz J., Pazdanowski M., *On increasing the convergence of the new Feasible Directions Method in nonlinear optimization*, Proc. X Conf. CMSM, Szczecin, 1991, 591-597.
- [23] Orkisz J., Cecot W., *Prediction of actual residual stresses resulting from cyclic loading in kinematic hardening material*, Proc. Int. Conf. COMPLAS V, Barcelona 1997, 1879-1891.
- [24] Orkisz J., *Finite Difference Method*, w: M. Kleiber, editor, *Handbook of Computational Solid Mechanics*, 336-432, Springer Verlag, Berlin 1998.
- [25] Orringer O., Tang Y.H., Gordon J.E., Morris J.M., Perlman A.B., *Crack propagation life of detail fractures in rail*, US DOT Final Rpt., DOT-TSC-FRA-88-1, Cambridge, MA, 1988.
- [26] Pazdanowski M., *On estimation of residual stresses in rails using shake-down based method*, Archives of Transport, vol. 22(3), 2010, 319-336.
- [27] Pazdanowski M., *Error driven remeshing strategy in an elastic-plastic shake-down problem*, Proc XXII Conf. CMSM, MS03-09-MS03-10, Lublin 2017.
- [28] Peronne N., Kao R., *A general Finite Difference Method for arbitrary meshes*, Computers and Structures, 5, 1975, 45-58.
- [29] Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery B.P., *Numerical Recipes in Fortran*, Cambridge University Press, Cambridge, MA, 1992.
- [30] Rodionov D.P., Schastlivtsev V.M., Tabatchikova T.I. i inni, *Structure of iron and steel rails produced in the 19th and early 20th century at Ural metallurgical works*, Physics of Metals and Metallography, vol. 108 (3), 2009, 243-253.
- [31] Sasaki T. i inni, *Measurement of residual stresses in rails by neutron diffraction*, Wear, vol. 265, 2008, 1402-1407.
- [32] Schlenzer G., Fischer F.D., *Residual stress formation during the roller straightening of railway rails*, Int. J. of Mechanical Sciences, vol. 43, 2001, 2281-2295.
- [33] Skyttebol A., Josefson B.L., Rinsberg J.W., *Fatigue crack growth in a welded rail under the influence of residual stresses*, Engng Fracture Mechanics, vol. 72, 2005, 271-285.
- [34] Skrzypek J., *Teoria plastyczności i pełzania, wprowadzenie teoretyczne, przykłady, zadania*, Wydawnictwo PK, Kraków 1980.
- [35] Steel R.K. i inni, *Catastrophic Web Cracking of Railroad Rail: A Discussion of the Unanswered Questions*, Association of American Railroads, 1990.

- [36] Stewart G.W., *On the early history of the Singular Value Decomposition*, SIAM Review 35, 1993, 551-566.
- [37] Strikwerda J., *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations (2nd ed.)*, SIAM, 2004.
- [38] Timoshenko S., Langer B.F., *Stresses in railroad track*, Journal of Applied Mechanics, 54, 1932, 277-293.
- [39] Wang Y.Y, Chiang F.P., *Experimental study of three-dimensional residual stresses in rails by Moire interferometry and dissecting methods*, Optics and Lasers in Engng, vol. 27, 1996, 89-100.
- [40] Zerbst U., Lunden R., Edel K.-O., Smith R.A., *Introduction to the damage tolerance behaviour of railway rails – a review*, Engineering Fracture Mechanics, vol. 76, 2009, 2563-2601.
- [41] Zienkiewicz O.C., Taylor R.L., Zhu J.Z., *The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals*, Butterworth-Heinemann, 2005.
- [42] Życzkowski M., *Obciążenia złożone w teorii plastyczności*, PWN, 1981.

Jacek Magiera*

ZBIEŻNOŚĆ ITERACYJNEJ ESTYMACJI BŁĘDU *A POSTERIORI* DANYCH EKSPERYMENTALNYCH METODĄ APROKSYMACJI FIZYCZNIE UZASADNIONEJ

CONVERGENCE OF AN ITERATIVE *A POSTERIORI* ESTIMATION OF EXPERIMENTAL DATA ERROR BY THE PHYSICALLY BASED APPROXIMATION

Streszczenie

W pracy przedstawiono wyniki badania zbieżności iteracyjnej metody oszacowania błędu *a posteriori* danych eksperymentalnych z wykorzystaniem aproksymacji fizycznie uzasadnionej zastosowanej do pól naprężeń reszkowych analizowanych w szynach kolejowych badanych metodą neutronografii. Przedstawiona metoda należy do niestatystycznych metod analizy błędów danych pomiarowych i może być szczególnie przydatna dla zastosowań w badaniach niszczących, w przypadku których nie da się wykonać serii badań dla tej samej próbki w celu zbudowania statystyki błędów. Dzięki wykorzystaniu podejścia hybrydowego, łączącego teorię badanych zjawisk z wynikami eksperymentalnymi i założeniami heurystycznymi (minimalizacja krzywizny tensorowej mierzonego pola), możliwa jest estymacja błędów w sposób analogiczny do stosowanego w estymatorach typu Zienkiewicza-Zhu SPR (*Superconvergent Patch Recovery*) [1]. W proponowanym w pracy podejściu bieżące oszacowanie błędów danego pola jest budowane w odniesieniu do pola wyższej jakości, jednak w tym wypadku nie jest to pole aproksymacyjne wyższego rzędu jak w estymatorze ZZ, ale pole wygładzone metodą aproksymacji fizycznie uzasadnionej. W pracy podjęto próbę wykazania zbieżności oszacowań iteracyjnej metody estymacji błędów *a posteriori* i uzyskano jej numeryczne potwierdzenie.

Słowa kluczowe: analiza błędów a posteriori danych doświadczalnych, aproksymacja fizycznie uzasadniona, metody hybrydowe, trójwymiarowy stan naprężeń reszkowych w szynach kolejowych, neutronografia

Abstract

In the paper convergence of the iterative physically based method for estimation of a posteriori error of neutron diffraction experimental data for rail residual stress was investigated. The method belongs to non-statistical methods of experimental data analysis and lends itself well to case of destructive testing which de facto prevent repetitive examinations of the same particular sample, thus also prevents of building a true statistics for the sample. The cost of sample extraction and examination is usually prohibitive in that case. Thanks to application of a hybrid approach to the addressed problem that binds together physical, experimental and heuristic (minimisation of a tensor curvature functional) relations it is possible to estimate the error of

* Dr inż., e-mail: Jacek.Magiera@pk.edu.pl Katedra Technologii Informatycznych w Inżynierii, Wydział Inżynierii Ładowej, Politechnika Krakowska.

experimental data in a way similar to the well-known Zienkiewicz-Zhu SPR (*Super-convergent Patch Recovery*) method [1]. In the approach proposed in this paper the estimator is also built against a higher quality reference field but now it not a higher approximation order field like in the case of ZZ estimator but a field that comes from smoothing of experimental data with the physically based global smoothing method. Numerical proof of convergence of the experimental data error estimates obtained by this approach is presented in the paper.

Keywords: a posteriori error analysis of experimental data, physically based approximation, hybrid methods, tri-axial rail residual stress

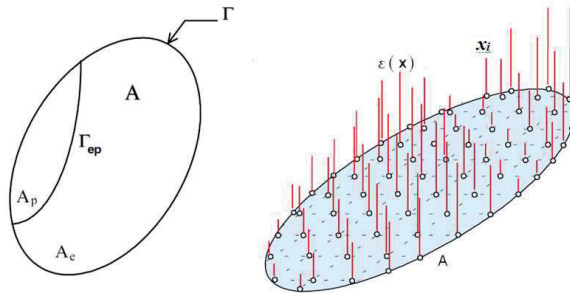
1. Wprowadzenie

Rozważmy problem pomiaru pola tensorowego odkształceń $\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{x})$, $\boldsymbol{x} = x_1, x_2$ w dyskretnym zbiorze punktów $\boldsymbol{x}_i, i = 1, 2, \dots, K$ pewnego ciała A – rys. 1, dla którego zdefiniowane jest odwracalne odwzorowanie \boldsymbol{f}) do pola naprężeń $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x})$:

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{x})). \quad (1)$$

Założmy też, że ciało to znajduje się w płaskim stanie naprężenia (PSN), w związku z czym tensor naprężenia z racji symetrii ma jedynie trzy różne składowe:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{bmatrix}. \quad (2)$$



Rys. 1. Ciało A , w którym dokonano pomiarów odkształceń $\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{x})$ w dyskretnym zbiorze punktów pomiarowych \boldsymbol{x}^i

Na rys. 1 pokazano dla ogólności rozważań sytuację, kiedy ciało A o brzegu zewnętrznym Γ może mieć dwie strefy A_p i A_e , i dzielący je wewnętrzny brzeg Γ_{ep} , pozwalającą opisać przypadek występowania np. strefy sprężystej i plastycznej w ciele, dla których będą obowiązywać różne prawa fizyki.

W rozważanym przypadku pomiarów stanów resztkowych w szynach kolejowych metodą neutronografii [2] oprócz przyjęcia PSN założymy, że przy odciążeniu stan resztkowy generuje liniowy związek między polem naprężeń i odkształceń, co pozwoli – wobec relacji (1) – sformułować metodę globalną aproksymacji fizycznie uzasadnionej wprost w przestrzeni naprężeń. Założymy także, że z racji niewielkiej objętości próbkowania V_i pomiar metodą neutronograficzną jest punktowy, a jego wynik przypisany środkowi ciężkości próbkowanej objętości.

2. Metoda globalna aproksymacji fizycznie uzasadnionej

Metoda globalna aproksymacji fizycznie uzasadnionej została sformułowana jako zadanie optymalizacji wielokryterialnej w obszarze ograniczonym. W klasycznym sformułowaniu [3–7] zadanie znalezienia wygładzonego pola naprężeń resztkowych $\sigma(\mathbf{x})$, aproksymującego zbiór \mathbf{K} wartości pomiarowych $\sigma_{ij}^k, i, j = 1, 2, k = 1..K$, spełniającego równania fizyki, równania wynikające z żądań heurystycznych, jak i pewne ograniczenia nierównościowe, jest przedstawione jako dwuetapowa optymalizacja polegająca na znalezieniu punktu stacjonarnego funkcjonału hybrydowego $\Phi(\sigma, \lambda)$:

$$\min_{\sigma} \Phi(\sigma, \lambda) = \lambda \Phi^T(\sigma) + (1 - \lambda) \Phi^E(\sigma), \quad \lambda \in [0, 1], \quad (2)$$

przy zachowaniu warunków, że znalezione pole aproksymacyjne $\sigma(\mathbf{x})$ spełnia dane ograniczenia równościowe:

$$A(\sigma) = 0, \quad (3)$$

i nierównościowe:

$$B(\sigma) \leq e. \quad (4)$$

We wzorze (2) $\Phi^T(\sigma)$ to funkcjonał reprezentujący teoretyczną część wymagań, które powinno spełniać poszukiwane pole naprężenia (np. reprezentującego zasadę minimum energii albo warunek gładkości, czyli lokalnego tłumienia szumu, który wnosi w rozwiązanie błąd danych pomiarowych), a $\Phi^E(\sigma)$ to funkcjonał związany z eksperymentem, chroniący pole aproksymacyjne $\sigma(\mathbf{x})$ od zbytniego odejścia jego przebiegu od powierzchni, która by była wygenerowana jako czysta interpolacja danych pomiarowych (bez spełniania żadnych dodatkowych ograniczeń). Udział wymagań teoretycznych (np. minimalizacji energii) i przeciwnych im wymagań związanych z zachowaniem względnej wierności danym eksperymentalnym reguluje parametr $\lambda \in [0, 1]$, który jest traktowany jako ustalony na danym kroku

minimalizacji po $\sigma(\mathbf{x})$ funkcjonau hybrydowego (2). Nie jest on jednak z góry znany, dlatego praktyczne rozwiązanie zadania metody globalnej wymaga sformułowania w drugim etapie dodatkowego kryterium zakończenia optymalizacji. Jedną z możliwości – jeśli jest znane dobre oszacowanie lokalnych błędów pomiarowych w poszczególnych punktach pomiarowych lub globalnego błędu, np. w sensie wartości średnich czy maksymalnych – jest prowadzenie sekwencji rozwiązań zadania (2)–(4) przy zwiększanej sukcesywnie wartości parametru λ do momentu, w którym spełnione zostaną ograniczenia nierównościowe (5)–(6) monitorujące odejście pola aproksymacyjnego $\sigma(\mathbf{x})$ od wynikającego z pomiarów dyskretnego pola wartości pomiarowych $\sigma_{ij}^k, i, j = 1, 2, k = 1..K$:

- lokalne:

$$\left| \sigma_{ij}^k - \sigma_{ij}^{k \text{ appr}} \right| \leq \Delta \sigma_{ij}^k, \quad i, j = 1, 2, \quad k = 1..K, \quad (5)$$

- globalne:

$$\sqrt{\sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \frac{(\sigma_{ij}^k - \sigma_{ij}^{k \text{ appr}})^2}{(\Delta \sigma_{ij}^k)^2}} \leq \Delta \sigma_{\text{global}}. \quad (6)$$

We wzorach (5)–(6) budowane są różnice między pomiarem w danym punkcie pomiarowym \mathbf{x}^i (a raczej jego reprezentacją w przestrzeni naprężeń) $\sigma_{ij}^k = \mathbf{f}(\varepsilon_{ij}^k)$, a jego ciągłym przybliżeniem polem aproksymacyjnym $\sigma(\mathbf{x})$, reprezentowanym lokalnymi wartościami składowych tensora naprężenia w kolejnych punktach pomiarowych $\sigma_{ij}^{k \text{ appr}}$. Różnice te są ograniczane lokalnymi wartościami błędu pomiaru wyrażonego w składowych naprężenia $\sigma_{ij}, i, j = 1, 2$ w kolejnych punktach pomiarowych $\Delta \sigma_{ij}^k, k = 1..K$ dla ograniczeń lokalnych lub wartością średnią błędu $\Delta \sigma_{\text{global}}$ w przypadku ograniczeń typu globalnego. Wzory (5) i (6) są formalnie zapisywane w składowych tensora naprężenia dlatego, że nie w każdym punkcie muszą być mierzone dane o $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})$ dostateczne do wyznaczenia wg równania (1) wszystkich składowych pola naprężenia w danym punkcie pomiarowym.

Sformułowanie (2)–(6) jest zapisane w sposób ogólny, dla zastosowań w praktycznych analizach wymaga wyspecyfikowania postaci teoretycznej $\Phi^T(\sigma)$ i eksperymentalnej $\Phi^E(\sigma)$ części funkcjonau hybrydowego (2) oraz szczegółowego zapisu warunków równościowych (3) i nierównościowych (4). W rozważanym przypadku analizy danych dla stanów resztkowych w szynach kolejowych badanych metodą ukośnych przekrojów [3–5] funkcjonau teoretyczny $\Phi^T(\sigma)$ przyjęto

jako niezmienniczą wobec obrotu krzywiznę pola tensorowego σ wg definicji Karmowskiego [6]:

$$\Phi^T(\sigma) = \int_{A_p} \kappa^2 dA, \quad (7)$$

gdzie κ^2 jest zdefiniowana jako:

$$\kappa^2(\sigma_{ij}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\partial^2 \sigma_{ij}}{\partial v^2} \frac{\partial^2 \sigma_{ij}}{\partial v^2} d\phi, \quad (8)$$

a $\frac{\partial}{\partial v}$ jest pochodną kierunkową pola naprężenia całkowaną po pełnym kącie $[0, 2\pi]$. Natomiast funkcjonal eksperymentalny $\Phi^E(\sigma)$ został zdefiniowany jako

$$\Phi^E(\sigma) = \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \frac{(\sigma_{ij}^k - \sigma_{ij}^{k \text{appr}})^2}{(\Delta\sigma_{ij}^k)^p}, \quad (9)$$

czyli w klasycznym sensie ważonej metody najmniejszych kwadratów MWLS [8]. Znajdujące się w mianowniku wyrażenie $(\Delta\sigma_{ij}^k)^p$ ma sens współczynnika wagiowego wyrażającego stopień zaufania do pomiaru składowej σ_{ij} naprężenia w k -tym punkcie pomiarowym. Wykładnik p został wprowadzony dla lepszej kontroli nad procesem filtrowania danych słabej jakości. Ograniczenia równościowe w przypadku samozrównoważonego pola naprężeń resztkowych zostały zdefiniowane jako:

- równania równowagi wewnętrznej:

$$\sigma_{ij,j} = 0 \quad \text{w} \quad A = A_e \cup A_p, \quad (10)$$

- równania równowagi na brzegu:

$$\sigma_{ij} n_j = 0 \quad \text{na} \quad \partial A, \quad (11)$$

- równania równowagi w całym przekroju (wypadkowe sił i momentu):

$$\begin{aligned}
\int_A \sigma_{xx} dA &= 0, \\
\int_A \sigma_{yy} dA &= 0, \\
\int_A \sigma_{xy} dA &= 0, \\
\int_A [(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})y - (\sigma_{yy} + \sigma_{xx})x] dA &= 0.
\end{aligned}
\tag{12}$$

Warto podkreślić, że dzięki sformułowaniu w naprężeniach równania fizyki, które będą wymuszane na polu aproksymacyjnym naprężeń, są zawsze prawdziwe i nie obejmują równań konstytutywnych, które z definicji niosą pewną dozę niepewności, jako że są modelem rzeczywistości, a nie obiektywnym prawem fizyki. Pozwala to traktować otrzymane z metody globalnej pola aproksymacyjne naprężenia jako statycznie dopuszczalne, co jest sporą zaletą w stosunku do klasycznych metod numerycznego opracowania i ulepszania danych eksperymentalnych, w których otrzymane na podstawie obarczonych błędem pomiarowym mapy naprężeń są ulepszone czysto matematycznymi metodami wygładzania, w związku z czym pola aproksymacyjne zazwyczaj nie spełniają żadnych praw fizyki obowiązujących dla mierzonych eksperymentalnie wartości.

3. Iteracyjna metoda analizy błędu *a posteriori* metodą globalną

Kluczem do budowy iteracyjnej metody estymacji błędu *a posteriori* pola uzyskanego z badań eksperymentalnych z wykorzystaniem metody globalnej aproksymacji fizycznie uzasadnionej jest znalezienie ulepszanego pola aproksymacyjnego badanej wielkości fizycznej – w rozważanym przypadku pola naprężeń – które mogłoby być potraktowane analogicznie do podejść estymacji błędu *a posteriori* w klasycznych metodach numerycznych, np. wg koncepcji estymatora SPR Zienkiewicza-Zhu [1] jako referencyjne pole wyższego rzędu. Wprawdzie w przypadku fizycznie uzasadnionej analizy danych eksperymentalnych nie mamy do czynienia ze zjawiskiem nadzbieżności w aproksymacji pól eksperymentalnych, tylko z uzyskaniem wygładzonego pola spełniającego zadane równania fizyki i realizujące postulat eliminacji z pól pomiarowych błędów. Błędy te są związane bądź z losowym szumem wysokiej częstotliwości (błąd przypadkowy związany z wpływem różnych czynników na fizykę pomiarów), bądź błędów systematycznych związanych np. z nieadekwatnym opisem fizyki modelu (np. w przypadku neutronografii zaburzona siatka krystaliczna w wyniku ekstremalnych efektów plastycznych i blokad dyslokacji na granicy ziaren) czy – także w przypadku badań neutronograficznych – efektami brzegowymi i dodatkowym rozproszeniem wiązki neutronów przy brzegu badanego ciała spowodowanych efektem tzw. częściowego

oświetlenia (ang. *partial illumination*) próbkowanej objętości. Mając ulepszone w stosunku do oryginalnego pola pomiarowego pole aproksymacyjne, łatwo można zbudować oszacowanie błędu każdej składowej pola naprężenia ze wzoru:

$$\Delta\sigma_{ij}^k = \left| \sigma_{ij}^k - \sigma_{ij}^{k \text{ appr}} \right|, \quad i, j = 1, 2, \quad k = 1..K. \quad (13)$$

Jednak konfrontacja tego wzoru ze sformułowaniem metody globalnej (2)–(4), oraz w szczególności definicją funkcjonału eksperymentalnego $\Phi^E(\boldsymbol{\sigma})$ ze wzoru (9) prowadzą do wniosku, że oszacowanie błędu *a posteriori* wg definicji ze wzoru (13), które się uzyskuje w wyniku minimalizacji funkcjonału hybrydowego i znalezieniu ulepszonych pól aproksymacyjnych zostało wyznaczone dzięki wcześniejszej znajomości tego oszacowania, wprowadzonego w mianowniku funkcjonału eksperymentalnego (9) jako waga wyrażająca zaufanie do danych eksperymentalnych dla danej składowej naprężenia σ_{ij} w danym punkcie pomiarowym k . Jest to oczywiście niewykonalne wprost, dlatego potrzebna jest procedura iteracyjna, w której w zerowym (startowym) kroku wagi te zostaną przyjęte arbitralnie, np. jako równe sobie i wszystkie równe jedności (14) albo jak we wzorze (15) jako inne ustalone wartości startowe $\overline{\Delta\sigma_{ij}^k}$, być może różne dla kolejnych składowych i kolejnych punktów pomiarowych, przyjęte na podstawie dodatkowej wiedzy o pomiarze czy jego fizyce:

$$\Delta^0\sigma_{ij}^k = 1, \quad \forall i, j = 1, 2 \quad \text{i} \quad \forall k = 1, \dots, K, \quad (14)$$

$$\Delta^0\sigma_{ij}^k = \overline{\Delta\sigma_{ij}^k}, \quad \forall i, j = 1, 2 \quad \text{i} \quad \forall k = 1, \dots, K. \quad (15)$$

Tak dobrane wagi startowe $\Delta^0\sigma_{ij}^k$ zostaną wprowadzone do definicji funkcjonału eksperymentalnego (9), a dokonując minimalizacji funkcjonału hybrydowego (2)–(4) z tak przyjętymi wstępnie wagami, można zbudować iteracyjny ciąg aproksymacji, w których pierwotnie arbitralnie dobrane wagi zostaną sukcesywnie zastępowane wyliczonymi w kolejnych iteracjach zadania m -tymi przybliżeniami wag, czyli kolejnymi oszacowaniami błędu *a posteriori* danych eksperymentalnych wg wzoru:

$$\Delta^m\sigma_{ij}^k = \left| \sigma_{ij}^k - \sigma_{ij}^{k \text{ appr}, m-1} \right|, \quad i, j = 1, 2, \quad k = 1..K, \quad m = 1, \dots, M, \quad (16)$$

gdzie indeks m numeruje iteracje procesu.

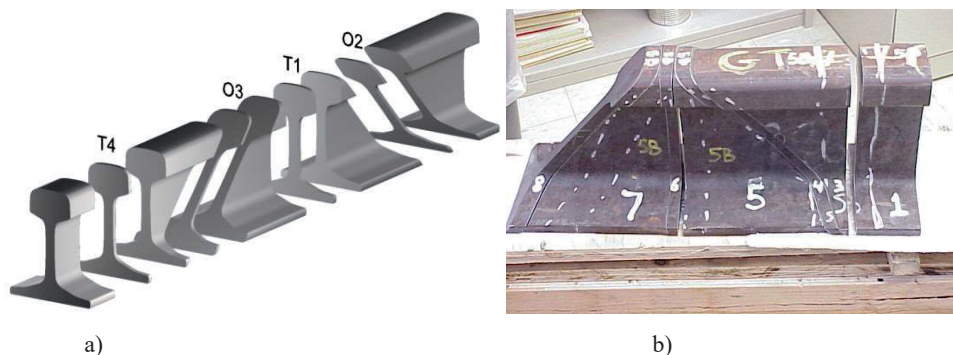
Podobnie jak w przypadku wielu metod iteracyjnych powstaje pytanie, czy podejście, w którym arbitralnie przyjmuje się punkt startowy jest zbieżne, czy jest jakiś obszar doboru punktu startowego, dla którego metoda jest zbieżna i obszar, dla którego zbieżność może być problematyczna. Niniejsza praca próbuje odpowiedzieć na te pytania, posługując się metodą symulacji numerycznych, brak bowiem dla metody globalnej podstaw matematycznych pozwalających zbudować takie oszacowania i udowodnić zbieżność metodami analitycznymi. Powodem braku takiego dowodu jest przede wszystkim charakter danych pomiarowych, który może być zasadniczo różny od zbioru do zbioru. W przypadku szyn kolejowych badanych metodą neutronografii wynik wygładzania jest uzależniony od jakości i ilości danych, pozyskiwanie danych i pomiar mają charakter statystyczny. Z punktu widzenia mechaniki czynnikiem niekontrolowanym jest np. historia deformacji materiału w zakresie plastycznym i jej konsekwencje na model materiału: w ekstremalnych warunkach obciążenia może dochodzić do przemian fazowych, które zmieniają siatkę krystaliczną, czyniąc wyznaczanie stałej d_0 (odległości płaszczyzn krystalicznych w nieobciążonym ciele [2]) także procesem losowym, podatnym na błędy, które trudno oszacować. Stąd jedyną opcją badania zbieżności wydaje się podejście numeryczne, w którym wnioskowanie oparte jest na wynikach szerokiego spektrum różnorodnych testów numerycznych.

4. Testy zbieżności iteracyjnej metody estymacji błędu *a posteriori* danych doświadczalnych dla różnych strategii doboru wag

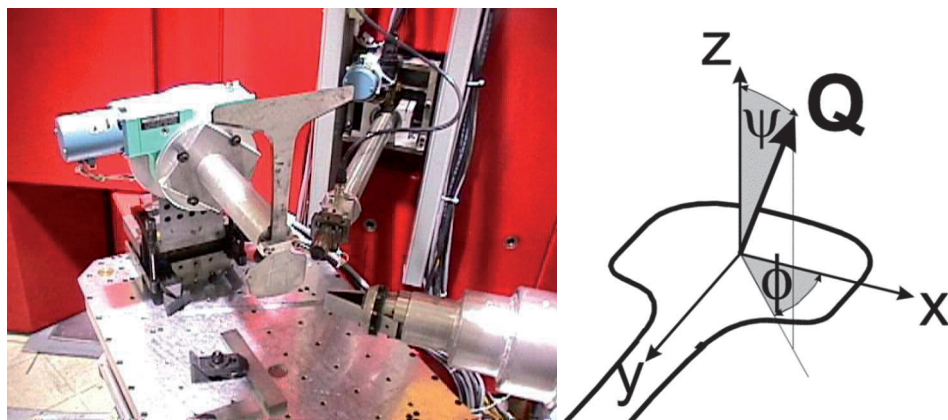
Rozważono i zbadano kilka strategii doboru wag startowych w celu przeanalizowania działania metody, jakości i zbieżności wyników, które są możliwe do osiągnięcia i dzięki temu, na bazie wykonanych testów numerycznych, uzyskania racjonalnych przesłanek dla weryfikacji zbieżności metody i jej przydatności do praktycznych jej zastosowań.

Testy wykonano dla próbki szyny kolejowej typu RE132 stosowanej w USA, która była zainstalowana w torowisku badawczym US DOT, Transportation Technology Center (TTC) w Pueblo, TX i poddana kontrolowanemu reżimowi obciążeń co do całkowitego tonażu, jak i jednostkowego nacisku na oś (39 ton) [2]. Szyna po wyjęciu z torowiska została pocięta na próbki wg schematu czteropróbkowej wersji metody ukośnych przekrojów [5]. Na rys. 2a pokazano schemat trepanacji, a na rys. 2b zdjęcie szyny pociętej na próbki o grubości ok. 6.35 mm (1/4 cala). Każda z czterech próbek została poddana analizie metodą neutronograficzną w podległym pod US Dept. of Commerce ośrodku badań neutronowych CNR/NIST w Gaithersburgu, MD. Rys. 3 pokazuje próbkę szyny zamocowaną w trójosiowym refraktometrze BT-8 dla badania naprężeń resztkowych w celu wyznaczenia w niej pła-

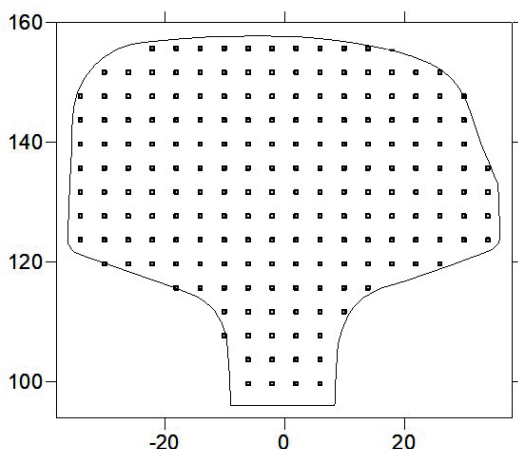
skiego stanu naprężenia. Na rys. 4 przedstawiono siatkę 364 punktów pomiarowych, w których dokonano pomiarów dyfrakcyjnych (objętość skanowana to 3x3x3 mm) oraz aktualny profil szyny po wyjęciu z torowiska z widocznym zużyciem i brakiem symetrii.



Rys. 2. Metoda ukośnych przekrojów dla szyn – schemat (a) i trepanacja realnej szyny (b)



Rys. 3. Próbką szyny w refraktometrze BT-8 oraz idea pomiarów neutronograficznych [2]



Rys. 4 Profil używanej szyny RE132 oznaczonej w [2] jako próbka #5

Analiza metodą neutronograficzną polega na naświetlaniu małego fragmentu objętości ciała neutronami o odpowiedniej energii/długości fali uzyskanymi z reaktora atomowego, a następnie pomiarze kąta dyfrakcji neutronów od płaszczyzn krystalograficznych tego ciała. Dla danego typu materiału, w stanie nieobciążonym, istnieje zależność między odległością niezdeformowanych płaszczyzn krystalograficznych d_0 a kątem, pod jakim następuje rozproszenie wiązki. Jeśli ciało – a raczej jego siatka krystalograficzna – poddana jest deformacji obciążeniami czynnymi lub została trwale zdeformowana w wyniku ruchu dyslokacji w procesie plastycznym i znajduje się w stanie naprężeń resztkowych, to odległości między płaszczyznami krystalograficznymi ulegają zmianie i w związku z tym kąt rozproszenia wiązki neutronów będzie inny. Jeżeli znany jest parametr d_0 oraz kąt rozproszenia wiązki neutronów, który z prawa Braga może być przeliczony na aktualną odległość między płaszczyznami krystalograficznymi d , to różnica między wielkościami d_0 i d może wprost służyć do znalezienia odkształcenia w analizowanym kierunku krystalograficznym hkl z klasycznego wzoru:

$$\varepsilon^{hkl} = \frac{d-d_0}{d_0}, \quad (17)$$

a po wykonaniu kilku ekspozycji z różnymi kombinacjami kątów (φ, ψ) do wyznaczenia pełnego tensora odkształcenia ε_{ij} , $i, j = 1, 2$. Dzięki standardowo przyjmowanej w przypadku odciążenia liniowej relacji między odkształceniem i naprężeniem wg wzoru:

$$\varepsilon_{\varphi\psi} = \frac{1}{2} S_2(hkl) [(\sigma_{11} \cos^2 \varphi + \sigma_{22} \sin^2 \varphi + \sigma_{12} \sin 2\varphi) \sin^2 \psi + \quad (18)$$

$$+(\sigma_{13}\cos\varphi + \sigma_{23}\sin\varphi)\sin 2\psi + \sigma_{11}\cos^2\varphi + \sigma_{33}\cos^2\psi]+ \\ +S_1(hkl)(\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})$$

możliwe jest uzyskanie pola naprężenia w badanym ciele. Zazwyczaj kąty (φ, ψ) przyjmuje się jako $(0,0)$, $(0,90)$, $(90,90)$ dla wyznaczenia naprężeń σ_{ii} , $i = 1,2,3$ (bez sumacji po indeksie i), a dla wyznaczenia naprężeń ścinających są to zazwyczaj kąty $(30, 90)$ i/lub $(60,90)$.

4.1. Testy numeryczne zbieżności iteracyjnej metody analizy błędu *a posteriori* metodą globalną

Program testów dla zbadania zbieżności estymacji błędu *a posteriori* danych eksperymentalnych metodą globalną aproksymacji fizycznie uzasadnionej obejmował wiele analiz powtarzanych dla różnych strategii doboru wag początkowych (14) i różnych strategii doboru wykładnika p . Wykonano je dla wszystkich 4. próbek T1, O2/ O3 i T4 szyny RE132 #5. Program testów przedstawiono w Tabeli 1.

Tabela 1. Plan testów

Test #	Strategia doboru $\Delta^0 \sigma_{ij}^k$	Wykładnik p	Uwagi i objaśnienia
1	$\Delta^0 \sigma_{ij}^k = 1$	$p=1$	Podstawowy wariant MNK
2	$\Delta^0 \sigma_{ij}^k = 1$	$p=2$	Silniejsze ważenie, wzmocnienie punktów o niskim błędzie i osłabienie punktów o znacznym błędzie
3	$\Delta^0 \sigma_{ij}^k = 1$	$p=1$ w pierwszym kroku ($m=1$) $p=2$ w kolejnych krokach ($m>1$)	Metoda pośrednia, w pierwszym kroku wagi nie wprowadzają silnego rozróżnienia dobrych i złych punktów pomiarowych, potem przyspieszenie obliczeń
4	$\Delta^0 \sigma_{ij}^k = \begin{cases} 0.1 \text{ kat. pkt. 1} \\ 1 \text{ kat. pkt. 2} \\ 10 \text{ kat. pkt. 3} \end{cases}$	$p=1$	Kat. 1 (kategoria punktu 1) – punkty z wnętrza główki szyn; Kat. 2 – dane w pkt. z obszarów bliskich brzegu (zjawisko utraty jakości spowodowane „częściowym oświetleniem”); Kat. 3 – dane ze strefy

			pod powierzchnią toczną, ekstremalne błędy
5	$\Delta^0 \sigma_{ij}^k = \begin{cases} 10 \text{ kat. pkt. 1} \\ 1 \text{ kat. pkt. 2} \\ 0.1 \text{ kat. pkt. 3} \end{cases}$	$p=1$	Kategorie punktów jak wyżej; w teście #5 – odwrotnie jak w teście #4 – punkty z wnętrza główki szyny, gdzie błędy met. neutronograficznej są zasadniczo najmniejsze, mają najsłabszy wpływ na wynik, najsilniejszy wpływ na wynik mają punkty o potencjalnie ekstremalnych błędach; test przeciążeniowy
6	$\Delta^0 \sigma_{ij}^k = RND1()$	$p=1$	Wagi losowe, błąd [0, 15 MPa]
7	$\Delta^0 \sigma_{ij}^k = RND2()$	$p=1$	Wagi losowe, błąd [0, 150 MPa]

Zbieżność jest badana w normach L2 i maksymowej:

$$(\overline{E_{ij}}^m)^2 = \frac{1}{A} \int_A ({}^m E_{ij}^k)^2 dA, \quad (19)$$

$$E_{ij}^m_{\max} = \max_{ij,k} ({}^m E_{ij}^k), \quad (20)$$

gdzie:

$${}^m E_{ij}^k = |\Delta^m \sigma_{ij}^k - \Delta^{m-1} \sigma_{ij}^k|. \quad (21)$$

Z racji dużej ilości materiału graficznego uzyskanego w analizach i ograniczonego miejsca, w niniejszej pracy przedstawione będą tylko niektóre przykładowe wyniki prezentujące mapy pól aproksymacyjnych, wykresy zbieżności wag i norm błędu.

4.2. Wyniki testów zbieżności

4.2.1. Test #1

W teście #1 przyjęto naturalne parametry startowe: wagi jako jednorodne pole jednostkowe $\Delta^0 \sigma_{ij}^k = 1$ (pomiaru we wszystkich punktach mają ten sam stopień wiarygodności) oraz wykładnik p we wzorze (9) jako $p = 1$. Test ten został wy-

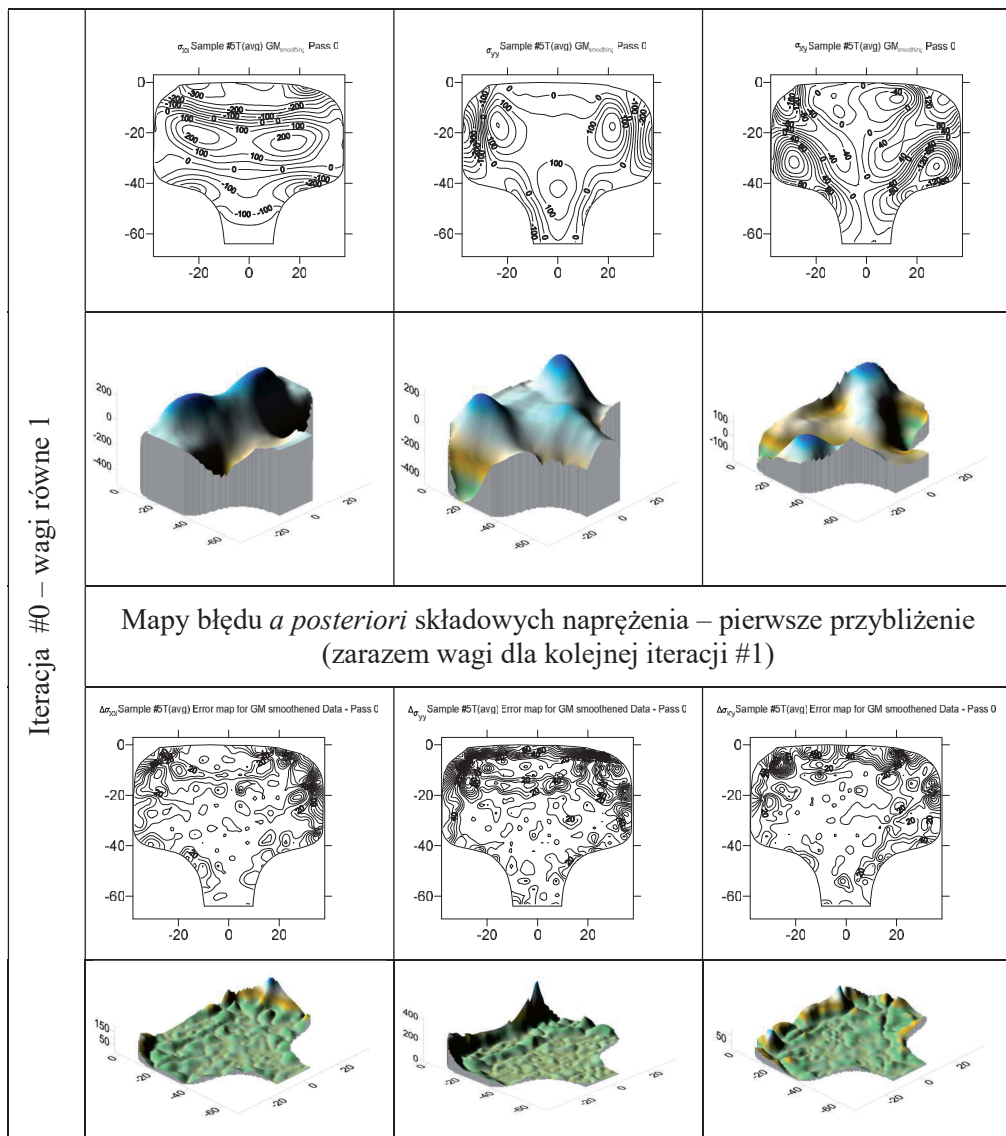
konany dla wszystkich serii pomiarowych T1, O2, O3 i T4 szyny, a także dla „wirtualnych” próbek uśrednionych T_{avg} i O_{avg} ¹. Wyniki tego testu zaprezentowane będą dla próbki T_{avg} , dla innych próbek osiągnięto wyniki prowadzące do takich samych wniosków.

Razem z iteracją zerową, czyli dla wag startowych przyjętych jak powyżej, w teście tym wykonano łącznie 5 kroków iteracyjnych. Wyniki zebrano w Tabelach nr 2–5.

Tabela 2. Wyniki testu #1 – Próbką #5 T_{avg} , Iteracja #0

	$\sigma_{xx}/\Delta\sigma_{xx}$	$\sigma_{yy}/\Delta\sigma_{yy}$	$\sigma_{xy}/\Delta\sigma_{xy}$
Pomiar eksperymentalny	<p>σ_{xx} Sample #5T(avg) Experimental</p>	<p>σ_{yy} Sample #5T(avg) Experimental</p>	<p>σ_{xy} Sample #5T(avg) Experimental</p>

¹ Uśrednianie ma sens w przypadku pomiarów nominalnie tych samych pól, z racji statystycznego charakteru części błędów pomiarowych ma szansę je zredukować i poprawić wyniki finalne.

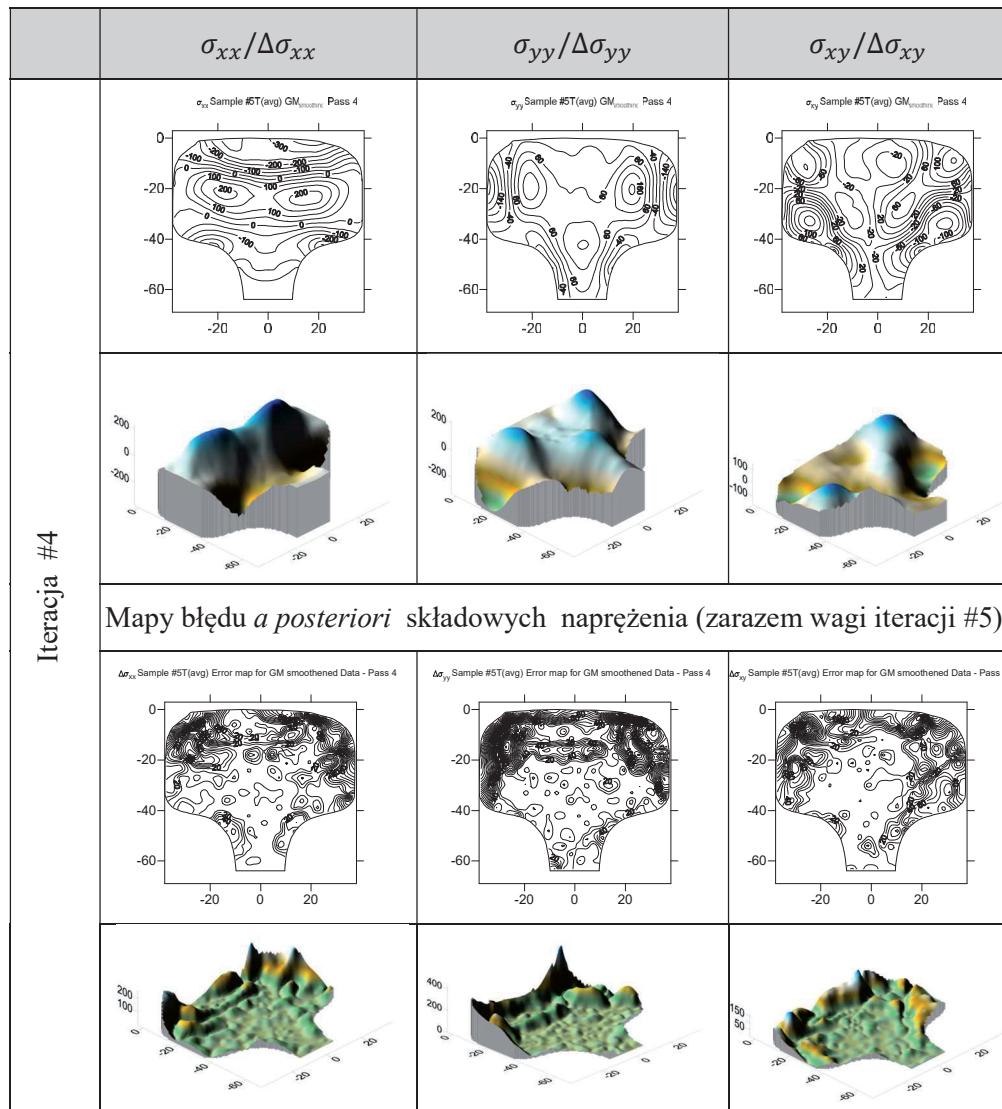


Ponieważ po drugim kroku zasadniczo rozwiązania w naprężeniach, jak i wagi się stabilizują, przedstawione wyniki pomijają rozwiązania dla kroków nr 2 i 3, jeśli chodzi o mapy naprężeń i mapy wag, natomiast w Tabeli nr 5 zebrano wyniki analizy zbieżności i normy błędów wag dla wszystkich kroków iteracyjnych. W Tabeli nr 2 zamieszczono także mapy surowych danych pomiarowych dla zobrazowania jakości danych pomiarowych i jako odniesienie dla wygładzonych rozwiązań pola

aproksymacyjnego σ . Mapy te służą także na każdym kroku do szacowania błędu *a posteriori* danych eksperymentalnych i budowy wag. Dla pełniejszego obrazu dla tej próbki zaprezentowano wszystkie składowe płaskie naprężenia.

Tabela 3. Wyniki testu #1 – Próbką #5 T_{avg} , Iteracja #1

	$\sigma_{xx}/\Delta\sigma_{xx}$	$\sigma_{yy}/\Delta\sigma_{yy}$	$\sigma_{xy}/\Delta\sigma_{xy}$
Iteracja #1			
	Mapy błędu <i>a posteriori</i> składowych naprężenia (zarazem wagi iteracji #2)		

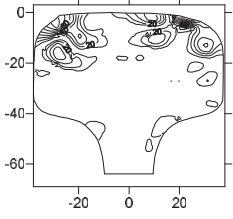
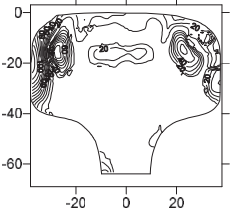
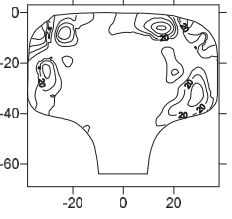
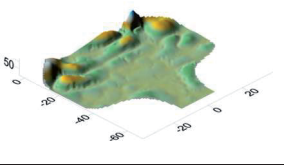
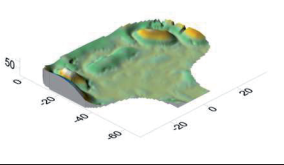
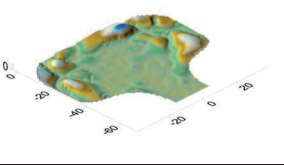
Tabela 4. Wyniki testu #1 – Próbką #5 T_{avg} , Iteracja #4 (ostatnia)

Analiza wyników z Tabel 2–4 pozwala konkludować, że zarówno same aproksymacje pola naprężenia, jak i rozkłady wag praktycznie nie różnią się między sobą wizualnie, poza przypadkiem wag otrzymanych po iteracji #0 (dla wag startowych przynajmniej *de facto* ten sam kredyt zaufania wszystkim punktom pomiarowym) i po kroku #1. Różnice widać szczególnie dla składowej σ_{xx}

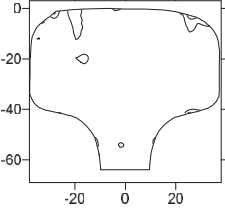
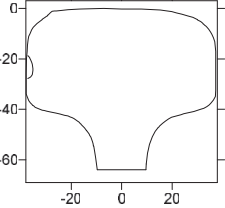
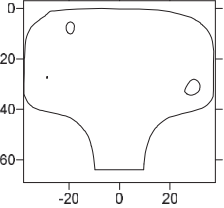
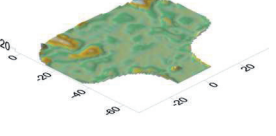
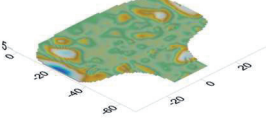
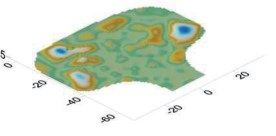
w skrajnych punktach powierzchni toczonej i w strefie kontaktu dwupunktowego (prawa pionowa część profilu szyny), gdzie materiał podlegał ekstremalnym obciążeniom, tarcia, zginięciu i plastycznemu płynięciu. Zauważenie różnic między mapami błędów w Tabelach 3 i 4 (po pierwszym i czwartym kroku iteracyjnym) jest już znacznie trudniejsze i dopiero analiza danych różnicowych i norm błędów liczonych ze wzorów nr (19) i (20) pozwalają te różnice zmierzyć i zobiektywizować – Tabela 5.

Analiza zbieżności wag (Tabela 5) prowadzi do wniosku, że zasadniczo z kroku na krok mamy do czynienia z procesem zbieżnym, choć zdarzają się niewielkie wahnięcia w normach błędów. Jest to widoczne np. dla kroku nr 3 dla składowej σ_{xx} , gdzie po osiągnięciu dla normy L_2 wartości 2,87 MPa w drugim kroku ($m=2$), wartość ta podnosi się do poziomu 3.37 MPa w kroku nr 3.

Tabela 5. Wyniki testu #1 – Próbkę #5 T_{avg} , zbieżność wag

	$m_{E_{xx}}^k =$ $ \Delta^m \sigma_{xx}^k - \Delta^{m-1} \sigma_{xx}^k $	$m_{E_{yy}}^k =$ $ \Delta^m \sigma_{yy}^k - \Delta^{m-1} \sigma_{yy}^k $	$m_{E_{xy}}^k =$ $ \Delta^m \sigma_{xy}^k - \Delta^{m-1} \sigma_{xy}^k $
$m = 1$			
			
	Normy błędów dla $m=1$		
	$(\bar{E}^1_{xx})^2 = \frac{1}{A} \int_A ({}^1E^k_{xx})^2 dA$ = 9.61 MPa	$(\bar{E}^1_{yy})^2 = \frac{1}{A} \int_A ({}^1E^k_{yy})^2 dA$ = 14.10 MPa	$(\bar{E}^1_{xy})^2 = \frac{1}{A} \int_A ({}^1E^k_{xy})^2 dA$ = 7.76 MPa
	$E_{xx}^1_{max} = \max_{ij,k} ({}^1E^k_{xx})$ = 121.98 MPa	$E_{yy}^1_{max} = \max_{ij,k} ({}^1E^k_{yy})$ = 1360.37 MPa	$E_{xy}^1_{max} = \max_{ij,k} ({}^1E^k_{xy})$ = 42.01 MPa

$m = 2$			
	<p>Normy błędów dla $m=2$</p>		
	$(\bar{E}^2_{xx})^2 = \frac{1}{A} \int_A ({}^2E_{xx}^k)^2 dA = 2.87 \text{ MPa}$ $E_{xx}^2_{max} = \max_{ij,k} ({}^2E_{xx}^k) = 18.24 \text{ MPa}$	$(\bar{E}^2_{yy})^2 = \frac{1}{A} \int_A ({}^2E_{yy}^k)^2 dA = 2.93 \text{ MPa}$ $E_{yy}^2_{max} = \max_{ij,k} ({}^2E_{yy}^k) = 23.99 \text{ MPa}$	$(\bar{E}^2_{xy})^2 = \frac{1}{A} \int_A ({}^2E_{xy}^k)^2 dA = 2.01 \text{ MPa}$ $E_{xy}^2_{max} = \max_{ij,k} ({}^2E_{xy}^k) = 11.04.16 \text{ MPa}$
$m = 3$			
	<p>Normy błędów dla $m=3$</p>		
	$(\bar{E}^3_{xx})^2 = \frac{1}{A} \int_A ({}^3E_{xx}^k)^2 dA = 3.37 \text{ MPa}$ $E_{xx}^3_{max} = \max_{ij,k} ({}^3E_{xx}^k) = 69.10 \text{ MPa}$	$(\bar{E}^3_{yy})^2 = \frac{1}{A} \int_A ({}^3E_{yy}^k)^2 dA = 2.08 \text{ MPa}$ $E_{yy}^3_{max} = \max_{ij,k} ({}^3E_{yy}^k) = 17.88 \text{ MPa}$	$(\bar{E}^3_{xy})^2 = \frac{1}{A} \int_A ({}^3E_{xy}^k)^2 dA = 1.55 \text{ MPa}$ $E_{xy}^3_{max} = \max_{ij,k} ({}^3E_{xy}^k) = 13.35 \text{ MPa}$

$m = 4$	$\Delta\sigma_{xx}$ Sample #51 (avn) GM _{GlobalFit} (W4-W3)	$\Delta\sigma_{yy}$ Sample #51 (avn) GM _{GlobalFit} (W4-W3)	$\Delta\sigma_{xy}$ Sample #51 (avn) GM _{GlobalFit} (W4-W3)
			
			
	Normy błędów dla $m=4$		
$(\bar{E}^4_{xx})^2 = \frac{1}{A} \int_A ({}^4E^k_{xx})^2 dA = 5.09 \text{ MPa}$ $E^4_{xx \max} = \max_{i,j,k} ({}^4E^k_{xx}) = 51.40 \text{ MPa}$	$(\bar{E}^4_{yy})^2 = \frac{1}{A} \int_A ({}^4E^k_{yy})^2 dA = 3.27 \text{ MPa}$ $E^4_{yy \max} = \max_{i,j,k} ({}^4E^k_{yy}) = 19.58 \text{ MPa}$	$(\bar{E}^4_{xy})^2 = \frac{1}{A} \int_A ({}^4E^k_{xy})^2 dA = 3.31 \text{ MPa}$ $E^4_{xy \max} = \max_{i,j,k} ({}^4E^k_{xy}) = 17.55 \text{ MPa}$	

Jeszcze bardziej jest to widoczne dla normy maksymowej, gdzie wartość $E^2_{xx \max} = 18.24 \text{ MPa}$ w kroku $m=3$ zwiększa się do $E^3_{xx \max} = 69.10 \text{ MPa}$ w kroku trzecim. Jednak wynik ten nie jest powielany dla składowej σ_{yy} , co może oznaczać, że ze względu na sprzężenie w metodzie globalnej wszystkich składowych naprężeń w jednym funkcjale hybrydowym, następują częściowe redystrybucje składowych pola naprężenia w punktach o szczególnie dużym błędzie pomiarowym. Jeżeli porównamy mapy różnicowe 3D wag dla składowej σ_{xx} w Tabeli 5 dla $m=2$ i $m=3$, to w drugim kroku rozkład lokalnych różnic wag w obszarze główki wykazuje jeszcze sporo fluktuacji, podczas gdy w trzecim kroku rozkład ten jest praktycznie całkowicie płaski, choć lokalnie – w lewej skrajnej części powierzchni toczonej – rozkład ten nie jest płaski, co właśnie wykrywa norma maksymowa. Nie jest to jednak dowód na brak zbieżności metody, ponieważ kolejny krok ($m=4$) znowu prowadzi do zmniejszania wartości norm błędów z kroku $m=3$. Jak się wydaje, estymacja *a posteriori* danych eksperymentalnych metodą globalną ma swoje odrębne cechy i skok normy różnicy wag nie musi oznaczać utraty zbieżności – raczej pewne wewnętrzne przewartościowanie stopnia zaufania do pomiarów i korektę wcześniejszych oszacowań.

4.2.2. Test #2

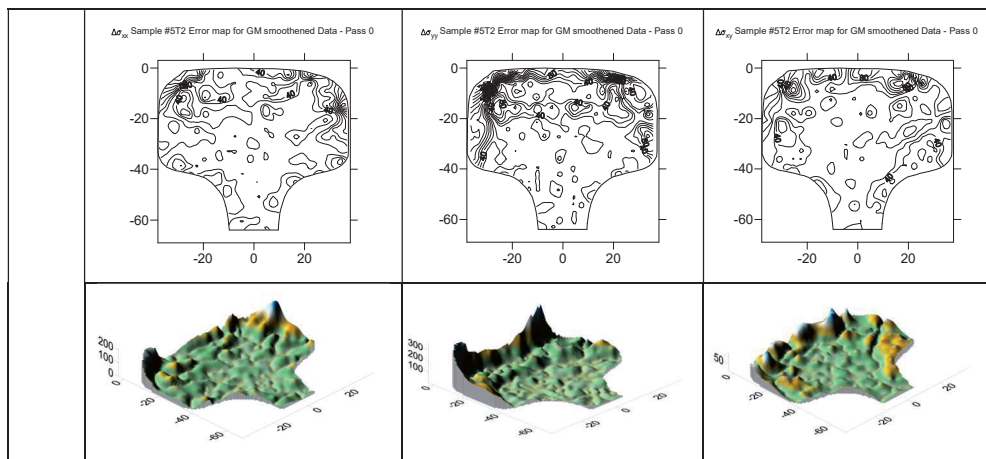
W teście #2 przyjęto wagi startowe takie same jak w teście #1, natomiast wykładnik p został przyjęty jako równy 2. Celem testu było zbadanie, jak podniesienie wag do potęgi wyższej niż 1 wpłynie na tempo zbieżności. Teoretycznie punkty pomiarowe o dobrej jakości mają wagi o niewielkich wartościach (w niektórych punktach zmierzają nawet do zera), natomiast wagi dla punktów o dużych błędach mają wartości rzędu nawet setek MPa. Podniesienie tych wartości do potęgi większej od 1 powinno prowadzić w takim razie do zwiększenia udziału w funkcjonale eksperymentalnym (9) pomiarów o oszacowanej dobrej jakości (zwłaszcza tych, dla których wagi będą mniejsze od 1) i dodatkowego osłabienia punktów z pomiarami o niskiej jakości (np. błąd w punkcie rzędu 100 MPa będzie generował wagę rzędu 1/10 000, czyniąc praktycznie dany punkt pomiarowy zaniedbywalnym). W testach dla próbki T4 szyny #5 wykonano 3 kroki iteracyjne. W Tabelach 6–8 zebrano wyniki dla wszystkich składowych płaskiego stanu naprężenia: σ_{xx} , σ_{yy} oraz σ_{xy} , a w Tabeli 9 mapy wag i rozkłady różnic wag – co do bezwzględnej wartości – wyliczanych wg (21). Te ostatnie mapy obrazują zbieżność lokalną wag.

Jak można zaobserwować na rysunkach zamieszczonych w Tabelach 6–8, proces iteracyjny dla pola naprężenia także i w tym przypadku jest zbieżny, zasadniczo rozwiązania po drugim kroku iteracyjnym nie są znacząco różne od tych otrzymanych po kroku pierwszym. Mapy błędów dla poszczególnych składowych także się stabilizują po drugim kroku, zasadnicza poprawa oszacowania błędu następuje pomiędzy pierwszym a drugim krokiem iteracyjnym. Na rysunkach w Tabeli nr 9 pokazano rozkłady różnic bezwzględnych wartości kolejnych serii wag ${}^m E_{ij}^k$, obliczonych na m -tym kroku wg wzoru (21) oraz wartości norm błędu obliczonych wg wzorów (19) i (20).

Interesującą obserwacją z analizy błędu *a posteriori* uzyskanych metodą globalną (rysunki map błędu w Tabelach 6–8) jest uderzająca zgodność lokalizacji obliczanych błędów z obszarami szyny, w których błędów tych można by się spodziewać na zasadzie racjonalnego rozumowania: są to powierzchnia toczna, w pobliżu której największe błędy są wyliczane dla wszystkich składowych naprężenia, strefa materiału startego obręczą koła (prawy górny róg szyny) oraz charakterystyczny niewielki szpic utworzony na peryferiach powierzchni tocznej po lewej jej stronie, który powstał w wyniku plastycznego płynięcia materiału szyny w warunkach ekstremalnego obciążenia.

Tabela 6. Wyniki testu #2 – Próbkę #5 T4, Iteracja #0

	$\sigma_{xx}/\Delta\sigma_{xx}$	$\sigma_{yy}/\Delta\sigma_{yy}$	$\sigma_{xy}/\Delta\sigma_{xy}$
Pomiar eksperymentalny	<p>σ_{xx} Sample #5T2 Experimental</p>	<p>σ_{yy} Sample #5T2 Experimental</p>	<p>σ_{xy} Sample #5T2 Experimental</p>
Iteracja #0 – wagi równe 1	<p>σ_{xx} Sample #5T2 GM_weighting Pass 0</p>	<p>σ_{yy} Sample #5T2 GM_weighting Pass 0</p>	<p>σ_{xy} Sample #5T2 GM_weighting Pass 0</p>
<p>Mapy błędów <i>a posteriori</i> (zarazem wagi – po podniesieniu do kwadratu – dla iteracji #1)</p>			



Są to miejsca, gdzie materiał ewidentnie był poddany ekstremalnym deformacjom plastycznym, być może dochodziło nawet do przemian fazowych (hartowanie plus ogromne ciśnienia od wysokiego tonażu skupione na niewielkiej powierzchni główki). Kształt zdeformowanej główki szyny dowodzi, że miało miejsce spore zużycie materiału, ponadto nukleacja szczelin i mikropęknięć, blokada dyslokacji czy segregacja zanieczyszczeń na granicach ziaren. Wszystkie te zjawiska powodują, że struktura krystaliczna materiału jest mocno zaburzona i daleko jej do struktury materiału rodzimego, dla której parametr d_0 (wzór (17)) byłyby stałe, jak to przyjmowano w czasie eksperymentów neutronograficznych [2]. W związku z tym można przyjąć za fakt, że konsekwencją tego jest błędne wyznaczenie odkształceń, a błędy te dziedziczy wyznaczone z nich pole naprężeń – i właśnie te obszary widzimy w mapach różnicowych oszacowań błędów *a posteriori*. Interesującą obserwacją jest także stwierdzenie faktu, że mapy te uwidaczniają inne jeszcze miejsca koncentracji błędów. Przykładowo dla składowej σ_{yy} obszarem znacznego błędu są prawa i lewa pionowa (lub bliska) skrajnia profilu główki, gdzie raczej trudno się spodziewać jakichś efektów mechanicznych w szynie, a także i sama powierzchnia toczna. Powodem tego stanu rzeczy jest prawdopodobnie fakt natryskowego hartowania szyn i możliwych zmian właściwości materiału w warstwach podpowierzchniowych, a także kierunek naświetlania próbki strumieniem neutronów, który dla tej składowej generuje szczególnie dużo przypadków częściowego oświetlenia (ang. *partial illumination*) materiału przy brzegach główki szyny, powodujących pojawienie się wzmożonych amplitud błędu.

Tabela 7. Wyniki testu #2 – Próbkę #5 T4, Iteracja #1

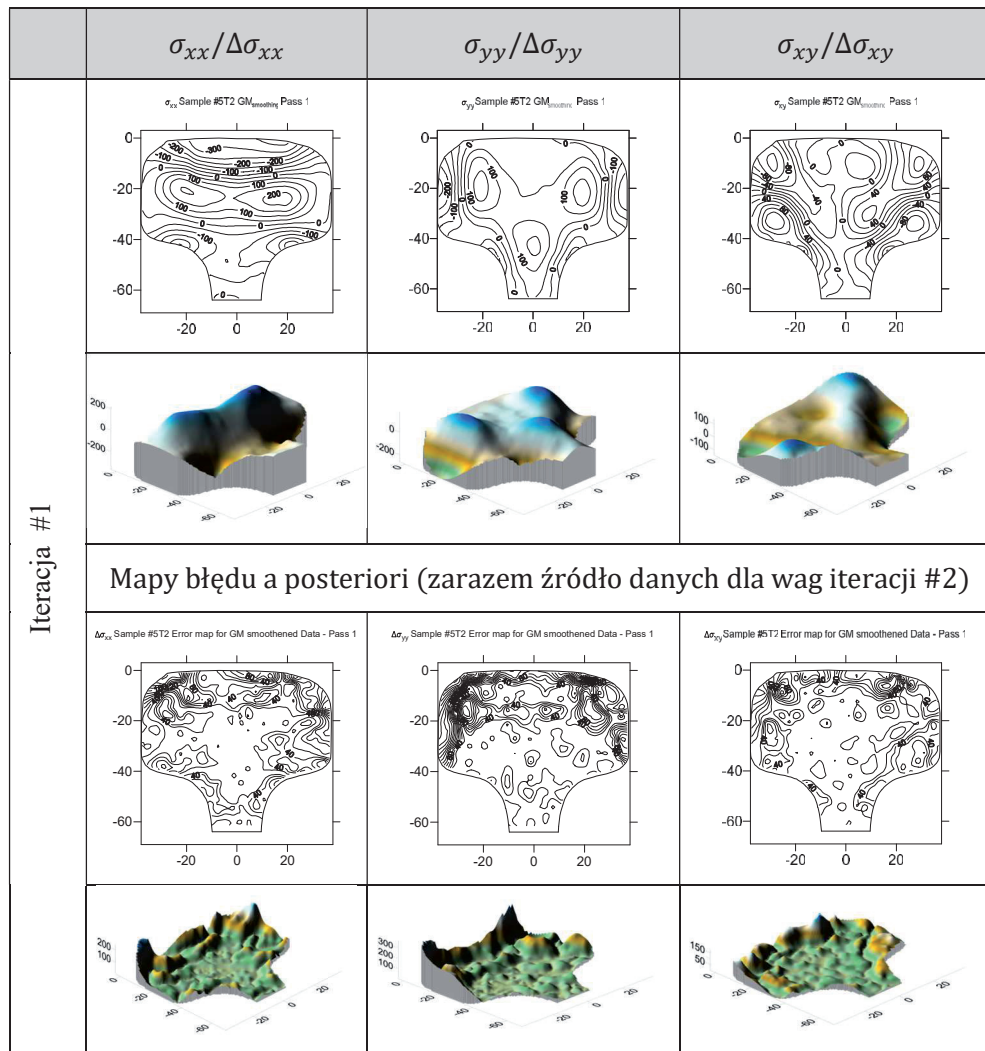
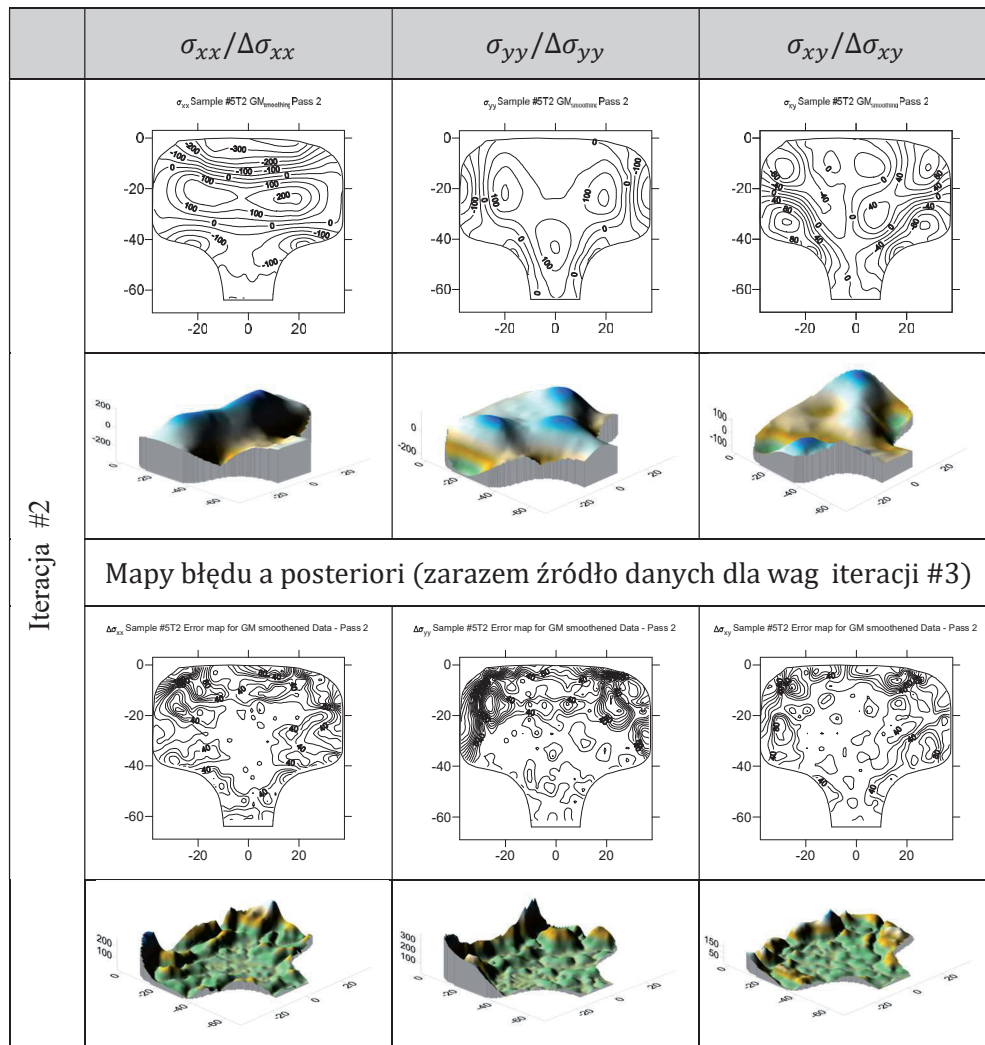
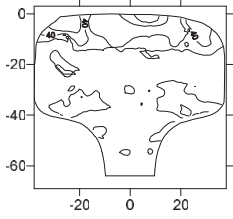
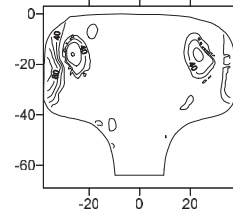
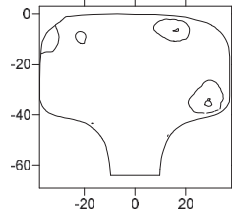
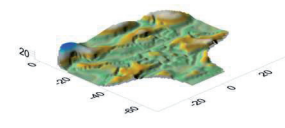
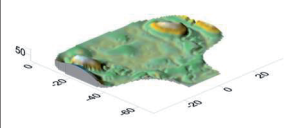
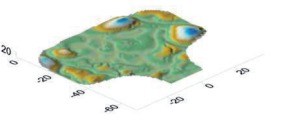
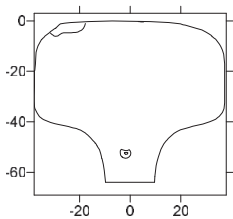
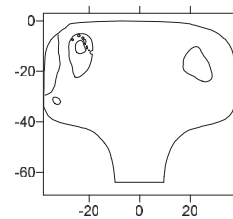
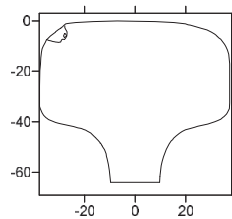
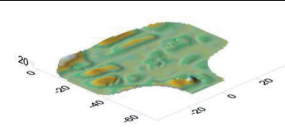
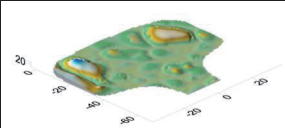
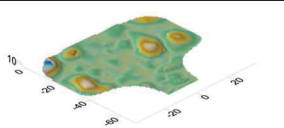


Tabela 8. Wyniki testu #2 – Próbką #5 T4, Iteracja #2



W Tabeli 9 przedstawiono wyniki analizy zbieżności wag dla testu #2. Zbieżność jest badana wg założenia, że jeżeli oszacowania błędu (16) wyliczane w lokalnych punktach pomiarowych $k=1, \dots, K$ z iteracji na iterację stabilizują się wokół pewnej nieznannej wartości dokładnego błędu, to metoda jest zbieżna, a uzyskane oszacowanie błędu *a posteriori* wiarygodne. Z racji przyjęcia w funkcjonale hybrydowym (9) definicji wag powiązanej z tak zdefiniowanym estymatorem błędu, zbieżność metody jest tożsama ze zbieżnością wag.

Tabela 9. Wyniki testu #2 - Próbkę #5 T4, zbieżność wag

	$m E_{xx}^k =$ $ \Delta^m \sigma_{xx}^k - \Delta^{m-1} \sigma_{xx}^k $	$m E_{yy}^k =$ $ \Delta^m \sigma_{yy}^k - \Delta^{m-1} \sigma_{yy}^k $	$m E_{xy}^k =$ $ \Delta^m \sigma_{xy}^k - \Delta^{m-1} \sigma_{xy}^k $	
$m = 1$	$\Delta \sigma_{xx}$ Sample #5T2 GM _{smooth} (W1-W0) 	$\Delta \sigma_{yy}$ Sample #5T2 GM _{smooth} (W1-W0) 	$\Delta \sigma_{xy}$ Sample #5T2 GM _{smooth} (W1-W0) 	
				
	Normy błędów dla $m=1$			
	$(\bar{E}^1_{xx})^2 = \frac{1}{A} \int_A ({}^1E^k_{xx})^2 dA$ $= 16.38 \text{ MPa}$ $E_{xx}^1 \max = \max_{ij,k} ({}^1E^k_{xx}) = 78.14 \text{ MPa}$	$(\bar{E}^1_{yy})^2 = \frac{1}{A} \int_A ({}^1E^k_{yy})^2 dA$ $= 13.33 \text{ MPa}$ $E_{yy}^1 \max = \max_{ij,k} ({}^1E^k_{yy}) = 110.98 \text{ MPa}$	$(\bar{E}^1_{xy})^2 = \frac{1}{A} \int_A ({}^1E^k_{xy})^2 dA$ $= 7.76 \text{ MPa}$ $E_{xy}^1 \max = \max_{ij,k} ({}^1E^k_{xy}) = 42.01 \text{ MPa}$	
$m = 2$	$\Delta \sigma_{xx}$ Sample #5T2 GM _{smooth} (W2-W1) 	$\Delta \sigma_{yy}$ Sample #5T2 GM _{smooth} (W2-W1) 	$\Delta \sigma_{xy}$ Sample #5T2 GM _{smooth} (W2-W1) 	
				

Normy błędu dla $m=2$		
$(E^2_{xx})^2 = \frac{1}{A} \int_A ({}^1E^k_{xx})^2 dA = 4.77 \text{ MPa}$ $E^2_{xx \max} = \max_{i,j,k} ({}^2E^k_{xx}) = 48.82 \text{ MPa}$	$(E^2_{yy})^2 = \frac{1}{A} \int_A ({}^1E^k_{yy})^2 dA = 6.67 \text{ MPa}$ $E^2_{xx \max} = \max_{i,j,k} ({}^2E^k_{xx}) = 47.95 \text{ MPa}$	$(E^2_{xy})^2 = \frac{1}{A} \int_A ({}^1E^k_{xy})^2 dA = 3.79 \text{ MPa}$ $E^2_{xy \max} = \max_{i,j,k} ({}^2E^k_{xy}) = 31.07 \text{ MPa}$

Analiza danych w Tabeli 9 – wizualna, w postaci map z kroku $m=1$ i $m=2$ (drugi i trzeci krok iteracyjny) – oraz norm błędu dla $m=1$ i $m=2$ pozwala konkludować, że osiągnięto bardzo dobrą zbieżność dla iteracyjnego szacowania błędu *a posteriori* danych doświadczalnych w przypadku wag zdefiniowanych wg wzoru (9) dla $p=2$. W trzech krokach iteracyjnych osiągnięto dokładność w sensie normy L_2 na poziomie kilku MPa (od 3.79 do 6.67 MPa), a w sensie wartości maksymalnych na poziomie ok. 50 MPa. Wobec początkowych oszacowań błędu pomiarowego na poziomie nawet 300 MPa (we wrażliwych punktach pod powierzchnią toczną) oraz praktycznie niezauważalną różnicą w wartościach samych składowych naprężenia, z inżynierskiego punktu wartości te są, jak się wydaje, akceptowalne.

4.2.3. Testy #3-7

Dyskusja wyników pozostałych testów przeprowadzonych dla numerycznego wykazania zbieżności iteracyjnej, fizycznie uzasadnionej metody analizy błędów *a posteriori* danych eksperymentalnych znacząco przekracza ramy niniejszej pracy, zwłaszcza że w przypadku czteropróbkowej metody ukośnych przekrojów analizie poddano w sumie 6 zbiorów danych, cztery dla pomiarów na próbkach T1, O2, O3 i T4 oraz dwóch wirtualnych próbek uzyskanych dla danych uśrednionych T_{avg} i O_{avg} . Zasadniczo wszystkie one prowadziły do podobnych wyników, jak przytoczone powyżej wnioski dla dwóch najbardziej naturalnych wersji metody, oznaczonej w niniejszej pracy jako test #1 i test #2. Jak się wydaje, czy to z podejściem $p=1$, czy $p=2$, metoda może być z powodzeniem stosowana w praktyce i nie wymaga zbyt wielu kroków iteracyjnych. W obu opisanych testach zasadniczą jakość oszacowań uzyskuje się już w trzecim kroku iteracyjnym, co nie jest wygórowanym obliczeniowo kosztem. Wykonane w testach #3–#7 obliczenia pozwalają także konkludować, że metoda jest zbieżna i w zasadzie nieczuła na wybór wag w pierwszym kroku iteracji. Niezależnie, czy było to naturalne przyjęcie wag jednorodnych jak w testach #1, #2 i #3², czy arbitralnie zróżnicowanych jak w testach

² Nieopisywany przypadek, podejście mieszane z testu #1 i #2 – waga w pierwszym kroku iteracyjnym jest przyjmowana z wykładnikiem $p=1$, co się wydaje bezpieczniejsze,

#4 i #5, czy przyjętych losowo (i to ze znacznymi amplitudami zaburzenia losowego) – otrzymywano konsystentne i porównywalne wyniki końcowe zarówno dla pól aproksymacyjnych naprężenia, jak i map oszacowań błędów *a posteriori*. Warto podkreślić, że zbieżność wykazano także w teście #5, w którym wagi początkowe przydzielono arbitralnie i to wbrew logice, przypisując wysoki kredyt zaufania punktom mapowanym w poprzednich testach jako punkty o szczególnie wysokich błędach (powierzchnia toczna, pionowe części profilu szyny), a niski punktom z wnętrza główki, gdzie pomiary zdają się być najbardziej wiarygodne, oraz w teście #7, gdzie wagi startowe losowano z amplitudą aż 150 MPa. Obydwa te przypadki dały wyniki zbieżne i to w podobnej liczbie iteracji (zbieżność uzyskano w 4–5 krokach).

Z praktycznego punktu widzenia wnioskiem badań jest konkluzja, że aby osiągnąć dobre oszacowania błędu *a posteriori* danych doświadczalnych nie jest potrzebna duża ilość iteracji. Zważywszy na uzyskane dla danych neutronograficznych wyniki, które pokazują, że błąd jest skoncentrowany głównie w obszarach peryferyjnych profilu szyny, gdzie materiał był poddany dużym deformacjom w zakresie plastycznym, a jego amplituda sięga nawet 300 MPa i więcej, iterowanie rozwiązań w 2–3 krokach iteracyjnych daje oszacowania zbieżne z wartościami oszacowań błędów różnych od kilku do kilkunastu MPa. Z praktycznego punktu widzenia jest to absolutnie satysfakcjonujące.

5. Podsumowanie

W pracy podjęto problem wykazania zbieżności iteracyjnych oszacowań błędu *a posteriori* danych eksperymentalnych prowadzonych z wykorzystaniem sformułowania globalnego aproksymacji fizycznie uzasadnionej. Posiłkując się realnymi danymi pomiarowymi dla szyn kolejowych, które przebadano metodą neutronograficzną, w wyniku licznych testów i analiz pokazano, że metoda ta może posłużyć do obróbki danych i dostarczyć pól aproksymacyjnych o wysokiej jakości, gładkich, różniczkowalnych, całkowalnych i spełniających z definicji wszystkie wbudowane równania fizyki. Dzięki metodzie aproksymacji zapewniającej zgodność rekonstruowanych pól z równaniami fizyki możliwe było nie tylko zbudowanie map błędów lokalnych, związanych z szumem losowym, który jest relatywnie łatwo odsiać z danych zwykłymi metodami wygładzania, np. opartych na klasycznej metodzie MWLS [8], funkcjach typu wygładzających funkcji sklepanych [9] czy zakorzenionych w statystyce, jak metody wykorzystujące różne sformułowania regresji [9] i wiele innych. Jednak jak to pokazały liczne przykłady zawarte w ni-

a potem – po w miarę dobrym oszacowaniu błędu *a posteriori* z wykładnikiem $p=2$, dla ogólnego przyspieszenia iteracji

niejszej pracy, dzięki metodzie aproksymacji fizycznie uzasadnionej możliwe jest zlokalizowanie błędów o dużo trudniejszym do znalezienia charakterze, jak błędy systematyczne czy błędy modelu. Fizycznie uzasadniona obróbka pól pomiarowych i oparta na niej analiza błędu pozwoliły bez trudu odfiltrować błąd losowy, jednak uzyskane wyniki są dużo ciekawsze i prowadzą do wniosku, że w przypadku danych neutronograficznych błęd o znacznej amplitudzie – nawet rzędu 300 MPa i więcej – jest zlokalizowany w obszarach, gdzie materiał podlegał ekstremalnym deformacjom zmieniającym wewnętrzną strukturę materiału. Wynik ten może być niezwykle ważny dla metody neutronograficznej, daje bowiem realną szansę na zbudowanie korelacji między mapami błędu wyników pomiarowych uzyskiwanych z metody globalnej a przyjmowanymi wartościami parametru d_0 w poszczególnych obszarach badanych ciał. Jeśli dzięki zastosowaniu metody aproksymacji fizycznie uzasadnionej udało się wyznaczyć poprawne korekty wartości stałej d_0 i przeliczyć pomiary składowych tensora odkształcenia w całym badanym ciele, to jest możliwe, że dałoby się w ten sposób osiągnąć nową jakość i wewnętrzną spójność wyników badań neutronograficznych. Możliwe też jest pokuszenie się o numeryczną symulację wyznaczenia metodą odwrotną poprawnej wartości stałej d_0 , co prawdopodobnie pozwoliłoby przeliczyć lokalnie pomierzone odkształcenia ϵ^{hkl} i uzyskać poprawę jakości surowych danych neutronograficznych.

Literatura

- [1] Zienkiewicz O.C., Zhu J.Z., *The superconvergent patch recovery (SPR) and adaptive finite element refinement*, CMAME, Vol. 101, 1992, 207-224.
- [2] Luzin V., Gordon J.E., Gnaupel-Herold T., Prask H.J., *Neutron Residual Stress Measurements on Rail Sections for Different Production Conditions*, IMECE2004-61754, 2004, 117-122.
- [3] Magiera J., *Experimental-numerical study of manufacture induced 3D rail residual stress*, 26th Symposium on Experimental Mechanics of Solids, Solid State Phenomena, Vol. 240, 2016, 17-24.
- [4] Magiera J., Karmowski W., Orkisz J., *Reconstruction of residual stresses in railroad rails from measurements made on vertical and oblique slices*, Wear, Vol. 191, 1996, 78-89.
- [5] Magiera J., *Enhanced 3D Analysis of Residual Stress in Rails by Physically Based Fit to Neutron Diffraction Data*, Wear, Vol. 253, 2002, 228-240.
- [6] Karmowski W., *Wspomagana teorią interpretacja wyników eksperymentów mechaniki ciał odkształcalnych*, rozprawa habilitacyjna, Seria Podstawowe Nauki Techniczne, Monografia 251, PK, 1999.

- [7] Magiera J., *An Experimental Study of the Development of Three-Dimensional Rail Residual Stress at Various Manufacturing Stages*, [w:] *The Third International Conference on Railway Technology: Research, Development and Maintenance*, J. Pombo, (Editor), Civil-Comp Press, Stirlingshire, United Kingdom, paper 173, 2016.
- [8] Lancaster P, Salkauskas K, *Curve and surface fitting*, Academic Press Inc., 1990.
- [9] Eubank R.L., *Nonparametric Regression and Spline Smoothing*, Seria: Statistics, CRC Press; 2nd ed., 1999.