

Računalniško podprta karakterizacija termo-reoloških lastnosti snovi

Computer Aided Thermo-Rheological Characterization

P. Koc¹, Fakulteta za matematiko in fiziko, Univerza v Ljubljani

B. Štok, Laboratorij za numerično modeliranje in simulacijo v mehaniki, Fakulteta za strojništvo, Univerza v Ljubljani

Prejem rokopisa - received: 1996-10-04; sprejem za objavo - accepted for publication: 1997-01-17

Uspešno reševanje tehničnih problemov z numerično analizo in računalniško simulacijo zahteva med drugim tudi dobro poznavanje lastnosti snovi, ki obravnavani problem karakterizirajo. V prispevku obravnavamo računalniško podprto identifikacijo temperaturne odvisnosti reoloških snovnih lastnosti, zasnovano na metodologiji reševanja inverznih problemov.

Ključne besede: matematično modeliranje, inverzni problem, snovna identifikacija

Successful treating of technical problems by means of numerical analysis and computer simulation is conditioned by a good knowledge of the material properties that characterize the considered problem. The computer aided identification of the temperature dependent rheological material properties, which is based on the inverse problem solution methodology, is presented in the paper.

Key words: mathematical modelling, inverse problem, material characterization

1 Uvod

Z intenzivnim razvojem novih, čedalje kompleksnejših materialov je vprašanje učinkovite karakterizacije materialov postalo še aktualnejše, saj je njihova uporaba ter vgradnja v tehnične sestave v veliki meri pogojevana prav s stopnjo poznavanja snovnih lastnosti. Predvsem v procesni tehniki je čedalje več naprav, ki obratujejo v zelo širokem delovnem območju. Delovanje takšnih sistemov, pri katerih so gradiva vgrajenih elementov ob statičnih obremenitvah navadno izpostavljena še velikim temperaturnim spremembam ter morebitnim kemičnim reakcijam, je mogoče zanesljivo načrtovati le ob primeren poznavanju odvisnosti, ki jih snovne lastnosti na celotnem delovnem območju izkazujejo.

Ugotavljanje snovnih lastnosti temelji predvsem na obdelavi eksperimentalno pridobljenih odzivov, t.j. na vrednotenju za analizirano snovno lastnost relevantnih podatkov, izmerjenih z eksperimentom. Za enolično identifikacijo raziskovane fizikalne lastnosti mora biti eksperiment ustrezno načrtovan ter izveden. Temu ustrezno so za značilne preizkuse preizkušanci ter potek eksperimenta povsem opredeljeni s standardi. Kompleksnost odvisnosti, ki naj bi jo z eksperimentom identificirali, pogojuje zahtevnost in število potrebnih eksperimentov, s tem pa tudi ceno izvedbe eksperimenta. Da bi enolično identificirali določeno odvisnost snovi, temelji večina tako predpisanih eksperimentov na zagotavljanju konstantnosti vplivnih veličin med izvajanjem eksperimenta. Pri karakterizaciji kompleksnejših odvisnosti snovnih lastnosti pa takšen način zahteva izvedbo množice preizkusov v različnih razmerah.

Za popolnejšo in hitrejšo karakterizacijo snovi, ki naj bi istočasno sprostila v predhodnem odstavku opisane omejitve pri izvedbi eksperimenta, je potrebno razviti ustrezno metodologijo. Zaželeno bi bilo, da bi le-ta praviloma ne omogočala le učinkovitejše matematične obdelave podatkov, marveč tudi bistveno posplošitev samega eksperimenta z možnostjo verodostojne identifikacije širšega spektra snovnih lastnosti pri manjšem številu različnih eksperimentov.

V prispevku je obravnavana računalniško podprta identifikacija temperaturne odvisnosti reoloških snovnih lastnosti, ki temelji na računalniški simulaciji laboratorijskega eksperimenta ter rešitvi inverznega robnega problema.

2 Formulacija problema

Pri obravnavanju termomehanskih problemov je poznavanje temperaturne odvisnosti snovnih lastnosti odločujoče za verodostojnost kakršnekoli analize. V nadaljevanju se omejimo na identifikacijo nekaterih snovnih lastnosti, ki vplivajo na napetostno-deformacijsko stanje v elastoplastičnih snoveh. Pri tem privzamemo, da je telo (realni strojni del v obratovanju ali preizkušanelec v eksperimentu) iz snovi, ki jo želimo karakterizirati. Telo je izpostavljeno časovno spremenljivemu delovanju zunanjih učinkov, tako toplotnih kot tudi mehanskih. Končno privzemimo še, da je fenomenološko vedenje v telesu, ki sledi kot odziv na definirane zunanje učinke, mogoče ustrezno popisati z matematičnim modelom.

2.1 Matematični model termomehanskega problema

V okviru veljavnega matematičnega modela, kjer z x označimo prostorsko koordinato poljubne točke obravna-

¹ Mag. Pino KOC, dipl. ing.
Fakulteta za matematiko in fiziko, Oddelek za matematiko in mehaniko
Lepi pot 11, 1000 Ljubljana, Slovenija

vanega telesa ($x \in \Omega \subset \Omega_\infty$) in s t časovno koordinato ($t \geq 0$), temelji izračun deformacijsko-napetostnega polja v telesu na časovno spreminjajočem se temperaturnem polju $T(x,t)$, ki ga določimo s predhodno toplotno analizo. Zaradi temperaturne odvisnosti snovnih lastnosti je problem nelinearen ter odvisen od zgodovine obremenjevanja. Deformacijsko-napetostno polje, ki ga opredeljujejo napetostni tenzor $\sigma_{ij}(x,t)$, tenzor deformacij $\epsilon_{ij}(x,t)$ ter vektor pomikov $u_i(x,t)$, je dano z rešitvijo sistema enačb

$$\sigma_{jij} + f_i = 0 \quad (1)$$

$$d\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} (du_{i,j} + du_{j,i}), \quad x \in \Omega \quad (2)$$

$$d\sigma_{ij} = H_{ijkl} d\epsilon_{kl} - \frac{E\alpha}{1-2\nu} dT \delta_{ij} \quad (3)$$

ob upoštevanju zunanjih učinkov. Enačba (1) predstavlja ravnotežne razmere, enačba (2) zvezo med deformacijami in pomiki in enačba (3) reološko zvezo med napetostmi in deformacijami. Pri tem je f_i vektor volumskih sil, H_{ijkl} tenzor snovnih lastnosti, E modul elastičnosti, α temperaturni koeficient razteznosti, ν Poissonovo število in δ_{ij} Kroneckerjev tenzor.

Toplotni učinki rezultirajo v časovno odvisno temperaturno polje $T(x,t)$, ki je zaradi predpostavke o predhodno izvedeni toplotni analizi definirano po celotnem telesu. Skladno s tem je temperaturna sprememba dT v časovnem intervalu $[t, t+dt]$:

$$dT = T(x, t+dt) - T(x, t) = \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} dt \quad (4)$$

Od mehanskih učinkov je potrebno po celotnem telesu upoštevati časovno spreminjanje volumskih sil $f_i(x,t)$, na površini Γ le-tega pa še definirano obtežbo $p_i^*(x,t)$ ali predpisane pomike $u_i^*(x,t)$. Skladno s tem mora rešitev sistema enačb (1-3) na delu površine Γ_σ izpolnjevati robni pogoj:

$$\sigma_{ji} n_j = p_i^*(x,t), \quad x \in \Gamma_\sigma \quad (5)$$

na delu površine Γ_u ($\Gamma_u = \Gamma - \Gamma_\sigma$) pa robni pogoj:

$$u_i = u_i^*(x,t), \quad x \in \Gamma_u \quad (6)$$

2.2 Identifikacija temperaturne odvisnosti mehanskih lastnosti trdnih snovi

Tenzor snovnih lastnosti H_{ijkl} , ki med drugim vključuje tudi odvisnost od modula elastičnosti E ter Poissonovega števila ν , se glede na zgodovino obremenjevanja spreminja, pri čemer so koeficienti tenzorja H_{ijkl} ter temperaturni koeficient razteznosti α še temperaturno odvisni. V primeru mehansko izotropne snovi se število neodvisnih koeficientov, ki popisujejo tenzor H_{ijkl} , zmanjša. Za elastoplastičen material so to: Poissonovo število $\nu = \nu(T)$, modul elastičnosti $E = E(T)$, meja plastičnosti $R_p = \sigma_v = \sigma_v(T)$ in tangenti modul $E_T = d\sigma/de$

$= E_T(\epsilon, T)$. Tangenti modul izračunamo iz krivulj tečenja ($\sigma-\epsilon$ krivulje), ki so temperaturno odvisne.

Ob poznanih temperaturnih odvisnostih posameznih snovnih lastnosti, ki opredeljujejo reološko zvezo (3), je mehanski odziv telesa na predpisane termomehanske obremenitve povsem determiniran in s tem enolično določljiv iz enačb (1-6). Vsaj načeloma pa bi lahko, ob predpostavljenem poznavanju mehanskega odziva na dano termomehansko obremenitev, dani matematični model uporabili za snovno karakterizacijo, konkretno v našem primeru za identifikacijo temperaturne odvisnosti reoloških snovnih lastnosti.

Z namenom računske identifikacije temperaturne odvisnosti snovne lastnosti $F = F(T)$ smemo zanj privzeti načeloma poljubno matematično odvisnost, katere stopnja ujemanja z dejansko odvisnostjo pa bo odvisna od števila prostih parametrov v privzetem funkcijskem zakonu. V konkretnem primeru privzamemo odsekoma linearno funkcijsko odvisnost snovnih lastnosti $F(T)$. Temperaturni interval opazovanja $[T_s, T_f]$ zato razdelimo na n , v splošnem različno velikih, podintervalov:

$$[T_s, T_f] = [T_0, T_1] \cup [T_1, T_2] \cup \dots \cup [T_{n-1}, T_n],$$

$$T_s \equiv T_0, T_f \equiv T_n \quad (7)$$

V skladu s privzeto funkcijsko odvisnostjo se funkcija $F(T)$ pri temperaturi $T \in [T_{i-1}, T_i]$ izraža z enačbo:

$$F(T) = F^{i-1} + \frac{F^i - F^{i-1}}{T_i - T_{i-1}} (T - T_{i-1}), \quad 1 \leq i \leq n, \quad (8)$$

pri čemer sta koeficienta F^{i-1} in F^i funkcijski vrednosti funkcije $F(T)$ na mejah i -tega podintervala.

Ob upoštevanju enačb (7) in (8) je temperaturno odvisni modul elastičnosti $E(T)$ popisan s funkcijskimi koeficienti E^0, E^1, \dots, E^k , Poissonov količnik $\nu(T)$ s koeficienti $\nu^0, \nu^1, \dots, \nu^m$, meja plastičnosti $\sigma_v(T)$ in krivulje tečenja $\sigma(\epsilon, T)$ s koeficienti $\sigma^0, \sigma^1, \dots, \sigma^r$ ter temperaturna razteznost $\alpha(T)$ s koeficienti $\alpha^0, \alpha^1, \dots, \alpha^s$. Snovne konstante $E^0, \dots, E^k, \nu^0, \dots, \nu^m, \sigma^0, \dots, \sigma^r$ in $\alpha^0, \dots, \alpha^s$ združimo v vektor $p^T = [E^0, \dots, \alpha^s]$, ki pri reševanju problema identifikacije tvorijo vektor neznanek. Simbol T označuje pri tem transponiranost vektorja p . Število funkcijskih koeficientov, ki popisujejo posamezno odvisnost (k, m, r, s), je lahko različno.

2.3 Inverzna metoda identifikacije

Osnova metode identifikacije je reševanje t.i. inverznega problema^{2,3}, kjer gre za določevanje koeficientov operatorja, ki opredeljuje fenomenološke lastnosti obravnavanega sistema. V našem primeru je to enačba (3), iskane koeficiente pa predstavlja vektor p . Ker je reševanje inverznega problema enako načinu reševanja ekstremalnih problemov¹, bomo v procesu računske identifikacije iskali optimalno vrednost vektorja neznanek p z ozirom na minimizacijo odstopanja med računskim in eksperimentalnim odzivom obravnavanega sistema.

Podrobnejši opis metode presega okvire tega prispevka, podan je v^{2,3}. Problem identifikacije lahko opišemo z naslednjim algoritmom:

- 1 - izvedba laboratorijskega eksperimenta ob poznanih robnih pogojih ter merjenje odziva realnega sistema
- 2 - izbira približka neznanosti odvisnosti snovnih lastnosti za začetni korak računskega iteracijskega postopka
- 3 - računalniška simulacija eksperimenta s privzetimi odvisnostmi snovnih lastnosti
- 4 - primerjava odziva numeričnega modela z odzivom realnega sistema
- 5 - v primeru, da je ujemanje primerjanih odzivov zadovoljivo, se iteracijski postopek in s tem tudi snovna identifikacija zaključita
- 6 - v primeru, da ujemanje primerjanih odzivov ni zadovoljivo, sledi popravek odvisnosti snovnih lastnosti ter določitev novega približka, ki bo upoštevan v naslednjem iteracijskem izračunu
- 7 - ponovitev algoritma od točke 3 dalje.

Prikazani algoritem je v bistvu optimizacijski¹, saj gre za minimizacijo odstopanj primerjanih odzivov. Sam problem minimizacije pa lahko opremo na postopke za iskanje ekstreme funkcije več spremenljivk. Merilo za ujemanje odziva numeričnega modela in odziva realnega sistema (točka 4 opisanega algoritma) predstavlja t.i. ciljna funkcija:

$$S(p) = [Y-U(p)]^T W[Y-U(p)] + q[Hp]^T Hp, \quad (9)$$

kjer je Y vektor na opazovanem sistemu izmerjenih veličin (točka 1) in $U(p)$ vektor z numeričnim modelom izračunanih veličin. Slednjega, ki je implicitna funkcija parametrov sistema p , izračunamo na osnovi analize direktnega problema (točka 3). Napake meritev vključuje na statistični način utežna matrika W , medtem ko je vloga regularizacijskega člana z utežnim koeficientom q zmanjšati prevelike spremembe vrednosti parametrov sistema, ki so navadno značilne za začetne korake identifikacije. Z regularizacijsko matriko H izvajamo nad parametri sistema regularizacijo 0., 1. ali 2. reda.

Potrebni pogoj za ekstrem ciljne funkcije $S(p)$, s katerim izrazimo zahtevo po ničnosti prvih odvodov ciljne funkcije $S(p)$ po parametrih p , zapišemo z enačbo:

$$\nabla_p S(p) = -2X^T(p) W[Y-U(p)] + 2qH^T Hp = 0 \quad (10)$$

Pri tem označuje ∇_p parcialni odvod po komponentah vektorja p in $X(p)$ občutljivostno matriko:

$$X^T(p) = \nabla_p U^T(p) \quad (11)$$

Skladno z Gauss-Newtonovo metodo minimizacije ciljne funkcije (9) izvedemo nadalje linearno aproksimacijo vektorja $U(p)$ v $(v+1)$ -vi iteraciji:

$$U(p^{v+1}) = U^{v+1} = U^v + X(p^v) [p^{v+1} - p^v] \quad (12)$$

pri čemer pomeni v števec iteracij. Upoštevajoč dano aproksimacijo sledi iz enačbe (10) sistem enačb, iz katerega ob poznanim vektorju p^v ter njemu pripadajočem odzivu $U(p^v)$ izračunamo naslednji približek p^{v+1} (točka 6):

$$\begin{aligned} \{X^T(p^v) W X(p^v) + qH^T H\} p^{v+1} = \\ = X^T(p^v) W\{X(p^v) p^v + [Y-U(p^v)]\} \end{aligned} \quad (13)$$

3 Numerični zglede

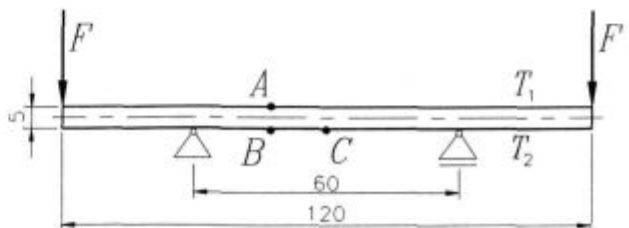
V ponazoritev prikazane metodologije računalniško podprte snovne identifikacije smo izvedli identifikacijo temperaturno odvisnih reoloških lastnosti hipotetičnega materiala, ki ima lastnosti, podobne jeklu. Iskane lastnosti so temperaturno odvisni modul elastičnosti, Poissonov količnik in temperaturni razteznostni koeficient ter krivulje tečenja pri različnih temperaturah. Toplotne lastnosti so v tem prispevku privzete kot poznane in niso predmet identifikacije, njihove temperaturne odvisnosti pa sicer lahko prav tako določimo z inverzno metodo identifikacije⁴.

3.1 Zasnova laboratorijskega eksperimenta

Sklop za izvedbo laboratorijskega eksperimenta, katerega geometrija je prikazana na **sliki 1**, je sestavljen iz prizmatičnega preizkušanca, pravokotnega prečnega prereza, z izmerami 5×10 mm, dolžine 120 mm, ki je podvržen mehanskim in temperaturnim obremenitvam. Senzorji za merjenje vzdolžnih in prečnih deformacij (oznaka A in B na **sliki 1**) so nameščeni na delu preizkušanca med obema podporama, senzor za merjenje upogiba pa je nameščen na sredini razpona (oznaka C). Poleg tega merimo še temperaturo zgornje (T_1) in spodnje (T_2) površine preizkušanca, kar pa na **sliki 1** ni posebej prikazano.

Začetno stanje preizkušanca je izotermno in nenapetostno, njegovo obremenjevanje pa poteka v dveh korakih. V prvem dosežemo z enakomernim segrevanjem na temperaturo $T_1 = 500^\circ\text{C}$ na celotni zgornji površini nosilca in intenzivnim hlajenjem ($T_2 = 0^\circ\text{C}$) po celotni spodnji površini stacionarno temperaturno polje v preizkušancu. Izmerjeni podatki nastalega deformacijskega polja rabijo za identifikacijo temperaturno odvisnega koeficienta temperaturne razteznosti. V drugem koraku dodamo temperaturni obremenitvi še upogibno (štiritočkovni upogibni preizkus), s katero povzročimo plastifikacijo nekaterih delov preizkušanca.

Ker podrobna analiza in izvedba eksperimenta nista predmet tega prispevka, je prikazani laboratorijski eksperiment ilustrativnega značaja, saj rabi le kot prikaz uporabnosti inverzne metode identifikacije.



Slika 1: Eksperimentalni sklop
Figure 1: Experimental arrangement

3.2 Ekvivalentni numerični eksperiment

Odziv realnega sistema, to so med potekom realnega eksperimenta izmerjene vrednosti Y , pomeni izhodišče za računalniško podprto identifikacijo. Ker pa gre v tem prispevku izključno za prikaz metodologije računske identifikacije, smo realni eksperiment zamenjali z numeričnim. V ta namen odvisnosti snovnih lastnosti, ki so v realnem eksperimentu neznane in so v bistvu predmet identifikacije, nadomestimo v numeričnem eksperimentu s povsem določenimi odvisnostmi, s tem pa je tudi odziv v numeričnem eksperimentu obravnavanega sistema povsem opredeljen. Dobimo ga namreč z rešitvijo direktnega problema ob upoštevanju predpisanih robnih pogojev. V našem primeru je odziv časovno spremenljivo deformacijsko polje, iz katerega za potrebe računske identifikacije izločimo končno množico vrednosti, diskretiziranih tako krajevno kot tudi časovno. S takšno diskretizacijo zagotovimo analogijo z realnim eksperimentom, v katerem je merjenje temperature, deformacij in pomikov omejeno krajevno na točke s senzori, nameščenimi na preizkušancu, časovno pa na ustrezno časovno zaporedje.

Med tehtne razloge za zamenjavo laboratorijskega eksperimenta z ekvivalentnim numeričnim, vsaj v uvodni fazi razvoja obravnavane metodologije snovne identifikacije, sodi nedvomno možnost neposrednega primerjanja v numeričnem eksperimentu izbrane "točne" temperaturne odvisnosti z računsko identificirano odvisnostjo. Nasprotno pa lahko o stopnji natančnosti identificirane odvisnosti, dobljene na osnovi izmerjenih odzivov v realnem eksperimentu, sodimo le posredno s primerjanjem računskega in realnega odziva.

V skladu z zgornjimi ugotovitvami nadomestimo v našem primeru opisani laboratorijski eksperiment z analizo ekvivalentnega numeričnega eksperimenta. Da bi zagotovili podobnost z realnim odzivom, perturbiramo numerični odziv skladno z napako meritve, ki izvira iz netočnosti senzorjev in merilne zanke. Glede na območje merjenja ter vrsto senzorjev, je določena največja verjetna napaka ϵ_{err} in u_{err} , ki je:

$$\epsilon_{err} = \pm \max [0.0003, 0.015\epsilon] \quad (14)$$

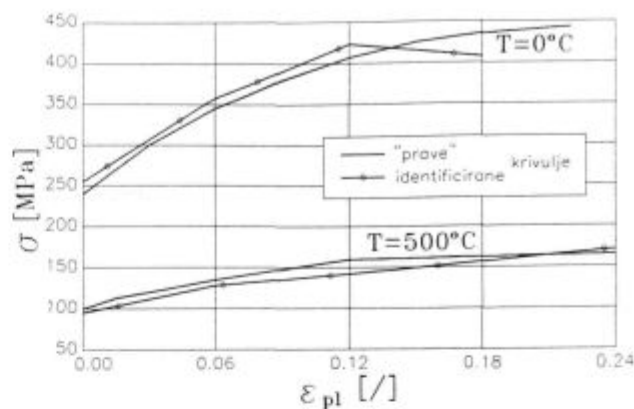
za senzorje, ki merijo deformacije ter

$$u_{err} = \pm \max [0.01 \text{ mm}, 0.0075u] \quad (15)$$

za senzor za merjenje upogiba, pri čemer sta ϵ in u absolutni velikosti izmerjenih deformacij in pomikov.

Začetni približki privzemajo konstantno vrednost snovnih lastnosti na celotnem temperaturnem območju od 0°C do 500°C , in sicer za modul elastičnosti 220 000 MPa, Poissonov količnik 0,36, temperaturni razteznostni koeficient $16,0 \cdot 10^{-6} \text{K}^{-1}$ ter mejo plastičnosti 300 MPa.

Računalniška simulacija numeričnega eksperimenta kakor tudi vse analize, potrebne v opisani inverzni metodologiji identifikacije, so izvedene z metodo končnih elementov. Rezultati identifikacije so prikazani v **tabeli 1** in na **sliki 2**. V **tabeli 1** so primerjane velikosti "točnih" in identificiranih funkcijskih koeficientov tempera-



Slika 2: "Prave" in identificirane krivulje tečenja jekla
Figure 2: "True" and identified yield curves of the steel

turno odvisnih krivulj $E = E(T)$, $\nu = \nu(T)$ in $\alpha = \alpha(T)$. Na **sliki 2** pa so prikazane krivulje σ - ϵ pri različnih temperaturah. Točne krivulje niso posebej označene na sliki, z votlimi simboli pa so označene krivulje, ki so rezultat identifikacije. V večjem delu diagramov je ujemanje pravih in ocenjenih vrednosti zadovoljivo.

Tabela 1: Primerjava "pravih" in identificiranih funkcijskih koeficientov za jeklo

Table 1: "True" versus identified function coefficients comparison of the steel

T ($^\circ\text{C}$)	E (105 MPa)		ν (/)		α (10^{-6}K^{-1})	
	pravi	identif.	pravi	identif.	pravi	identif.
0,0	2,10	2,15	0,300	0,297	11,00	11,34
200,0	1,97	1,94	0,310	0,309	13,00	13,09
400,0	1,83	1,80	0,320	0,326	14,30	14,20
500,0	1,73	1,71	0,330	0,332	14,80	14,73

4 Sklepne ugotovitve

Iz prikazanega numeričnega primera je razvidna robustnost metode identifikacije. Število iteracij, potrebnih za razrešitev identifikacijskega problema, je odvisno od števila funkcijskih koeficientov (vektor p) ter od dobre ali slabe pogojenosti problema. V tem smislu je mehaniški problem slabše pogojen od termičnega⁴, zato so s ciljem razrešitve identifikacijskega problema vpeljani dodatni postopki, kot npr. obremenjevanje po korakih in manjšanje števila funkcijskih koeficientov.

5 Literatura

- ¹ J. S. Arora: *Introduction to Optimum Design*, McGraw-Hill Book Company, 1989
- ² J. V. Beck, K. J. Arnold: *Parameter Estimation in Engineering, and Science*, John Wiley & Sons, 1977
- ³ J. V. Beck, B. Blackwell, C. R. Clair: *Inverse Heat Conduction - Ill-posed Problems*, John Wiley & Sons, 1985
- ⁴ B. Štok, P. Koc: Računalniško podprta identifikacija temperaturne odvisnosti snovnih lastnosti, *Kovine, zlitine, tehnologije*, 30, 1996, 1