

ŘEŠENÍ NEPŘÍMÝCH ÚLOH VEDENÍ TEPLA POMOCÍ STOCHASTICKÉ METODY EXODUS

J. Šroub, M. Honner

Západočeská univerzita v Plzni, Fakulta aplikovaných věd, Katedra fyziky

Abstrakt

V příspěvku je popsáno řešení neustálené nepřímé úlohy vedení tepla pomocí stochastické simulační metody Exodus. Jsou definovány pravděpodobnosti přechodu, výskytu, absorpce a odrazu. Určení pravděpodobností přechodu je vysvětleno na úloze vedení tepla. Dále je ukázán výpočet teplot při přímé i nepřímé úloze. Metoda je aplikována na příkladu určení povrchových teplot a tepelných toků během HVOF nástřiku povlaků.

1 Úvod

Nepřímá úloha spočívá v nalezení takových podmínek jednoznačnosti, aby v určitých zadaných místech uvnitř oblasti byl dodržen žádaný průběh teploty nebo jiné teplotní charakteristiky. Cílem nepřímé úlohy vedení tepla bývá obvykle určení průběhu povrchových teplot a povrchových tepelných toků ze známých průběhů teplot změřených uvnitř vzorku. Efektivní metody řešení nepřímých úloh mají za následek značné zjednodušení experimentů a zvýšení jejich přesnosti a spolehlivosti. Důležitost těchto výpočtů roste s rozvojem nových technologií, využívajících intenzivních zdrojů tepla, jako jsou lasery [4], plazmové technologie [2], atd. Obecným rysem těchto technologií je, že povrchové teploty jsou špatně měřitelné jak kontaktními, tak i bezkontaktními metodami.

2 Teorie

Stochastická metoda Exodus [1] je modifikací metody Monte Carlo. Vychází z popisu tepelného či jiného fyzikálního pole diskrétními Markovovými řetězci. Tepelný problém lze chápat jako spojitý stochastický systém, v němž je náhodným pohybem molekul přenášena energie mezi jednotlivými stavy systému. Pro aplikaci metody Exodus se oblast diskretizuje přiložením vhodné sítě, jejíž uzly se pak považují za stavy systému. Systém je popsán pravděpodobnostmi přechodů nosičů informace z jednotlivých stavů do stavů ostatních. Pravděpodobnosti přechodů závisí na tepelně fyzikálních vlastnostech prostředí, na tvaru oblasti, respektive na tvaru a uspořádání zvolené sítě.

Systém obsahující n stavů je popsán čtvercovou maticí pravděpodobnosti přechodů \mathbf{P} , řádu n . Prvek p_{ij} matice \mathbf{P} je pravděpodobností přechodu nosiče ze stavu i do stavu j . Řádkové součty matice \mathbf{P} jsou rovny jedné. Pro systém v němž mohou nosiče přecházet jen do sousedních uzlů je matice \mathbf{P} pásová.

2.1 Pravděpodobnosti přechodů

V rovnici vedení tepla

$$a \left(\frac{\partial^2 t}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 t}{\partial y^2} \right) = \frac{\partial t}{\partial \tau} \quad , \quad (1)$$

značí t – teplotu, τ – čas, x, y – souřadnice, a – difuzivitu. Rovnice se diskretizuje zavedením sítě s označením podle obr.1.

Jednotlivé parciální derivace se nahradí diferenčními výrazy

$$\frac{\partial^2 t}{\partial x^2} = \frac{2}{h_z + h_v} \cdot \left(\frac{t_{i+1,j,k} - t_{i,j,k}}{h_v} - \frac{t_{i,j,k} - t_{i-1,j,k}}{h_z} \right) \quad , \quad (2)$$

$$\frac{\partial^2 t}{\partial y^2} = \frac{2}{h_s + h_j} \cdot \left(\frac{t_{i,j+1,k} - t_{i,j,k}}{h_j} - \frac{t_{i,j,k} - t_{i,j-1,k}}{h_s} \right) , \quad (3)$$

$$\frac{\partial t}{\partial \tau} = \frac{1}{\Delta \tau} \cdot (t_{i,j,k+1} - t_{i,j,k}) . \quad (4)$$

Dosažením rovnic (2) až (4) do rovnice (1) a po úpravě bude

$$\begin{aligned} & \frac{2a \cdot \Delta \tau}{h_v \cdot (h_z + h_v)} \cdot t_{i+1,j,k} + \frac{2a \cdot \Delta \tau}{h_z \cdot (h_z + h_v)} \cdot t_{i-1,j,k} + \frac{2a \cdot \Delta \tau}{h_s \cdot (h_s + h_j)} \cdot t_{i,j-1,k} + \\ & + \frac{2a \cdot \Delta \tau}{h_j \cdot (h_s + h_j)} \cdot t_{i,j+1,k} + \left(1 - \frac{2a \cdot \Delta \tau}{h_v \cdot (h_z + h_v)} - \frac{2a \cdot \Delta \tau}{h_z \cdot (h_z + h_v)} - \frac{2a \cdot \Delta \tau}{h_s \cdot (h_s + h_j)} - \right. \\ & \left. - \frac{2a \cdot \Delta \tau}{h_j \cdot (h_s + h_j)} \right) \cdot t_{i,j,k} = t_{i,j,k+1} . \end{aligned} \quad (5)$$

Tuto rovnici rozšíříme kvadrátem charakteristického rozměru (L) a zavedeme bezrozměrové úseky ve všech čtyřech směrech (n_v, n_z, n_s, n_j) a krok Fourierova čísla (ΔFo)

$$n_v = \frac{h_v}{L} ; \quad n_z = \frac{h_z}{L} ; \quad n_s = \frac{h_s}{L} ; \quad n_j = \frac{h_j}{L} ; \quad \Delta Fo = \frac{a \Delta \tau}{L^2} . \quad (6)$$

Rovnice (5) přejde do tvaru

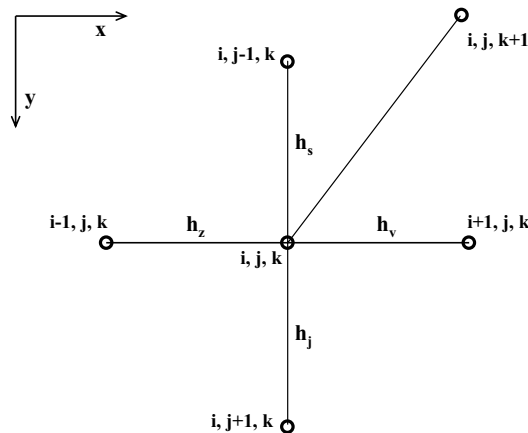
$$\begin{aligned} & \frac{2 \cdot \Delta Fo}{n_v \cdot (n_z + n_v)} \cdot t_{i+1,j,k} + \frac{2 \cdot \Delta Fo}{n_z \cdot (n_z + n_v)} \cdot t_{i-1,j,k} + \frac{2 \cdot \Delta Fo}{n_s \cdot (n_s + n_j)} \cdot t_{i,j+1,k} + \\ & + \frac{2 \cdot \Delta Fo}{n_j \cdot (n_s + n_j)} \cdot t_{i,j-1,k} + \left(1 - \frac{2 \cdot \Delta Fo}{n_v \cdot (n_z + n_v)} - \frac{2 \cdot \Delta Fo}{n_z \cdot (n_z + n_v)} - \right. \\ & \left. - \frac{2 \cdot \Delta Fo}{n_s \cdot (n_s + n_j)} - \frac{2 \cdot \Delta Fo}{n_j \cdot (n_s + n_j)} \right) \cdot t_{i,j,k} = t_{i,j,k+1} . \end{aligned} \quad (7)$$

Tím jsou určeny pravděpodobnosti přechodu do sousedních uzlů

$$\begin{aligned} p_v &= \frac{2 \cdot \Delta Fo}{n_v \cdot (n_z + n_v)} ; \quad p_z = \frac{2 \cdot \Delta Fo}{n_z \cdot (n_z + n_v)} \\ p_s &= \frac{2 \cdot \Delta Fo}{n_s \cdot (n_s + n_j)} ; \quad p_j = \frac{2 \cdot \Delta Fo}{n_j \cdot (n_s + n_j)} \end{aligned} \quad (8)$$

a pravděpodobnosti setrvání v uzlech p_t ,

$$p_t = 1 - p_v - p_z - p_s - p_j . \quad (9)$$



Obrázek 1: Okolí obecného uzlu sítě

2.2 Pravděpodobnost absorpce a odrazu

V případě okrajové podmínky 3.druhu jsou absorbuujícími stavy teploty vnějšího prostředí. Pravděpodobnosti pro uzly odpovídající povrchovým bodům řešeného tělesa záleží tedy na součiniteli přestupu tepla. Na hranici oblasti platí rovnice

$$-\frac{\partial t}{\partial n} = \frac{Bi}{L}(t_i - f_i) \quad . \quad (10)$$

Dostane-li se nosič do místa i na hranici oblasti, pak je s pravděpodobností p_{abs} absorbován ve stavu s hodnotou funkce odpovídající vnějšímu prostředí f_i . Jinak se nosič s pravděpodobností p_{odr} odrazí a přejde do stavu t_{i+1} uvnitř oblasti, který je od stavu t_i vzdálen o délku h

$$-\frac{t_i - t_{i+1}}{h} = \frac{Bi}{L}(t_i - f_i) \quad . \quad (11)$$

Vyjádří-li se délka h jako m -tina charakteristického rozměru L , pak po úpravě

$$t_i = \frac{m}{Bi + m}t_{i+1} + \frac{Bi}{Bi + m}f_i = p_{odr}t_{i+1} + p_{abs}f_i \quad . \quad (12)$$

Tímto jsou určeny pravděpodobnosti absorpce a odrazu

$$p_{odr} = \frac{m}{Bi + m} \quad ; \quad p_{abs} = \frac{Bi}{Bi + m} \quad . \quad (13)$$

2.3 Pravděpodobnosti výskytu

Narozdíl od jiných stochastických metod (například metody Monte Carlo) se při použití metody Exodus nesledují trajektorie jednotlivých nosičů (eventuelně myšlených svazků nosičů), ale zjišťuje se, jaká je pravděpodobnost výskytu nosiče v tom kterém stavu systému. Vyjde se při tom z pravděpodobností výskytu $\mathbf{b}_j^{(0)}$ ($j = 1, 2, \dots, n$) nosiče v jednotlivých stavech na počátku. Tyto pravděpodobnosti se uspořádají do řádkového vektoru počátečních pravděpodobností výskytu.

$$\mathbf{b}^{(0)} = [b_1^{(0)}, b_2^{(0)}, \dots, b_n^{(0)}] \quad . \quad (14)$$

Má-li se sledovat náhodné bloudivění vycházející ze stavu i , potom vektor $\mathbf{b}^{(0)}$ obsahuje jedničku v místě i , jinak samé nuly. Jinými slovy : s pravděpodobností 1 jsou všechny nosiče ve stavu i .

Z matice \mathbf{P} a vektoru $\mathbf{b}^{(0)}$ se dají postupným pronásobováním vypočítat pravděpodobnosti výskytu v jednotlivých krocích procesu. Pravděpodobnosti výskytu nosičů po uskutečnění jednoho kroku náhodného bloudivění se vypočítají pronásobením vektoru počátečních pravděpodobností výskytu $\mathbf{b}^{(0)}$ maticí pravděpodobností přechodů \mathbf{P}

$$\mathbf{b}^{(1)} = \mathbf{b}^{(0)} \cdot \mathbf{P} \quad . \quad (15)$$

Pravděpodobnost výskytu nosičů po uskutečnění k kroků náhodného bloudivění se vypočítá na základě pravděpodobností výskytu v předchozím kroku $\mathbf{b}^{(k-1)}$

$$\mathbf{b}^{(k)} = \mathbf{b}^{(k-1)} \cdot \mathbf{P} \quad (16)$$

nebo z počáteční pravděpodobnosti výskytu $\mathbf{b}^{(0)}$

$$\mathbf{b}^{(k)} = \mathbf{b}^{(0)} \cdot \mathbf{P}^k \quad . \quad (17)$$

Z vektoru \mathbf{b} se dá (postupem uvedeným v části 2.4) určit průběh teploty v uzlu i , tedy vyřešit úlohu v jednom bodě teplotního pole.

2.4 Přímá úloha

Pravděpodobnosti přechodů z každého stavu do všech stavů sousedních se pro zvolenou síť, dané tepelně fyzikální parametry a zvolený časový krok určí z elementárních tepelných bilancí. Současně se určí pravděpodobnost, s jakou nosič setrvává ve stavu, v němž právě je. Tím se také výpočetnímu kroku k přiřadí význam času na díle. Vypočítá se soubor matic $\mathbf{B}^{(k)}$ ($k = 1, 2, \dots, k1$), jak bylo v předchozím odstavci naznačeno. Pro řešení úlohy s vnitřními zdroji tepla je třeba ještě vypočítat matici $\mathbf{N}^{(k)}$

$$\mathbf{N}^{(k)} = \sum_{ik=1}^k \mathbf{B}^{(ik)} \quad (18)$$

Prvek n_{ij} matice \mathbf{N} má význam počtu průchodů nosiče informace místem j , byl-li proces bloudění nastartován v místě i . Matici \mathbf{N} vypočítáme jako součet všech matic \mathbf{B} od počátku procesu.

2.5 Přímá úloha s časově neproměnnou okrajovou podmínkou a konstantními vnitřními zdroji

V této části se omezíme na řešení přímé úlohy pro neustálené pole s konstantními vnitřními zdroji s časově neproměnnou okrajovou podmínkou 1.druhu. Řešení úlohy ve v místech dostaneme jako součet součinu matice $\mathbf{B}^{(k)}$ typu (v, n) s vektorem vnitřních zdrojů \mathbf{q}

$$\mathbf{t}^{(k)} = \mathbf{B}^{(k)} \cdot \mathbf{f} + \mathbf{N}^{(k)} \cdot \mathbf{q} \quad , \quad (19)$$

kde $\mathbf{t}^{(k)}$ typu $(v, 1)$ je vektor teplotních charakteristik (teplot, teplotních diferencí, středních teplot a podobně) v čase odpovídajícím kroku k , vektor \mathbf{f} typu $(n, 1)$ obsahuje hodnoty počáteční podmínky v prvcích příslušejících neabsorbujícím stavům a hodnoty okrajové podmínky v prvcích příslušejícím stavům absorbujícím, vektor \mathbf{q} obsahuje příspěvky vnitřních zdrojů tepla v příslušných místech.

Přeskupíme-li matici \mathbf{B} v každém kroku tak, že do prvních r sloupců dáme hodnoty příslušející stavům absorbujícím a do zbývajících $s = n - r$ sloupců hodnoty příslušející stavům neabsorbujícím, můžeme matici \mathbf{B} rozdělit na dvě části

$$\mathbf{B}^{(k)} = \left[\mathbf{B}_A^{(k)} \ : \ \mathbf{B}_N^{(k)} \right] \quad . \quad (20)$$

Pokud odpovídajícím způsobem upravíme vektor \mathbf{f}

$$\mathbf{f}^T = \left[\mathbf{f}_A^T \ : \ \mathbf{f}_N^T \right] \quad , \quad (21)$$

a shodně přeskupíme též matici \mathbf{N} a vektor \mathbf{q} , potom řešení přímé úlohy s časově konstantní podmínkou lze psát

$$\mathbf{t}^{(k)} = \mathbf{B}_A^{(k)} \cdot \mathbf{f}_A + \mathbf{B}_N^{(k)} \cdot \mathbf{f}_N + \mathbf{N}^{(k)} \cdot \mathbf{q} \quad , \quad (22)$$

kde \mathbf{f}_A je vektor okrajových podmínek a \mathbf{f}_N je vektor počátečních podmínek.

2.6 Přímá úloha s časově proměnnou okrajovou podmínkou a konstantními vnitřními zdroji

Charakteristickým rysem metody Exodus, a stochastických metod vůbec, je obrácený smysl chodu času. Souvisí to s tím, že na díle je energie přenášena od povrchu oblasti k jednotlivým vnitřním místům. Prakticky je však nezvládnutelné určit nějakými pokusy nebo simulacemi

pravděpodobnost dosažení určitého místa nosiči startovanými od různých míst povrchu. Je však možné zjistit pravděpodobnosti dosažení jednotlivých míst hranice oblasti nosiči startovanými z určitého vnitřního uzlu oblasti. Čas plyne opačně než na díle. V případě závislosti okrajové podmínky (a také vnitřních zdrojů, tepelné fyzikálních parametrů, tvaru oblasti) na čase je toto třeba brát v úvahu.

Při řešení neustálené úlohy v kroku $k1$ s časově proměnnou okrajovou podmínkou se musí řešení provádět krok za krokem. Pro určení teploty nebo jiné tepelné charakteristiky j jednom místě, je třeba znát vektor $\mathbf{b}^{(k)}$ ($k = 1, 2, \dots, k1$) v každém předchozím kroku. Teplotní charakteristika v časovém kroku $k1$ je dána součtem přírůstků za všechny již uplynulé kroky

$$\mathbf{t}^{(k1)} = \sum_{k=1}^{k1} \left(\mathbf{B}^{(k)} - \mathbf{B}^{(k-1)} \right) \cdot \mathbf{f}^{(k1-k+1)} + \mathbf{N}^{(k)} \cdot \mathbf{q} \quad , \quad (23)$$

kde vektor \mathbf{f} obsahuje okrajové a počáteční podmínky ve všech časových hladinách $k = 1, 2, \dots, k1$.

Rozdělíme-li matici \mathbf{B} na části \mathbf{B}_A a \mathbf{B}_N vztahující se k absorbujícím a neabsorbujícím stavům, pak lze předchozí rovnici napsat ve tvaru

$$\mathbf{t}^{(k1)} = \sum_{k=1}^{k1} \left(\mathbf{B}_A^{(k)} - \mathbf{B}_A^{(k-1)} \right) \cdot \mathbf{f}_A^{(k1-k+1)} + \mathbf{B}_N^{(k1)} \cdot \mathbf{f}_N + \mathbf{N}^{(k)} \cdot \mathbf{q} \quad , \quad (24)$$

kde vektor \mathbf{f}_A obsahuje okrajové podmínky, které jsou v jednotlivých časových hladinách různé a vektor \mathbf{f}_N počátečních podmínek je konstantní. Pro řešení v kroku $k1$ je třeba znát matice \mathbf{B}_A a vektory \mathbf{f}_A ve všech předchozích krocích. Matice \mathbf{B}_N stačí znát jen v kroku $k1$. Takovéto uspořádání výpočtu umožní ušetřit výpočetní čas a paměť oproti řešení vyjádřenému rovnicí (23).

Z rovnic (22) a (24) je zřejmé, že řešení se rozpadá na dvě fáze. V první, časově náročnější fázi se řeší matice \mathbf{B} zahrnující vliv tvaru oblasti a tepelné fyzikálních parametrů. Ve druhé fázi se zahrne do řešení vliv počáteční a okrajové podmínky a vnitřních zdrojů. Případné alternativy hraničních podmínek se dají snadno realizovat.

2.7 Nepřímá úloha

Úloha nepřímá spočívá v nalezení takových podmínek jednoznačnosti, aby v určitých zadaných místech uvnitř oblasti byl dodržen žádaný průběh teploty nebo jiné teplotní charakteristiky. Následuje formulace řešení nepřímé úlohy spočívající v nalezení průběhu teploty na povrchu při známých průbězích teplot uvnitř oblasti. Pro zjednodušení uvažujme nulové vnitřní zdroje $q = 0$.

2.8 Nepřímá úloha s časově konstantní okrajovou podmínkou

Předpokládejme, že jsou dány průběhy teplot ve w vnitřních uzlech oblasti, uspořádané do vektorů $\mathbf{t}^{(k)}$ typu $(w, 1)$, $k = 1, 2, \dots, k1$. Pokud můžeme předpokládat, že hledaná okrajová podmínka nezávisí na čase, vyjdeme z rovnice (24).

$$\mathbf{t}^{(k)} = \mathbf{B}_A^{(k)} \cdot \mathbf{f}_A + \mathbf{B}_N^{(k)} \cdot \mathbf{f}_N \quad , \quad (25)$$

kterou napíšeme pro w neabsorbujících stavů se zadanou hodnotou. Neznámou v rovnici (25) je vektor \mathbf{f}_A .

Matice $\mathbf{B}_A^{(k)}$ a $\mathbf{B}_N^{(k)}$ pro všechna k se určí stejně, jako při řešení úlohy přímé. Hraniční uzly odpovídající absorbujícím stavům se vhodně spojí do skupin tak, aby počet skupin $r = w$.

Odpovídající sloupce v matici \mathbf{B}_A se sloučí, takže matice \mathbf{B}_A bude čtvercová. Cílem bude najít vektor \mathbf{f}_A obsahující hodnoty okrajové podmínky pro $r = w$ úseků hranice oblasti.

Z maticové rovnice (25) se vypočítá hledaný vektor okrajové podmínky

$$\mathbf{f}_A^{(k)} = \left(\mathbf{B}_A^{(k)}\right)^{-1} \cdot \left(\mathbf{t}^{(k)} - \mathbf{B}_N^{(k)} \cdot \mathbf{f}_N\right) \quad , \quad (26)$$

pro všechny časové hladiny $k = 1, 2, \dots, k1$.

V obecnějším případě je na části povrchu okrajová podmínka zadána, ve zbývajících místech se má určit. Nutnou podmínkou je, že počet hledaných průběhů w musí být shodný s počtem průběhů zadaných uvnitř oblasti. Vyjdeme z rovnice (19) pro $q = 0$ a pro každou časovou hladinu k ($k = 1, 2, \dots, k1$) přeskupíme a přeznačíme prvky. Na prvních w míst vektoru \mathbf{t} dáme hodnoty zadaných teplot a označíme \mathbf{t}_I , zbývajících $v - w$ prvků označíme \mathbf{t}_D .

Podobně uspořádáme vektor hraničních podmínek, kde prvních w hodnot \mathbf{f}_I představuje hledané hodnoty okrajové podmínky, zbývajících $n - w$ hodnot označených \mathbf{f}_D jsou zadané hodnoty okrajové podmínky. Matice \mathbf{B} se přeskupí tak, že do prvních w řádků se dají pravděpodobnosti vztahující se k vnitřním uzlům, v nichž je zadán průběh teploty. Současně do prvních w sloupců se dají pravděpodobnosti výskytu vztahující se k w hraničním uzlům (eventuálně úsekům hranice), v nichž se hledá hodnota okrajové podmínky. Tím se matice \mathbf{B} rozpadne na čtyři části, z nichž pro řešení nepřímé úlohy potřebujeme čtvercovou matici \mathbf{B}_I typu (w, w) a matici \mathbf{B}_D typu $(w, n - w)$. Rovnici (20) pak lze názorně přepsat

$$\begin{bmatrix} \mathbf{t}_I^{(k)} \\ \dots \\ \mathbf{t}_D^{(k)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_I^{(k)} & \vdots & \mathbf{B}_D^{(k)} \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \vdots & \dots \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{f}_I^{(k)} \\ \dots \\ \mathbf{f}_D^{(k)} \end{bmatrix} \quad . \quad (27)$$

S využitím nového značení lze psát

$$\mathbf{t}_I^{(k)} = \mathbf{B}_I^{(k)} \cdot \mathbf{f}_I + \mathbf{B}_D^{(k)} \cdot \mathbf{f}_D \quad , \quad k = 1, 2, \dots, k1 \quad , \quad (28)$$

kde \mathbf{f}_I je hledaný vektor. Odtud

$$\mathbf{f}_I = \left(\mathbf{B}_I^{(k)}\right)^{-1} \cdot \left(\mathbf{t}_I^{(k)} - \mathbf{B}_D^{(k)} \cdot \mathbf{f}_D\right) \quad , \quad k = 1, 2, \dots, k1 \quad , \quad (29)$$

čímž je řešena nepřímá úloha hledání hraniční podmínky za předpokladu, že tato nezávisí na čase. Je-li nyní znám celý vektor \mathbf{f} , lze snadno řešením přímé úlohy dopočítat dosud neznámé hodnoty \mathbf{t}_D teplot uvnitř oblasti v každé časové hladině.

2.9 Nepřímá úloha s časově proměnnou okrajovou podmínkou

Při řešení nepřímé úlohy hledání časově proměnné okrajové podmínky vyjdeme z rovnice (23) pro řešení odpovídající úlohy přímé. Uvažujme opět $q = 0$. Vektory \mathbf{t} , \mathbf{f} a matici \mathbf{B} uspořádáme a části přeznačíme obdobně jako naznačuje rovnice (26), tedy pro každou časovou hladinu

$$\mathbf{t}^{(k)} = \begin{bmatrix} \mathbf{t}_I^{(k)} \\ \dots \\ \mathbf{t}_D^{(k)} \end{bmatrix} \quad ; \quad \mathbf{B}^{(k)} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_I^{(k)} & \vdots & \mathbf{B}_D^{(k)} \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \vdots & \dots \end{bmatrix} \quad ; \quad \mathbf{f}^{(k)} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_I^{(k)} \\ \dots \\ \mathbf{f}_D^{(k)} \end{bmatrix} \quad , \quad (30)$$

$k = 1, 2, \dots, k1$ s tím rozdílem, že vektor \mathbf{f} je také proměnný v čase. S využitím tohoto značení lze psát rovnici

$$\mathbf{t}_I^{(k1)} = \sum_{k=1}^{k1} \left(\mathbf{B}_I^{(k)} - \mathbf{B}_I^{(k-1)}\right) \cdot \mathbf{f}_I^{(k1-k+1)} + \sum_{k=1}^{k1} \left(\mathbf{B}_D^{(k)} - \mathbf{B}_D^{(k-1)}\right) \cdot \mathbf{f}_D^{(k1-k+1)} \quad , \quad (31)$$

z níž nejprve pro $k_1 = 1$ vyřešíme $\mathbf{f}_I^{(1)}$ pro dané $\mathbf{t}_I^{(1)}$

$$\mathbf{f}_I^{(1)} = \left(\mathbf{B}_I^{(1)} - \mathbf{B}_I^{(0)} \right)^{-1} \cdot \left[\mathbf{t}_I^{(1)} - \left(\mathbf{B}_D^{(1)} - \mathbf{B}_D^{(0)} \right) \cdot \mathbf{f}_D^{(1)} \right] \quad . \quad (32)$$

Dále se rovnice (31) upraví do tvaru

$$\begin{aligned} \mathbf{t}_I^{(k_1)} &= \left(\mathbf{B}_I^{(1)} - \mathbf{B}_I^{(0)} \right) \cdot \mathbf{f}_I^{(k_1)} + \sum_{k=2}^{k_1} \left(\mathbf{B}_I^{(k)} - \mathbf{B}_I^{(k-1)} \right) \cdot \mathbf{f}_I^{(k_1-k+1)} + \\ &+ \sum_{k=1}^{k_1} \left(\mathbf{B}_D^{(k)} - \mathbf{B}_D^{(k-1)} \right) \cdot \mathbf{f}_D^{(k_1-k+1)} \quad , \end{aligned} \quad (33)$$

a odtud se určí neznámé $\mathbf{f}_I^{(k_1)}$ pro libovolné k_1 postupně od $k_1 = 2$

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_I^{(k_1)} &= \left(\mathbf{B}_I^{(1)} - \mathbf{B}_I^{(0)} \right)^{-1} \cdot \left[\mathbf{t}_I^{(k_1)} - \sum_{k=2}^{k_1} \left(\mathbf{B}_I^{(k)} - \mathbf{B}_I^{(k-1)} \right) \cdot \mathbf{f}_I^{(k_1-k+1)} - \right. \\ &\left. - \sum_{k=1}^{k_1} \left(\mathbf{B}_D^{(k)} - \mathbf{B}_D^{(k-1)} \right) \cdot \mathbf{f}_D^{(k_1-k+1)} \right] \quad . \end{aligned} \quad (34)$$

V rovnicích (32) a (34) jsou vektory \mathbf{t}_I , \mathbf{f}_D zadány, matice \mathbf{B} se určí stejně jako při řešení úlohy přímé, pouze se přeskupí. Hodnoty \mathbf{f}_I na pravé straně rovnice (34) jsou známy z řešení v předešlých časových hladinách. Je-li pak znám celý vektor $\mathbf{f}^{(k)}$ v časových hladinách $k = 1, 2, \dots, k_1$, lze určit vektory $\mathbf{t}_D^{(k)}$ ($k = 1, 2, \dots, k_1$) řešením úlohy přímé.

Protože matice $\mathbf{B}_I^{(0)}$ je nulová, lze předchozí rovnice zjednodušit. Využít ji lze v případě, že uzly se zadanou teplotou leží ve zvolené síti v první vrstvě uzlů pod povrchem. Pokud jsou tyto uzly hlouběji, obsahuje matice $\mathbf{B}_I^{(1)}$ v některých řádcích samé nuly a nelze ji invertovat. Ústupkem je provedení několika (k_0) kroků, čímž se naplní matice $\mathbf{B}_I^{(k_0)}$. Rovnice (33) pak bude tvaru

$$\begin{aligned} \mathbf{t}_I^{(k_1)} &= \sum_{k=1}^{k_0} \left(\mathbf{B}_I^{(k)} - \mathbf{B}_I^{(k-1)} \right) \cdot \mathbf{f}_I^{(k_1-k+1)} + \sum_{k=k_0+1}^{k_1} \left(\mathbf{B}_I^{(k)} - \mathbf{B}_I^{(k-1)} \right) \cdot \mathbf{f}_I^{(k_1-k+1)} + \\ &+ \sum_{k=1}^{k_1} \left(\mathbf{B}_D^{(k)} - \mathbf{B}_D^{(k-1)} \right) \cdot \mathbf{f}_D^{(k_1-k+1)} \quad , \end{aligned} \quad (35)$$

Pro dosti malý krok Fourierova čísla lze uvažovat, že přibližně platí $\mathbf{f}_I^{(k_1-k_0+1)} = \mathbf{f}_I^{(k_1-k_0)} = \dots = \mathbf{f}_I^{(k_1)}$, a potom lze psát

$$\begin{aligned} \mathbf{t}_I^{(k_1)} &= \left(\mathbf{B}_I^{(k_0)} - \mathbf{B}_I^{(0)} \right) \cdot \mathbf{f}_I^{(k_1)} + \sum_{k=k_0+1}^{k_1} \left(\mathbf{B}_I^{(k)} - \mathbf{B}_I^{(k-1)} \right) \cdot \mathbf{f}_I^{(k_1-k+1)} + \\ &+ \sum_{k=1}^{k_1} \left(\mathbf{B}_D^{(k)} - \mathbf{B}_D^{(k-1)} \right) \cdot \mathbf{f}_D^{(k_1-k+1)} \quad , \end{aligned} \quad (36)$$

Vždy platí $\mathbf{B}_I^{(0)} = 0$. S jistou přibližností lze počítat

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_I^{(k_1)} &= \left(\mathbf{B}_I^{(k_0)} \right)^{-1} \cdot \left[\mathbf{t}_I^{(k_1)} - \sum_{k=k_0+1}^{k_1} \left(\mathbf{B}_I^{(k)} - \mathbf{B}_I^{(k-1)} \right) \cdot \mathbf{f}_I^{(k_1-k+1)} - \right. \\ &\left. - \sum_{k=1}^{k_1} \left(\mathbf{B}_D^{(k)} - \mathbf{B}_D^{(k-1)} \right) \cdot \mathbf{f}_D^{(k_1-k+1)} \right] \quad . \end{aligned} \quad (37)$$

Chyba způsobená sdružením k_0 časových kroků závisí na strmosti průběhů teplot, hloubce umístění uzlů se zadanou teplotou uvnitř oblasti, velikosti k_0 a velikosti kroku Fourierova čísla.

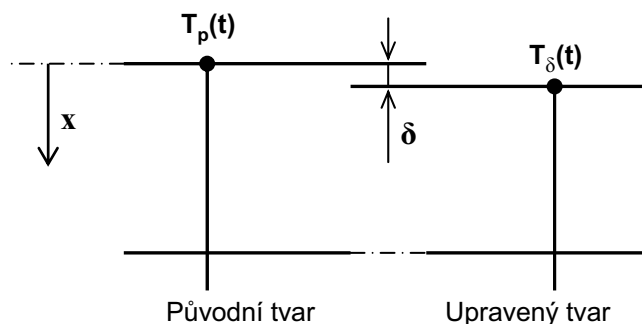
Pro řešení nepřímé úlohy musí být splněny některé podmínky :

- Matice \mathbf{B}_I musí být čtvercová, tedy počet uzlů v nichž je zadán či změřen průběh teploty musí být roven počtu úseků hranice, na nichž se hledá okrajová podmínka. Při daném počtu měřících bodů se vhodným pospojováním upraví počet úseků hranice.
- Matice \mathbf{B}_I musí být invertovatelná, matice nesmí obsahovat nulové řádky. To je splněno, pokud měřící místa leží v první vrstvě pod povrchem – potom se dá počítat průběh okrajové podmínky podle rovnice (34). Jinak se volí hodnota $k_0 > 1$, ne však zbytečně velká. Hodnota k_0 musí být větší, než je počet vrstev mezi měřeným místem a povrchem.
- Každý řádek matice \mathbf{B}_I musí přinášet novou informaci. Proto například nesmí měřené body ležet těsně u sebe nebo u symetrické úlohy nesmí být použita měřící místa umístěná symetricky.

Z hlediska dané úlohy je nejvhodnější umístění měřících míst ve stejné, nepřilíš velké, hloubce pod povrchem přibližně stejně daleko podél celého úseku hranice, kde se hledá okrajová podmínka.

2.10 Určení tepelného toku

Tepelný tok na povrch ve směru normály se určí z rozdílu teplot ΔT na povrchu a v nějaké hloubce δ , například 10^{-5} m, pod povrchem (obr.2). První z teplot se určí jak bylo popsáno výše. Druhá z teplot se určí stejným výpočtetním postupem na síti, která se od první liší pouze zmenšeným rozměrem povrchových prvků.



Obrázek 2: Schéma výpočtu povrchového tepelného toku

Tepelný tok se poté vypočte z následující rovnice

$$q = (T_p(t) - T_\delta(t)) \cdot \lambda \cdot \delta^{-1} \quad (\text{W m}^{-2}) \quad . \quad (38)$$

3 Příklad

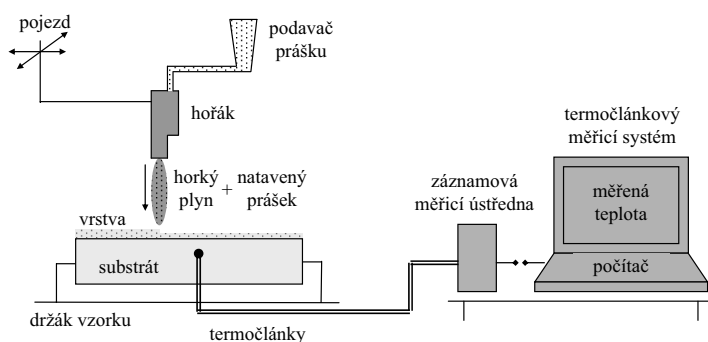
Výpočet povrchové teploty a tepelného toku pomocí metody Exodus si ukážeme na příkladu HVOF (obr. 4) nanášení povlaků [3]. Provedený experiment zahrnoval nanášení materiálu na vzorky o rozměrech $(30 \times 70 \times 100 \text{ mm})$, jehož výsledkem jsou průběhy teplot z termočlánků umístěných v různých místech a hloubkách pod povrchem substrátu. Schématické uspořádání experimentu je vidět na obrázku 3.

Materiálové vlastnosti vzorku v oceli ČSN 16536 jsou $\lambda = 44.8 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $c = 480 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ a $\rho = 8000 \text{ kg m}^{-3}$. Časový krok $\Delta\tau$ byl 0.025 s.

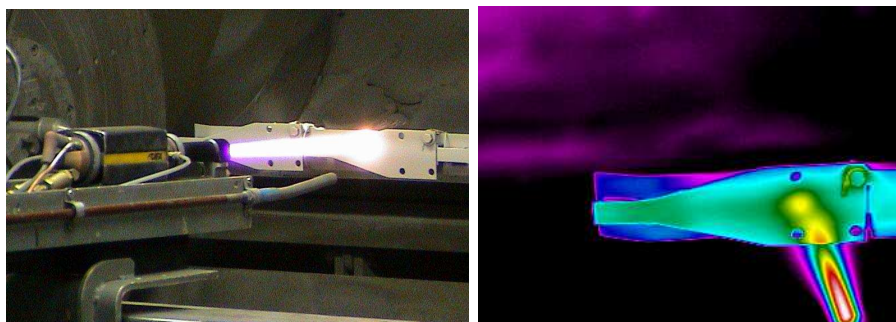
Byl použit model s předpokladem jednorozměrného šíření tepla. Síť je pravoúhlá nerovnoměrná tvořená $3 \times 11 = 33$ uzly. Měřící termočlánek je umístěn doprostřed první podpovrchové vrstvy. V tomto případě lze výpočet provádět podle rovnice 34 a odpadá problém s naplněním matice B_I . Výpočet povrchových teplot a tepelných toků probíhá postupně pro jednotlivé termočláanky.

Výsledky modelu jsou ukázány na obrázku 5. Maximální teplota na povrchu byla 70°C a maximální tepelný tok do vzorku byl $6 \cdot 10^5 \text{ W m}^{-2}$. Maximum teploty bylo zpožděno oproti maximu tepelného toku o cca 0.1 s.

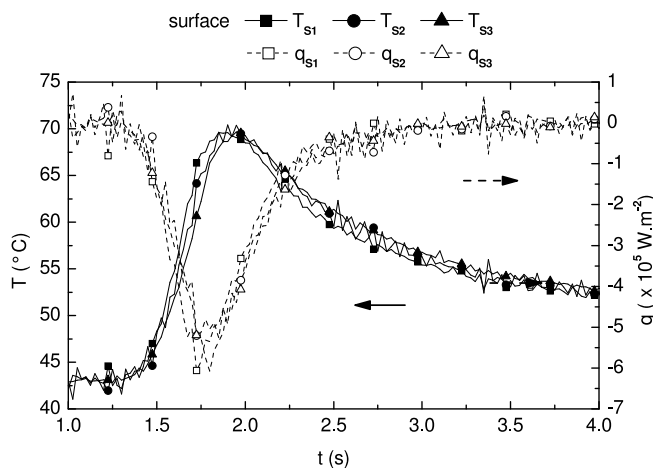
Výsledné teploty spočtené metodou Exodus byly následně použity jako okrajové podmínky porovnávacího modelu (MKP). Pro výpočet byl použit systém Cosmos/M. Výsledky z MKP modelu byly porovnány s naměřenými teplotními průběhy (obr. 6). Maximální rozdíl je kolem 0.3°C .



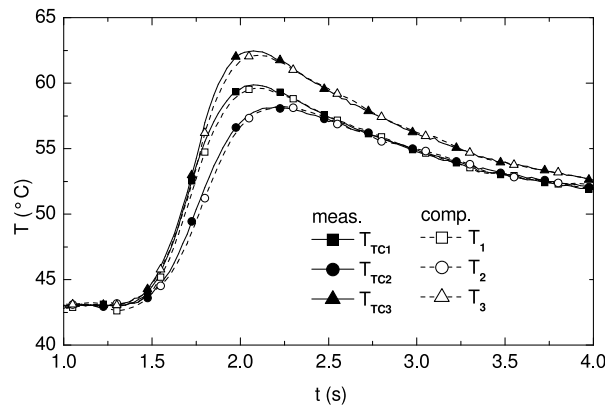
Obrázek 3: Schéma uspořádání experimentu měření teplot při HVOF nástřiku povlaků



Obrázek 4: Žárový nástřik ochranných povlaků metodou HVOF ve viditelném a infračerveném spektru záření



Obrázek 5: Vypočtené průběhy povrchových teplot a tepelných toků



Obrázek 6: Porovnání měřených teplotních průběhů s průběhy vypočtenými pomocí MKP modelu

4 Závěr

Výhody metody Exodus se projeví při řešení nepřímých úloh (hledání povrchových teplot a tepelných toků). Zatímco metoda Exodus řeší nepřímou úlohu jedním výpočetním postupem, u ostatních metod je nutné opakované řešení přímých úloh s postupným zpřesňováním neznámé okrajové podmínky. Výsledky vypočtené metodou Exodus byly porovnány s výsledky získanými metodou konečných prvků. Obecně je konstatována dobrá shoda.

Poděkování

Tento článek vznikl za finančního přispění MŠMT v rámci projektu výzkumného záměru č. MSM 4977751302.

Reference

- [1] A. F. Emery and W. W. Carson. A modification to Monte Carlo method – The Exodus method. *Journal of Heat Transfer*, 90:328–332, 1968.
- [2] D. Homberg. On an inverse problem related to laser material treatment. *Inverse Problems*, 22:1855–1867, 2006.
- [3] Milan Honner, Petr Červený, Václav Franta, and Frantisek Čejka. Heat transfer during HVOF deposition. *Surface and Coatings Technology*, 106:94–99, 1998.
- [4] N. Shantinga L. Huipinga, Z. Guogun and L. Yiguo. Inverse heat conduction analysis of quenching process using finite-element and optimization method. *Finite Elements in Analysis*, 42(12):1087–1096, 2006.

Ing. Jan Šroub

Západočeská univerzita v Plzni, Fakulta aplikovaných věd, Katedra fyziky, Univerzitní 22, 306 14 Plzeň, tel.: +420 377421088, e-mail: jsroub@kfy.zcu.cz

Doc. Ing. Milan Honner, Ph.D.

Západočeská univerzita v Plzni, Fakulta aplikovaných věd, Katedra fyziky, Univerzitní 22, 306 14 Plzeň, tel.: +420 377421088, e-mail: honner@kfy.zcu.cz