

## POPRAWA EFEKTYWNOŚCI SYMULACJI KRZEPNIĘCIA METODĄ ELEMENTÓW SKOŃCZONYCH DZIĘKI ADAPTACJI SIATKI I KROKU CZASOWEGO

ARKADIUSZ NAGÓRKA

### *IMPROVEMENTS OF EFFICIENCY OF FINITE ELEMENT SIMULATIONS OF SOLIDIFICATION DUE TO ADAPTIVE MESH REFINEMENT AND TIME-STEP SELECTION*

#### *Abstract*

*The paper deals with an application of adaptive mesh refinement and automatic time-step selection techniques to numerical simulations of solidification. High cooling and heating rates in the beginning of the process involve the need for using very small time steps. Moreover, regions of highest error in the cast subdomain often coincide with the moving fronts of phase change which makes it impossible to generate a common mesh suitable for the entire simulation. In order to avoid high cost of computations on fine and uniform spatial and temporal discretizations adaptivity based on error estimates was introduced to our finite element code.*

*Error of spatial discretization, measured in energy norm, is estimated either by means of a Zienkiewicz-Zhu type error estimator based on postprocessed heat flux or by an explicit residual method. Error estimates form the basis for adaptive mesh refinement. Local truncation error of the time-stepping scheme, estimated by a method utilizing two helper solutions obtained with a smaller time step, allows to select a new step size leading to the solution with accuracy close to preassigned tolerance.*

*Results of example simulations of solidification confirm considerable reduction of computation time thanks to mesh refinement and automatic time-step selection.*

### 1. WSTĘP

Szybki wzrost mocy obliczeniowej komputerów sprawił, że symulacje komputerowe stały się podstawowym sposobem przewidywania przebiegu zjawisk fizycznych i procesów o coraz większym stopniu skomplikowania. Złożoność ta sprawia, że przewidywania te muszą charakteryzować się odpowiednio wysoką dokładnością. Im większe wymagania co do

dokładności wyników symulacji numerycznych, tym większy koszt obliczeń potrzebnych do jej uzyskania, często niemożliwy do zaakceptowania w praktyce.

Wyniki symulacji komputerowych zwykle nie do końca pokrywają się z rzeczywistością. Przyczyn może być kilka: nieprawidłowy model matematyczny, niedokładne wartości parametrów materiałowych czy wreszcie błąd metody przybliżonego rozwiązania (dykretyzacji) oraz błąd zaokrągleń związany z kompu-

terową realizacją obliczeń na liczbach rzeczywistych. Tutaj rozważany jest jedynie błąd dyskretyzacji przy założeniu, że model matematyczny i własności materiałowe wystarczająco wiernie opisują rzeczywistość, oraz że pozostałe składniki błędu rozwiązania przybliżonego, takie jak błąd całkowania czy błąd rozwiązania układu równań liniowych, mają w nim pomijalnie mały udział.

Błąd dyskretyzacji maleje wraz ze zmniejszeniem wielkości elementu skończonego, wzrostem stopnia lokalnych funkcji interpolacyjnych i zmniejszeniem wielkości kroku czasowego. W przypadku zagadnienia krzepnięcia obecność dużych prędkości stygnięcia oraz dużych gradientów temperatury pociąga za sobą konieczność stosowania bardzo drobnej dyskretyzacji czasoprzestrzennej w celu uzyskania rozwiązania obciążonego małym błędem. Jednak im drobniejsza dyskretyzacja, tym większa jest liczba stopni swobody (niewiadomych zadania) do wyznaczenia i symulacje stają się coraz bardziej kosztowne pod względem czasu obliczeń oraz wymagań co do pamięci operacyjnej komputera. Zwykle więc albo siatka i krok czasowy są zbyt drobne i uzyskane wielkim kosztem rozwiązanie charakteryzuje się dokładnością większą niż wymagana, albo błąd uzyskanego niewielkim kosztem rozwiązania jest nieakceptowalnie duży na zbyt zgrubnej dyskretyzacji. Celowe jest automatyczne dostosowywanie dyskretyzacji do rozwiązania tak, aby siatka była zagęszczona jedynie w miejscach, które tego wymagają, a krok czasowy zmieniał się w czasie trwania procesu stosownie do jego warunków.

Celem metod adaptacyjnych jest więc optymalizacja procesu obliczeniowego, prowadząca do uzyskania możliwie najlepszych wyników jak najmniejszym kosztem. Dzięki wykorzystaniu ilościowego opisu dokładności wyników obliczeń (oszacowania błędu a posteriori) poprawia się niezawodność metody, co pozwala na utrzymywanie nieuniknionego błędu obliczeń poniżej pewnego założonego poziomu dopuszczalnego, równego np. 1 % nieznanego rozwiązania dokładnego. Wyraźnie lepsza staje się również wydajność obliczeń, co umożliwi bądź osiągnięcie znacznie wyższej dokładności kosztem porównywalnym z kosztem obliczeń tradycyjnych, bądź osiągnięcie porównywalnej dokładności znacznie mniejszym kosztem.

W dalszej części artykułu przedstawiono model matematyczny krzepnięcia, metodę rozwiązania przybliżonego, metody szacowania błędu dyskretyzacji przestrzennej oraz błędu całkowania po czasie, techniki adaptacji siatki i kroku czasowego oraz wyniki symulacji pokazujące korzyści płynące z zastosowania podejścia adaptacyjnego.

## 2. OPIS MATEMATYCZNY KRZEPNIĘCIA STOPU

Rozważmy zagadnienie poszukiwania rozkładu temperatury  $T(x,y,t)$  w ciele, w którym może zachodzić przemiana fazowa ciecz-ciało stałe. Krzepnięcie rozpoczyna się w temperaturze likwidus  $T_L$ , a kończy w temperaturze solidus  $T_S$  lub temperaturze eutektycznej  $T_E$ , zależnie od stężenia składnika stopowego oraz warunków procesu. Niech  $\Omega \subset \mathbf{R}^2$  będzie obszarem dwuwymiarowym o brzegu  $\Gamma$ . Pole temperatury w chwili  $t$  w dowolnym punkcie  $(x, y) \in \Omega$  ciała scharakteryzowanego przez współczynnik przewodności cieplnej  $\lambda$ , ciepło właściwe  $c$ , gęstość  $\rho$  oraz utajone ciepło krzepnięcia  $L$  można opisać równaniem

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (\lambda \nabla T) = \rho_s L \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad \text{w } \Omega, \quad t > 0, \quad (1)$$

gdzie  $f_s \in [0,1]$  jest udziałem fazy stałej, zdefiniowanym jako stosunek objętości fazy zakrzepłej zawartej w pewnej rozważanej objętości do tej objętości, a indeks ( $s$ ) odpowiada fazie stałej. Między ciekłym i zakrzepłym stopem rozciąga się obszar dwufazowy, zwany również przejściowym (ang. *mushy zone*), w którym  $f_s \in [0,1]$ .

W chwili  $t = 0$  określone są warunki początkowe

$$T(x, y, 0) = T_0(x, y) \quad \text{w } \Omega, \quad (2)$$

odpowiadające temperaturze wstępnego nagrzania formy i temperaturze zalewania.

Na brzegu  $\Gamma = \Gamma_I \cup \Gamma_{II} \cup \Gamma_{III} \cup \Gamma_{IV}$  określone mogą być następujące warunki brzegowe

$$T = \hat{T} \quad \text{na } \Gamma_I, \quad (3)$$

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = \hat{q}_n \quad \text{na } \Gamma_{II}, \quad (4)$$

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = \alpha (T - T_\infty) \quad \text{na } \Gamma_{III}, \quad (5)$$

$$\mathbf{q}^{(o)} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{q}^{(f)} \cdot \mathbf{n} = k (T^{(o)} - T^{(f)}) \quad \text{na } \Gamma_{IV}, \quad (6)$$

gdzie  $\mathbf{q} = -\lambda \nabla T$  jest strumieniem cieplnym,  $\mathbf{n}$  jest jednostkowym wektorem normalnym skierowanym na zewnątrz brzegu,  $\hat{T}$  jest zadaną temperaturą brzegową,  $\hat{q}_n$  jest zadanym strumieniem normalnym do brzegu,  $T_\infty$  jest temperaturą otoczenia,  $T^{(o)}$  i  $T^{(f)}$  są temperaturami brzegowymi odlewu i formy,  $\mathbf{q}^{(o)}$  i  $\mathbf{q}^{(f)}$  są strumieniami cieplnymi przepływającymi przez brzegi odpowiednio odlewu i formy, a  $\alpha$  i  $k$  to współczynniki wymiany ciepła. Warunek brzegowy (6) opisuje nieidealny kontakt na granicy między formą i odlewem, objawiający się nieciągłością pola temperatury  $T^{(o)} \neq T^{(f)}$ .

W sformułowaniach entalpowych zagadnienia źró-

dło ciepła ukryte jest w definicji entalpii stopu. W pracy tej zastosowano jawne sformułowanie pojemnościowe

$$c^* \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (\lambda \nabla T) = 0 \quad \text{w } \Omega, \quad t > 0, \quad (7)$$

gdzie  $c^* = dH/dT$  jest zastępczą pojemnością cieplną. Warunki brzegowe i początkowe są takie same jak dla równania (1).

Zależność entalpii od temperatury w przedziale temperatur krzepnięcia jest nieliniowa (Sczygiol, 2000). W niniejszej pracy jest ona przybliżona rozkładem odcinkami parabolicznym z ciągłością pochodnej (zastępczej pojemności cieplnej) oraz entalpii w temperaturach  $T_S$  i  $T_L$ . Dwie parabole oraz ich pochodne są zgodne w pewnej temperaturze pośredniej. Daje to odcinkami liniową zmienność zastępczej pojemności cieplnej w przedziale temperatur krzepnięcia.

Słabe lub wariacyjne sformułowanie zagadnienia jest wygodnym punktem wyjścia dla przybliżonych metod rozwiązania, takich jak np. metoda elementów skończonych. Celem jest znalezienie temperatury  $T \in V \equiv H^1(\Omega)$  spełniającej warunek

$$B(T, v) = L(v) \quad \forall v \in V, \quad (8)$$

gdzie

$$B(u, v) = \left( c^* \frac{\partial u}{\partial t}, v \right) + B_E(u, v) + B_\Gamma(u, v), \quad (9)$$

$$B_E(u, v) = \int_{\Omega} \lambda \nabla u \cdot \nabla v \, dx \, dy,$$

$$B_\Gamma(u, v) = \int_{\Gamma_{III}} \alpha u v \, ds + \int_{\Gamma_{II}^{(o)}} k (u^{(o)} - u^{(f)}) v \, ds + \int_{\Gamma_{II}^{(f)}} k (u^{(f)} - u^{(o)}) v \, ds, \quad (10)$$

$$L(v) = - \int_{\Gamma_{II}} \hat{q}_n v \, ds + \int_{\Gamma_{III}} \alpha T_\infty v \, ds.$$

### 3. ROZWIĄZANIE PRZYBLIŻONE

Rozwiązanie przybliżone zagadnienia (8) poszukiwane jest w przestrzeni funkcyjnej o skończonej liczbie wymiarów, będącej podprzestrzenią  $H^1(\Omega)$ . Niech  $P_h$  określa podział obszaru  $\Omega$  na nie nachodzące na siebie trójkąty  $K$  o wielkości  $h_K$  i z liniową interpolacją rozwiązania. Wtedy odpowiednią przestrzeń funkcyjną metody elementów skończonych określić można jako

$$V_h = \left\{ v \in H^1(\Omega) : v \in C^0(\Omega), v|_K \in P_1(\Omega_K), \forall K \in P_h \right\}.$$

Zadanie jest następujące: znajdź  $T_h \in V_h$ , takie że

$$B(T_h, v_h) = L(v_h) \quad \forall v_h \in V_h. \quad (11)$$

Zastosowanie metody Galerkinia daje dyskretyzację przestrzenną zagadnienia (11) w postaci

$$\mathbf{M} \frac{d\mathbf{T}}{dt} + \mathbf{K}\mathbf{T} = \mathbf{b}, \quad (12)$$

gdzie  $\mathbf{M}$  jest macierzą pojemności,  $\mathbf{K}$  jest macierzą przewodności, a  $\mathbf{b}$  uwzględnia naturalne warunki brzegowe. Układ równań różniczkowych (12) jest następnie dyskretyzowany w czasie za pomocą schematu wstecznego Eulera, co daje dla każdego przedziału  $I_k = (t_k, t_{k+1})$  o długości  $\Delta t_k = t_{k+1} - t_k$  układ równań algebraicznych

$$(\mathbf{M}_{k+1} + \Delta t_k \mathbf{K}_{k+1}) \mathbf{T}_{k+1} = \mathbf{M}_{k+1} \mathbf{T}_k + \Delta t_k \mathbf{b}_{k+1}. \quad (13)$$

Z uwagi na możliwą zależność własności materiałowych od temperatury jest to układ równań nieliniowych. Układy równań liniowych powstałe w wyniku jego linearyzacji rozwiązywane są za pomocą jednej z metod iteracyjnych, a mianowicie metody podwójnie sprzężonych gradientów (BiCG) z diagonalną poprawą uwarunkowania wstępnego. Okazuje się, że liczba wymaganych iteracji jest niewielka i rozwiązanie układu uzyskiwane jest bardzo szybko. Prowadzi to do wysokich wymagań co do efektywności procedur szacowania błędów i adaptacji siatki, ich koszt nie powinien być bowiem większy od kosztu uzyskania samego rozwiązania.

### 4. SZACOWANIE BŁĘDU ROZWIĄZANIA PRZYBLIŻONEGO

Oszacowania błędów rozwiązania są podstawą algorytmu adaptacyjnego. To na ich podstawie dokonuje się ocena dokładności rozwiązania oraz, w przypadku rozwiązania niewystarczająco dokładnego, dobór nowych parametrów dyskretyzacji.

W pracy tej założono, że rzeczywisty błąd rozwiązania może być rozdzielony na część pochodzącą od dyskretyzacji przestrzennej i od całkowania po czasie. Do adaptacji siatki elementów skończonych używa się odpowiednio przystosowanych estymatorów błędów rozwiązania dla zagadnień opisanych równaniami eliptycznymi, takich jak estymator Zienkiewicza i Zhu (1992) oraz estymator residualny (Johnson i Hansbo, 1992). Dobór kroku czasowego odbywa się natomiast na podstawie zaadoptowanej metody szacowania lokalnego błędów obciążenia całkowania równań różniczkowych zwyczajnych (Mahnken i Stein, 1989).

#### 4.1. Szacowanie błędów metodą Zienkiewicza i Zhu

Błąd rozwiązania przybliżonego w normie energetycznej jest związany z formą dwuliniową obecną

w wariacyjnym sformułowaniu zagadnienia (8) zależnością

$$\|e\|_{E(\Omega)}^2 = B_E(e, e) = \int_{\Omega} \lambda \nabla(T - T_h) \cdot \nabla(T - T_h) dx dy = \int_{\Omega} 1/\lambda (\mathbf{q} - \mathbf{q}_h) \cdot (\mathbf{q} - \mathbf{q}_h) dx dy. \quad (14)$$

Definicja ta jest bezużyteczna w praktyce, ponieważ, poza trywialnymi przypadkami, nieznanym jest dokładny, rzeczywisty strumień ciepła  $\mathbf{q}$ .

Do znalezienia oszacowania  $E$  błędu w normie energetycznej zastosować można podejście wprowadzone przez Zienkiewicza i Zhu (1987), w którym w miejsce nieznanego dokładnego strumienia  $\mathbf{q}$  podstawia się wielkość  $\mathbf{q}^*$  będącą jego przybliżeniem, tak więc

$$\|e\|_E^2 \approx E^2 = \int_{\Omega} 1/\lambda (\mathbf{q}^* - \mathbf{q}_h) \cdot (\mathbf{q}^* - \mathbf{q}_h) dx dy = \sum_{K \in P_h} \int_{\Omega_K} 1/\lambda (\mathbf{q}^* - \mathbf{q}_h) \cdot (\mathbf{q}^* - \mathbf{q}_h) dx dy = \sum_{K \in P_h} E_K^2, \quad (15)$$

gdzie  $E_K$  jest wkładem elementu skończonego  $K$  do globalnego błędu, będącym *wskaźnikiem błędu*. Zazwyczaj można utożsamiać go z oszacowaniem błędu lokalnego  $\|e\|_{E(\Omega_K)}$ .

Aby estymator (15), zwany estymatorem Zienkiewicza i Zhu lub estymatorem ZZ, dawał dobre wyniki, strumień  $\mathbf{q}^*$  musi charakteryzować się większą dokładnością, niż nieciągły na granicach elementów skończonych strumień  $\mathbf{q}_h = -\lambda \nabla T_h$ , otrzymany bezpośrednio z rozwiązania. Strumień  $\mathbf{q}_h$  jest odcinkami stały w przypadku zastosowania liniowych funkcji interpolacyjnych, a szybkość redukcji jego błędu przy zagęszczeniu siatki jest niższa niż rozwiązania podstawowego  $T_h$ . Jeśli dla wielomianowych funkcji interpolacyjnych stopnia  $p$  rozwiązanie  $T_h$  charakteryzuje błąd globalny w normie  $L_2$  rzędu  $O(h^{p+1})$ , to błąd pochodnej jest już rzędu  $O(h^p)$ . Okazuje się jednak, że w pewnych punktach elementu skończonego wartość strumienia  $\mathbf{q}_h$  jest bardzo bliska wartości dokładnej, np. w środku elementu jednowymiarowego stopnia pierwszego lub w środku ciężkości liniowego elementu trójkątnego. Właśnie na podstawie wartości strumienia w tych punktach, zwanych punktami optymalnymi, można otrzymać wyższego rzędu ciągły strumień  $\mathbf{q}_h^*$  w całym analizowanym obszarze. Proces ten nazywa się czasem *odzyskiwaniem gradientu* (ang. *gradient recovery*) (Ainsworth i Oden, 2000).

W pracy tej wykorzystywana jest metoda *nadzbieżnego odzyskiwania z łatek* elementów (ang. *superconver-*

*gent patch recovery*, w skrócie SPR) (Zienkiewicz i Zhu, 1992), w której poszukiwanie ulepszonych wartości gradientu odbywa się na drodze rozwiązania lokalnych zagadnień na łatach elementów. Łata elementów  $P_N$  skojarzoną z węzłem  $N$  określa się zbiór elementów, które zawierają ten węzeł. Istota metody polega na lokalnym dopasowaniu za pomocą metody najmniejszych kwadratów wielomianu aproksymacyjnego wyższego stopnia do wartości strumienia  $\mathbf{q}_h$  próbkowanych w punktach optymalnych w obszarze łaty. Celem jest więc znalezienie współczynników  $\mathbf{a}$  wielomianu aproksymującego strumień na obszarze łaty związanej z węzłem  $N$

$$\hat{\mathbf{q}}^*(x, y) = \mathbf{P}(x, y) \mathbf{a}, \quad (x, y) \in P_N, \quad (16)$$

gdzie  $\mathbf{P}(x, y)$  jest macierzą wyrazów wielomianu interpolacyjnego. Aby wyznaczyć wartości współczynników należy znaleźć minimum wyrażenia

$$\Pi(\mathbf{a}) = \sum_{K \in P_N} [\mathbf{P}(x_K, y_K) \mathbf{a} - \mathbf{q}_h(x_K, y_K)] \cdot [\mathbf{P}(x_K, y_K) \mathbf{a} - \mathbf{q}_h(x_K, y_K)]. \quad (17)$$

Wyrażenie (17) osiąga minimum, gdy  $\partial \Pi(\mathbf{a}) / \partial \mathbf{a} = 0$ , czyli gdy

$$\left\{ \sum_{K \in P_N} \mathbf{P}(x_K, y_K)^T \mathbf{P}(x_K, y_K) \right\} \mathbf{a} = \sum_{K \in P_N} \mathbf{P}(x_K, y_K)^T \mathbf{q}_h(x_K, y_K), \quad (18)$$

co pozwala wyznaczyć współczynniki na drodze rozwiązania niewielkiego układu równań.

Wartości odzyskanego strumienia  $\hat{\mathbf{q}}^*$  wyliczone w poszczególnych węzłach łaty z wzoru (16) są zapamiętywane w celu wykorzystania do późniejszej interpolacji w obszarze elementów z wykorzystaniem ich funkcji kształtu. Ponieważ węzły wewnętrzne siatki należą dodatkowo do kilku łatek związanych z sąsiednimi węzłami, zapamiętywana jest wartość średnia  $\hat{\mathbf{q}}_{sr}^*$  strumienia wyznaczona na podstawie wartości z wszystkich łatek zawierających dany węzeł. Ostatecznie więc odzyskany strumień  $\mathbf{q}^*$  jest interpolowany w obszarze elementu następująco

$$\mathbf{q}^*(x, y) = \sum_{i=1}^3 \Psi_i(x, y) \hat{\mathbf{q}}_{sr}^*(x_i, y_i), \quad (19)$$

gdzie  $\Psi_i$  to funkcje kształtu.

Odzyskany strumień cieplny  $\mathbf{q}^*$  może być podstawiony do wzoru (15) na oszacowanie błędu. Ponieważ w ogólnym przypadku stopień wielomianu określającego odzyskany strumień jest taki sam, jak stopień

$p$  wielomianu interpolującego temperaturę, to do całkowania numerycznego należy zastosować kwadraturę pozwalającą obliczyć dokładną wartość całki z wielomianu stopnia co najmniej  $2p$ . Reguła ta jest prawdziwa przy założeniu stałej wartości parametru materiałowego  $\lambda$ . Tak więc w przypadku wykorzystywanych w pracy elementów liniowych przyjęto kwadraturę trójpunktową z punktami całkowania o współrzędnych powierzchniowych  $(2/3, 1/6, 1/6)$ ,  $(1/6, 2/3, 1/6)$  i  $(1/6, 1/6, 2/3)$  z wagą  $1/3$  każdy. Całka liczona z jej pomocą jest obciążona niewielkim błędem pochodzącym z pominięcia faktycznej zmienności współczynnika przewodności cieplnej – przyjmowana jest bowiem wartość obliczona dla średniej temperatury w rozważanym elemencie skończonym.

#### 4.2. Szacowanie błędu metodą residualną

Inna klasa metod szacowania błędu opiera się na wyznaczaniu norm residuum rozwiązywanego równania różniczkowego. Jeśli do obliczenia oszacowania wystarczy w bezpośredni sposób skorzystać jedynie z rozwiązania przybliżonego oraz danych zadania, to estymator określany jest jako jawny. Jeżeli natomiast obliczenie oszacowania pociąga za sobą konieczność rozwiązania dodatkowego zadania, estymator określany jest jako niejawny (Ainsworth i Oden, 2000).

W celu znalezienia oszacowania błędu w normie energetycznej zastosowane zostało podejście wprowadzone przez Johnsona i Hansbo (1992). Punktem wyjścia jest równanie błędu

$$B(e, v) = L(v) - B(T_h, v) \quad \forall v \in V \quad (20)$$

otrzymane przez podstawienie  $T = T_h + e$  do równania (8). Ponieważ błąd  $e \in V(\Omega)$ , więc

$$B(e, e) = L(e) - B(T_h, e), \quad (21)$$

gdzie

$$B(e, e) = \left( c^* \frac{\partial e}{\partial t}, e \right) + B_E(e, e) + B_\Gamma(e, e). \quad (22)$$

Jeśli przyjąć dla uproszczenia, że  $\partial e / \partial t \approx 0$  oraz że  $B_E(e, e) \approx 0$ , to po lewej stronie równania (21) pozostaje jedynie  $B_E(e, e)$  równe z definicji  $\|e\|_{E(\Omega)}^2$ . Zadanie sprowadza się więc do znalezienia oszacowania jego prawej strony.

Przedstawienie każdej z całek występujących w równaniu (21) jako sumy wkładów z poszczególnych elementów, zastosowanie twierdzenia Greena do składnika zawierającego  $\nabla e$ , rozbiecie całek brzegowych na części odpowiadające brzegom obszaru oraz krawędziom wewnętrznym elementów oraz przegrupowanie wyrazów daje

$$\begin{aligned} \|e\|_{E(\Omega)}^2 &= \sum_{K \in P_h} \int_{\partial\Omega_K \cap \Gamma_N} (\mathbf{q}_h \cdot \mathbf{n} - q_n(T_h)) e \, ds + \\ &\sum_{K \in P_h} \int_{\partial\Omega_K, \Gamma} \frac{1}{2} [\mathbf{q}_h \cdot \mathbf{n}] e \, ds + \\ &\sum_{K \in P_h} \int_{\Omega_K} \left( \nabla \cdot (\lambda \nabla T_h) - c^* \frac{\partial T_h}{\partial t} \right) e \, dx \, dy, \quad (23) \end{aligned}$$

gdzie  $\Gamma_N$  oznacza brzegi, na których założono naturalne warunki brzegowe,  $q_n(T_h)$  oznacza wymuszoną normalną składową strumienia cieplnego na brzegu, a  $[\mathbf{q}_h \cdot \mathbf{n}]$  jest wielkością nieciągłości (uskuoku) normalnej składowej strumienia cieplnego na krawędzi elementu.

Wyrażenia podcałkowe zawierają residua, a więc wielkości mówiące w jakim stopniu równanie różniczkowe i warunki brzegowe nie są spełnione przy podstawieniu do nich  $T_h$  w miejsce  $T$ . Oczywiście w przypadku, gdy  $T_h$  jest rozwiązaniem dokładnym, residua zerują się. Po wprowadzeniu odpowiednich oznaczeń *residuum wewnętrznego*  $r$  i *residuum brzegowego*  $R$ , związanych z elementem  $K \in P_h$ , równanie (23) upraszcza się do

$$\|e\|_{E(\Omega)}^2 = \sum_{K \in P_h} \int_{\Omega_K} r e \, dx \, dy + \sum_{K \in P_h} \int_{\partial\Omega_K} R e \, ds. \quad (24)$$

Korzystając z cechy ortogonalności Galerkinia  $B_E(e, v_h) = 0$  i przyjmując  $v_h = -\pi_h e \in V_h$ , gdzie  $\pi_h$  jest pewnym operatorem interpolacyjnym, otrzymuje się

$$\begin{aligned} \|e\|_{E(\Omega)}^2 &= B_E(e, e) = B_E(e, e) - B_E(e, \pi_h e) = \\ &B_E(e, e - \pi_h e), \quad (25) \end{aligned}$$

stąd

$$\begin{aligned} \|e\|_{E(\Omega)}^2 &= \sum_{K \in P_h} \int_{\Omega_K} r (e - \pi_h e) \, dx \, dy + \\ &\sum_{K \in P_h} \int_{\partial\Omega_K} R (e - \pi_h e) \, ds. \quad (26) \end{aligned}$$

Zastosowanie nierówności trójkąta, nierówności Cauchy'ego i Schwarz'a, wprowadzenie oszacowań błędu interpolacji wielomianowej  $\pi_h$  oraz wykorzystanie nierówności Cauchy'ego i Schwarz'a dla sum daje ostatecznie oszacowanie w postaci

$$\begin{aligned} \|e\|_{E(\Omega)} &\leq E = \left( \sum_{K \in P_h} C_{i,1,K}^2 h_K^2 \|r\|_{L_2(\Omega_K)}^2 \right)^{1/2} + \\ &\left( \sum_{K \in P_h} C_{i,2,K}^2 h_K \|R\|_{L_2(\partial\Omega_K)}^2 \right)^{1/2}, \quad (27) \end{aligned}$$

gdzie  $C_{i,1,K} = \sqrt{\lambda_K^{-1}} C_{i,1}$ ,  $C_{i,2,K} = \sqrt{\lambda_K^{-1}} C_{i,2}$ , a  $C_{i,1}$  i  $C_{i,2}$  to stałe interpolacyjne, których wartości można oszacować numerycznie (Johnson i Hansbo, 1992). Tak więc do oszacowania błędu  $E$  w normie energetycznej konieczne jest jedynie obliczenie norm residuów wewnętrznych i brzegowych w poszczególnych elementach skończonych. Jest to estymator jawny charakteryzujący się dużą prostotą i niskim narzutem obliczeń. Znak „mniejsze bądź równe” w oszacowaniu (27) oznacza, że zawsze należy liczyć się z możliwością przeszacowania błędu.

Residuum wewnętrzne  $\nabla(\lambda \nabla T_h)$  równania różniczkowego krzepnięcia zawiera człon z pochodną czasową temperatury. Dla stosunkowo dużych kroków czasowych może on znacznie dominować nad członem uwzględniającym co sprawia, że residuum wewnętrzne nie maleje przy zagęszczaniu siatki. Z tego powodu w pracy tej pomija się residuum wewnętrzne w obliczeniach, co daje niepełne oszacowanie błędu

$$E_R = \left( \sum_{K \in P_h} C_{i,2,K}^2 h_K \|R\|_{L_2(\partial\Omega_K)}^2 \right)^{1/2} \quad (28)$$

oraz odpowiadający mu wskaźnik błędu

$$E_{R,K} = C_{i,2,K} h^{1/2}_K \|R\|_{L_2(\partial\Omega_K)} \quad (29)$$

Okazuje się, że również ten uproszczony estymator błędu ma bardzo dobre właściwości (Nagórka i Szczygiol, 2003). Dodatkowo posiada on oczywistą zaletę w postaci niższego narzutu obliczeniowego.

### 4.3. Szacowanie błędu całkowania po czasie

Istotą zastosowanej metody szacowania lokalnego błędu całkowania po czasie jest wykorzystanie rozwiązania pomocniczego, uzyskanego z mniejszym krokiem czasowym. Załóżmy, że dysponujemy rozwiązaniem  $T_{h,0,5\Delta t}(t_{k+1})$  uzyskanym w dwóch krokach o długości  $\Delta t_k/2$ , czyli w przedziałach czasu  $[t_k, t_k + 1/2\Delta t_k]$  oraz  $[t_k + 1/2\Delta t_k, t_k]$ . Błąd obciążenia w przedziale  $I_k$  dla w ten sposób uzyskanego rozwiązania jest w przybliżeniu równy sumie błędów obciążenia z poszczególnych, węższych przedziałów

$$e_{0,5\Delta t, I_k} = T_{ref}(t_{k+1}) - T_{h,0,5\Delta t} \approx$$

$$2 \frac{1}{(n+1)!} \left( \frac{\Delta t_k}{2} \right)^{n+1} T^{(n+1)}(t_k), \quad (30)$$

gdzie  $T_{ref}$  jest rozwiązaniem odniesienia, obliczonym z drobniejszym krokiem czasowym i przy założeniu, że  $T_{ref}(t_k) = T_{h,0,5\Delta t}(t_k)$ ,  $n$  to rząd metody a oznacza  $m$

tą pochodną czasową rozwiązania przybliżonego.

Szacowany błąd obciążenia dla całkowania z krokiem  $\Delta t_k$  jest zdefiniowany jako

$$e_{\Delta t, I_k} = T_{ref}(t_{k+1}) - T_{h,\Delta t} \approx \frac{1}{(n+1)!} \Delta t_k^{n+1} T^{(n+1)}(t_k). \quad (31)$$

Przy założeniu zgodności pochodnych czasowych rozwiązań uzyskanych z krokiem  $\Delta t_k$  i  $\Delta t_{k/2}$  z równań (30) i (31) wyznaczyć można oszacowanie

$$e_{\Delta t, I_k} \approx E_t = \frac{2^n (T_{h,0,5\Delta t} - T_{h,\Delta t})}{2^n - 1}. \quad (32)$$

W przypadku zastosowanego w niniejszej pracy schematu wstecznego Eulera oszacowanie błędu obciążenia redukuje się do

$$e_{\Delta t, I_k} \approx E_t = 2 (T_{h,0,5\Delta t} - T_{h,\Delta t}). \quad (33)$$

Technika ta daje oszacowanie błędu obciążenia w punkcie, wygodniej jest jednak posługiwać się normą  $L_2$  uwzględniającą jego zmienność w obszarze elementu skończonego, bądź w całym rozważanym obszarze:

$$\|e_{\Delta t, I_k}\|_{L_2(\Omega)}^2 = \sum_{K \in P_h} \|e_{\Delta t, I_k}\|_{L_2(\Omega_K)}^2 = \sum_{K \in P_h} \int_{\Omega_K} e^2_{\Delta t, I_k} dx dy.$$

Ponieważ zarówno temperatura  $T_{h,\Delta t}$ , jak i wyznaczona z mniejszym krokiem czasowym temperatura  $T_{h,0,5\Delta t}$  interpolowane są za pomocą funkcji tego samego stopnia  $p$ , do numerycznego wyznaczenia całki potrzebna jest kwadratura dokładnie całkująca wielomian stopnia co najmniej  $2p$ . W przypadku zastosowanych w niniejszej pracy elementów liniowych wystarczy kwadratura trójpunktowa wspomniana w punkcie 4.1.

Niewątpliwą wadą metody jest konieczność powtórnego rozwiązywania problemu w dwóch drobniejszych krokach jedynie po to, aby znaleźć oszacowanie błędu. Nic jednak nie stoi na przeszkodzie, aby uzyskane rozwiązanie pomocnicze  $T_{h,0,5\Delta t}$ , charakteryzujące się wyższą dokładnością, wykorzystać dalej zamiast rozwiązania  $T_{h,\Delta t}$ , którego błąd był szacowany. Ponadto, mimo narzutu związanego z koniecznością dodatkowych obliczeń zastosowanie adaptacji kroku czasowego na podstawie tych oszacowań pozwala w konsekwencji skrócić sumaryczny czas obliczeń.

## 5. ADAPTACJA SIATKI

Dostosowywanie siatki to drugi, po szacowaniu *a posteriori* błędu, kluczowy składnik adaptacyjnej metody elementów skończonych. Mając rozkład oszacowanego w pewnej normie błędu rozwiązania otrzymanego na pewnej siatce, obliczenia można powtórzyć na dyskretyzacji zmodyfikowanej tak, aby błąd no-

wego rozwiązania był mniejszy i bardziej równomiernie rozłożony.

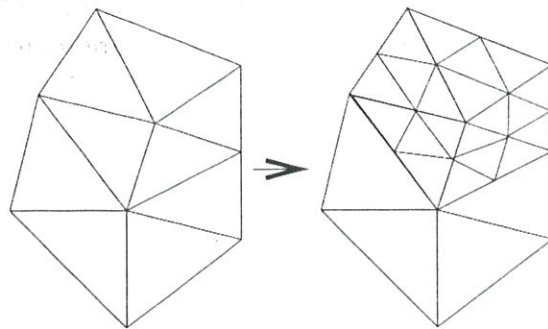
Zadania nieustalone wymagają użycia jednej z metod całkowania po czasie, prowadzącej do sekwencji zadań, których celem jest znalezienie rozwiązania na kolejnych poziomach czasu. Wtedy wspomniany wyżej algorytm adaptacyjny rozważać należy w ramach pojedynczego kroku czasowego. Obliczenia w ramach wybranego kroku czasowego prowadzone są z wykorzystaniem rozkładu temperatury z kroku poprzedniego. Dopuszczenie adaptacji prowadzi zawsze do niezgodności siatek odpowiadających poprzedniemu i aktualnemu poziomowi czasu. Konieczne jest więc zastosowanie procedury *przeniesienia rozwiązania* z jednej siatki na inną, przy możliwej do wystąpienia różnicy wielkości i stopni elementów skończonych.

W pracy tej zastosowano metodę adaptacji siatki przez podział elementu na drobniejsze. Technika ta ma lokalny charakter i polega na wstawieniu trzech nowych węzłów zlokalizowanych w środkach każdego z jego boków (rysunek 1a). W wyniku ich połączenia w miejsce elementu dzielonego powstają cztery mniejsze elementy skończone o takich samych kątach wierzchołkowych. Jest to ważna cecha, zapobiegająca powstawaniu silnie zdeformowanych elementów o małym kącie wierzchołkowym. Rozdrabnianie elementu w ten sposób ma charakter izotropowy.

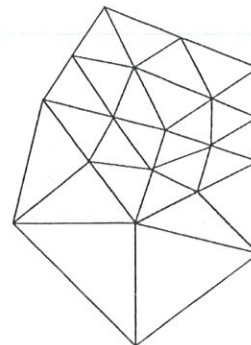
Aby uniknąć konieczności wprowadzania do układów równań ograniczeń związanych z występowaniem *wiszących węzłów* (węzłów leżących na środkach boków sąsiednich nierozdrabnianych elementów) zastosowano procedurę ich eliminacji. Polega ona na połączeniu wiszącego węzła z wierzchołkiem trójkąta leżącym na przeciwko bokowi, na którym ten węzeł leży, co prowadzi do utworzenia dwóch *elementów przejściowych* w miejsce jednego usuniętego. (rysunek 1b).

Jeśli szacowany błąd w pewnej części siatki jest znacznie mniejszy niż dopuszczalny, a miejsca ze zbyt dużym błędem wymagają przeprowadzenia następnej iteracji procedury adaptacyjnej, możliwe jest wprowadzenie lokalnego rozrzedzenia siatki. Sytuacja taka wystąpić może np. przy przejściu do następnego kroku czasowego w zagadnieniach zależnych od czasu lub przy przejściu do następnej iteracji metody rozwiązywania układów równań nieliniowych. W zadaniach ustalonych możliwe jest natomiast wprowadzenie nadmiernego rozdrobnienia siatki w pierwszej iteracji algorytmu adaptacyjnego, spowodowane zbyt pesymistycznie oszacowanym błędem na początkowej zgrubnej siatce elementów skończonych. Technika adaptacji przez podział w naturalny sposób umożliwia rozrzedzanie siatki, jednak tylko w tych miejscach, w których wcześniej siatka została zagęszczona. Z punktu widzenia implementacji wymaga to utrzymywania hierarchicznej, drzewiastej struktury

a)



b)



Rysunek 1. Technika adaptacji siatki a) podział elementu trójkątnego na cztery mniejsze, b) likwidacja wiszących węzłów.

Figure 1. Mesh refinement technique a) subdivision of a triangular element into four smaller ones, b) elimination of hanging nodes.

danych, reprezentującej zależności rodzic - dziecko między elementami dzielonymi i powstałymi w wyniku podziału

Wprowadzenie zmian do siatki elementów skończonych w celu poprawy dokładności rozwiązania w następnej iteracji algorytmu adaptacyjnego wymaga przyjęcia odpowiedniej strategii wyboru tych stref w siatce, które wymagają zmiany. Od liczby elementów zaznaczonych do podziału lub rozrzedzenia zależy efektywność obliczeń. Im więcej elementów zostanie zaznaczonych do rozdrobnienia po danej iteracji procedury adaptacyjnej, tym większa będzie redukcja błędu w iteracji następnej. Założony graniczny dopuszczalny błąd względny zostanie dosyć szybko osiągnięty – liczba iteracji będzie niewielka. Prowadzić to może jednak do niepotrzebnego rozdrobnienia siatki w miejscach, które tego nie wymagają, co jest równoznaczne z otrzymaniem nieoptymalnej sekwencji siatek. Z drugiej jednak strony, zaznaczenie do rozdrobnienia zbyt małej liczby elementów pogorszyć może wydajność procesu, co objawi się dużą liczbą iteracji potrzebnych do osiągnięcia błędu mniejszego niż dopuszczalny.

W pracy tej zastosowano strategię ustalonej frakcji, w której do rozrzedzenia przeznaczają się  $\beta_1 \cdot 100\%$

elementów o najmniejszym błędzie, a do rozdrobnienia  $\beta_2 \cdot 100\%$  elementów o największym błędzie, przy czym  $\beta_1$  i  $\beta_2$  to parametry sterujące. Inaczej mówiąc, po posortowaniu elementów rosnąco wg lokalnego wskaźnika błędu siatka będzie rozrzedzona w miejscu pierwszych  $\beta_1 \cdot N_e$  elementów, a do rozdrobnienia przeznaczonych będzie  $\beta_2 \cdot N_e$  elementów z końca listy, gdzie  $N_e$  oznacza liczbę elementów w siatce. W obliczeniach omawianych w dalszej części przyjęto  $\beta_1 = 0$  i  $\beta_2 = 0,6$

Innym zagadnieniem jest dobór kryterium zakończenia iteracyjnego procesu obejmującego rozwiązanie, szacowanie błędu i dostosowanie siatki. Najbardziej naturalne kryterium jest następujące: adaptację siatki można zakończyć, gdy oszacowany w pewnej normie błąd rozwiązania osiąga wartość mniejszą od pewnej założonej wartości dopuszczalnej, np.

$$\|E\| < \eta_h \|T\|. \quad (34)$$

Kryterium to jest odpowiednie w sytuacji, gdy celem adaptacji jest osiągnięcie rozwiązania o założonej wymaganej dokładności możliwie najmniejszym kosztem, proporcjonalnym do liczby niewiadomych zadania  $N$ . Wymaga ono, aby oszacowanie błędu  $E$  charakteryzowało się indeksem efektywności (stosunkiem oszacowania do stanu faktycznego) bliskim 1, co jest prawdą w przypadku metody ZZ, ale nie jest dla jawnej metody residualnej.

Alternatywny warunek zakończenia dotyczy liczby niewiadomych zadania: proces adaptacji można uznać za zakończony, gdy

$$N \geq N_{max}, \quad (35)$$

gdzie  $N_{max}$  jest maksymalną dopuszczalną liczbą stopni swobody, zależną np. od mocy obliczeniowej czy ilości pamięci operacyjnej komputera. Możliwe jest również przyjęcie założonej z góry liczby iteracji procedury adaptacyjnej. Kryterium to jest odpowiednie, gdy celem adaptacji jest osiągnięcie jak najbardziej dokładnych wyników przy ustalonych, ograniczonych zasobach sprzętowych. W tym przypadku znajomość wartości błędu nie jest tak ważna (istotny jest jego rozkład przestrzenny) i przeszacowanie błędu przy użyciu jawnej metody residualnej nie sprawia problemu.

W zadaniach niestabilnych, do których zalicza się również krzepnięcie, opisane wyżej dostosowanie siatki należy zastosować dla poszczególnych kroków czasowych osobno. Można przy tym adaptować siatkę w każdym kroku czasowym lub jedynie w wybranych. Pierwsze podejście w bardziej niezawodny sposób pozwala wychwycić gwałtowną zmienność rozwiązania w czasie i odpowiednio dostosować do niego siatkę, drugie jest na ogół bardziej ekonomiczne.

W przypadku, gdy rozwiązanie tylko nieznacznie zmienia się przy przejściu od jednego poziomu czasu

do drugiego, adaptacja w każdym kroku czasowym może być niepotrzebna. Przykładem są obliczenia krzepnięcia wykonywane z niewielkim krokiem czasowym  $\Delta t$ , gdzie poza początkowym okresem zaraz po zalaniu formy rozkłady temperatury w kolejnych krokach czasowych są podobne.

Iteracyjny proces rozwiązania, szacowania błędu i dostosowywania siatki prowadzi do osiągnięcia w rozważanym kroku pewnej zaadaptowanej siatki końcowej. Siatka ta jest wykorzystywana potem w obejmujących pewną liczbę kroków czasowych obliczeniach nieadaptacyjnych. Dzieje się tak aż do następnego kroku, w którym znowu przeprowadzana jest procedura adaptacyjna.

W pracy tej zastosowano *niejawną* strategię adaptacji dla zadań zależnych od czasu. Jej istota polega na przeprowadzaniu w danym kroku czasowym pełnego iteracyjnego procesu rozwiązania, szacowania błędu i dostosowywania siatki aż do spełnienia kryterium zakończenia, podczas gdy cechą strategii jawnej jest przejście do następnego kroku czasowego już po pierwszym dostosowaniu siatki, bez ponownego rozwiązania zadania na tej siatce. Można wyróżnić dwie wersje strategii niejawnej, a mianowicie wersję, w której siatką wyjściową jest dostosowana siatka z ostatniego adaptacyjnego kroku czasowego, oraz wersję, gdzie siatką wyjściową jest zgrubna siatka początkowa. W pracy tej zastosowano wersję drugą. Za jej wyborem przemawia fakt, że nowe położenie frontów przemiany łatwiej jest odwzorować wykonując kilka iteracji zagęszczania siatki zgrubnej niż adaptacyjnie rozrzedzając i zagęszczając siatkę dostosowaną do rozwiązania z poprzedniego kroku czasowego.

Pierwszym etapem obliczeń w adaptacyjnym kroku czasowym jest więc całkowite rozrzedzenie siatki do stanu początkowego. Pamiętać jednak należy, że rozwiązanie z poprzedniego kroku czasowego będzie używane w schemacie Eulera całkowania po czasie dla kolejnych iteracji algorytmu adaptacyjnego. Nie należy więc przenosić pola temperatury z poprzedniego kroku czasowego na siatkę zgrubną, ponieważ spowodowałoby to zbyt dużą utratę informacji. Rozwiązanie to byłoby bowiem przenoszone z siatki zgrubnej na siatkę z kolejnych iteracji procedury adaptacyjnej. Lepszym rozwiązaniem jest zapamiętanie rozwiązania z poprzedniego kroku czasowego wraz z siatką i przenoszenie go z siatki zapamiętanej na siatkę z aktualnej iteracji algorytmu adaptacyjnego w rozważanym kroku czasowym.

## 6. ADAPTACJA KROKU CZASOWEGO

Zwiększenie wielkości kroku czasowego pozwala znacznie skrócić czas obliczeń. Im większy krok czasowy, tym liczba kroków potrzebna do osiągnięcia



cia czasu końcowego jest mniejsza. Z drugiej strony drobny krok czasowy pozwala uchwycić szybką zmienność rozwiązania, np. temperatury tuż po zalaniu formy.

W niniejszej pracy automatyczny dobór kroku czasowego opiera się na oszacowaniach  $E_t$  błędu obciążenia. Oczekuje się przy tym, że w każdej chwili spełniony będzie następujący warunek na błąd względny

$$\frac{\|E_t\|_{L_2(\Omega)}}{\|\Delta T_k\|_{L_2(\Omega)}} \leq (1 + \alpha) \eta_t, \quad (36)$$

gdzie  $\nu_t$  jest założoną tolerancją błędu,  $\Delta T_k$  oznacza przyrost temperatury a  $\alpha$  jest liczbą nieujemną. Parametr ten wprowadza się w celu niedopuszczenia do odrzucenia wyników z danego kroku czasowego wtedy, gdy błąd dopuszczalny jest tylko nieznacznie przekroczone. W przypadku, gdy  $\alpha = 0$  każde, nawet najmniejsze przekroczenie błędu granicznego prowadzi do powtórzenia obliczeń z nowym krokiem czasowym.

Zastosowana w pracy strategia doboru kroku czasowego jest następująca: Po wyznaczeniu rozwiązania w chwili  $t_{k+1}$  z krokiem  $\Delta t_k^{(i)}$ , gdzie  $i$  oznacza numer iteracji dostosowywania kroku czasowego, szacowany jest względny błąd obciążenia. Jeśli błąd ten jest większy niż  $(1 + \alpha)\eta_t$ , wtedy wyznaczana jest nowa wielkość kroku czasowego  $\Delta t_k^{(i+1)}$  i obliczenia są powtarzane. Ponieważ w ogólnym przypadku błąd obciążenia metody rzędu  $n$  jest proporcjonalny do  $\Delta t_k^{n+1}$ , czyli

$$\frac{\|E_t\|_{L_2(\Omega)}}{(\Delta t_k^{(i)})^{n+1}} = \frac{\eta_t \|\Delta T_k\|_{L_2(\Omega)}}{(\Delta t_k^{(i+1)})^{n+1}}, \quad (37)$$

więc nową wielkość kroku czasowego, prawdopodobnie prowadzącą w następnej iteracji do uzyskania dokładności  $\eta_t$ , można wyznaczyć z wzoru

$$\Delta t_k^{(i+1)} = \Delta t_k^{(i)} \left( \frac{\eta_t \|\Delta T_k\|_{L_2(\Omega)}}{\|E_t\|_{L_2(\Omega)}} \right)^{\frac{1}{n+1}}. \quad (38)$$

Jeśli błąd względny jest mniejszy niż dopuszczalny, obliczeń nie trzeba powtarzać. Z wzoru (38) wyznaczana jest wtedy nowa wielkość kroku czasowego  $\Delta t_{k+1}^{(0)}$ , używana w obliczeniach dla kolejnego przedziału czasu  $I_{k+1}$ .

Schemat ten gwarantuje, że po zakończeniu obliczeń dla przedziału  $I_k$  błąd względny nie będzie większy niż dopuszczalny w sensie (36). Może się natomiast zdarzyć, że będzie on znacznie mniejszy. Nie jest to korzystne, ponieważ nie wykorzystana jest możliwość znacznego wydłużenia kroku czasowego. Z drugiej jednak strony dodatkowym kosztem, po-

trzebnym do przeprowadzenia dodatkowej iteracji z większym krokiem wyznaczonym z zależności (38), uzyskane byłoby mniej dokładne rozwiązanie. Lepiej więc przejść od razu do następnego przedziału czasu.

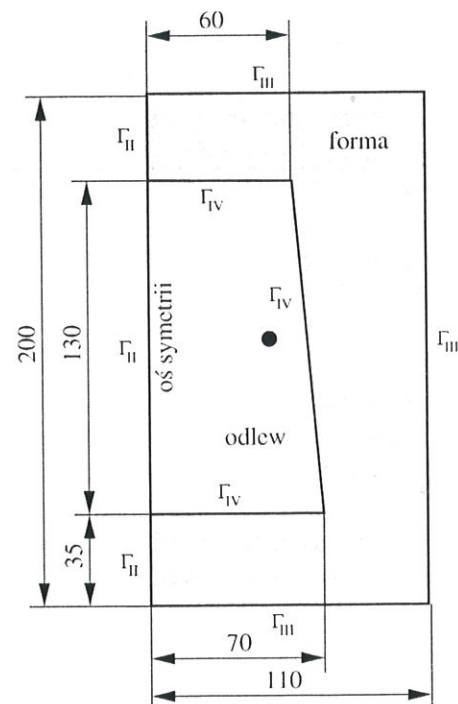
W celu niedopuszczenia do zbyt gwałtownego wzrostu lub zmniejszenia wielkości kroku czasowego wprowadzono dodatkowy warunek nie pozwalający na osiągnięcie kroku mniejszego niż  $0,1\Delta t_k$  lub większego niż  $5\Delta t_k$ . Wprowadzono również minimalną dopuszczalną wielkość kroku czasowego  $\Delta t_{min}$ . Jej osiągnięcie powoduje natychmiastowe przerwanie obliczeń i przejście do następnego przedziału czasu.

Podobnie jak w przypadku adaptacji siatki i tutaj dostosowywanie kroku czasowego można wykonywać co założoną liczbę kroków czasowych. Jednym z etapów procedury adaptacji kroku czasowego może być dostosowywanie siatki przestrzennej opisane wcześniej.

## 7. JAKOŚĆ OSZACOWAŃ BŁĘDU

Aby zbadać dokładność oszacowań błędu dawanych przez poszczególne metody wykonano serię symulacji krzepnięcia dla przykładowego odlewu ze stopu Al-2%Cu krzepnącego w formie metalowej.

Rozważany układ formy i odlewu przedstawiony jest na rysunku 2 (z uwagi na symetrię wystarczy wziąć pod uwagę połowę rzeczywistego układu). Na brzegach oznaczonych jako  $\Gamma_{III}$  występuje wymiana ciepła z otoczeniem, modelowana warunkami brzegowymi trzeciego rodzaju ze współczynnikiem wymiany



Rysunek 2. Geometria układu formy i odlewu.  
Figure 2. Geometry of the mould and of the cast.

ciepła  $\alpha = 100 \text{ W}/(\text{m}^2\text{K})$  przy temperaturze otoczenia  $T_\infty = 300 \text{ K}$ . Na brzegach  $G_{IV}$  ma miejsce nieidealny kontakt między formą i odlewem ze współczynnikiem wymiany ciepła  $k = 1000 \text{ W}/(\text{m}^2\text{K})$ . Pozostałe brzegi, będące osiami symetrii układu, są adiabatyczne.

Symulacja zaczyna się w chwili  $t = 0$ , kiedy cała wnęka formy o temperaturze  $590 \text{ K}$  wypełniona jest ciekłym stopem o temperaturze  $960 \text{ K}$ , znacznie wyższej od temperatury likwidus  $T_L = 926 \text{ K}$ . Przy założeniu równowagowych warunków krzepnięcia temperatura solidus równa jest  $T_S = 886 \text{ K}$ . Własności fizyczne materiałów odlewu i formy zestawiono w tabelicy 1.

Tablica 1. Własności materiałowe odlewu i formy dla przykładowego zadania krzepnięcia

Table 1. Material properties of the cast and of the mould for an example solidification problem

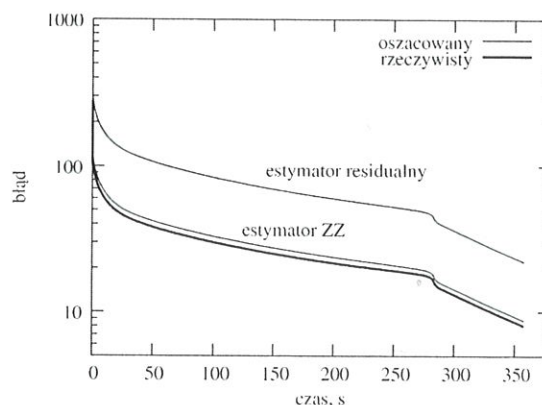
	ciecz	ciało stałe	forma
$\rho [\text{kg}/\text{m}^3]$	2498	2824	7500
$c [\text{J}/(\text{kg K})]$	1275	1077	620
$\lambda [\text{W}/(\text{m K})]$	104	262	40
$L [\text{J}/\text{kg}]$	390000		

Krzepnięcie odlewu kończy się po około pięciu minutach. Wszystkie omawiane dalej symulacje obejmują okres 360 s.

Celem dwóch pierwszych symulacji było określenie charakteru czasowej i przestrzennej zmienności faktycznego błędu dyskretyzacji przestrzennej oraz jego oszacowań metodą ZZ i metodą residualną. Dodatkowo określono faktyczną i szacowaną zbieżność metody, czyli szybkość redukcji błędu przy wzroście liczby niewiadomych. Aby to było możliwe, w wybranych krokach obliczeniowych (co 5 sekund czasu krzepnięcia przy wielkości kroku czasowego  $\Delta t = 0,05 \text{ s}$ ) obliczenia rozpoczynane były na zgrubnej siatce początkowej zawierającej 199 węzłów oraz 300 elementów i sukcesywnie powtarzane na siatkach będących wynikiem jednorodnego zagęszczenia siatki poprzedniej. W każdym z takich kroków wykonywano trzy iteracje rozdrabniania, tak więc obliczenia prowadzone były na siatkach o rozmiarze  $h, 1/2h, 1/4h$  i  $1/8h$ . Ostatecznie uzyskiwano siatkę zawierającą 9978 węzłów i 19200 elementów. W każdej iteracji szacowany był błąd rozwiązania. Dodatkowo wyznaczono przybliżenie błędu faktycznego wg wzoru (14) na podstawie różnicy między danym rozwiązaniem a rozwiązaniem odniesienia uzyskanym na bardzo drobnej siatce. Siatka ta jest wynikiem pięciokrotnego rozdrabniania siatki początkowej i zawiera 155106 węzłów i 307200 elementów o charakterystycznym rozmiarze  $1/32h$ . Należy zaznaczyć, że rozwiązanie odniesienia w chwili  $t_{k+1}$  wyznaczane było przy założeniu jego zgodności z temperatu-

ram  $T_h$  na początku kroku, czyli w chwili  $t_k$ . Tak więc to, co było obliczane, to przybliżenie błędu lokalnego w czasie. Obliczenia dla pośrednich kroków czasowych wykonywane były na siatce o rozmiarze elementów równym  $1/8h$ .

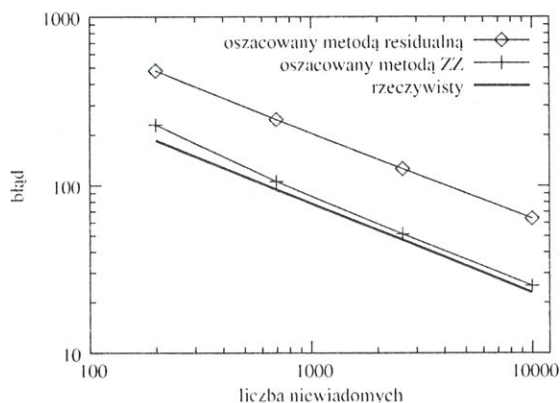
Zmienność w czasie rzeczywistego (faktycznego) błędu rozwiązania w normie energetycznej oraz jego oszacowań metodą ZZ (wzór 15) i metodą residualną (wzór 28) dla trzykrotnie zagęszczonej siatki przedstawiono na rysunku 3. Jednostką kwadratu normy energetycznej błędu rozwiązania jest  $[\text{W}/\text{K}\cdot\text{m}]$ . Bardzo duży błąd rozwiązania na początku procesu spowodowany jest ekstremalnymi warunkami stygnięcia cieczy i nagrzewania formy po zalaniu. W miarę upływu czasu błąd maleje i stabilizuje się. Po pewnym czasie występuje uskok odpowiadający chwili zakończenia krzepnięcia, czyli zniknięcia frontu między ciałem stałym a obszarem dwufazowym. Zaznaczony grubą linią błąd faktyczny zmienia się w szerokim zakresie. W porównaniu ze stanem tuż po rozpoczęciu procesu błąd maleje o dwa rzędy wielkości. Widoczna jest bardzo dobra zgodność oszacowań metodą ZZ ze stanem faktycznym. Indeks efektywności jest bliski jedności przez cały czas trwania symulacji. Choć metoda residualna daje przeszacowanie błędu, to indeks efektywności jest w przybliżeniu stały.



Rysunek 3. Zmienność w czasie rzeczywistego błędu rozwiązania i jego oszacowań.

Figure 3. Variation in time of the actual error of discretization and its estimates.

Obok indeksu efektywności oszacowania istotna jest zgodność szybkości redukcji oszacowań z szybkością redukcji błędu rzeczywistego przy wzroście liczby niewiadomych. Na rysunku 4 przedstawiono wykres odpowiadający chwili  $t = 3 \text{ min}$ . Okazuje się, że wspomniana zgodność występuje o czym świadczy zgodność nachylenia krzywych w układzie współrzędnych z osiami ze skalą logarymiczną. Symbole na wykresie odpowiadają wynikom obliczeń na kolejno rozdrabnianych siatkach. Zgodnie z oczekiwaniami układają się one w linię prostą, co jest konsekwencją algebraicznej szybkości zbieżności metody



Rysunek 4. Redukcja błędu dyskretyzacji przestrzennej przy wzroście gęstości siatki w chwili  $t = 3$  min.

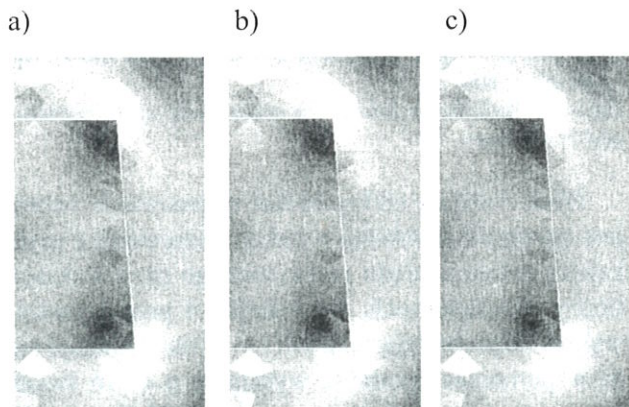
Figure 4. Reduction of the error of spatial discretization due to mesh refinement at  $t = 3$  min.

(zależności  $e_E = Ch^1$  między błędem a rozmiarem elementu).

Rozkłady lokalnego błędu dyskretyzacji oraz wskaźników błędu, będących jego przybliżeniem, dla chwili  $t = 3$  min przedstawiono na rysunku 5. Celem jest zobrazowanie miejsc występowania dużego i małego błędu, dlatego też nie zamieszczono skali barw (im jaśniejszy odcień szarości tym większy błąd lokalny). Dodatkowo zakres wartości na rozkładzie dla metody residualnej został dobrany tak, aby uzyskać podobny efekt i jest niezgodny z tym dla błędu rzeczywistego i oszacowanego metodą ZZ.

Widoczna jest niemal idealna zgodność oszacowań z rzeczywistym błędem lokalnym. Dla rozważanej przykładowej konfiguracji błąd w formie jest większy od błędu w odlewie, chociaż nie jest to reguła. Szczególnie duży błąd występuje w okolicy wierzchołków narożnych w miejscach połączenia wklęsłych fragmentów brzegu formy. Są to tzw. *osobliwości wierzchołkowe*.

Rysunek 6 przedstawia rozkład błędu lokalnego

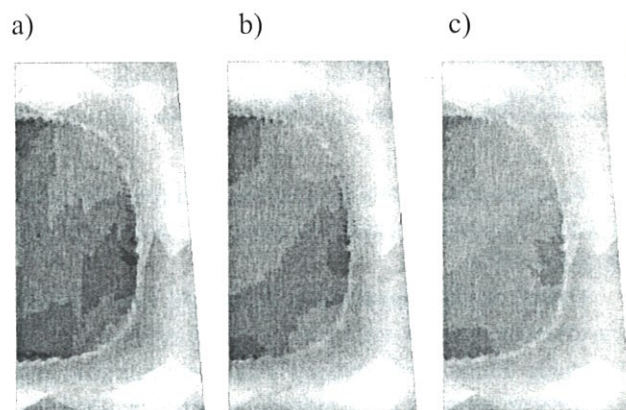


Rysunek 5. Rozkład błędu dyskretyzacji przestrzennej i jego oszacowań w chwili  $t = 3$  min, a) oszacowanie ZZ, b) oszacowanie residualne, c) błąd rzeczywisty.

Figure 5. Distribution of the error of spatial discretisation and its estimates at  $t = 3$  min, a) ZZ estimate, b) residual estimate, c) actual error.

oraz jego oszacowania w obszarze odlewu w chwili  $t = 30$  s. Zauważyć można tam linię większego błędu pokrywającą się z położeniem granicy między cieczą a strefą dwufazową. Znacznie większym błędem charakteryzują się jednak okolice brzegów odlewu i głównie w tych miejscach należy rozdrabniać siatkę.

Na powyższych rozkładach, dotyczących zarówno odlewu jak i formy, zauważyć można wpływ kształtu elementu skończonego na błąd rozwiązania. Istnieją tam odizolowane grupy elementów charakteryzujące się wartościami błędów kontrastującymi z elementami sąsiednimi, przy czym elementy te są wynikiem podziału jednego lub kilku sąsiednich elementów zgrubnej siatki początkowej. Przyczyną faktu, że elementy te w dużej mierze współdzielą wartość błędów, jest ich jednakowa miara kształtu odziedziczona po elemencie macierzystym. Minimalny kąt wierzchołkowy wspomnianych elementów jest mniejszy niż w elementach sąsiednich, stąd większy błąd dyskretyzacji.

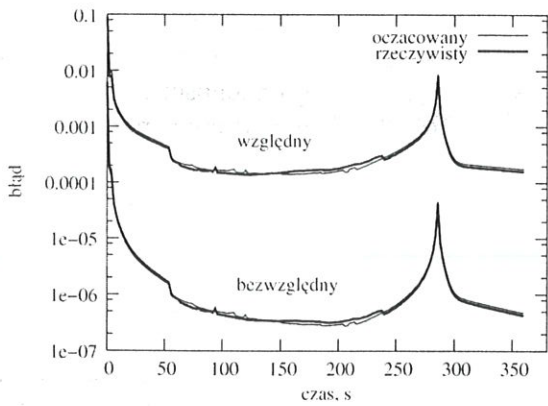


Rysunek 6. Rozkład błędu dyskretyzacji przestrzennej i jego oszacowań w obszarze odlewu w chwili  $t = 30$  s, a) oszacowanie ZZ, b) oszacowanie residualne, c) błąd rzeczywisty.

Figure 6. Distribution of the error of spatial discretisation and its estimates in the cast subdomain at  $t = 30$  s, a) ZZ estimate, b) residual estimate, c) actual error.

Celem następnej symulacji było określenie czasowej zmienności błędów całkowania po czasie oraz jakości jego oszacowania. Obliczenia wykonano ze stałym krokiem czasowym równym 0,05 s na jednorodnej siatce zawierającej 2510 węzłów i 4638 elementów. Podobnie do poprzedniego przypadku również tutaj szacowanie błędów odbywało się co każde 5 s czasu krzepnięcia. W celu wyznaczenia błędów faktycznego rozwiązanie odniesienia otrzymywano z dziesięciokrotnie mniejszym krokiem czasowym równym 0.005 s. Zmienność błędów całkowania po czasie i jego oszacowań zobrazowano na rysunku 7. Jednostką błędów bezwzględnych jest  $[K \cdot m]$ .

Błąd względny zdefiniowany jest tu jako iloraz  $\|e\|_{L_2(\Omega)}$  i  $\|\Delta T_k\|_{L_2(\Omega)}$ , więc odnosi się do normy  $L_2$  przyrostu temperatury w ramach rozważanego kroku czasowego. Widoczny jest szeroki przedział zmien-



Rysunek 7. Zmienność błęd całkowania po czasie i jego oszacowań.

Figure 7. Temporal variation of the actual error of time stepping and its estimates.

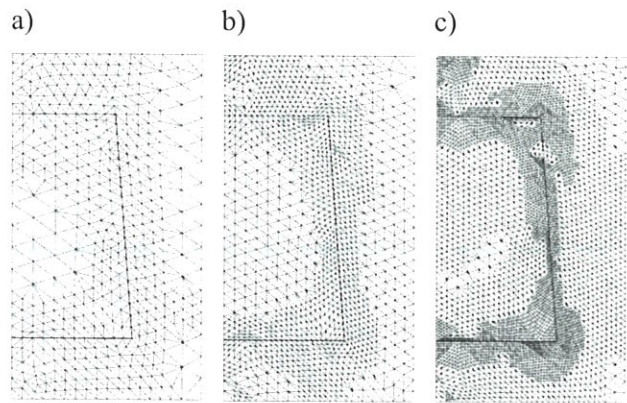
ności błędu względnego rozciągający się od kilku procent na początku procesu do kilku setnych procenta na końcu symulacji. W jeszcze większym zakresie zmienia się błąd bezwzględny. Cechą charakterystyczną jest gwałtowny wzrost wartości błędu w miarę zbliżania się do chwili zakończenia procesu krzepnięcia. Procedura automatycznego doboru kroku czasowego powinna wychwycić tę zmianę i odpowiednio zmniejszyć wielkość kroku. Na wykresie widać też, że zastosowana metoda szacowania błędu daje wyniki bardzo bliskie stanowi faktycznemu.

Zakres zmienności błędu bezwzględnego na rysunku 7 jest inny niż zakres zmienności błędu na rysunku 3. Jest to spowodowane różnymi definicjami wykorzystywanych norm błędu: są to odpowiednio norma  $L_2$ , wyliczana na podstawie rozkładu różnicy temperatur, oraz norma energetyczna, biorąca pod uwagę różnicę strumieni cieplnych i uwzględniająca parametr materiałowy  $\lambda$ .

## 8. SKRÓCENIE CZASU OBLICZEŃ W WYNIKU ADAPTACJI

W celu zademonstrowania korzyści płynących z zastosowania podejścia adaptacyjnego wykonano serię symulacji różniących się wykorzystywaniem lub niewykorzystywaniem adaptacji siatki czy kroku czasowego. Dla każdego przypadku zmierzono czas obliczeń wykonywanych na komputerze z procesorem AMD Athlon 1,4 GHz i 512 MB pamięci operacyjnej.

Czasem odniesienia dla obliczeń adaptacyjnych jest czas trwania obliczeń wykonywanych na jednorodnej siatce odniesienia o umiarkowanej gęstości i z niewielkim krokiem czasowym bez stosowania adaptacji żadnego typu. Serie symulacji przeprowadzono w dwóch wariantach różniących się gęstością siatki, na której wykonywano porównywane obliczenia nieadaptacyjne. I tak w wariacie A siatka ta składa się z 18464



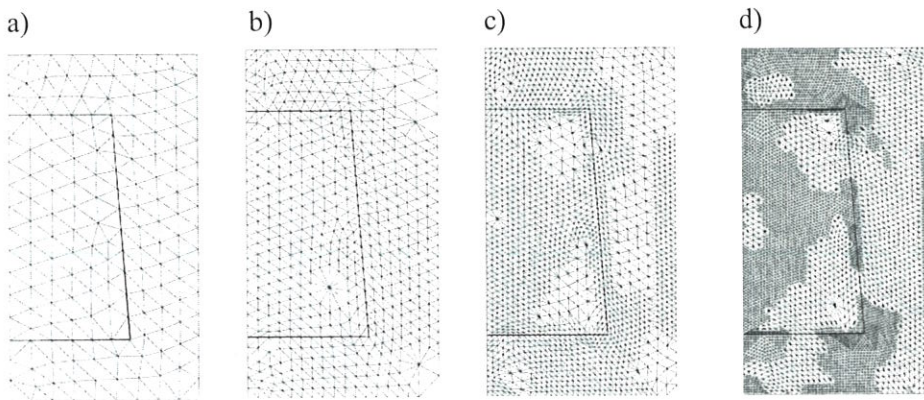
Rysunek 8. Sekwencja dostosowanych siatek w chwili  $t = 30$  s.  
Figure 8. A sequence of adapted meshes at  $t = 30$  s.

elementów i 9608 węzłów i odpowiada trzykrotnie zagęszczonej siatce zgrubnej, natomiast w wariacie B jest to siatka 4638 elementów i 2510 węzłów odpowiadająca dwukrotnemu zagęszczeniu siatki zgrubnej. Obliczenia nieadaptacyjne przeprowadzono z krokiem czasowym 0,05 s.

Następnie wykonano obliczenia adaptacyjne, w których dopuszczono dostosowywanie siatki przy ustalonym kroku czasowym równym 0,05 s. Analogicznie do obliczeń mających na celu wyznaczenie błędu rozwiązania iteracyjna procedura adaptacji siatki wykonywana była co każde 5 s krzepnięcia, czyli co 100 kroków czasowych. W wariacie A dopuszczono wykonywanie trzech iteracji adaptacji, natomiast w wariacie B wykonywano dwie iteracje. W efekcie minimalny rozmiar elementu na zaadaptowanej siatce odpowiada rozmiarowi elementów z jednorodnej siatki odniesienia. Ponieważ błąd dyskretyzacji przestrzennej można szacować dwiema metodami, w sumie wykonano cztery symulacje tego typu.

Przykład sekwencji siatek otrzymanych w kolejnych iteracjach adaptacji w chwili  $t = 30$  s dla wariantu A obliczeń pokazano na rysunku 8. Rysunek 9 przedstawia natomiast sekwencję dostosowanych siatek dla chwili  $t = 3$  min.

Na każdym z powyższych rysunków siatka z lewej to zgrubna siatka początkowa, od której zaczynają się obliczenia w każdym kroku czasowym z adaptacją siatki. Po uzyskaniu zgrubnego rozwiązania i wyznaczeniu oszacowań błędu pewną liczbę elementów przeznaczają się do rozdrobnienia, czego efektem jest druga siatka itd. Rozkład gęstości elementów jest zgodny z rozkładem lokalnego błędu przedstawionym na rysunkach 6 i 5. Ponieważ błąd rozwiązania w obszarze odlewu jest co do wartości bezwzględnej mniejszy niż błąd w obszarze formy, strategia ustalonej frakcji wyboru elementów do rozdrobnienia ma tendencję do preferowania elementów formy oraz ignorowania elementów odlewu. Problemu tego można uniknąć dokonując wyboru elementów do podziału w poszczegól-



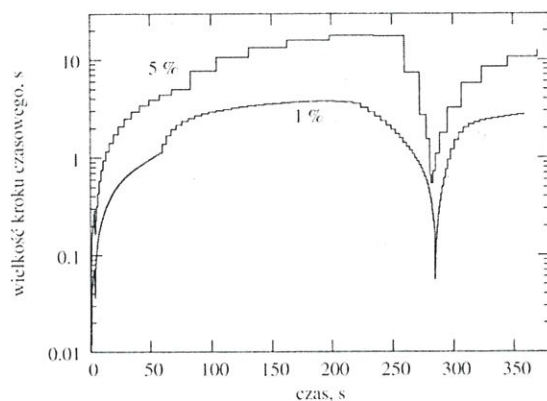
Rysunek 9. Sekwencja dostosowanych siatek w chwili  $t = 3$  min.  
Figure 9. A sequence of adapted meshes at  $t = 3$  min.

gólnych podobszarach niezależnie, tzn. wybierając np. 60% elementów z odlewu oraz 60% elementów z formy. Wynikiem tego jest zagęszczanie siatki zarówno w formie, jak i w odlewie.

Następnym etapem były obliczenia z automatycznym doбором kroku czasowego. W tym przypadku adaptacja wykonywana była w co drugim kroku obliczeń. Jako początkową wielkość kroku czasowego przyjęto 0,01 s. Wielkość ta była jednocześnie traktowana jako minimalny dopuszczalny krok czasowy. Jako dopuszczalną tolerancję błędu  $\eta$ , przyjęto 1% w pierwszej wersji lub 5% w wersji drugiej.

W przypadku, gdy adaptacji kroku czasowego nie towarzyszyła adaptacja siatki, obliczenia wykonywane były na odpowiedniej siatce odniesienia. W innym razie sytuacja była identyczna jak w symulacjach wykonywanych tylko z adaptacją siatki z tą różnicą, że teraz dostosowywanie siatki odbywało się w co drugim kroku czasowym na przemian z adaptacją kroku czasowego.

Zmienność wielkości automatycznie dobranego kroku czasowego dla obliczeń wykonanych z różnymi tolerancjami błędu przedstawiono na rysunku 10.



Rysunek 10. Wielkość automatycznie dobranego kroku czasowego dla różnych tolerancji błędu.

Figure 10. Automatically selected timestep size for various error tolerances.

Zmienność dla różnych wariantów i w przypadku dodatkowej obecności adaptacji siatki jest podobna, przedstawiono więc po jednym wykresie. Wykresy te są w pewnym sensie odwróceniem wykresów zmienności błędu z rysunku 7. Widoczne jest znaczne zróżnicowanie wielkości kroku czasowego. Krok jest bardzo mały na początku procesu, w miarę upływu czasu wzrasta by

potem zacząć gwałtownie maleć wraz ze zbliżaniem się chwili zakończenia krzepnięcia. Następnie wielkość kroku czasowego dalej wzrasta. W okresie spokojnym krok czasowy jest duży i znacznie przewyższa sensowne 0,05 s założone dla obliczeń ze stałym krokiem. Naturalnie wielkość kroku czasowego w danej chwili czasu jest mniejsza w przypadku niższej tolerancji błędu.

Zestawienie zegarowych czasów trwania obliczeń dla symulacji w wariantcie A przedstawiono w tabelicy 2. Obliczenia na siatce odniesienia zajęły około 3 godzin. Zastosowanie adaptacji siatki skróciło czas obliczeń o mniej więcej połowę, natomiast adaptacja kroku czasowego zredukowała czas symulacji do 48 minut przy tolerancji 1 % oraz do 20 minut przy 5 %. Zastosowanie połączenia adaptacji siatki i kroku czasowego pozwoliło osiągnąć jeszcze większe oszczędności. W zależności od tolerancji błędu czas obliczeń skrócił się odpowiednio do 28 minut lub nawet do 8 minut.

Na czas trwania obliczeń składają się m.in. czas właściwej symulacji (zdominowany sumą czasów budowania i rozwiązywania układu równań liniowych), czas wyliczania oszacowań błędu oraz czas rozdrabniania siatki. Czas rozwiązania układu równań iteracyjną metodą sprzężonych gradientów, proporcjonalny do liczby wykonanych iteracji, zależy m.in. od jakości rozwiązania startowego. I tak np. im mniejszy krok czasowy  $\Delta t$ , tym rozwiązanie startowe (równe temperaturze z poprzedniego kroku) jest bliższe poszukiwanemu rozwiązaniu z kolejnego kroku, więc dla takiej samej liczby węzłów w siatce liczba iteracji będzie mniejsza, niż przy obliczeniach z większym krokiem czasowym. Podobnie, w kolejnych iteracjach zagęszczania siatki za rozwiązanie startowe przyjmuje się aktualne rozwiązanie interpolowane z siatki poprzedniej, co daje jeszcze lepsze startowe przybliżenie poszukiwanego rozwiązania. Koszt szacowania błędu metodą ZZ lub residualną zależy głównie od liczby elementów w siatce, natomiast czas szacowania błędu całkowania po czasie zdominowany jest czasem trwania pomocniczych obliczeń wykonywa-

Tablica 2. Skrócenie czasu obliczeń w wyniku adaptacji siatki i automatycznego doboru kroku czasowego dla wariantu A  
 Table 2. Reduction of computation time due to mesh refinement and automatic timestep selection for the A variant

Adaptacja siatki	—	ZZ	RES	—	ZZ	RES	—	ZZ	RES
adaptacja $\Delta t$	—	—	—	1 %	1 %	1 %	5 %	5 %	5 %
czas obliczeń, s	10749 2:59:09	5949 1:39:09	5773 1:36:13	2901 48:21	1688 28:08	1716 28:36	1169 19:29	488 8:08	518 8:38

nych z o połowę mniejszym krokiem czasowym, który to czas jest w przybliżeniu równy podwojonemu czasowi właściwej symulacji w danym kroku. Czas zagęszczania wybranych fragmentów siatki zależy głównie od ilości rozdrabnianych elementów, a czas wyznaczania nowego kroku czasowego jest pomijalnie mały.

Ponieważ stosunek czasu właściwej symulacji w ramach wybranego kroku czasowego do czasu szacowania błędu czy zagęszczania siatki zmienia się w czasie trwania symulacji, lepiej jest porównywać czasy trwania wspomnianych operacji zsumowane po wszystkich krokach czasowych. I tak np. z 2901 sekund obliczeń (tabela 2, tylko adaptacja  $\Delta t$ , 1%) 1236 sekund przypada na właściwą symulację, a 1315 sekund na wyliczenie oszacowań błędu całkowania po czasie. W przypadku trwających 1716 sekund obliczeń, w których dodatkowo przeprowadzano adaptację siatki (RES, 1% w tabeli 2), 553 sekundy przypadają na właściwą symulację, 57 sekund na szacowanie błędu metodą residualną (czas ten dla metody ZZ jest podobny), 625 sekund na szacowanie błędu całkowania po czasie, a 222 sekundy na zagęszczanie siatki. Dla trwających 518 sekund analogicznych obliczeń dla dokładności 5% jest to odpowiednio 176, 13,189 i 51 sekund.

Należy w tym miejscu zwrócić uwagę na fakt, że dla rozważanego zagadnienia krzepnięcia, opisanego równaniem przewodzenia ciepła, czasy rozwiązania układów równań liniowych są bardzo krótkie – rozwiązanie jest osiągane po niewielkiej liczbie iteracji metody sprzężonych gradientów, nawet przy zastosowaniu prostej, diagonalnej metody poprawy uwarunkowania wstępnego. W przypadku innych zagadnień, takich jak np. analiza stanu naprężenia, metody iteracyjne mogą sprawować się znacznie gorzej i czas rozwiązania układu równań o podobnym rozmiarze może być znacznie dłuższy, nawet przy zastosowaniu bardziej wyrafino-

wanych metod poprawy uwarunkowania. Wynikiem tego może być znacznie większa dysproporcja między czasem właściwej symulacji a czasem szacowania błędu czy czasem adaptacji siatki.

W tablicy 3 zestawiono czasy trwania obliczeń w wariacie B. I tutaj możliwe są wyraźne oszczędności płynące z zastosowania adaptacji, począwszy od 27 minut dla obliczeń nieadaptacyjnych do ok. 2 minut dla kombinacji adaptacji siatki i adaptacji kroku czasowego przy niskich wymaganiach co do dokładności.

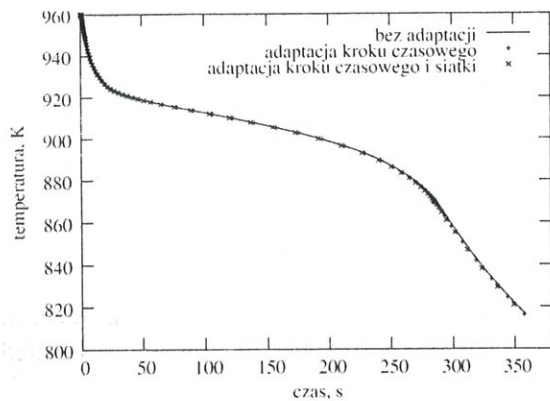
Okazuje się jednak, że w pewnych przypadkach oszczędność czasu obliczeń może być niewielka, np. przy adaptacji siatki wykonywanej bez adaptacji kroku czasowego. Przyczyną tego jest fakt, że w wariacie B w wersji bez adaptacji rozmiary rozwiązywanych w kolejnych krokach układów równań liniowych są małe, więc metoda sprzężonych gradientów daje wynik bardzo szybko. Trudno jest w takich warunkach na tyle wydajnie zaimplementować pozostałe etapy obliczeń adaptacyjnych (estymatory błędu, rozdrabnianie siatki), aby mogły one z nią konkurować. W wariacie A obliczeń ilość węzłów w siatce, na której były wykonywane obliczenia bez adaptacji, jest większa (czterokrotnie) i oszczędności czasu wyraźniej się objawiają. Jak wspomniano wyżej, efektywność adaptacji w wariacie B byłaby znacznie większa dla zagadnienia np. liniowej sprężystości.

Mimo znacznego skrócenia czasu obliczeń różnice między rozwiązaniem odniesienia a rozwiązaniami uzyskanym przy zastosowaniu podejścia adaptacyjnego są niewielkie. Widać to na rysunku 11, gdzie pokazano krzywe stygnięcia w wybranym punkcie odlewu zaznaczonym kropką na rysunku 2. Jest to węzeł wyjściowej siatki zgrubnej oraz każdej z siatek będących wynikiem adaptacji, co jest cechą zastosowanej techniki rozdrabniania.

Rozwiązanie odniesienia zaznaczone jest linią ciąg-

Tablica 3. Skrócenie czasu obliczeń w wyniku adaptacji siatki i automatycznego doboru kroku czasowego dla wariantu B  
 Table 3. Reduction of computation time due to mesh refinement and automatic timestep selection for the B variant

Adaptacja siatki	—	ZZ	RES	—	ZZ	RES	—	ZZ	RES
Adaptacja $\Delta t$	—	—	—	1 %	1 %	1 %	5 %	5 %	5 %
czas obliczeń, s	1636 27:16	1612 26:52	1658 27:38	403 6:43	507 8:27	510 8:30	143 2:23	123 2:03	127 2:07

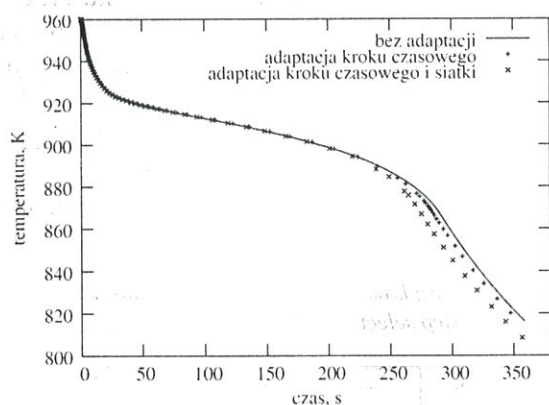


Rysunek 11. Krzywe stygnięcia w wybranym punkcie odlewu dla dokładności 1%.

Figure 11. Cooling curves for the selected point of the cast and for the 1% error tolerance.

głą, symbole reprezentują natomiast rozwiązania adaptacyjne w dwóch wersjach: z adaptacją siatki (estymator ZZ) oraz z adaptacją siatki i towarzyszącą jej adaptacją kroku czasowego z tolerancją 1%, przy czym aby nie zaciemniać wykresu zamieszczono dane z co piątego kroku obliczeń. Odległość między sąsiednimi symbolami wskazuje na wielkość kroku czasowego i zgodnie z oczekiwaniami punkty te są zagęszczone w miejscach dużej zmienności szybkości stygnięcia, tam bowiem błąd obcięcia metody całkowania po czasie ma największą wartość. Wyniki obliczeń z wykorzystaniem estymatora residualnego są prawie identyczne i dlatego nie zostały zamieszczone. Ponadto, wykresy dla wariantów A i B tylko nieznacznie się różnią, dlatego zamieszczono jeden.

Analogiczny wykres dla obliczeń adaptacyjnych wykonywanych z tolerancją błędów czasowego 5% przedstawiono na rysunku 12. W tym przypadku symbole reprezentują dane z każdego kroku czasowego. Widać dobrą zgodność wyników z rozwiązaniem odniesienia w prawie całym przedziale czasu krzepnięcia z wyjątkiem jego zakończenia. Pewna niezgodność



Rysunek 12. Krzywe stygnięcia w wybranym punkcie odlewu dla dokładności 5%.

Figure 12. Cooling curves for the selected point of the cast and for the 5% error tolerance.

występuje zwłaszcza dla kombinacji adaptacji siatki i kroku czasowego – krzepnięcie kończy się za wcześnie. Wniosek z tego jest taki, że 5% to w tym przypadku zbyt wysoka tolerancja dla błędów całkowania po czasie.

## 9. PODSUMOWANIE

Wyniki symulacji wskazują na wysoką jakość oszacowań błędów rozwiązania przy zastosowaniu omówionych metod, przy czym metody te dają oszacowania błędów lokalnego w czasie, tzn. pochodzącego jedynie z rozważanego kroku czasowego. Są one podstawą adaptacji siatki i wielkości kroku czasowego. Na podstawie serii symulacji pokazano radykalne skrócenie czasu obliczeń możliwe dzięki zastosowaniu poszczególnych technik dostosowywania lub ich kombinacji.

Przedstawione tu podejście adaptacyjne może być zastosowane do innych zagadnień, np. do analizy stanu naprężenia, w obliczeniach mechaniki płynów itd. W zagadnieniach tych koszt rozwiązania wynikowych układów równań liniowych metodami iteracyjnymi jest znacznie większy niż dla zadań cieplnych przy podobnej liczbie niewiadomych. Bierze się to z większej liczby wymaganych iteracji metody oraz większego kosztu poprawy uwarunkowania wstępnego. W tych przypadkach skrócenie czasu obliczeń dzięki ograniczeniu liczby niewiadomych zadania w wyniku adaptacji byłoby jeszcze większe niż przedstawiono dla zagadnienia krzepnięcia.

## LITERATURA

- Ainsworth M., Oden J., 2000, *A Posteriori Error Estimation in Finite Element Analysis*, John Wiley & Sons, Inc.
- Johnson C., Hansbo P., 1992, Adaptive finite element methods in computational mechanics, *Comput. Methods. Appl. Mech. Engrg.* 101, 143-181.
- Mahnken R., Stein E., 1989, Adaptive time-step control in creep analysis, *Int. J. Num. Meth. Engrg.* 28, 1619-1633.
- Nagórka A., Szczygiol N., 2003, Applicability of incomplete explicit residual error estimates in adaptive finite element simulations of solidification, *Mat. I. Konf. ADMOS 03, International Conference on Adaptive Modeling and Simulation*, Goteborg.
- Szczygiol N., 2000, Approaches to enthalpy approximation in numerical simulation of two-component alloy solidification, *Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences*, 7, 717-734.
- Zienkiewicz O., Zhu J., 1987, A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis, *Int. J. Num. Meth. Engrg.*, 24, 337-357.
- Zienkiewicz O., Zhu J., 1992, The superconvergent patch recovery and a posteriori error estimates. Part I. The recovery technique, *Int. J. Num. Meth. Engrg.*, 33, 1331-1364.

Artykuł otrzymano 13 lutego 2004 r.