

Zadanie identyfikacji spektrum relaksacji materiałów liniowo lepkosprężystych jest źle postawionym problemem odwrotnym [Stankiewicz 2007], jego rozwiązanie (jeśli istnieje) jest nieciągłe względem danych zadania, co oznacza, że nawet bardzo małe wahania danych (w tym niewielkie zakłócenia) mogą powodować bardzo duże fluktuacje rozwiązania. Identyfikacja spektrum relaksacji wymaga więc stosowania specjalnych metod. W ciągu ostatnich kilku lat powstało wiele metod optymalnej identyfikacji spektrum częstotliwości i czasów relaksacji bazujących na rozwinięciu nieznanego spektrum w skończony szereg funkcyjny, przykładowo [Stankiewicz 2003, 2004, 2005, 2007] i prace tam cytowane. Dla zapewnienia dobrego uwarunkowania zadania w algorytmach tych zastosowano klasyczną na gruncie teorii problemów źle postawionych technikę regularyzacji, polegającą na takiej modyfikacji zadania oryginalnego, która prowadzi do zadania dobrze postawionego o rozwiązaniu możliwie bliskim rozwiązaniu zadania wyjściowego. Podejście takie zapewnia wygładzenie wyznaczonego spektrum relaksacji.

W tej pracy zaproponowano metodę identyfikacji spektrum relaksacji na podstawie dyskretnych, zakłóconych pomiarów modułu relaksacji zgromadzonych w standardowym teście relaksacji naprężeń, w której model spektrum dobierany jest tak, aby zapewnić najlepsze jego wygładzenie przy równoczesnym odtworzeniu pomiarów modułu relaksacji.

Spektrum relaksacji i jego model

W reologii powszechnie przyjmuje się, że moduł relaksacji $G(t)$, nazywany także modułem Boltzmana, posiada całkowitą reprezentację postaci [Christensen 1971]

$$G(t) = \int_0^{\infty} H(v) e^{-v t} dv, \quad (1)$$

gdzie nieujemna funkcja $H(v)$ nazywana jest spektrum częstotliwości relaksacji, a v oznacza częstotliwość relaksacji. Wzór (1) wielu autorów traktuje jako wzór definicyjny spektrum relaksacji [Rao 1999; Anderssen i Loy 2002]. Będziemy zakładać, że istnieje rzeczywiste spektrum częstotliwości relaksacji $H(v)$ (warunki jego istnienia podano w [Stankiewicz 2007]), jest ono całkowicie nieznanne, natomiast moduł relaksacji $G(t)$ jest dostępny pomiarowo. Moduł $G(t)$ będziemy przybliżać modelem

$$G_M(t) = \int_0^{\infty} H_M(v) e^{-v t} dv, \quad (2)$$

gdzie $H_M(v)$ jest modelem spektrum relaksacji.

Identyfikacja spektrum relaksacji

Będziemy zakładać, że przeprowadzono skończony eksperyment dyskretny (test relaksacji naprężeń) i wyznaczono pomiary modułu relaksacji $\bar{G}(t_i) = G(t_i) + z(t_i)$ w chwilach czasu $t_i \geq 0$, $i = 1, \dots, N$, gdzie $z(t_i)$ jest addytywnym błędem pomiarowym. Klasyczny problem optymalnej identyfikacji spektrum relaksacji $H(v)$ polega na takim doborze modelu

$H_M(\nu)$, aby model $G_M(t)$ przybliżał dane eksperymentalne $\{\bar{G}(t_i)\}$ jak najlepiej w sensie przyjętego wskaźnika jakości modelu. Jako miarę dokładności modelu spektrum zazwyczaj przyjmuje się wskaźnik kwadratowy. Zadanie identyfikacji polega wówczas na wyznaczeniu modelu (2) minimalizującego sumę kwadratów błędów modelu we wszystkich punktach pomiarowych

$$Q_N[H_M(\cdot)] = \sum_{i=1}^N [\bar{G}(t_i) - G_M(t_i)]^2 \rightarrow \min_{H_M(\cdot) \in L^2[0, \infty)} \quad (3)$$

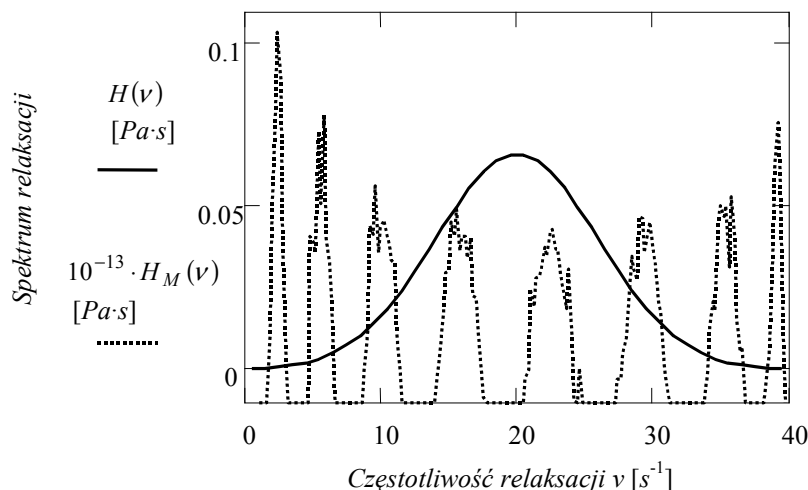
Generalnie, zadanie to w przestrzeni funkcji całkownych z kwadratem $L^2[0, \infty)$ nie posiada rozwiązania. Problem optymalizacji (3) można rozwiązać, jeśli ograniczymy zbiór rozwiązań dopuszczalnych do pewnego podzbioru przestrzeni $L^2[0, \infty)$, np. podprzestrzeni liniowej generowanej przez skończone układy funkcji bazowych (por. [Stankiewicz 2003, 2004, 2005]). Jednak nawet wówczas zadanie to z reguły nie posiada rozwiązania jednoznacznego, jest więc nadal zadaniem źle postawionym i nawet niewielkie zakłócenia mogą powodować katastrofalne fluktuacje wyznaczonego modelu spektrum relaksacji. Ilustruje to następujący przykład.

Przykład 1 - motywacja

Dany jest materiał liniowo lepko-sprężysty, którego spektrum częstotliwości relaksacji opisuje rozkład Gaussa

$$H(\nu) = \frac{1}{6\sqrt{2\pi}} e^{-\nu^2/12} \quad (4)$$

Moduł relaksacji tego materiału $\bar{G}(t) = G(t) + z(t)$ z zakłóceniami pomiarowymi $z(t)$ o rozkładzie jednostajnym w przedziale $[-0.025, 0.025]$ Pa spróbkowano w $N = 200$ punktach ze stałym okresem próbkowania $\Delta t = 0.0025$ s. Zbiór rozwiązań dopuszczalnych ograniczono do podprzestrzeni liniowej generowanej przez układ $K = 10$ funkcji bazowych Laguerre'a, co zredukowało oryginalny problem optymalizacji dynamicznej (3) do statycznego zadania liniowo-kwadratowego (por. [Stankiewicz 2007]). Rozwiązanie tego zadania jest jednak nadal niejednoznaczne, spośród jego nieskończenie wielu rozwiązań wybrano rozwiązanie normalne, czyli rozwiązanie o najmniejszej normie euklidesowej. W przypadku ortogonalnych funkcji bazowych oznacza to wyznaczenie spektrum minimalizującego wskaźnik $Q_N[H_M(\cdot)]$ o najmniejszej normie. Już wartość normy $\|H_M\|_2 = 6.519 \cdot 10^{12}$ sygnalizuje „rozmiar” fluktuacji rozwiązania, lepiej ilustruje to rysunek 1, na którym przedstawiono rzeczywiste spektrum relaksacji $H(\nu)$ (4) oraz jego model $H_M(\nu)$, dla którego zastosowano mnożnik 10^{-13} .



Rys. 1. Rzeczywiste spektrum relaksacji $H(v)$ (4) oraz jego model $H_M(v)$

Fig. 1. Relaxation spectrum $H(v)$ (4) (solid line) and the model $H_M(v)$ (dash line)

Klasycznym antidotum jest w takiej sytuacji regularyzacja problemu. Podejście takie zostało zastosowane w wielu poprzednich pracach autorki, przykładowo [Stankiewicz 2003, 2004, 2005, 2007]. Przy odpowiednim doborze techniki regularyzacji pozwala ono skutecznie zniwelować fluktuacje modelu spektrum relaksacji. W następnym punkcie zostanie sformułowany i rozwiązany problem bezpośredniego wygładzenia fluktuacji modelu spektrum relaksacji.

Wygładzenie spektrum relaksacji – postawienie problemu

Należy wyznaczyć funkcję $H_M(\cdot)$ klasy $L^2[0, \infty)$ minimalizującą całkowite kryterium identyfikacji

$$\|H_M(\cdot)\|^2 = \int_0^{\infty} H_M(v)^2 dv \rightarrow \min_{H_M(\cdot) \in L^2[0, \infty)} \quad (5)$$

przy ograniczeniach

$$\bar{G}(t_i) = \int_0^{\infty} H_M(v) e^{-v t_i} dv, \quad i = 1, \dots, N \quad (6)$$

Spektrum relaksacji stanowiące rozwiązanie zadania (5), (6) to spektrum o najmniejszej normie, czyli najbardziej wygładzone w klasie funkcji całkownych z kwadratem, które równocześnie gwarantuje odtworzenie pomiarów modułu relaksacji.

Rozwiązanie

Istnienie rozwiązania zadania (5), (6) wynika natychmiast z wypukłości wskaźnika kwadratowego (5) oraz liniowości ograniczeń równościowych (6). Ze znanego na gruncie rachunku wariacyjnego twierdzenia Eulera-Lagrange'a [Ławrynowicz 1977, twierdzenie 1.7] wynika istnienie liczb rzeczywistych (mnożników Lagrange'a) $\lambda_1 \dots \lambda_N$ takich, że – oprócz ograniczeń równościowych zadania (6) – spełnione jest równanie Eulera-Lagrange'a:

$$H_M(v) - \sum_{i=1}^N \lambda_i e^{-iv} = 0. \quad (7)$$

Podstawiając $H_M(v)$ dane równaniem (7) do (6) otrzymujemy układ równań

$$\bar{G}(t_i) = \int_0^{\infty} \sum_{j=1}^N \lambda_j e^{-t_j v} e^{-iv} dv, \quad i = 1, \dots, N,$$

który definiując wektor mnożników Lagrange'a $\lambda_N = [\lambda_1 \dots \lambda_N]^T$, wektor pomiarów modułu relaksacji $\bar{G}_N = [\bar{G}(t_1) \dots \bar{G}(t_N)]^T$ oraz $N \times N$ wymiarową macierz, która w i -tym wierszu i j -tej kolumnie ma element $\int_0^{\infty} e^{-iv} e^{-t_j v} dv$, czyli

$$\Phi_N = \left[\int_0^{\infty} e^{-iv} e^{-t_j v} dv \right]_{N \times N} = \left[\frac{1}{t_i + t_j} \right]_{N \times N}, \quad (8)$$

można zapisać w dogodnej postaci:

$$\bar{G}_N = \Phi_N \lambda_N. \quad (9)$$

Macierz Gramma Φ_N jest nieosobliwa, ponieważ funkcje bazowe jądra Laplace'a $e^{-t_1 v}, \dots, e^{-t_N v}$ są liniowo niezależne. Istnieje więc rozwiązanie układu równań (9), jest ono jednoznaczne i dane wzorem $\lambda_N = \Phi_N^{-1} \bar{G}_N$. Stąd, na podstawie (8) model optymalny jest następujący

$$H_{M,N}(v) = \sum_{i=1}^N \lambda_i e^{-iv},$$

lub równoważnie w postaci wektorowej

$$H_{M,N}(v) = \lambda_N^T \varphi_N(v) = \bar{G}_N^T \Phi_N^{-1} \varphi_N(v), \quad (10)$$

gdzie funkcja wektorowa $\boldsymbol{\varphi}_N(\nu) = [e^{-t_1\nu} \dots e^{-t_N\nu}]^T$. Model optymalny (10) jest więc kombinacją liniową – ze współczynnikami $\lambda_1 \dots \lambda_N$ - bazowych funkcji wykładniczych $e^{-t_1\nu}, \dots, e^{-t_N\nu}$. Jest on jednoznaczny, ciągłym zarówno względem częstotliwości relaksacji ν jak i danych zadania $\{t_i, \bar{G}(t_i)\}$ i najlepiej wygładzonym modelem spektrum relaksacji w klasie funkcji całkowalnych z kwadratem spełniającym ograniczenia (6).

Podstawy algebraiczne algorytmu

Do konstrukcji algorytmu numerycznego wyznaczania spektrum relaksacji zastosujemy technikę dekompozycji macierzy względem wartości szczególnych (ang. *Singular Value Decomposition* SVD). Niech rozkład SVD symetrycznej macierzy Φ_N przyjmuje postać

$$\Phi_N = V \Sigma V^T, \quad (11)$$

gdzie $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_N) \in R^{N \times N}$ jest macierzą utworzoną z wartości szczególnych $\sigma_1, \dots, \sigma_N$ macierzy Φ_N , zaś $V \in R^{N \times N}$ jest macierzą ortogonalną. Optymalny model spektrum relaksacji na podstawie (10) i (11) dany jest formułą

$$H_{M,N}(\nu) = \bar{G}_N^T V \Sigma^{-1} V^T \boldsymbol{\varphi}_N(\nu), \quad (12)$$

gdzie Σ^{-1} jest $N \times N$ wymiarową macierzą diagonalną

$$\Sigma^{-1} = \text{diag}(1/\sigma_1, \dots, 1/\sigma_N). \quad (13)$$

Rozkład SVD macierzy Φ_N jest z obliczeniowego punktu widzenia najbardziej czasochłonnym i „pamięciochłonnym” krokiem algorytmu. Procedury SVD są dostępne w postaci zoptymalizowanych, gotowych do użycia procedur numerycznych w popularnych dziś pakietach oprogramowania (przykładowo: $\text{svd}(A)$ w Mathcad 7.0, $[U, S, V] = \text{svd}(A)$ w Matlab 6.5).

Macierz Φ_N zależy od doboru punktów próbkowania modułu relaksacji, nie zależy natomiast od wyników eksperymentu. Oznacza to, że przy wielokrotnym powtarzaniu schematu identyfikacji dla kolejnych próbek badanego materiału wyznaczanie macierzy Φ_N^{-1} nie musi być powtarzane (o ile zostaną zachowane te same punkty pomiarowe).

Schemat identyfikacji

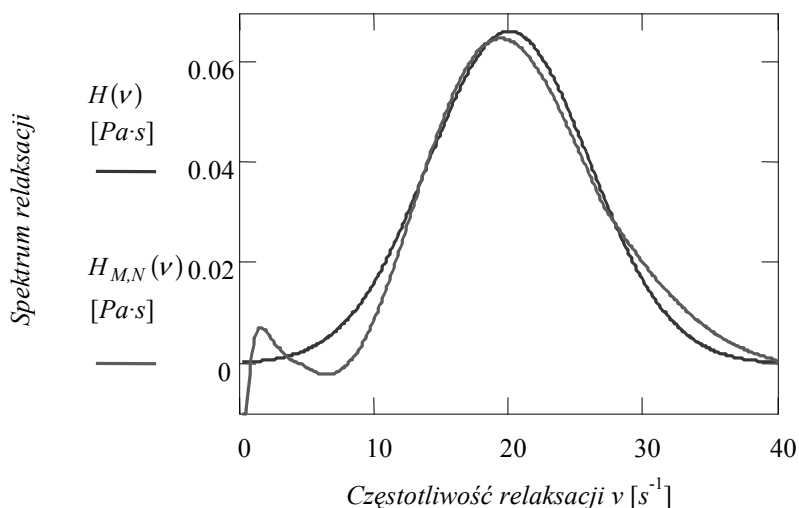
Ciągłe spektrum relaksacji można wyznaczyć stosując następujący algorytm.

1. Przeprowadź eksperyment (test relaksacji naprężeń) i zgromadź pomiary $\bar{G}(t_i)$ modułu relaksacji w chwilach czasu $t_i \geq 0$, $i = 1, \dots, N$.

2. Oblicz macierz Φ_N (8) i wyznacz jej rozkład SVD (11) oraz macierz Σ^{-1} (13).
3. Wyznacz spektrum częstotliwości relaksacji $H_{M,N}(\nu)$ dane wzorem (12).

Przykład 2

Rozważmy ponownie materiał liniowo lepkościowy o spektrum częstotliwości relaksacji danym rozkładem Gaussa (4), dla którego przeprowadzono eksperyment opisany powyżej. Najlepiej wygładzone spektrum relaksacji wyznaczone w oparciu o zaproponowany schemat identyfikacji przedstawia rysunek 2. Miarą jego wygładzenia jest norma $\|H_{M,N}\|_2 = 0.1989$, podczas gdy dla „rzeczywistego” spektrum relaksacji (4) $\|H\|_2 = 0.2391$.



Rys. 2. Spektrum relaksacji $H(\nu)$ (4) oraz jego najlepiej wygładzony model $H_{M,N}(\nu)$

Fig. 2. Relaxation spectrum $H(\nu)$ (4) and the best smoothed model $H_{M,N}(\nu)$

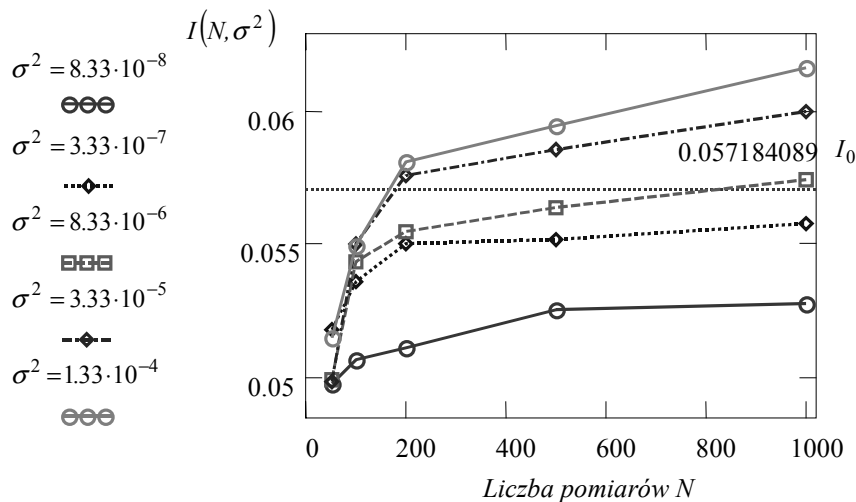
Wyniki badań eksperymentalnych - eksperyment numeryczny

· Eksperyment przeprowadzono dla spektrum relaksacji opisanego rozkładem Gaussa (4). Zbadano zarówno własności asymptotyczne algorytmu, jak i wpływ zakłóceń na wyznaczony model. Zastosowano schemat obliczeń algebraicznych wykorzystujący rozkład SVD macierzy Φ_N (11). Punkty pomiarowe t_i generowano ze stałym krokiem próbkowania w skończonym przedziale czasu $[0, 0.05]$ s. Eksperyment powtórzono $n = 100$ razy generując zakłócenia $\{z_i\}$ niezależnie zgodnie z rozkładem jednostajnym w przedziale $[-h, h]$ dla $h = 0.0005, 0.001, 0.005, 0.01, 0.02$ Pa i $N = 50, 100, 200, 500, 1000$. $h = 0.01$ Pa to 1% wartości maksymalnej sygnału $G(t)$, a $h = 0.0005$ Pa to ok. 1% wartości średniej tego sygnału. Aby ocenić jakość wygładzenia modelu spektrum relaksacji wyznaczono

zależny od liczby pomiarów N i wariancji zakłóceń σ^2 wskaźnik wygładzenia zdefiniowany dla próby n elementowej jako:

$$I(N, \sigma^2) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{100} \int_0^{\infty} H_{M, N, j}(v)^2 dv. \quad (14)$$

gdzie $H_{M, N, j}(v)$ jest przybliżeniem spektrum relaksacji wyznaczonym przy j -tym powtórzeniu eksperymentu dla danego N oraz danej wariancji zakłóceń σ^2 , $j = 1, \dots, n$. Symulowane tu zakłócenia są nawet silniejsze niż rzeczywiste zakłócenia pomiarowe rejestrowane zazwyczaj dla materiałów roślinnych. Przykładowo zakłócenia dla analizowanych w [Stankiewicz 2007] próbek buraka cukrowego nie przekraczały 0.8% wartości maksymalnej sygnału $G(t)$ i 0.7% wartości średniej tego sygnału. Zależność wskaźnika (14) od N oraz σ^2 przedstawia rysunek 3, na którym zaznaczono także wartość wskaźnika $I_0 = \int_0^{\infty} H(v)^2 dv$.



Rys. 3. Wskaźnik $I(N, \sigma^2)$ w funkcji liczby pomiarów i wariancji zakłóceń

Fig. 3. The index $I(N, \sigma^2)$ as a function of the number of measurements and the variance of noises

Wskaźnik $I(N, \sigma^2)$ zależy zarówno od samych zakłóceń (ich wariancji) jak i od macierzy Φ_N (czyli w szczególności od liczby pomiarów). Zbyt mało pomiarów dyskwalifikuje algorytm, ale już $N \geq 200$ jest satysfakcjonujące (por. przykład przedstawiony powyżej). W rozważanym przykładzie metoda powoduje także zbyt silne wygładzenie spektrum relaksacji dla niewielkich zakłóceń.

Uwagi końcowe

1. Idea techniki regularyzacji sięga do istoty problemu źle postawionego – braku jednoznaczności jego rozwiązania. Postawiony w pracy problem wygładzania spektrum relaksacji znajduje inspirację w skutkach problemu źle postawionego – katastrofalnych niekiedy fluktuacjach uzyskanego rozwiązania.
2. Przedstawiona metoda identyfikacji spektrum relaksacji jest pewną techniką interpolacji punktów pomiarowych.
3. Obliczenia numeryczne algorytmu do wyznaczania macierzy odwrotnej wykorzystują standardową technikę dekompozycji macierzy względem wartości szczególnych.
4. Analiza własności teoretycznych metody, w szczególności wygładzenia spektrum relaksacji i odporności wyznaczonego modelu na zakłócenia będzie przedmiotem kolejnej pracy [Stankiewicz 2009]. W pracy tej zostanie podana także wersja rekurencyjna algorytmu a także pewna, istotna dla materiałów pochodzenia roślinnego, modyfikacja metody.
5. Przedstawiona metoda identyfikacji spektrum relaksacji jest rozwiązaniem znanego na gruncie analizy funkcjonalnej i teorii sterowania optymalnego [Gabasov i Kirilłowa 1971] problemu momentów w przestrzeni $L^2[0, \infty)$.

Bibliografia

- Anderssen R.S., Loy R.J.** 2002. Rheological implications of completely monotone fading memory. *J. Rheol.* Vol. 46(6), pp. 1459- 1472.
- Chen P.** 1994. Creep response of generalised Maxwell model. *Int. Agrophysics* Vol. 8, pp. 555–558.
- Christensen R.M.** 1971. *Theory of Viscoelasticity. An Introduction.* Academic Press, New York.
- Gabasov R., Kirilłova F.** 1971. *Kačestvennaja teorija optimal'nych processov.* Nauka, Moskva.
- Gołacki K.** 2001. Nowe możliwości wykorzystania charakterystyk lepkosprężystych materiałów pochodzenia roślinnego. *Inżynieria Rolnicza.* No. 2, s. 69-75.
- Ławrynowicz J.** 1977. *Rachunek wariacyjny ze wstępem do programowania matematycznego.* WNT, Warszawa.
- Rao M. A.** 1999. *Rheology of Fluid and Semisolid Foods. Principles and Applications.* Aspen Publishers, Inc., Gaithersburg, Maryland.
- Stankiewicz A.** 2003. Metoda optymalnej identyfikacji ciągłego spektrum relaksacji materiałów lepkosprężystych. *Inżynieria Rolnicza.* No. 12(54), s. 373-384.
- Stankiewicz A.** 2004. Metoda identyfikacji spektrum relaksacji materiałów lepkosprężystych. *Problemy Eksploatacji.* Vol. 52(1), s. 121-133.
- Stankiewicz A.** 2005. Algorytm aproksymacji spektrum retardacji roślinnych materiałów lepkosprężystych funkcjami Legendre'a. *Acta Agrophysica.* Vol. 6(3), s. 795-813.
- Stankiewicz A.** 2007. *Identyfikacja spektrum relaksacji lepkosprężystych materiałów roślinnych.* Rozprawa doktorska, Akademia Rolnicza w Lublinie, Lublin.
- Stankiewicz A.** 2009. Identyfikacja spektrum relaksacji metodą momentów: własności i zastosowania. *Inżynieria Rolnicza* Nr 6(115). s. 259-267.

IDENTIFICATION OF THE RELAXATION SPECTRUM BY MOMENT METHOD APPROACH: CONCEPTUAL IDEA

Abstract. Fruits and vegetables are most often modelled in a viscoelastic regime, which is good for characterizing strain-stress dependence, creep and stress relaxation within a small deformation. Relaxation spectrum is a very useful tool in the characterization of viscoelastic materials as the knowledge on them enables the calculation of any linear material functions such as the creep compliance, the Poisson's ratio or shear and bulk modulus. The paper deals with the problem of recovery of continuous relaxation spectrum from discrete-time noise corrupted measurements of relaxation modulus obtained in stress relaxation test. A new identification algorithm is proposed in which the best smoothing of the model is achieved together with simultaneous reconstruction of the relaxation modulus measurements. The numerical realization of the scheme by using the singular value decomposition (SVD) is discussed and the resulting computer algorithm is outlined.

Key words: viscoelasticity, relaxation spectrum, identification algorithm, ill-posed problem, optimal model smoothing

Adres do korespondencji:

Anna Stankiewicz; e-mail: anna.stankiewicz@up.lublin.pl
Katedra Podstaw Techniki
Uniwersytet Przyrodniczy w Lublinie
ul. Doświadczalna 50A
20-280 Lublin