

Adrian Różański*, Dariusz Łydzba*

UWAGI O WIELKOŚCI REPREZENTATYWNEJ ELEMENTARNEJ OBJĘTOŚCI DLA LOSOWYCH MIKROSTRUKTUR KOMÓRKOWYCH

1. Wprowadzenie

Ze względu na duże możliwości obliczeniowe współczesnych komputerów bardzo często do rozwiązywania zagadnień homogenizacji wykorzystuje się metody numeryczne. Wspomnieć tutaj należy przede wszystkim o metodach elementów oraz objętości skończonych oraz uogólnionej metodzie komórek (ang. *Generalized Method of Cells*) [7, 6]. Zagadnienia postawione z wykorzystaniem tych metod rozwiązywane są na obszarze reprezentatywnej elementarnej objętości (REO), która najczęściej rozumiana jest jako najmniejsza objętość analizowanego ośrodka, która zawiera wszystkie informacje o strukturze i własnościach całego materiału [4]. W pracach [2, 10] przedstawiono liczne definicje REO wykorzystywane przez badaczy do różnych celów, jak również wykorzystanie analizy statystycznej do określenia wielkości REO.

Wyznaczanie parametrów efektywnych, z wykorzystaniem REO, pozwala na znaczną redukcję czasu obliczeń, ponieważ objętość ta zawiera znacznie mniejszą liczbę niejednorodności, aniżeli objętość całego materiału. Jednakże w wielu przypadkach nawet obliczenia prowadzone na obszarze reprezentatywnym wymagają długiego czasu ze względu na duży rozmiar REO [15]. W pracy [9] stwierdzono, że „odpowiedź” REO musi być niezależna od przyłożonych warunków brzegowych (periodyczność, jednorodny stan odkształcenia bądź naprężenia), co również przemawia za tym, iż obszar REO musi być odpowiednio duży. W literaturze spotkać można liczne próby zredukowania wymaganego czasu obliczeń, np. poprzez dzielenie rozpatrywanego obszaru na regularne, nienakładające się „podobszary” [16], rekonstrukcję rzeczywistego ośrodka z wykorzystaniem dostępnej informacji statystycznej [14], bądź prowadzenie równoległych obliczeń na wielu procesorach w jednym czasie (ang. *parallel computing*) [3].

* Wydział Budownictwa Lądowego i Wodnego, Politechnika Wroclawska, Wrocław

W tym artykule zdecydowano się na inne podejście, a mianowicie, aby parametry efektywne określać rozpatrując dużą ilość losowych realizacji, znacznie mniejszych mikrostruktur, a następnie analizowany parametr określać jako wartość średnią, tj.:

$$\bar{k} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n k_j, \quad (1)$$

gdzie:

n — określa liczbę realizacji;

k_j — jest pewnym parametrem określonym dla j -tej realizacji.

W poprzednich pracach autorów prezentowano już przyjęte tutaj rozumowanie dla przykładu parametrów mechanicznych sprężystości [6] oraz parametrów transportu [5]. Wówczas jednak zakładano a priori wielkość rozpatrywanego obszaru oraz liczbę wykonanych realizacji, nie analizując w sposób analityczny, czy przyjęte n jest wystarczające. W kolejnej pracy [8] wysunięto tezę, że gdy analizowane są parametry efektywne transportu, to wielkość obszaru ma ogromne znaczenie, tzn. jeśli przyjęty w obliczeniach wymiar próbki jest za mały, to wykonując nawet nieskończoną liczbę realizacji n nie otrzymamy w wyniku parametrów efektywnych. Ponadto z wykonanych symulacji numerycznych wynikało, iż minimalny wymiar próbki może być określany na podstawie informacji statystycznej zawartej w prawdopodobieństwie dwupunktowym.

W tym artykule podjęto próbę analitycznego określenia, zarówno minimalnego wymiaru próbki, jak również wymaganej liczby realizacji n . W tym pierwszym przypadku wykorzystano, jak już wcześniej wspomniano, funkcję korelacji, a mianowicie prawdopodobieństwo dwupunktowe [11], natomiast do zrealizowania drugiego celu użyto (ze względu na rozpatrywany typ mikrostruktury) właściwości rozkładu dwumianowego [1]. Innymi słowy, w tej pracy, podjęto próbę zdefiniowania REO w bardziej szerokim zakresie, tj. poprzez definicję wielkości próbki wraz z liczbą koniecznych do wykonania realizacji. Pokazano również, że niektóre właściwości kompozytów można określać poprzez uśrednianie po małej liczbie realizacji dużych próbek bądź zamiennie poprzez rozpatrywanie dużej liczby realizacji małych mikrostruktur. Podobnie jak w poprzednich pracach analizowano tzw. mikrostrukturę komórkową będącą imitacją obrazu binarnego. Krótki opis procesu jej realizacji przedstawiono w kolejnym rozdziale. Ponadto należy wspomnieć, iż analizy numeryczne ograniczono do określania wartości parametrów efektywnych transportu, na przykładzie procesu dyfuzji.

2. Analizowana mikrostruktura

2.1. Generowanie mikrostruktury poprzez symulacje numeryczne

Podobnie jak we wcześniejszych pracach autorów, tak i w tym artykule, rozważania dotyczą szczególnego typu mikrostruktury komórkowej, których przykłady, w zależności

od liczby komórek, przedstawiono na rysunku 1. Losowe realizacje mikrostruktury tworzy się wykorzystując generator liczb pseudolosowych z rozkładu równomiernego z przedziału $[0, 1)$. Dla mikrostruktury dwuskładnikowej, o udziale frakcyjnym wtrąceń ϕ , konstruowanie geometrii odbywa się poprzez przyporządkowanie komórkom parametrów matrycy, bądź wtrącenia. Odbywa się to w następujący sposób: „krocząc” od komórki do komórki generuje się liczbę pseudolosową — jeśli wygenerowana liczba jest mniejsza bądź równa ϕ wówczas tej komórce przypisuje się parametry wtrącenia (komórka wypełniana jest kolorem czarnym), w przeciwnym wypadku — parametry matrycy (komórka wypełniana jest kolorem białym).



Rys. 1. Przykłady losowo wygenerowanych mikrostruktur, odpowiednio: 40×40 , 60×60 , 80×80

2.2. Generowanie mikrostruktury: opis probabilistyczny

Przedstawiony powyżej sposób generacji mikrostruktury zapewnia, że dla dostatecznie dużej liczby komórek udział frakcyjny wtrącenia jest bliski wartości założonej na początku losowania. Ponadto sposób tworzenia mikrostruktury można opisywać przy pomocy rozkładu dwumianowego — jako sukces rozumiemy przypisanie komórce koloru czarnego z prawdopodobieństwem p , natomiast porażka oznacza pojawienie się w komórce koloru białego z prawdopodobieństwem $q = 1 - p$. Każda mikrostruktura ma kształt kwadratu o równej liczbie wierszy i kolumn N . Zatem wszystkich komórek (niezależnych prób) mamy N^2 . Wobec tego wartość oczekiwana udziału frakcyjnego ϕ wynosi:

$$E(\phi) = \sum_{t=0}^{N^2} \frac{t}{N^2} \binom{N^2}{t} p^t q^{N^2-t} = p, \quad (2)$$

gdzie t oznacza liczbą sukcesów.

Zatem takie losowanie zapewnia, że wartość oczekiwana udziału frakcyjnego wynosi p . Oczywiście, w przypadku rzeczywistych mikrostruktur, gdy N jest pewną skończoną wartością, to wówczas zgodnie z prawem wielkich liczb mamy, że gdy N wzrasta, to prawdopodobieństwo, że S_N/N^2 odchyli się od p o więcej niż dowolnie zadana z góry liczba $\varepsilon > 0$, zmierza do zera (przez S_N rozumiemy liczbę wszystkich sukcesów).

Analogicznie jak wyrażenie (2) określamy wartość oczekiwaną kwadratu udziału frakcyjnego:

$$E(\phi^2) = \sum_{t=0}^{N^2} \left(\frac{t}{N^2} \right)^2 \frac{N^2!}{t!(N^2-t)!} p^t q^{N^2-t} = \frac{(N^2-1)p^2 + p}{N^2}. \quad (3)$$

3. Określanie właściwości mikrostruktury oraz parametrów efektywnych transportu

3.1. Udział frakcyjny

Rozważmy teraz zbiór n realizacji mikrostruktur takich jak na rysunku 1. Każda j -ta mikrostruktura generowana jest w sposób opisany w poprzednim rozdziale. Udział frakcyjny czarnych komórek (wtrąceń), dla każdej realizacji, wynosi ϕ_j . Całkowity udział frakcyjny czarnych komórek, obliczony po wszystkich n realizacjach, określamy zgodnie ze wzorem (1), tj.

$$\bar{\phi} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \phi_j = \frac{1}{nN^2} \sum_{j=1}^n S_N^j = \frac{S_N}{nN^2}, \quad (4)$$

gdzie:

S_N^j — liczba sukcesów w j -tej realizacji;

S_N — oznacza liczbę wszystkich sukcesów w n realizacjach.

Postulujemy teraz następujące ograniczenie na wartość estymatora $\bar{\phi}$:

$$p(1-\varepsilon) \leq \bar{\phi} \leq p(1+\varepsilon). \quad (5)$$

Jak wspomniano już wcześniej ε jest dowolną, z góry zadaną, liczbą taką, że $\varepsilon > 0$. Wówczas zagadnienie określenia koniecznej liczby realizacji n , przy zadanej wartości ε , można sformułować w następujący sposób:

$$\forall (\delta > 0, N > 0) \quad \exists n \Rightarrow P(p(1-\varepsilon)nN^2 \leq S_N \leq p(1+\varepsilon)nN^2) \geq 1-\delta, \quad (6)$$

gdzie δ jest zadanym parametrem określającym prawdopodobieństwo z jakim S_N ma spełniać zadane ograniczenie.

Z drugiej strony, nietrudno zauważyć, że prawdopodobieństwo dane zależnością (6) równe jest:

$$P(p(1-\varepsilon)nN^2 \leq S_N \leq p(1+\varepsilon)nN^2) = \sum_{i=i_{\min}}^{i=i_{\max}} \binom{nN^2}{i} p^i q^{(nN^2-i)}, \quad (7)$$

przy czym

$$i_{\min} = \lfloor nN^2(1-\varepsilon)p \rfloor + 1$$

$$i_{\max} = \lfloor nN^2(1+\varepsilon)p \rfloor$$
(8)

W powyższych równaniach symbol [*] oznacza część całkowitą.

Zatem określenie koniecznej liczby realizacji n sprowadza się do obliczania sumy z równania (7), przy zadanej dokładności ε oraz przy ustalonym prawdopodobieństwie (6), tj. zadaniu wartości parametru δ . Przeprowadzono obliczenia dla różnych rozmiarów mikrostruktur, od $N = 1$ do $N = 20$. Wyniki zebrano w tabeli 1. Warto tu wspomnieć, że obliczenia wykonano dla wartości $\delta = 0,05$ oraz dwóch wartości $\varepsilon = 0,03$ i $\varepsilon = 0,05$. Przyglądając się wynikom zebranym w tabeli 1 nietrudno dostrzec, że im większy wymiar próbki N , tym mniejsza liczba realizacji n jest wymagana. Ponadto, dla ustalonej wielkości N , im większa wartość p , tym mniejsza liczba realizacji.

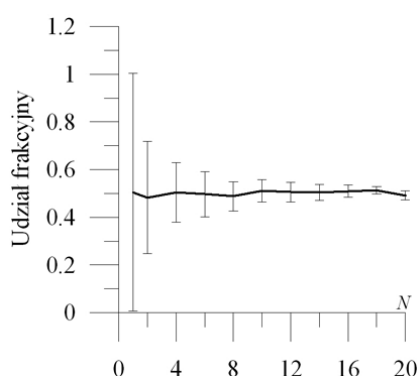
TABELA 1

Wymagana liczba realizacji n określona dla różnych wielkości obszaru N

N	Liczba realizacji n					
	$p = 0,1$		$p = 0,3$		$p = 0,5$	
	$\varepsilon = 0,03$	$\varepsilon = 0,05$	$\varepsilon = 0,03$	$\varepsilon = 0,05$	$\varepsilon = 0,03$	$\varepsilon = 0,05$
1	38417	13705	9952	3540	4264	1501
2	9551	3431	2486	885	1056	381
4	2389	859	619	225	263	96
6	1065	385	275	100	119	44
8	600	217	155	57	67	25
10	384	139	100	36	43	16
12	267	97	70	25	30	11
14	197	71	51	19	22	8
16	150	55	39	15	17	6
18	119	43	31	12	14	5
20	96	35	25	9	11	4

Na rysunku 2 zilustrowano również zależność estymatora $\bar{\phi}$ od wielkości próbki N dla przypadku, gdy $p = 0,5$. Nietrudno dostrzec zależność, iż im większe N tym, rozrzut wokół

wartości średniej jest mniejszy. Jednak, co najważniejsze, wartość średnia nie zależy od rozmiaru N , pod warunkiem, że przeprowadzona jest wystarczająca liczba realizacji. Nawet, gdy próbka składa się z jednej komórki ($N = 1$), to wartość średnia niewiele odbiega od założonej wartości p . Zatem można wysunąć wniosek, iż udział frakcyjny w ośrodku niejednorodnym może być z powodzeniem określany poprzez uśrednienie po kilku realizacjach dużych próbek, bądź wielu realizacjach znacznie mniejszych mikrostruktur (tab. 1, rys. 2). W następnym rozdziale sprawdzimy, czy takie rozumowanie można rozszerzyć na przypadek parametrów efektywnych transportu.



Rys. 2. Wartość średnia udziału frakcyjnego w funkcji wielkości próbki N

3.2. Parametry efektywne transportu

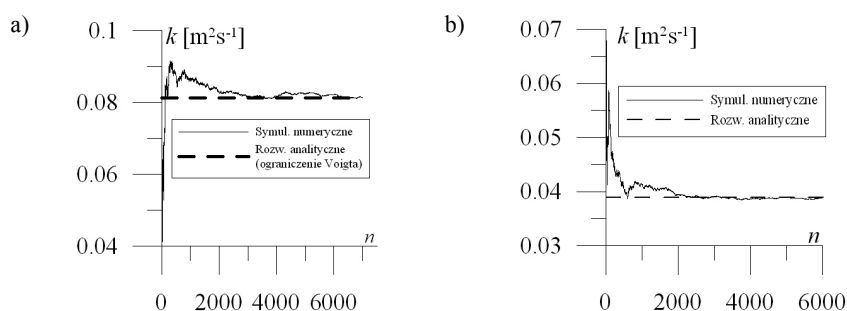
Jak wspomniano wcześniej określanie parametrów fizycznych ograniczono do przypadku dwuwymiarowej dyfuzji przez ośrodek losowy przedstawiony na rysunku 1. Każda komórka ma przypisany współczynnik dyfuzji — $k_M = 0,009 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ dla matrycy oraz $k_W = 0,25 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ dla wtrącenia. Metodę określania parametrów efektywnych transportu (wykorzystywaną w dalszej analizie) dla takich mikrostruktur sformułowano we wcześniejszych pracach autorów [5, 8].

Podobnie jak to miało miejsce w przypadku udziału frakcyjnego rozważmy zbiór n realizacji mikrostruktur, takich, jak na rysunku 1. Parametr dyfuzji, dla każdej j -tej realizacji, określamy jako k_j . W pierwszej kolejności sformułujemy rozwiązanie analityczne dla najmniejszej możliwej wielkości próbki, czyli $N = 1$. Oczywiście jest, że ze względu na procedurę generowania ośrodka losowego, komórka posiadająca parametr wtrącenia k_W pojawia się z prawdopodobieństwem p , natomiast komórce przypisuje się parametr matrycy k_M z prawdopodobieństwem $q = 1 - p$. Zatem wartość oczekiwana parametru efektywnego dyfuzji wynosi:

$$E(k) = \sum_{t=0}^1 k_t \frac{1}{t!(1-t)!} p^t (1-p)^{1-t} = k_W p + k_M (1-p), \quad (9)$$

przy czym w powyższym równaniu, jeśli $t = 0$, to $k_0 = k_M$ oraz dla $t = 1$ mamy, że $k_1 = k_W$. Łatwo zauważyć, że równanie (9) opisuje oszacowanie Voigta.

Następnie wykonano symulacje numeryczne wyznaczając estymator wartości oczekiwanej \bar{k} dany równaniem (1). Wyniki przedstawiono na wykresie (rys. 3a). Obliczenia przeprowadzono dla wartości prawdopodobieństwa $p = 0,3$; wówczas wartość oczekiwana dana zależnością (9) wynosi $E(k) = 0,0813 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$. Jak widać estymator \bar{k} już po liczbie realizacji $n = 3000$ niewiele odbiega od wartości oczekiwanej — rozwiązania analitycznego (rys. 3a).

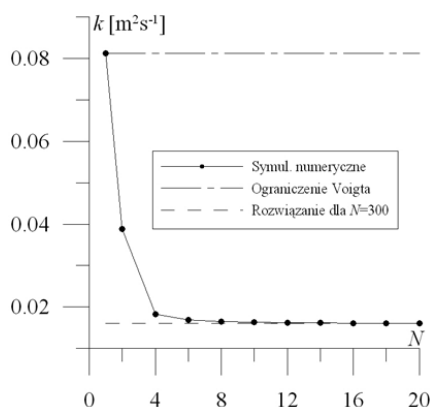


Rys. 3. Porównanie wyników z symulacji numerycznych oraz rozwiązania analitycznego: a) $N = 1$; b) $N = 2$

Analogicznie wyznaczono rozwiązanie analityczne dla większej próbki, tj. $N = 2$. Tym razem wymagało to rozpatrzenia, nie dwóch jak poprzednio, lecz szesnastu możliwych realizacji mikrostruktury. W tym przypadku $E(k) = 0,0389 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$. Podobnie jak poprzednio rozwiązanie numeryczne zbiega dość szybko do wartości oczekiwanej i właściwie już po 2000 realizacji niewiele od niego odbiega (rys. 3b). Co jednak ważniejsze, rozwiązania w tych dwóch przypadkach, tj. $N = 1$ oraz $N = 2$, znacznie się różnią. Wynika z tego, iż w przypadku parametrów efektywnych transportu nie można przyjąć rozumowania jak dla udziału frakcyjnego. Wobec powyższego wartość parametru efektywnego zależy nie tylko od liczby realizacji, ale również od wielkości próbki N .

Ze względu na to, iż wyznaczanie rozwiązania analitycznego wymaga rozpatrywania dużej liczby realizacji, a mianowicie 2^{N^2} , dlatego dla większych wymiarów próbek wykonano jedynie symulacje numeryczne. Wyniki obrazujące wartość średnią parametru efektywnego w funkcji wymiaru próbki (od $N = 1$ do $N = 20$) przedstawiono na rysunku 4. Za każdym razem liczbę realizacji n przyjęto jak dla przypadku udziału frakcyjnego (tab. 1. $p = 0,3$; $\varepsilon = 0,03$). Obserwując wyniki łatwo dostrzec, że wraz ze wzrostem wymiaru próbki N , wartość średnia parametru efektywnego asymptotycznie dąży do ustalonej wartości. Na wykresie przedstawiono również rozwiązanie numeryczne jednej (znacznie większej) realizacji mikrostruktury o wymiarze $N = 300$ (linia przerywana). Wyraźnie widać, że rozwiązania dla $N \geq 10$ bardzo nieznacznie odbiegają od tego określonego dla jednej dużej realizacji. Zatem parametry efektywne transportu można wyznaczać rozpatrując małą liczbę realizacji — nawet jedną realizację — dużych obszarów, lub dużą liczbę realizacji znacznie mniejszych mikrostruktur ale pod warunkiem, że wymiar próbki jest wystarczająco duży. Rozpatrywany obszar musi być odpowiednio duży, aby był reprezentatywny do określania para-

metrów efektywnych transportu. Nie można zatem sformułować wniosku jak w przypadku udziału frakcyjnego, gdzie decydująca była tylko liczba wykonanych realizacji — wartość średnia nie zależała od wielkości obszaru, a jedynie od liczby realizacji n .



Rys. 4. Wartość średnia k w funkcji wielkości próbki N

Ponieważ w przypadku określania parametrów transportu istnieje pewna progowa wielkość próbki poniżej, której otrzymane rezultaty są dalekie od wartości parametrów efektywnych, w następnym rozdziale podjęto próbę określenia minimalnej wielkości reprezentatywnej elementarnej objętości na podstawie prawdopodobieństwa dwupunktowego.

4. Określenie minimalnego wymiaru próbek: prawdopodobieństwo dwupunktowe

Prawdopodobieństwo dwu-punktowe jest funkcją korelacji bardzo często wykorzystywaną w mechanice ośrodków niejednorodnych do tworzenia ograniczeń wartości parametrów efektywnych [11] oraz rekonstrukcji mikrostruktur rzeczywistych materiałów [12, 13]. Miara ta określana jest dla każdego ze składników ośrodka osobno. Prawdopodobieństwo dwu-punktowe dla wtrącenia $S_2^{(W)}$ (matrycy $S_2^{(M)}$) oznacza prawdopodobieństwo z jakim dwa losowo rzucone na obszar ośrodka punkty znajdują się we wtrąceniu (w matrycy).

Dla ośrodka statystycznie izotropowego wartość prawdopodobieństwa zależy tylko od względnej odległości pomiędzy dwoma punktami $z = |z|$ i prawdziwe są następujące związki [11]:

$$\begin{aligned}
 S_2^{(M)}(z) &= (1 - \phi) - 0.5S_2^{(MW)}(z) \\
 S_2^{(W)}(z) &= \phi - 0.5S_2^{(MW)}(z) \\
 S_2^{(M)}(z) + 2S_2^{(MW)}(z) + S_2^{(W)}(z) &= 1
 \end{aligned}
 \tag{10}$$

gdzie $S_2^{(M)}$ oznacza prawdopodobieństwo, że dwa losowo rzucone punkty znajdują się jednocześnie w dwóch różnych składnikach kompozytu — innymi słowy, funkcja ta oznacza prawdopodobieństwo zajścia zdarzenia, że pierwszy punkt znajdzie się w matrycy, a drugi we wtrąceniu lub odwrotnie. Zauważmy, że wystarczy znać tylko jedną funkcję prawdopodobieństwa, np. dla wtrącenia $S_2^{(M)}$, a dwie pozostałe, tj. $S_2^{(M)}$ oraz $S_2^{(M)}$ można określić z zależności (10). Ponadto, jak pokazano w pracy [11], prawdopodobieństwo dwupunktowe dla wtrącenia osiąga swoją maksymalną wartość równą ϕ dla $z = 0$ i asymptotycznie zbiega do wartości ϕ^2 dla $z \rightarrow \infty$.

Wyniki symulacji numerycznych, uzyskane przez autorów we wcześniejszej pracy [8], prowadzą do wniosku, że na podstawie wartości prawdopodobieństwa dwupunktowego można określać minimalny wymiar próbki, który jest reprezentatywny — pod warunkiem wykonania odpowiedniej liczby realizacji — dla rozważanego zagadnienia. Innymi słowy szukamy minimalnego wymiaru obszaru, który przy wykonaniu odpowiednio dużej liczby realizacji będzie odwzorowaniem (ze względu na zgodność prawdopodobieństwa dwupunktowego) jednej realizacji dużej mikrostruktury. Poniżej prezentujemy sformułowanie analityczne tego zagadnienia.

Ze względu na opisane wcześniej właściwości prawdopodobieństwa dwupunktowego postulujemy, że odwzorowanie mikrostruktury, pod względem geometrycznym, jest poprawne, gdy:

$$\frac{\left| (E(\phi))^2 - E(\phi^2) \right|}{(E(\phi))^2} \leq \varepsilon. \quad (11)$$

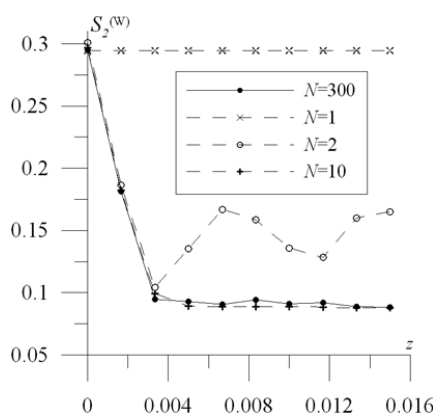
Podstawiając wyrażenia (2) i (3) do nierówności (11) otrzymujemy, że wymiar obszaru, aby był reprezentatywny pod względem odwzorowania geometrii, musi spełniać następujący warunek:

$$N \geq \sqrt{\frac{1-p}{\varepsilon p}}. \quad (12)$$

Dla rozważanej przez nas mikrostruktury mamy $p = 0,3$. Przyjmujemy, jak poprzednio, że $\varepsilon = 0,03$. Wówczas minimalny wymiar próbki (zakładając, że N musi być liczbą całkowitą) określony na podstawie warunku (12) wynosi $N \geq 9$. Należy tutaj wspomnieć, że N określone jest z warunku (11), który bazuje na wartościach oczekiwanych udziału frakcyjnego, zatem aby tak określony wymiar był reprezentatywny należy wykonać odpowiednio dużą liczbę realizacji.

Prawdopodobieństwo dwupunktowe dla wtrącenia (dla różnych wielkości próbki N) przedstawiono na rysunku 5, przy czym z oznacza odległość między dwoma punktami. Ponadto należy tu wspomnieć, że każda komórka ma wymiar $1/300$. Wartości funkcji $S_2^{(M)}$ określono poprzez symulacje Monte Carlo, tj. wielokrotne rzucanie odcinka o długości z i zli-

czanie ile razy oba jego końce znajdowały się we wtrąceniu. Dla przypadku $N = 1$, $N = 2$ oraz $N = 10$ określono wartość tej funkcji korelacji jako wartość średnią po liczbie realizacji n , którą przyjęto jak w przypadku rozważania udziału frakcyjnego (tab. 1; $p = 0,3$; $\varepsilon = 0,03$). W przypadku dużej mikrostruktury ($N = 300$), analogicznie jak dla parametrów efektywnych, wartość funkcji określono dla jednej realizacji.



Rys. 5. Wartości prawdopodobieństwa dwupunktowego dla wtrącenia dla różnych wielkości rozpatrywanych obszarów N

Obserwując wyniki (rys. 5) można dostrzec, że dla zbyt małych obszarów ($N = 1$, $N = 2$), nie spełniających warunku (12), obie funkcje znacznie od siebie odbiegają oraz, że nie dążą do rozwiązania dla dużej próbki ($N = 300$). W przypadku $N = 10$ ($n = 100$ realizacji) oraz jednej realizacji mikrostruktury o wymiarze $N = 300$ wartości $S_2^{(w)}$ są już niemal identyczne. Zatem bazując na własnościach prawdopodobieństwa dwu-punktowego jedną realizację dużej mikrostruktury można odwzorować, pod względem geometrii, poprzez większą liczbę realizacji znacznie mniejszych mikrostruktur.

Jeśli ponadto porównamy wyniki dla prawdopodobieństwa dwu-punktowego (rys. 5) oraz parametrów efektywnych (rys. 4), to nietrudno dostrzec podobną tendencję — zarówno w jednym i drugim przypadku, gdy spełniony jest warunek (12), to przy wystarczającej liczbie realizacji n wartość średnia poszukiwanego parametru jest bliska wartości otrzymanej dla jednej realizacji dużej mikrostruktury.

5. Wnioski

Na przykładzie testowej mikrostruktury (rys. 1) w artykule przedstawiono szerszą definicję REO obejmującą, nie tylko wymiar rozważanego obszaru, ale również liczbę koniecznych do wykonania realizacji. Wykazano, że możliwe jest odwzorowanie właściwości jednej bardzo dużej realizacji mikrostruktury poprzez dużą liczbę realizacji znacznie mniej-

szych obszarów. Ponadto sformułowano wniosek, że wymiary REO dla określania parametrów efektywnych transportu oraz parametrów opisujących geometrię mogą znacząco się różnić.

W pierwszej kolejności przeanalizowano parametr geometryczny, tj. udział frakcyjny. Na podstawie własności rozkładu dwumianowego przedstawiono procedurę określania koniecznej liczby realizacji, tak aby wartość średnia po wszystkich wykonanych realizacjach nieznacznie odbiegała od wartości założonej przed losowaniem. Wyniki przedstawione w tabeli 1 jednoznacznie wykazują tendencję, iż im większy wymiar próbki N , tym mniejsza liczba realizacji n jest wymagana. Ponadto, dla ustalonej wielkości N , im większa wartość p , tym wymagana liczba realizacji jest mniejsza. Jednocześnie przyglądając się wynikom przedstawionym na wykresie wartości średniej w funkcji N (rys. 2) łatwo dostrzec, że wartość średnia nie zależy od wymiaru próbki N , pod warunkiem, że przeprowadzona jest wystarczająca liczba realizacji. Nawet, gdy $N = 1$ to wartość średnia niewiele odbiega od założonej wartości p . Zatem wartość średnia udziału frakcyjnego nie zależy od wymiaru REO, a jedynie od liczby realizacji.

W przypadku analizy parametrów efektywnych transportu wykazano, że z jednej strony możliwe jest ich określanie poprzez rozpatrywanie dużej liczby realizacji małych próbek, ale z drugiej strony wymiar REO nie może być za mały. Jeśli wymiar REO jest za mały to pokazano na przykładzie rozwiązań numerycznych, jak również analitycznych, że rozwiązania nie zbiegają do wyznaczonego dla jednej dużej realizacji (rys. 3). Ponadto dla najmniejszej możliwej wielkości próbki, tj. $N = 1$ otrzymujemy w wyniku oszacowanie Voigta (9).

W kolejnym rozdziale podjęto próbę analitycznego określenia minimalnej wielkości REO na podstawie własności prawdopodobieństwa dwupunktowego. Innymi słowy poszukiwano najmniejszego możliwego wymiaru REO, który przy wykonaniu odpowiednio dużej liczby realizacji będzie odwzorowaniem (ze względu na zgodność prawdopodobieństwa dwupunktowego) jednej realizacji dużej mikrostruktury (bądź kilku realizacji znacznie większych próbek). Określona z warunku (11) wielkość REO, dla rozważanego przypadku, wyniosła $N \geq 9$. Pokazano, że wykonując 100 realizacji dla $N = 10$ oraz jedną realizację dla $N = 300$ otrzymujemy zgodność wartości prawdopodobieństwa dwu-punktowego (rys. 5). Co jednak najważniejsze identycznie zachowują się zależności dla parametrów efektywnych (rys. 4), gdzie wyraźnie widać, że dla $N \geq 9$ wartość średnia parametru efektywnego pozostaje już niemal stała i tylko nieznacznie różni się od rozwiązania dla $N = 300$.

LITERATURA

- [1] *Feller W.*: An Introduction To Probability Theory And Its Applications, London, John Wiley and Sons 1961
- [2] *Gitman I.M., Askes H., Sluys L.J.*: Representative volume: Existence and size determination, Engineering Fracture Mechanics, vol. 74, 2007, s. 2518–2534
- [3] *Kanit T., Forest S., Galliet I., Mounoury V., Jeulin D.*: Determination of the size of the representative volume element for random composites: statistical and numerical approach, Int. Journal of Solids and Structures, vol. 40, 2003, s. 3647–3679
- [4] *Łydźba D.*: Zastosowania metody asymptotycznej homogenizacji w mechanice gruntów i skał, Wrocław, Oficyna Wydawnicza PWr 2002

- [5] *Łydźba D., Różański A.*: Kompozyty losowe: numeryczne określanie parametrów efektywnych transportu. XXX Zimowa Szkoła Mechaniki Górotworu i Geoinżynierii, Szklarska Poręba 11–16 marca 2007, s. 441–450
- [6] *Łydźba D., Różański A., Kawa M.*: Numeryczna analiza kompozytów losowych metodą komórek, Współczesne problemy naukowo badawcze budownictwa lądowego i wodnego (opracowanie zwarte), Wrocław, Oficyna Wydawnicza PWR 2007
- [7] *Paley M., Aboudi J.*: Micromechanical analysis of composites by the generalized method of cells, *Mechanics of Materials*, vol. 14, 1992, s. 127–139
- [8] *Różański A., Łydźba D., Shao J.F.*: Numerical evaluation of effective transport properties of random cell models: two-point probability approach, "Geoproc 2008", Polytech Lille, Lille 1–5 czerwca 2008, s. 345–353
- [9] *Sab K.*: On the homogenization and simulation of random materials, *Eur. J. Mech. Solids*, vol. 11, 1992, s. 585–607
- [10] *Stroeven M., Askes H., Shyu L.J.*: Numerical determination of representative volume for granular materials, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, vol. 193, 2004, s. 3221–3238
- [11] *Torquato S.*: *Random Heterogeneous Materials. Microstructure and Macroscopic Properties*, New York, Springer-Verlag 2002
- [12] *Yeong C.L.Y., Torquato S.*: Reconstructing random media, *Physical Review E*, vol. 57, nr 1, 1998, s. 495–506
- [13] *Yeong C.L.Y., Torquato S.*: Reconstructing random media II. Three dimensional media from two-dimensional cuts, *Physical Review E*, Vol. 58, Nr 1, 1998, s. 224–233
- [14] *Zeman J., Sejnoha M.*: Numerical evaluation of effective elastic properties of graphite fiber tow impregnated by polymer matrix, *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 49, 2001, s. 69–90
- [15] *Zohdi T.I., Wriggers P.*: *Introduction to Computational Micromechanics*, Berlin, Springer-Verlag, 2005
- [16] *Zohdi T.I., Wriggers P., Huet C.*: A method of subtracting large-scale computational micromechanical problems, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, vol. 190, 2001, s. 5639–5656