

Dariusz Łydźba, Adrian Różański**

WIELKOŚĆ PRÓBKI A REPREZENTATYWNOŚĆ GEOMETRYCZNA MIKROSTRUKTURY KOMPOZYTÓW LOSOWYCH

1. Wprowadzenie

Podstawą wszystkich analiz prowadzonych w geomechanice jest założenie o statystycznej jednorodności ośrodka skalnego. Postulat ten umożliwia, między innymi, stosowanie do opisu procesów zachodzących w tych ośrodkach aparatu mechaniki ośrodka ciągłego oraz wyznaczanie/identyfikację parametrów materiałowych ośrodka na podstawie badań laboratoryjnych prowadzonych na próbkach o skończonej wielkości. Wykorzystywana w badaniach wielkość próbki jest zalecana odpowiednimi przepisami lub wytycznymi normowymi.

Celem niniejszego artykułu jest, na podstawie systematycznych rozważań, sformułowanie warunku na tzw. minimalną wielkość próbki zapewniającą reprezentatywność geometryczną mikrostruktury statystycznie jednorodnego i izotropowego dwuskładnikowego ośrodka losowego. Do oceny reprezentatywności wykorzystywana jest statystyczna miara mikrostruktury zwana funkcją korelacji prawdopodobieństwa dwupunktowego. Próbkę uważa się, w niniejszym artykule, za reprezentatywną jeśli na podstawie znajomości jej geometrii możliwa jest, z zadawalającą dokładnością, replika prawdopodobieństwa dwupunktowego.

Układ pracy jest następujący. W następnym punkcie przedstawia się definicję prawdopodobieństwa dwupunktowego. Szczegółowo analizowane są również jego podstawowe własności. W kolejnym punkcie formułowany jest warunek na minimalną wielkość próbki. Przykłady obliczeniowe w postaci symulacji numerycznych oraz wnioski końcowe kończą pracę.

2. Miara mikrostruktury: prawdopodobieństwo dwupunktowe

Rozważmy pewien dwuskładnikowy kompozyt losowy. Niech składniki 1 oraz 2 tego ośrodka zajmują odpowiednio obszary V_1 oraz V_2 . Rozkład przestrzenny w kompozycie tych

* Instytut Geotechniki i Hydrotechniki, Wydział Budownictwa Lądowego i Wodnego, Politechnika Wroclawska, Wrocław

składników określają ich funkcje charakterystyczne. W szczególności, indeksując składnik kompozytu przez „ i ”, jego funkcja charakterystyczna ma postać:

$$I^{(i)}(\mathbf{y}) = \begin{cases} 1, & \text{dla } \mathbf{y} \in V_i \\ 0, & \text{dla } \mathbf{y} \notin V_i \end{cases} \quad (1)$$

Wartość oczekiwana z funkcji charakterystycznej jest miarą udziału frakcyjnego składnika „ i ” w ośrodku oraz równocześnie — prawdopodobieństwa, że losowo wybrany punkt znajduje się w składniku „ i ”, tj.:

$$E[I^{(i)}(\mathbf{y})] = \phi_i \quad (2)$$

Jest to podstawowa miara mikrostruktury ośrodka i określana jest również mianem prawdopodobieństwa jednopunktowego dla składnika „ i ”. Jeśli ośrodek jest ponadto statystycznie jednorodny wtedy wartość oczekiwana jest równoważna uśrednieniu objętościowemu, tj.:

$$E[I^{(i)}(\mathbf{y})] = \langle I^{(i)}(\mathbf{y}) \rangle = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \int_V I^{(i)}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \quad (3)$$

Analogicznie, tzn. z wykorzystaniem operatora wartości oczekiwanej, definiowana jest miara wyższego rzędu będąca miarą prawdopodobieństwa, że losowo wybrane dwa punkty odległe o wektor \mathbf{z}_2 znajdują się w składniku i , tj.:

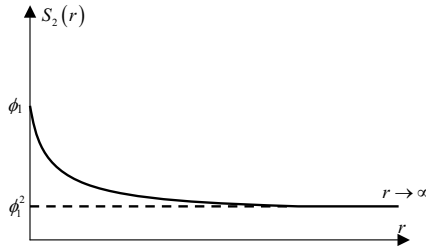
$$S_2^i(\mathbf{z}_2) = E[I^{(i)}(\mathbf{y})I^{(i)}(\mathbf{y} + \mathbf{z}_2)] \quad (4)$$

Przy statystycznej jednorodności oraz statystycznej izotropii ośrodka miara ta zależy tylko od względnej odległości $r = |\mathbf{z}_2|$ pomiędzy dwoma punktami [3], tj.:

$$S_2^i(r) = E[I^{(i)}(\mathbf{y})I^{(i)}(\mathbf{y} + r)] = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \int_V I^{(i)}(\mathbf{y})I^{(i)}(\mathbf{y} + r) d\mathbf{y} \quad (5)$$

Funkcja korelacji $S_2^i(r)$ określana jest również mianem prawdopodobieństwa dwupunktowego [2, 3]. Dla $r = 0$ jest ona równa ϕ_i oraz przy $r \rightarrow \infty$ „zbiega” do wartości ϕ_i^2 (rys. 1).

Mając binarny obraz mikrostruktury, funkcję prawdopodobieństwa dwupunktowego klasycznie określa się wykorzystując metodę Monte Carlo [2]. W niniejszym artykule zastosowana zostanie odmienna procedura. Niech obraz mikrostruktury stanowi kwadrat o $M \times M$ pikselach. Przyporządkowując określonemu składnikowi mikrostruktury wartość 1 oraz drugiemu składnikowi wartość 0, obraz mikrostruktury może być odwzorowany w postaci kwadratowej macierzy $A[i, j]$ o wymiarze M . Indeksy i oraz j odpowiadają pozycji piksela, tj. są to odpowiednio numer wiersza oraz kolumny w cyfrowym obrazie mikrostruktury. Wartość $A[i, j] = 1$ oznacza, że piksel ten zajmowany jest przez wyróżniony składnik, natomiast war-



Rys. 1. Schematyczny wykres prawdopodobieństwa dwupunktowego z charakterystycznymi punktami „przebiegu”

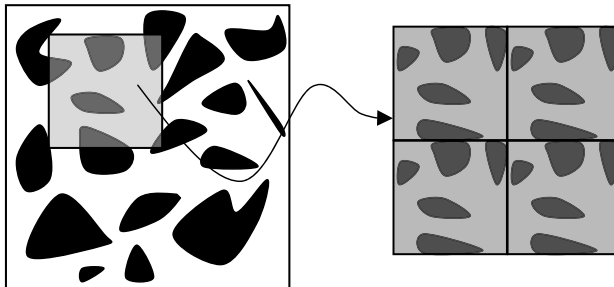
tość 0 implikuje występowanie w tym pikselu drugiego składnika. Funkcja korelacji prawdopodobieństwa dwupunktowego określona jest wtedy zależnością:

$$S_2(k) = \frac{1}{M^2} \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^M \frac{A[i,j](A[i,j+k] + A[i+k,j])}{2} \quad k = 1, 2, \dots \quad (6)$$

3. Minimalny wymiar próbki: sformułowanie warunku

Niech z rozważanego dwuskładnikowego kompozytu wybierana jest losowo próbka o określonym wymiarze, tj. $N \times N$ pikseli. Otrzymaną mikrostrukturę „rozszerzamy” na cały obszar $M \times M$ pikseli przez periodyczną replikę wylosowanej mikrostruktury (rys. 2). Następnie dla tak wygenerowanej mikrostruktury wyznaczamy zgodnie z zależnością (5) funkcję prawdopodobieństwa dwupunktowego. Wykonujemy n takich losowań i procedurę „rozrzeszenia” ośrodka oraz wyznaczenia prawdopodobieństwa dwupunktowego każdorazowo powtarzamy. Ostateczną wartość prawdopodobieństwa dwupunktowego utożsamiamy ze średnią arytmetyczną prawdopodobieństwa dwupunktowego otrzymanego z tych n losowań. Jaki musi być wymiar próbki N , aby gwarantował, przy dostatecznie dużej liczbie losowań n , otrzymanie, z założoną dokładnością, repliki prawdopodobieństwa dwupunktowego ośrodka oryginalnego?

Sformułowanie warunku na wartość N jest konsekwencją dwóch własności funkcji korelacji prawdopodobieństwa dwupunktowego. Po pierwsze, ponieważ $\lim_{r \rightarrow \infty} S_2(r) \rightarrow \phi^2$, wobec



Rys. 2. Losowanie próbki i „generowanie” ośrodka przez periodyczną replikę

tego, dla zadanej dokładności ε , można zawsze określić promień korelacji $l_p(\varepsilon)$, dla którego spełniona jest zależność:

$$\forall r \geq l_p(\varepsilon) \Rightarrow \left| \frac{S_2(r) - \phi^2}{\phi^2} \right| \leq \varepsilon \quad (7)$$

Oczywiście wartość N musi być nie mniejsza niż promień korelacji $l_p(\varepsilon)$. Przyjmijmy, że:

$$N_{\min} = l_p(\varepsilon) + \delta \quad (8)$$

Ponieważ ośrodek „tworzony” jest przez periodyczną replikę wylosowanej próbki, zatem zależność (5) wraz z periodycznością mikrostruktury implikują następujący związek:

$$S_2[l_p(\varepsilon)] = \frac{\delta}{l_p(\varepsilon) + \delta} S_2[l_p(\varepsilon)] + \frac{l_p(\varepsilon)}{l_p(\varepsilon) + \delta} S_2(\delta) \quad (9)$$

Powyższa równość jest spełniona, dla dowolnej funkcji prawdopodobieństwa dwupunktowego, jeśli $\delta = l_p(\varepsilon)$, a wobec tego:

$$N_{\min} = 2l_p(\varepsilon) \quad (10)$$

Jeśli będą więc losowane próbki o wymiarze $N \geq N_{\min}$, wtedy wartość prawdopodobieństwa dwupunktowego dla $r = l_p$ będzie równa, zgodnie z własnością analizowanej funkcji korelacji, kwadratowi udziału frakcyjnego składnika w wylosowanej próbce. Wartość udziału frakcyjnego χ w próbce to wielkość lokalna [1]. Ponieważ ośrodek jest statystycznie jednorodny, zatem:

$$E[\chi] = \phi \quad (11)$$

Z drugiej strony, warunek (7), implikuje następującą nierówność:

$$\frac{E[\chi^2] - \phi^2}{\phi^2} \leq \varepsilon \quad (12)$$

Lewy człon powyższej nierówności, wykorzystując funkcje prawdopodobieństwa dwupunktowego, można również wyrazić następująco [4]:

$$\left| \frac{E[\chi^2] - \phi^2}{\phi^2} \right| = \frac{4}{N^2 \phi^2} \int_0^N \int_0^N [S_2(\sqrt{x^2 + y^2}) - \phi^2] (N-x)(N-y) dx dy \quad (13)$$

Jest to funkcja malejąca wielkości próbki N . Oznaczając zatem przez N_c wymiar próbki, dla którego spełnione jest:

$$\forall N \geq N_x \Rightarrow \left| \frac{E[\chi^2] - \phi^2}{\phi^2} \right| \leq \varepsilon \quad (14)$$

konieczny wymiar próbki zapewniający replikę prawdopodobieństwa dwupunktowego, z założoną dokładnością, określa poniższa nierówność:

$$N \geq \max\{N_x, 2I_p(\varepsilon)\} \quad (15)$$

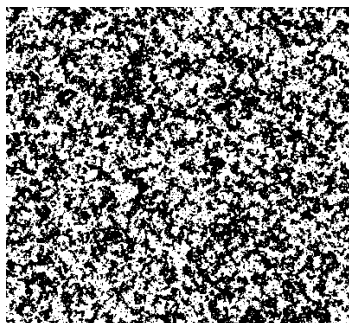
4. Weryfikacja numeryczna

Sformułowany powyżej warunek na minimalny wymiar próbki jest tzw. warunkiem koniecznym. Na drodze rozważań ogólnych wydaje się niemożliwe udowodnienie, że jest to również warunek wystarczający. Z tego względu jego przydatność zweryfikowano dokonując licznych symulacji numerycznych dla różnych typów mikrostruktur. Wszystkie analizy potwierdziły efektywność proponowanego warunku. W niniejszym artykule ograniczono się do przedstawienia wyników dla trzech typów mikrostruktur.

Na rysunku 3 przedstawiono obraz cyfrowy mikrostruktury Debye'a [3]. Funkcja prawdopodobieństwa dwupunktowego dla tej mikrostruktury określona jest zależnością:

$$S_2(r) = \phi(1 - \phi)e^{-\frac{r}{a}} + \phi^2 \quad (16)$$

Wykres tej funkcji dla $a = 2$ przedstawia rysunek 4.

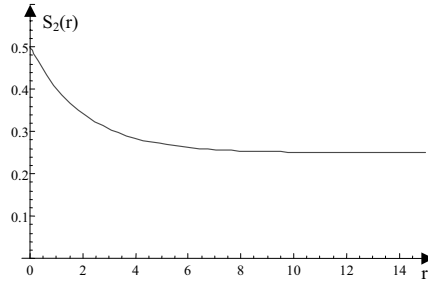


Rys. 3. Mikrostruktura Debye'a [3]

Odpowiadający tej mikrostrukturze wykres funkcji:

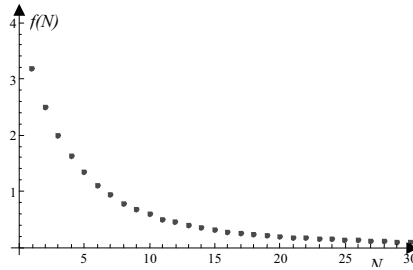
$$f(N) = \left| \frac{E[\chi^2] - \phi^2}{\phi^2} \right| \quad (17)$$

wyznaczono numerycznie metodą Monte Carlo i przedstawiono na rysunku 5. Minimalny wymiar próbki, przy dopuszczalnej tolerancji $\varepsilon = 0,01$, wyznaczono zgodnie z warunkiem (15)

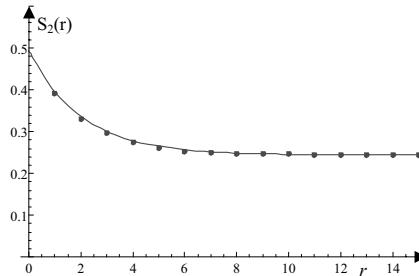


Rys. 4. Funkcja prawdopodobieństwa dwupunktowego dla mikrostruktury Debye'a

i otrzymano $\max\{N_{\chi^2}, 2l_p(\varepsilon)\} = 30$. Warunkiem decydującym była nierówność (14). Jakość otrzymanej repliki, dla tej minimalnej próbki, przedstawia rysunek 6. Na rysunku punkty oznaczają wartości dla repliki natomiast linia ciągła to oryginalna funkcja.



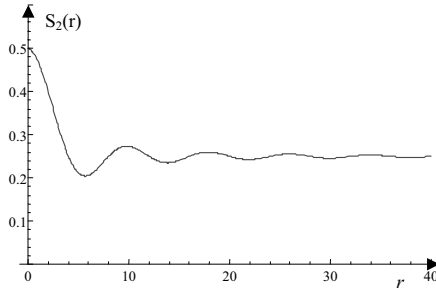
Rys. 5. Wykres funkcji $f(N)$ dla mikrostruktury Debye'a



Rys. 6. Otrzymana replika funkcji prawdopodobieństwa dwupunktowego.
Wymiar próbki: 30 pikseli, 40 losowań

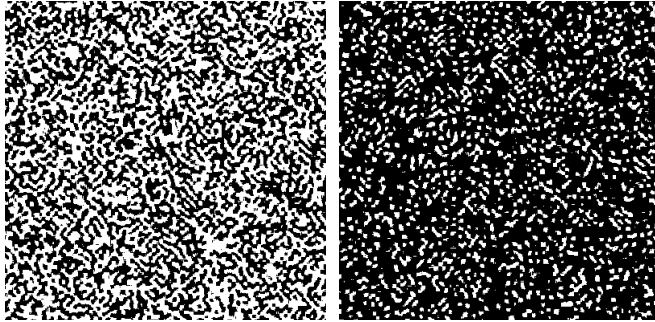
W dalszej analizie rozważano mikrostruktury, dla których „przebieg” funkcji prawdopodobieństwa dwupunktowego był bardziej skomplikowany (rys. 7). Prawdopodobieństwo to opisane było następującą zależnością:

$$S_2(r) = \phi(1 - \phi)e^{-\frac{r}{a}} \frac{\sin(qr)}{qr} + \phi^2 \quad q = \frac{2\pi}{b} \quad (18)$$

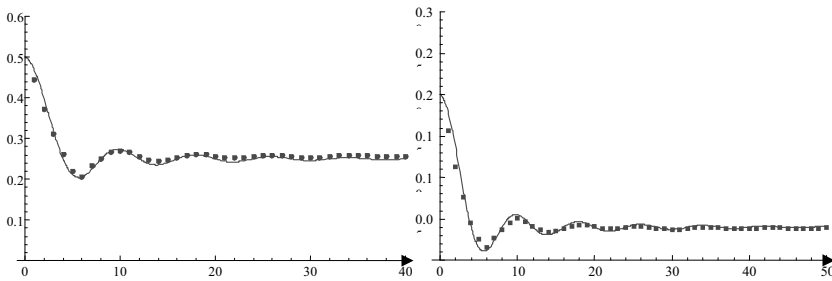


Rys. 7. Wykres funkcji (18) dla $a = 32$, $b = 8$ oraz $\phi = 0,5$

W obliczeniach przyjęto: $a = 32$ oraz $b = 8$. Rozważono dwie wartości udziału frakcyjnego, tj: 0,5 oraz 0,2. Odpowiadające tym parametrom mikrostruktury przedstawiono na rysunku 8. Wyznaczono następujące wielkości próbek: $N = 80$ dla $\phi = 0,5$ oraz $N = 86$ dla $\phi = 0,2$. Wygenerowane numerycznie repliki prawdopodobieństwa dwupunktowego przedstawiają wykresy na rysunku 9.



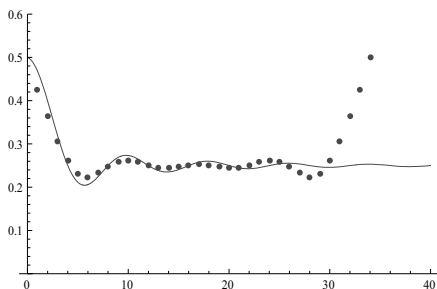
Rys. 8. Mikrostruktury charakteryzujące się prawdopodobieństwem dwupunktowym (16): lewa mikrostruktura $\phi = 0,5$, prawa mikrostruktura $\phi = 0,2$



Rys. 9. Otrzymane repliki prawdopodobieństwa dwupunktowego: lewa mikrostruktura $\phi = 0,5$, prawa mikrostruktura $\phi = 0,2$. Liczba losowań — 40

Należy zaznaczyć, że w przypadku tych mikrostruktur o wielkości próbki decydował warunek (10). Przyjęcie wielkości próbki według warunku (14) skutkowało nie zadawalającą re-

pliką analizowanej funkcji korelacji. Dla mikrostruktury o udziale frakcyjnym $\phi = 0,5$, jakość otrzymanej repliki przy 40 losowaniach oraz próbce $N = 34$ obrazuje wykres na rysunku 10.



Rys. 10. Replika prawdopodobieństwa dwupunktowego przy próbce $N = 34$, udział frakcyjny $\phi = 0,5$, liczba losowań — 40

5. Uwagi końcowe

W artykule, wykorzystując miarę mikrostruktury zwaną prawdopodobieństwem dwupunktowym, sformułowano warunek na minimalną wielkość próbki kompozytu losowego zapewniający jej reprezentatywność ze względu na geometrię mikrostruktury. Jako warunek reprezentatywności geometrii mikrostruktury przyjęto, z założoną dopuszczalną tolerancją, replikę prawdopodobieństwa dwupunktowego. Wykonane, dla różnych typów mikrostruktur kompozytów losowych, symulacje numeryczne wykazały poprawność sformułowanego warunku.

LITERATURA

- [1] Lu B., Torquato S.: Local Volume Fraction Fluctuation in Heterogeneous Media. *J. Chem. Phys.*, 93 (5), 1990, s. 3452–3458
- [2] Łydzba D., Różański A.: Statystyczna charakteryzacja miar geometrycznych mikrostruktur losowych: definicje, właściwości i zastosowania. *Górnictwo i Geoinżynieria*, 33(1), 2009, s. 399–410
- [3] Torquato S.: *Random Heterogeneous Materials. Microstructure and Macroscopic Properties*. Springer-Verlag, New York 2002
- [4] Quintanilla J., Torquato S.: Local Volume Fraction Fluctuation in Random Media. *J. Chem. Phys.*, 106 (7), 1997 s. 2741–2751