

Adrian Różański*, Dariusz Łydzba*, Maciej Sobótka*

NUMERYCZNE OKREŚLANIE PARAMETRÓW EFEKTYWNYCH TRANSPORTU NA PODSTAWIE CYFROWYCH OBRAZÓW MIKROSTRUKTURY

1. Wprowadzenie

W ciągu ostatnich kilkunastu lat silnie rozwinęły się nieinwazyjne (nie powodujące żadnych uszkodzeń) techniki umożliwiające uzyskiwanie obrazów cyfrowych mikrostruktur materiałów kompozytowych. Pośród licznych metod, te najbardziej popularne to: tomografia komputerowa, obrazowanie rezonansu magnetycznego oraz badanie za pomocą mikroskopów elektronowych. Zazwyczaj uzyskany z badania obraz cyfrowy składa się tylko z jednego kanału barwnego: czarnego i jego odcieni. Mówimy wówczas, że obraz jest w odcieniach szarości (ang. *greyscale*) — jeden piksel obrazu kodowany jest na ośmiu bitach i dlatego może być jednym z 256 rozmaitych odcieni szarości, od bieli do czerni. W przypadku ośrodków dwuskładnikowych bardzo często obrazy redukuje się do obrazu binarnego poprzez operację progowania (ang. *thresholding*). Wówczas obraz cyfrowy składa się z samych zer i jedynek, którym przypisuje się jakiś kolor, np. czarny i biały.

Oddzielnym, bardzo ważnym zagadnieniem z punktu widzenia mechaniki ośrodków niejednorodnych, jest określanie efektywnych parametrów mechanicznych na podstawie uzyskanego z badania obrazu cyfrowego mikrostruktury. W tym celu wykorzystuje się liczne metody numeryczne. Wspomnieć tutaj należy przede wszystkim o metodach elementów oraz objętości skończonych oraz o uogólnionej metodzie komórek (ang. *Generalized Method of Cells*) [8, 9]. W wielu przypadkach, ze względu na dużą liczbę niewiadomych, obliczenia mogą wymagać długiego czasu, nawet na komputerach o dużej mocy obliczeniowej. W literaturze spotkać można liczne próby zredukowania wymaganego czasu obliczeń, np. poprzez dzielenie rozpatrywanego obszaru na regularne, nie nakładające się „podobszary” [18], lub

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

przewodzenie równoległych obliczeń na wielu procesorach w tym samym czasie (ang. *parallel computing*) [3].

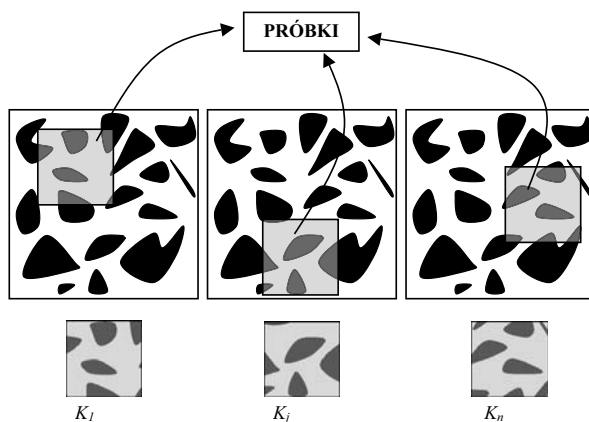
W niniejszym artykule autorzy proponują, obliczeniowo bardziej wydajną, metodę określania efektywnych parametrów transportu. Postuluje się, że parametry efektywne można estymować jako wartości uśrednione po odpowiedniej liczbie realizacji losowo pobranych z obrazu cyfrowego próbek (o wymiarze znacznie mniejszym niż wymiar obrazu cyfrowego). Innymi słowy wartość parametru efektywnego określa się jako:

$$\overline{K^{eff}} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n K_j \quad (1)$$

gdzie:

- K_j — parametr określony dla j -tej próbki,
- n — liczba „pobranych” próbek (losowych realizacji).

Stosowaną metodę, graficznie przedstawiono na rysunku 1.



Rys. 1. Graficzna interpretacja metody określania parametrów efektywnych

We wcześniejszych pracach autorów [7, 12, 13] wysunięto tezę, że gdy analizowane są parametry efektywne transportu, to wielkość próbki ma ogromne znaczenie dla uzyskanych rezultatów: po pierwsze oczywistym jest fakt, że dla ustalonego udziału frakcyjnego składników, wraz ze zmniejszaniem rozmiaru próbki, liczba realizacji, po których uśredniamy powinna wzrastać; po drugie, co ważniejsze, 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 wówczas symulacji numerycznych jednoznacznie wynika, iż minimalny wymiar próbki może być określany na podstawie informacji statystycznej zawartej w prawdopodobieństwie dwupunktowym.

Dalsze badania [14] wykazały, iż przy określaniu wymiaru próbki konieczne jest uwzględnienie, dodatkowo, wartości parametrów transportu każdego ze składników. Okazuje się, że w zależności od kontrastu pomiędzy tymi parametrami minimalny wymiar próbki, aby była ona reprezentatywna dla całego obszaru, może się znacząco zredukować w stosunku do określania go jedynie na podstawie miary geometrycznej, tj. prawdopodobieństwa dwupunktowego.

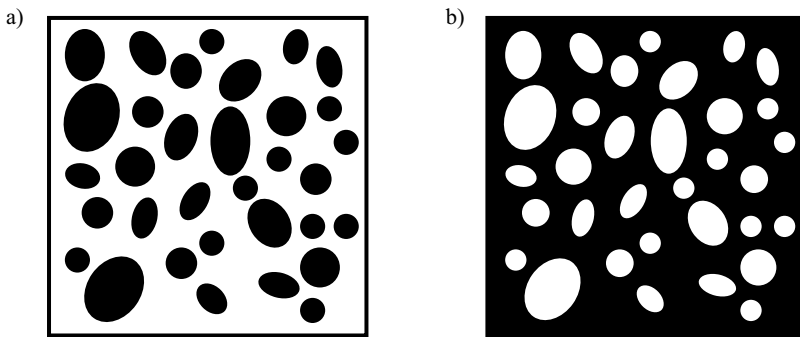
Należy tu wspomnieć, iż wyniki uzyskane w pracach [7, 12–14] odpowiadają mikrostrukturze testowej, dla której przyjęty sposób generacji powoduje, że udział frakcyjny poszczególnych składników ma rozkład prawdopodobieństwa w postaci rozkładu dwumianowego. To natomiast implikuje, iż wartość oczekiwana, jak również wariancja udziału frakcyjnego dane są w formie analitycznej, co skutkuje tym, iż określenie minimalnego wymiaru próbki jest zadaniem stosunkowo łatwym i ma jedynie charakter badawczy.

W tym artykule formułuje się nowy warunek określający minimalny wymiar próbki, którego stosowalność rozszerzona jest na dowolną mikrostrukturę losową. Pokazano, iż wariancja udziału frakcyjnego, dla dowolnej mikrostruktury w postaci obrazu cyfrowego, może być określana na podstawie wartości prawdopodobieństwa dwupunktowego. Wprowadza się nową funkcję mikrostruktury opartą na własnościach prawdopodobieństwa dwupunktowego, jak również na wartościach parametrów mechanicznych składników. W konsekwencji formułuje się warunek określający minimalny wymiar próbki, który jest reprezentatywny dla danego ośrodka losowego. Weryfikację postulowanego warunku przeprowadzono na podstawie dwóch obrazów cyfrowych dwuskładnikowych mikrostruktur losowych wygenerowanych na podstawie modeli Isinga oraz Debye'a [15].

2. Prawdopodobieństwo dwupunktowe

Bardzo często rozważając ośrodki losowe posiadamy ograniczoną informację statystyczną o ośrodku. Zazwyczaj jedyną informacją jest udział frakcyjny poszczególnych składników kompozytu. Wówczas możliwe jest podanie oszacowań oraz ograniczeń wartości parametrów efektywnych w funkcji posiadanej informacji statystycznej [5]. Jednocześnie oczywistym jest fakt, iż im więcej informacji o ośrodku jest znane, tym lepsze oszacowanie (węższe ograniczenia) parametrów efektywnych.

Konieczność określania miar mikrostruktur wyższych rzędów aniżeli udział frakcyjny składników wynika jednocześnie z faktu, że miara ta, w wielu przypadkach, nie stanowi istotnej informacji o rozważanym ośrodku. Aby zobrazować ten fakt, wyobraźmy sobie dwuskładnikowy ośrodek o tym samym udziale frakcyjnym poszczególnych składników (rys. 2a). Załóżmy, że czarny składnik wykazuje dużą przewodność w odniesieniu do składnika białego. Z drugiej strony, na rysunku 2b, przedstawiono taką samą mikrostrukturę ale o zamienionych składnikach. Nietrudno zauważyć, że ze względu na dużą przewodność czarnego składnika druga mikrostruktura ma wyższą przewodność, pomimo tego, iż oba ośrodki mają takie same udziały frakcyjne.



Rys. 2. Mikrostruktury o zamienionych składnikach (równy udział frakcyjny poszczególnych składników)

Zgodnie z przedstawionym przykładem nietrudno zauważyć, że parametry efektywne zależą od informacji statystycznej wyższego rzędu niż udział frakcyjny. Miarą wyższego rzędu, która jest bardzo często wykorzystywana w mechanice ośrodków niejednorodnych, jest prawdopodobieństwo dwupunktowe. Wielkość ta odpowiada wartości prawdopodobieństwa, że dwa losowo wybrane punkty (o zadanej odległości r) z obrazu mikrostruktury znajdują się w jednym składniku kompozytu. Prawdopodobieństwo dwupunktowe określane jest dla każdego ze składników oddzielnie i w przypadku ośrodka statystycznie jednorodnego oraz statystycznie izotropowego prawdziwe są następujące związki [15]:

$$\begin{aligned}
 S_2^{(1)}(r) &= \phi_1 - 0,5S_2^{(12)}(r) \\
 S_2^{(2)}(r) &= \phi_2 - 0,5S_2^{(12)}(r) \\
 S_2^{(1)}(r) + S_2^{(12)}(r) + S_2^{(2)}(r) &= 1
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

gdzie:

- $S_2^{(i)}$ — prawdopodobieństwo dwupunktowe dla składnika i ,
- ϕ_i — udział frakcyjny składnika i ,
- $S_2^{(12)}$ — prawdopodobieństwo zajścia zdarzenia, że dwa losowo wybrane punkty znajdują się w dwóch różnych składnikach kompozytu.

Ponadto prawdopodobieństwo dwupunktowe dla składnika i osiąga swoją maksymalną wartość równą ϕ_i dla $r = 0$ i zazwyczaj dąży asymptotycznie do wartości ϕ_i^2 [15], tj.:

$$\begin{aligned}
 \lim_{r \rightarrow 0} S_2^{(i)}(r) &= \phi_i \\
 \lim_{r \rightarrow \infty} S_2^{(i)}(r) &= \phi_i^2
 \end{aligned}
 \tag{3}$$

Więcej informacji na temat miar geometrycznych mikrostruktur losowych można znaleźć w pracy [15] oraz we wcześniejszej pracy autorów [7].

3. Lokalna zmienność właściwości ośrodków losowych

3.1. Udział frakcyjny

Powszechnie wiadomo, iż dla ośrodka statystycznie jednorodnego udział frakcyjny jest stały. Nietrudno jednak zauważyć, że wraz z wybieraniem próbek z obrazu cyfrowego (rys. 1) udział frakcyjny w próbce może się zmieniać (zagadnienie to jest dość szeroko omawiane w pracach: [4, 10, 11]).

W celu zobrazowania problemu zdefiniujmy tzw. lokalny udział frakcyjny $\zeta(\mathbf{x})$, jako udział frakcyjny jednego ze składników — powiedzmy składnika 1 — w losowo wybranej próbce, której centrum znajduje się w \mathbf{x} . Pomimo tego, iż makroskopowo, udział frakcyjny składnika 1 jest stały, równy ϕ_1 , to ζ jest zmienną losową, która może przyjmować wartości w zakresie od 0 do 1. Jeśli przyjmiemy, że próbka zajmuje pewien skończony obszar Ω_0 , którego centrum znajduje się w \mathbf{x} , to wówczas lokalny udział frakcyjny składnika 1 może być zdefiniowany jako:

$$\bar{\xi}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\|\Omega_0\|} \int_{\Omega_0(\mathbf{x})} I^{(1)}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \quad (4)$$

gdzie $I^{(1)}(\mathbf{y})$ jest funkcją indykatorową, która przyjmuje wartość 1, gdy \mathbf{x} należy do obszaru zajmowanego przez składnik 1, lub wartość 0 w przeciwnym wypadku, tj.:

$$I^{(1)}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{gd}y \mathbf{x} \in v_1 \\ 0, & \text{gd}y \mathbf{x} \notin v_1 \end{cases} \quad (5)$$

We wcześniejszych pracach autorów [12, 13], pokazano, iż w celu określenia wymiaru próbki (aby był reprezentatywny dla całego obszaru) konieczna jest znajomość wariancji udziału frakcyjnego w próbce, tj.:

$$Var\{\bar{\xi}\} = E\{\bar{\xi}^2\} - (E\{\bar{\xi}\})^2 \quad (6)$$

W powyższym wzorze $E\{\cdot\}$ jest operatorem wartości oczekiwanej.

Wykorzystując hipotezę o ergodyczności ośrodków losowych łatwo pokazać, że i wobec tego:

$$Var\{\bar{\xi}\} = E\{\bar{\xi}^2\} - \phi_1^2 \quad (7)$$

Nietrudno zatem zauważyć, że określenie wariancji lokalnego udziału frakcyjnego wymaga wyznaczenia wartości $E\{\zeta^2\}$. W dalszej części skupimy się na wykazaniu, iż $E\{\zeta^2\}$, a w konsekwencji $Var\{\zeta\}$, może być określana na podstawie prawdopodobieństwa dwupunktowego $S_2^{(1)}$.

W tym celu definiujemy następującą funkcję indykatorową:

$$H(\mathbf{y} - \mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{gdzi } (\mathbf{y} - \mathbf{x}) \in \Omega_0(\mathbf{x}) \\ 0, & \text{w przeciwnym razie} \end{cases} \quad (8)$$

Wówczas równanie (4) przyjmuje postać:

$$\xi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\|\Omega_0\|} \int_{\Omega} I^{(1)}(\mathbf{y}) H(\mathbf{y} - \mathbf{x}) d\mathbf{y} \quad (9)$$

Wykorzystanie hipotezy o ergodyczności ośrodków losowych, jak również zależności (9), skutkuje tym, że:

$$E\{\xi^2\} = \lim_{\|\Omega\| \rightarrow \infty} \frac{1}{\|\Omega\|} \frac{1}{\|\Omega_0\|^2} \int_{\Omega} \int_{\Omega} \int_{\Omega} I^{(1)}(\mathbf{x} + \mathbf{r}) I^{(1)}(\mathbf{x} + \mathbf{z}) H(\mathbf{r}) H(\mathbf{z}) d\mathbf{r} d\mathbf{z} d\mathbf{x} \quad (10)$$

co w konsekwencji prowadzi do:

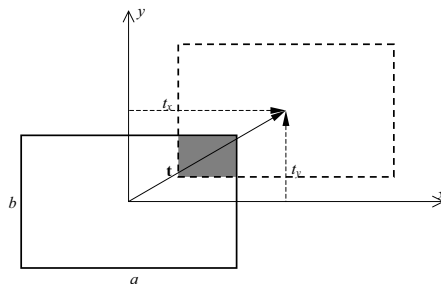
$$E\{\xi^2\} = \frac{1}{\|\Omega_0\|^2} \int_{\Omega} \int_{\Omega} S_2^{(1)}(\mathbf{t}) H(\mathbf{r}) H(\mathbf{r} - \mathbf{t}) d\mathbf{r} d\mathbf{r} \quad (11)$$

Zauważmy, że zależność (11) uzyskano wprowadzając podstawienie $\mathbf{t} = \mathbf{r} - \mathbf{z}$.

W dalszej części skupiamy się na określeniu wielkości $\vartheta_{in}(\mathbf{t}, a, b)$ zdefiniowanej jako:

$$\vartheta_{in}(\mathbf{t}, a, b) = \int_{\Omega} H(\mathbf{r}) H(\mathbf{r} - \mathbf{t}) d\mathbf{r} \quad (12)$$

Równanie (12) określa powierzchnię utworzoną poprzez dwa nakładające się na siebie obszary (próbki), których centra oddalone są od siebie o wektor \mathbf{t} . Ponadto, a i b oznaczają długości boków próbki (rys. 3).



Rys. 3. Dwie próbki, których centra oddalone są o wektor \mathbf{t}

Wykorzystując przyjęte oznaczenia (rys. 3) równanie (12) może być przedstawione jako:

$$\vartheta_{\text{int}}(\mathbf{t}, a, b) = (a - |t_x|)(b - |t_y|)I(a - |t_x|)I(b - |t_y|) \quad (13)$$

gdzie $I(x)$ oznacza funkcję Heavisidea. Podstawienie zależności (13) do równania (11) prowadzi w konsekwencji do następującej zależności definiującej wariancję lokalnego udziału frakcyjnego:

$$\text{Var}\{\xi\} = \frac{1}{\|\Omega_0\|^2} \int_{\Omega} (S_2^{(1)}(\mathbf{t}) - \phi_i^2)(a - |t_x|)(b - |t_y|)I(a - |t_x|)I(b - |t_y|) dt \quad (14)$$

Wykonując dość proste przekształcenia algebraiczne łatwo doprowadzić równanie (14) do ostatecznej postaci, tj:

$$\text{Var}\{\xi\} = \frac{4}{\|\Omega_0\|^2} \int_{\Omega} \int_{\Omega} [S_2^{(1)}(\mathbf{t}) - \phi_i^2](a - t_x)(b - t_y) dx dy \quad (15)$$

Jak łatwo zauważyć zależność (15) umożliwia określenia wariancji lokalnego udziału frakcyjnego (dla dowolnej mikrostruktury losowej) na podstawie wartości prawdopodobieństwa dwupunktowego.

3.2. Oszacowania Voigta i Reussa

W pracy [14], na podstawie symulacji numerycznych przeprowadzonych dla testowej mikrostruktury, wskazano na fakt, iż wymiar próbki może również zależeć od wartości parametrów każdego ze składników. Ponadto stwierdzono, że wielkość próbki określona z warunku reprezentatywności geometrycznej, tj. na podstawie wariancji udziału frakcyjnego, jest górnym oszacowaniem wymiaru próbki. Zatem uwzględnienie w warunku reprezentatywności wartości parametrów mechanicznych składników może skutkować jedynie zredukowaniem wielkości próbki w zależności od kontrastu pomiędzy parametrami — mówiąc bardzo ogólnie: dla ustalonego udziału frakcyjnego składników, wraz ze zmniejszaniem się kontrastu pomiędzy parametrami mechanicznymi, wymagany wymiar próbki maleje.

Jak pokazano w poprzednim rozdziale, w zależności od lokalizacji próbki, udział frakcyjny składników w próbce zmienia się, a to w konsekwencji implikuje, że jednocześnie zmianie ulegają oszacowania parametrów efektywnych Voigta oraz Reussa. Wobec tego, analogicznie jak w przypadku udziału frakcyjnego, w dalszej części rozdziału koncentrujemy się na zagadnieniu zmienności lokalnego oszacowania Voigta/Reussa. Ponownie analizujemy losową mikrostrukturę dwuskładnikową, zakładając, że składnik 1 (składnik 2) ma parametr transportu równy k_1 (k_2).

W tym celu wprowadzamy funkcję indykatorową w postaci:

$$I_i(\mathbf{x}) = \begin{cases} \lambda_i, & \text{gdzie } \mathbf{x} \in v_1 \\ \lambda_2, & \text{gdzie } \mathbf{x} \in v_2 \end{cases} \quad (16)$$

dla której λ_1 oraz λ_2 przyjmują różne wartości w zależności od rozpatrywanego oszacowania. I tak, dla oszacowania Voigta mamy, że

$$\lambda_1 = k_1 \quad \text{oraz} \quad \lambda_2 = k_2 \quad (17)$$

podczas, gdy w przypadku oszacowania Reussa:

$$\lambda_1 = \frac{1}{k_1} \quad \text{oraz} \quad \lambda_2 = \frac{1}{k_2} \quad (18)$$

Wykorzystując zależność (8) lokalne oszacowanie Voigta/Reussa może być określone jako:

$$\xi_i(\mathbf{x}) = \frac{1}{\|\Omega_0\|} \int_{\Omega} I_i(\mathbf{y})H(\mathbf{y} - \mathbf{x})d\mathbf{y} = \frac{1}{\|\Omega_0\|} \int_{\Omega} I_i(\mathbf{x} + \mathbf{r})H(\mathbf{r})d\mathbf{r} \quad (19)$$

Analogicznie, jak dla udziału frakcyjnego, dążymy do określenia wariancji lokalnego oszacowania Voigta/Reussa, co zgodnie z definicją (6) sprowadza się do określenia $E\{\xi_i^2\}$. Ze względu na ograniczenia co do objętości artykułu, jak również na analogię do przypadku udziału frakcyjnego, większość przekształceń algebraicznych została przez autorów pominięta. Poniżej prezentuje się jedynie najważniejsze (zdaniem autorów) zależności.

Podobnie jak dla przypadku równania (11) łatwo pokazać, że:

$$E\{\xi_i^2\} = \frac{1}{\|\Omega_0\|^2} \int_{\Omega} \int_{\Omega} S_2(\mathbf{t}, \lambda_1, \lambda_2)H(\mathbf{r})H(\mathbf{r} - \mathbf{t})d\mathbf{r}d\mathbf{t} \quad (20)$$

Zauważmy, że poprzez zdefiniowanie funkcji indykatorowej w postaci (16) pod całką w równaniu (20) pojawia się nowa miara mikrostruktury:

$$S_2(\mathbf{t}, \lambda_1, \lambda_2) = E\{[\lambda_1 I^{(1)}(\mathbf{x}) + \lambda_2 I^{(1)}(\mathbf{x})][\lambda_1 I^{(1)}(\mathbf{x} + \mathbf{t}) + \lambda_2 I^{(1)}(\mathbf{x} + \mathbf{t})]\} \quad (21)$$

która zależy nie tylko od odległości pomiędzy dwoma punktami mikrostruktury ale również od wartości parametrów mechanicznych każdego ze składników.

Wykorzystanie (12) i (13) prowadzi do ostatecznej postaci wariancji lokalnego oszacowania Voigta/Reussa:

$$Var\{\xi_i\} = \frac{4}{\|\Omega_0\|^2} \int_{\Omega} \int_{\Omega} [S_2(\mathbf{t}, \lambda_1, \lambda_2) - (E\{\xi_i\})]^2 (a - t_x)(b - t_y) dx dy \quad (22)$$

Równanie (22), na podstawie wartości nowej miary mikrostruktury $S_2(\mathbf{t}, \lambda_1, \lambda_2)$, zdefiniowanej zależnością (21), prowadzi do określenia wariancji lokalnego oszacowania Voigta/Reussa. Wykorzystując właściwości prawdopodobieństwa dwupunktowego (2) nie trudno pokazać, że wprowadzona przez autorów miara (21) może być wyrażona jako:

$$S_2(\mathbf{t}, \lambda_1, \lambda_2) = \lambda_1^2 S_2^{(1)}(\mathbf{t}) + \lambda_2^2 S_2^{(2)}(\mathbf{t}) + \lambda_1 \lambda_2 [1 - S_2^{(1)}(\mathbf{t}) - S_2^{(2)}(\mathbf{t})] \quad (23)$$

Wobec tego wyrażenie pod całką w równaniu (22) można przekształcić do następującej postaci:

$$S_2(\mathbf{t}, \lambda_1, \lambda_2) - (E\{\xi_i\})^2 = \lambda_1^2 [S_2^{(1)}(\mathbf{t}) - \phi_i^2] + \lambda_2^2 [S_2^{(2)}(\mathbf{t}) - \phi_i^2] + \\ - \lambda_1 \lambda_2 [S_2^{(1)}(\mathbf{t}) - \phi_i^2] - \lambda_1 \lambda_2 [S_2^{(2)}(\mathbf{t}) - \phi_i^2] \quad (24)$$

co, przy uwzględnieniu (15) prowadzi do:

$$Var\{\xi_i\} = (\lambda_1 - \lambda_2)^2 Var\{\xi_i\} \quad (25)$$

Zatem wariancję lokalnego oszacowania Voigta/Reussa (25) można — dla ośrodka dwuskładnikowego — określać na podstawie wartości wariancji lokalnego udziału frakcyjnego zdefiniowanego zależnością (15).

4. Warunek określający wymiar próbki

Analogicznie do warunku reprezentatywności geometrycznej sformułowanego w pracach [12, 14] definiujemy nowy warunek reprezentatywności próbki, uwzględniający wartości parametrów mechanicznych, w postaci:

$$\frac{Var\{\xi_i\}}{(E\{\xi_i\})^2} \leq \varepsilon_N \quad (26)$$

gdzie ε_N oznacza założony błąd oszacowania. Uwzględniając w nierówności (26) zależności (25) oraz (15) i wykonując proste przekształcenia algebraiczne łatwo doprowadzić do formuły określającej minimalny wymiar próbki $\|\Omega_0\|$:

$$\|\Omega_0\| \geq \frac{2|\lambda_1 - \lambda_2|}{E\{\xi_i\}} \sqrt{\frac{\int_0^a \int_0^b [S_2^{(1)}(\mathbf{t}) - \phi_i^2] (a - t_x)(b - t_y) dx dy}{\varepsilon_N}} \quad (27)$$

Jednocześnie należy w tym miejscu wspomnieć, iż minimalny wymiar próbki $\|\Omega_0\|$ należy określać ze względu na zmienność lokalnego oszacowania Voigta oraz Reussa. Innymi słowy, za ostateczny wymiar próbki $\|\Omega_0\|$ przyjmujemy wartość maksymalną wynikającą z dwóch oszacowań, tj.

$$\|\Omega_0\| \geq \max[\|\Omega_0\|_{\text{Voigt}}; \|\Omega_0\|_{\text{Reuss}}] \quad (28)$$

gdzie:

$$\|\Omega_0\|_{\text{Voigt}} = \frac{2|k_1 - k_2|}{(k_1\phi_1 - k_2\phi_2)} \sqrt{\frac{\int_0^a \int_0^b [S_2^{(1)}(\mathbf{t}) - \phi_1^2](a - t_x)(b - t_y) dx dy}{\varepsilon_N}} \quad (29)$$

oraz

$$\|\Omega_0\|_{\text{Reuss}} = \frac{2\left|\frac{1}{k_1} - \frac{1}{k_2}\right|}{(k_1\phi_1 - k_2\phi_2)} \sqrt{\frac{\int_0^a \int_0^b [S_2^{(1)}(\mathbf{t}) - \phi_1^2](a - t_x)(b - t_y) dx dy}{\varepsilon_N}} \quad (30)$$

5. Wyznaczenie liczby próbek

Liczbę próbek (losowych realizacji mikrostruktury) konieczną do określenia parametru efektywnego z pewnym błędem można oszacować np. na podstawie centralnego twierdzenia granicznego [1]. Z drugiej zaś strony liczba próbek może być określona wprost z przedziałów ufności [3]. Innymi słowy, jeśli chcemy oszacować pewien parametr Z , z określoną dokładnością ε_n (błąd względny oszacowania), to po prostych przekształceniach wzorów na przedziały ufności można pokazać, że dokładność estymacji powinna spełniać następującą nierówność:

$$\varepsilon_n \geq \frac{\theta}{Z} \sqrt{\frac{\text{Var}(Z)}{n}} \quad (31)$$

co w konsekwencji prowadzi do nierówności określającej liczebność próby:

$$n \geq \frac{\theta^2 \text{Var}(Z)}{Z^2 \varepsilon_n^2} \quad (32)$$

Występujący w powyższych wzorach parametr θ definiuje się jako:

$$\theta = \Phi^{-1}\left(1 - \frac{\alpha}{2}\right) \quad (33)$$

gdzie $\Phi(\cdot)$ oznacza dystrybucję standardowego rozkładu normalnego, natomiast α decyduje o wartości prawdopodobieństwa oszacowania, które wynosi $1 - \alpha$. W praktyce, najczęściej przyjmuje się wartości prawdopodobieństwa na poziomie 0,99; 0,95; lub 0,90. W dalszych rozważaniach przyjmuje się, że $\alpha = 0,05$ co implikuje wartość prawdopodobieństwa $1 - \alpha = 0,95$. Wobec powyższego parametr θ zdefiniowany zależnością (33) przyjmuje wartość:

$$\theta = \Phi^{-1}(0,975) = 1,96 \tag{34}$$

Nietrudno zauważyć, że cała trudność w określaniu koniecznej liczby realizacji opiera się na wyznaczeniu wariancji określanego parametru. Jednakże, jak pokazano w poprzednim rozdziale, określenie wariancji lokalnego oszacowania Voigta oraz Reussa i w konsekwencji wyznaczenie liczby próbek n można sprowadzić do następującego zagadnienia: ile realizacji mikrostruktury należy wykonać, aby z prawdopodobieństwem 95%, określić średnią wartość oszacowania Voigta/Reussa z dokładnością ε_n ? Wykorzystując podane powyżej zależności liczba realizacji może być określona w następujący sposób:

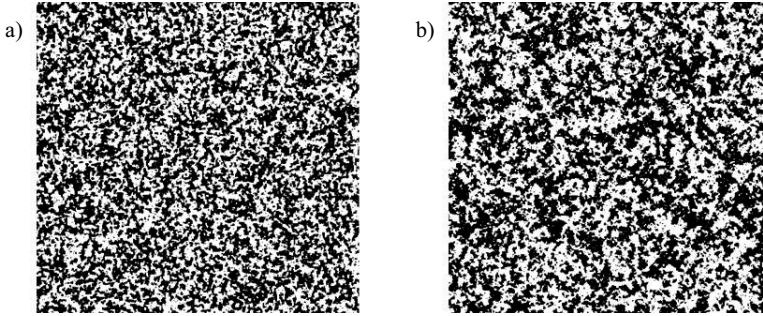
$$n \geq \max[n_{\text{Voigt}}; n_{\text{Reuss}}] \tag{35}$$

gdzie:

$$\begin{aligned} n_{\text{Voigt}} &= \frac{\theta^2 (k_1 - k_2)^2 \text{Var}\{\bar{\xi}\}}{\varepsilon_n^2 (k_1 \phi_1 - k_2 \phi_2)^2} \\ n_{\text{Reuss}} &= \frac{\theta^2 \left(\frac{1}{k_1} - \frac{1}{k_2}\right)^2 \text{Var}\{\bar{\xi}\}}{\varepsilon_n^2 \left(\frac{\phi_1}{k_1} - \frac{\phi_2}{k_2}\right)^2} \end{aligned} \tag{36}$$

6. Weryfikacja warunku reprezentatywności próbek

W celu zweryfikowania poprawności warunku określającego minimalny wymiar próbki wykonano symulacje numeryczne dla dwóch wygenerowanych obrazów cyfrowych dwuskładnikowych mikrostruktur losowych (rys. 4). Oba obrazy cyfrowe składają się z 250 000 białych/czarnych pikseli określających dany składnik kompozytu (składnik 1 — kolor biały, składnik 2 — kolor czarny). Przyjęto równy udział frakcyjny obu składników, tj. $\phi_1 = \phi_2 = \phi = 0,5$. Należy tu wspomnieć, iż obraz cyfrowy z rysunku 4a uzyskano poprzez losową generację na podstawie modelu Isinga [15]. Druga mikrostruktura (rys. 4b) przedstawia ośrodek „Debye’a” utworzony metodą rekonstrukcji na podstawie zadanej funkcji prawdopodobieństwa dwupunktowego. Model Isinga, jak również rekonstrukcja ośrodków losowych, nie są tematem tego referatu i nie będą tu szerzej omawiane. W celu zapoznania się z przedstawionymi zagadnieniami autorzy odsyłają do następujących publikacji: [15–17].



Rys. 4. Obrazy cyfrowe (500×500 pikseli) dwuskładnikowych mikrostruktur losowych: a) model Isinga [15], b) mikrostruktura Debye'a [15]

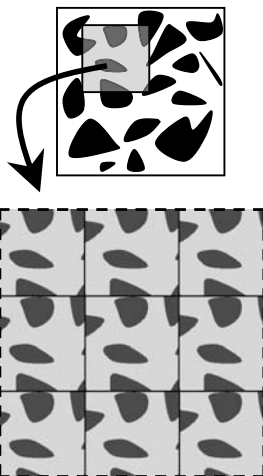
W dalszym ciągu przedstawia się zagadnienie dwuwymiarowej dyfuzji przez ośrodek losowy przedstawiony na rysunku 4. Oba składnikom przypisujemy następujące współczynniki dyfuzji: składnik 1 — $k_1 = 0,25 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$, składnik 2 — $k_2 = 0,03 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$. W pierwszej kolejności wyznaczono parametry efektywne dla obrazów cyfrowych przedstawionych na rysunku 4 (tab. 1). W tym celu wykorzystano metodę określania parametrów efektywnych transportu opartą na metodzie objętości skończonych sformułowaną we wcześniejszej pracy autorów [6]. Pierwotnie w metodzie tej każdy piksel stanowił jedną objętość kontrolną. Jednakże ze względu na zminimalizowanie błędu numerycznego w dalszych obliczeniach przyjęto, że każdy piksel obrazu cyfrowego wypełnia 9 objętości kontrolnych. W efekcie otrzymuje się schemat obliczeniowy składający się z 225 000 objętości skończonych, co implikuje konieczność rozwiązywania układu równań z taką właśnie liczbą niewiadomych. Do rozwiązania układu równań wykorzystano własny program napisany w środowisku języka C++.

TABELA 1
Wartości efektywnego współczynnika dyfuzji określonego dla obrazów cyfrowych mikrostruktur losowych (rys. 4)

Efektywny współczynnik dyfuzji K^{eff} [m^2s^{-1}]	
Mikrostruktura z rys. 4a	Mikrostruktura z rys. 4b
0,0862	0,0859

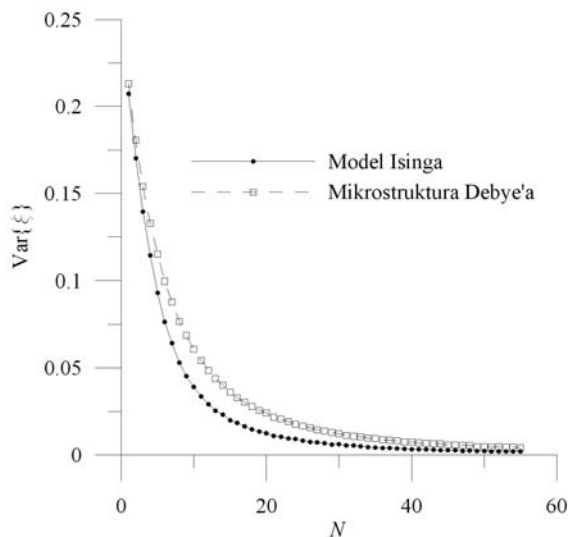
W dalszym ciągu określono, dla każdej mikrostruktury, minimalny wymiar próbki zgodnie z zależnością (28). Zauważmy, że określenie wymiaru próbki $\|\Omega_0\|$ sprowadza się w pierwszej kolejności do obliczenia wartości prawdopodobieństwa dwupunktowego $S_2^{(1)}(t)$ (dla obu obrazów cyfrowych), a następnie do obliczenia całki we wzorze (15). Zagadnienia te potraktowano jako mniej ważne i, ze względu na ograniczenia co do objętości artykułu, nie są tu omawiane. Autorzy ograniczają się jedynie do następującego komentarza: metodę określania wartości $S_2^{(i)}(t)$ dla obrazów cyfrowych sformułowano w pracy [16] natomiast do obliczenia całki z zależności (15) wykorzystano metodę podstawową Monte Carlo [2] (ang. *crude Monte Carlo*). Ponadto należy w tym miejscu wspomnieć, iż każda losowo wygene-

rowana próbka traktowana jest jako nieskończony obszar otrzymany w wyniku założonej periodyczności pojedynczej próbki (rys. 5).



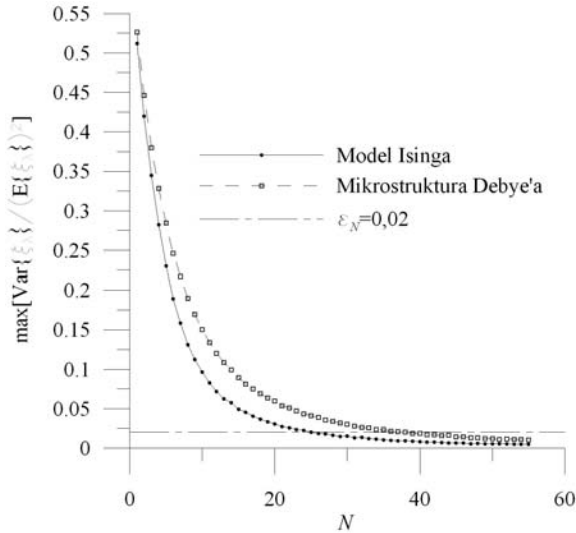
Rys. 5. Periodyczność wylosowanej próbki

Na rysunku 6 przedstawiono jak zmienia się wariancja lokalnego udziału frakcyjnego (15) w funkcji wymiaru próbki $\|\Omega_0\|$, przy czym wymiar próbki rozumiany jest jako liczba pikseli w wierszu (kolumnie) oznaczona jako N . Nietrudno zauważyć, że w obu przypadkach, wraz ze wzrostem wymiaru próbki, wariancja lokalnego udziału frakcyjnego maleje.



Rys. 6. Wariancja lokalnego udziału frakcyjnego w funkcji wymiaru próbki

Na kolejnym wykresie (rys. 7) przedstawiono warunek określający wymiar próbki opisany zależnością (26). Jak łatwo zauważyć, dla mikrostruktury Isinga, minimalny wymiar próbki jest mniejszy niż w przypadku mikrostruktury Debye'a. Wynika to z faktu, iż w przypadku tej drugiej mikrostruktury składniki tworzą znacznie większe klastry, a zatem oczywiste jest, że próbka, aby była reprezentatywna, powinna mieć większy wymiar. Przyjmując błąd $\varepsilon_N = 2\%$ odczytano z wykresu następujące wymiary próbek: dla modelu Isinga $N = 26$ (676 pikseli), natomiast w przypadku mikrostruktury Debye'a $N = 39$ (1521 pikseli).



Rys. 7. Warunek określający wymiar próbki

Wykorzystując zależności (35) oraz (36) wyznaczono konieczną liczbę realizacji n . Podobnie jak w przypadku określania wielkości próbki, tak i w tym przypadku, przyjęto błąd oszacowania na poziomie 2% ($\varepsilon_n = 0,02$). Uzyskano następujące wartości n : dla modelu Isinga $n = 185$ realizacji, a w przypadku mikrostruktury Debye'a parametr efektywny należy określać jako uśredniony po $n = 176$ realizacjach.

Mając dany wymiar próbki oraz liczbę realizacji obliczono, dla każdej mikrostruktury, estymator parametru efektywnego zgodnie z zależnością (1). Uzyskane rezultaty — wartości średnie efektywnego współczynnika dyfuzji — są bardzo zbliżone do tych przedstawionych w tabeli 1. W obu przypadkach błąd względny obliczony jako:

$$\frac{|K^{eff} - \overline{K^{eff}}|}{K^{eff}} \cdot 100\% \tag{37}$$

jest na poziomie 3%.

Otrzymane wyniki potwierdzają fakt, iż po pierwsze — parametry efektywne mikrostruktur danych w postaci obrazów cyfrowych można określać jako wartości uśrednione po

pewnej liczbie próbek o znacznie mniejszych wymiarach, a po drugie — kryterium wyboru minimalnego wymiaru próbki, aby była ona reprezentatywna dla całego obszaru, wydaje się być prawidłowe. Ponadto prezentowane przez autorów podejście wykazuje dużą efektywność ze względu na kilkunastokrotną redukcję czasu obliczeń.

7. Wnioski

W pracy przedstawiono procedurę określania parametrów efektywnych na podstawie obrazu cyfrowego mikrostruktury. Zaproponowano, aby parametry efektywne transportu określać jako wartości uśrednione po odpowiedniej liczbie realizacji losowo pobranych z obrazu cyfrowego próbek, których wymiar jest znacznie mniejszy niżeli wymiar pierwotnego obrazu. Wprowadzono kryterium określania wymiaru próbki bazujące na wartości wariancji lokalnego oszacowania Voigta oraz Reussa. Jednocześnie pokazano, iż w przypadku ośrodka dwuskładnikowego, wielkość ta jest funkcją wariancji lokalnego udziału frakcyjnego, którą można określać na podstawie wartości prawdopodobieństwa dwupunktowego. Korzystając ze wzorów na przedziały ufności przedstawiono procedurę określania liczby próbek jaką należy przyjąć przy obliczaniu estymatora parametru efektywnego.

Na przykładzie zagadnienia dyfuzji, dla obu rozpatrywanych w pracy mikrostruktur, błąd oszacowania efektywnego współczynnika dyfuzji, wg zaproponowanej metody, jest na poziomie 3%.

LITERATURA

- [1] *Feller W.*: An Introduction To Probability Theory And Its Applications. John Wiley and Sons, London 1961
- [2] *Kalos M.H., Whitlock P.A.*: Monte Carlo Methods. Second Edition, Wiley-VCH Verlag, Weinheim 2008
- [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, p. 3647–3679
- [4] *Lu B., Torquato S.*: Local Volume Fraction Fluctuations in Heterogeneous Media. J. Chem. Phys. 93 (5), 1990, p. 3452–3459
- [5] *Łydźba D.*: Zastosowania metody asymptotycznej homogenizacji w mechanice gruntów i skał. Oficyna Wydawnicza PWr, Wrocław 2002
- [6] *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
- [7] *Łydźba D., Różański A.*: Statystyczna charakteryzacja miar geometrycznych mikrostruktur losowych: definicje, właściwości, zastosowania. Górnictwo i Geoinżynieria, Rok 33 (1), 2009, s. 399
- [8] *Łydźba D., Różański A., Kawa M.*: Numeryczna analiza kompozytów losowych metodą komórek. Współczesne problemy naukowo badawcze budownictwa lądowego i wodnego (opracowanie zwarte), Oficyna Wydawnicza PWr, Wrocław 2007
- [9] *Paley M., Aboudi J.*: Micromechanical Analysis of Composites by the Generalized Method of Cells. Mechanics of Materials, Vol. 14, 1992, p. 127–139

- [10] *Quintanilla J., Torquato S.*: Local Volume Fraction Fluctuations in Random Media. *J. Chem. Phys.* 106 (7), 1997, p. 2741–2751
- [11] *Quintanilla J., Torquato S.*: Local Volume Fraction Fluctuations in Periodic Heterogeneous Media, *J. Chem. Phys.* 110 (6), 1999, p. 3215–3219
- [12] *Różański A., Łydźba D.*: Uwagi o wielkości reprezentatywnej elementarnej objętości dla losowych mikrostruktur komórkowych. *Górnictwo i Geoinżynieria*, Rok 33 (1), 2009, s. 507
- [13] *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, p. 345–353
- [14] *Różański A., Łydźba D., Shao J.F.*: Numerical Determination of Minimum Size of RVE for Random Composite Materials: Two-point Probability Approach. Proceedings of the First International Symposium on Computational Geomechanics, COMGEO I, 29 April–1 May, 2009, eds S. Pietruszczak et al., Rhodes: IC2E International Centre for Computational Engineering, Juan les Pins, France 2009, p. 26–37
- [15] *Torquato S.*: *Random Heterogeneous Materials. Microstructure and Macroscopic Properties.* Springer-Verlag, New York 2002
- [16] *Yeong C.L.Y., Torquato S.*: Reconstructing Random Media. *Physical Review E*, Vol. 57, Nr 1, 1998, p. 495–506
- [17] *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, p. 224–233
- [18] *Zohdi T.L., Wriggers P., Huet C.*: A Method of Substracting Large-scale Computational Micro-mechanical Problems. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol. 190, 2001, p. 5639–5656