

Na prawach rękopisu

Wydział Budownictwa Lądowego i Wodnego
Politechniki Wrocławskiej

**Zagadnienia odwrotne w teorii
homogenizacji: koncepcja makroskopowej
funkcji odpowiedzi materiałowej oraz
numeryczna identyfikacja ekwiwalentnej
mikrostruktury**

Raport serii PRE nr 6/2018

Praca doktorska

Damian Stefaniuk

Słowa kluczowe:

teoria homogenizacji,
zagadnienie odwrotne,
przepływ ciepła,
stochastyczna optymalizacja,
miary mikrostruktury

Promotor: prof. dr hab. inż. Dariusz Łydźba

Promotor pomocniczy: dr inż. Adrian Różański

Wrocław, czerwiec 2018

Autor (Autorzy):

1. mgr inż. Damian Stefaniuk

Politechnika Wroclawska
Wydział Budownictwa Lądowego i Wodnego
Katedra Geotechniki, Hydrotechniki, Budownictwa Podziemnego i Wodnego
Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław
tel. +48 71 320 41 27
e-mail: damian.stefaniuk@pwr.edu.pl

Raport został złożony w Redakcji Wydawnictw Wydziału Budownictwa Lądowego i Wodnego Politechniki Wrocławskiej w czerwcu 2018 r.

Lista odbiorców:	Recenzenci	2 egz.
	Promotor	1 egz.
	Promotor pomocniczy	1 egz.
	Autor	1 egz.
	CWiINT PWr	1 egz.
	Archiwum W-2	2 egz.
	<hr/>	
	Razem	8 egz.

Podziękowania

Pragnę wyrazić wdzięczność wszystkim, dzięki którym niniejsza praca powstała, w szczególności

Promotorowi, profesorowi Dariuszowi Łyźbie za przekazaną mi wiedzę, cenne wskazówki, motywowanie do twórczej pracy oraz kreatywne podejście w poszukiwaniu rozwiązań licznych problemów,

Promotorowi pomocniczemu, doktorowi Adrianowi Różańskiemu za inspirację do badań, pomoc w planowaniu doświadczeń oraz niezastąpioną pomoc w redagowaniu pracy.

Wyrazy wdzięczności składam również doktorowi Maciejowi Sobótce oraz Michałowi Pachniczowi za cenne uwagi.

Chciałabym również podziękować rodzinie oraz przyjaciołom, za nieustanne wsparcie oraz nigdy niegasnącą wiarę we mnie.

SPIS TREŚCI

1. Wprowadzenie	3
2. Metody predykcji wartości efektywnych stałych materiałowych – podstawy teorii homogenizacji.....	9
2.1. Reprezentatywna elementarna objętość (REO).....	11
2.2. Ogólne sformułowanie zagadnienia brzegowego dla oceny efektywnej przewodności cieplnej	15
2.3. Metody rozwiązywania zagadnienia brzegowego ciągłej mikromechaniki.....	18
2.3.1. Obliczeniowa mikromechanika	19
2.3.2. Metody analityczne	21
2.3.2.1. Ograniczenia Wienera.....	21
2.3.2.2. Ograniczenia Hashina-Shtrikmana	22
2.3.2.3. Schemat Mori-Tanaki oraz samouzgodnionego pola	23
2.3.2.4. Uwagi.....	32
2.4. Podsumowanie.....	33
3. Ekwiwalentna mikrostruktura ośrodka porowatego – sformułowanie matematyczne zagadnienia odwrotnego	35
3.1. Funkcja makroskopowej odpowiedzi materiałowej	40
3.2. Sformułowanie matematyczne zagadnienia odwrotnego – równanie całkowe Fredholma I-go rodzaju	43
3.3. Podsumowanie.....	46
4. Rozwiązanie zagadnienia odwrotnego teorii homogenizacji – stochastyczna optymalizacja	47
4.1. Klasyczne sformułowanie metody SA	48
4.2. Procedura numerycznego rozwiązywania zagadnienia odwrotnego teorii homogenizacji	50
4.3. Efektywność i poprawność sformułowanej procedury	55
4.3.1. Ograniczenia Hashina-Shtrikmana.....	55
4.3.2. Założona funkcja ekwiwalentnej mikrostruktury.....	58
4.4. Podsumowanie.....	60

5. Ekwiwalentna mikrostruktura ośrodka porowatego – regularyzacja zagadnienia odwrotnego	61
5.1. Wrażliwość rozwiązania zagadnienia odwrotnego na błędy pomiarowe.....	61
5.2. Stabilizacja rozwiązania zagadnienia odwrotnego.....	66
5.2.1. Procedura regularyzacji Tichonowa.....	67
5.2.2. Implementacja regularyzacji Tichonowa do zagadnienia odwrotnego.....	69
5.2.3. Autorska metoda wyznaczania optymalnej wartości współczynnika regularyzacji.....	79
5.3. Podsumowanie.....	84
6. Ekwiwalentne mikrostruktury wybranych ośrodków porowatych	85
6.1. Statystyczne miary mikrostruktury ośrodków porowatych.....	85
6.1.1. Prawdopodobieństwo n -punktowe.....	86
6.1.2. Funkcja prawdopodobieństwa odcinkowego.....	90
6.1.3. Krętość.....	91
6.2. Ekwiwalentna mikrostruktura – identyfikacja na podstawie obrazów cyfrowych struktury wewnętrznej ośrodka.....	94
6.2.1. Funkcja makroskopowej odpowiedzi materiałowej – identyfikacja numeryczna.....	94
6.2.1.1. Uwagi.....	109
6.2.2. Funkcje ekwiwalentnej mikrostruktury dla obrazów cyfrowych.....	110
6.3. Ekwiwalentna mikrostruktura – identyfikacja na podstawie laboratoryjnego oznaczania makroskopowej funkcji odpowiedzi materiałowej.....	115
6.3.1. Piasek średni (MSa) – miary mikrostruktury.....	115
6.3.2. Przewodność cieplna szkieletu gruntowego.....	127
6.3.3. Funkcja makroskopowej odpowiedzi materiałowej – identyfikacja laboratoryjna.....	128
6.3.4. Funkcja ekwiwalentnej mikrostruktury piasku średniego.....	137
6.3.5. Autorska metoda oceny wartości współczynnika przewodności cieplnej szkieletu ośrodka porowatego.....	144
6.3.6. Wpływ ilości punktów pomiarowych na uzyskane rozwiązanie.....	148
6.4. Podsumowanie.....	154
7. Tomograf cieplny	157
8. Podsumowanie	163

1. Wprowadzenie

Głównym celem teorii homogenizacji jest „przenoszenie” opisu matematycznego rozważanego procesu fizycznego ze skali niejednorodności (skala mikro) do skali zastosowań inżynierskich (skala makro). W przypadku problemów liniowych, opisy matematyczne w skali mikro oraz makro są analogiczne, z wyjątkiem właściwości materiałowych występujących w obu opisach. Wartości stałych materiałowych w skali mikro, ze względu na silną niejednorodność mikrostruktury, są zależne od położenia w przestrzeni, podczas gdy w skali makro, jako charakteryzujące ośrodek „ujednorodniony”, mają stałą wartość. W konsekwencji, drugim celem technik homogenizacji jest określanie parametrów zastępczych dla ośrodka mikro-niejednorodnego w terminach parametrów jego składników oraz statystycznych miar mikrostruktury, przy czym miary te zależą od morfologii mikrostruktury (np. przestrzennego ułożenia składników kompozytu, ich kształtów itd.).

Jeżeli posiadamy kompletną informację statystyczną o ośrodku, wówczas możemy określić parametr efektywny w sposób jednoznaczny, a zagadnienie wyznaczenia parametru makroskopowego jest określane mianem zagadnienia bezpośredniego (wprost) teorii homogenizacji. Co jednak oczywiste, do każdego zagadnienia bezpośredniego możemy sformułować zagadnienie do niego odwrotne. Jeśli więc zagadnienie bezpośrednie teorii homogenizacji polega na określeniu parametrów efektywnych na podstawie znajomości morfologii mikrostruktury oraz parametrów mechanicznych składników, to zagadnienie odwrotne do niego polegałoby na odtworzeniu mikrostruktury kompozytu na podstawie jego właściwości makroskopowych. Rozwiązanie tak sformułowanego zagadnienia odwrotnego nie jest, w ogólności, jednoznaczne i wymaga, co zostanie pokazane w dalszej części pracy, dodatkowych uwarunkowań.

Szacowania właściwości efektywnych (zagadnienie bezpośrednie teorii homogenizacji) ośrodków losowych dokonywać można dwiema, metodologicznie różnymi, metodami, tj. analityczną oraz numeryczną. Te pierwsze cechują się matematyczną „prostotą” oraz wysoką efektywnością obliczeniową (w sensie czasu obliczeń). Można do nich zaliczyć, m. in. analityczne schematy aproksymacyjne bazujące na rozwiązaniu pojedynczego elipsoidalnego wtrącenia w nieskończonej macierzy

(tzw. rozwiązaniu Eshelby'ego (Eshelby, 1957)). Niestety, główną wadą metod analitycznych jest ubogie odzwierciedlenie rzeczywistej mikrostruktury kompozytu oraz trudności w przyjmowaniu poprawnych założeń dotyczących uproszczonych morfologii stanowiących zastępcze medium dla rzeczywistego ośrodka. Z drugiej strony, metody numeryczne pozwalają na określanie parametrów zastępczych dla skomplikowanych mikrostruktur, uzyskanych np. z zobrazowania w rentgenowskiej mikrotomografii komputerowej. Jednakże ich użycie wiąże się zwykle z dodatkowymi trudnościami wynikającymi bezpośrednio ze stosowanych metod numerycznych (np. metoda elementów skończonych, metoda objętości skończonych) co w konsekwencji skutkuje bardzo długim czasem obliczeń.

Wobec tego w ostatnim czasie ponownie na atrakcyjności zyskały metody analityczne i można powiedzieć, że obecnie przeżywają one pewien okres renesansu. W pracy rozważania prowadzi się z wykorzystaniem dwóch schematów analitycznych; są to: schemat Mori-Tanaki (Mori & Tanaka, 1973) i schemat samouzgodnionego pola (Hill, 1952). Konsekwentnie, w dalszej części pracy, pierwszy ze schematów, zamiennie, określane będzie oznaczeniem „M-T”, podczas gdy schemat samouzgodnionego pola oznaczany będzie jako „S-C” (wynika to z oryginalnego nazewnictwa, tj. ang. *Self-Consistent*). Oba wspomniane schematy zakładają pewną uproszczoną morfologię mikrostruktury ośrodka. W szczególności, schemat M-T zakłada morfologię w postaci elipsoidalnych wtrąceń w ciągłej matrycy, natomiast schemat S-C zakłada strukturę polikrystaliczną (ziarnową). Korzystając z obu schematów parametr makroskopowy można wyrazić w terminach parametrów mechanicznych i udziałów frakcyjnych poszczególnych składników. Ponadto właściwości makroskopowe są również funkcją tzw. operatorów lokalizacji dla poszczególnych składników ośrodka. Wspomniane operatory lokalizacji są w głównej mierze zależne od kształtu danego składnika kompozytu, tj. długości poszczególnych półosi wtrącenia elipsoidalnego. Generalnie, co należy szczególnie podkreślić, stosując dany schemat analityczny zastępuje się mikrostrukturę ośrodka rzeczywistego poprzez pewną uproszczoną/zastępczą mikrostrukturę (np. w schemacie M-T zakładamy wyidealizowaną morfologię w postaci ciągłej matrycy i elipsoidalnych wtrąceń). Niestety, w przypadku skomplikowanych morfologii ośrodków rzeczywistych nie jest oczywistym i nie ma jednoznacznej „recepty”, jak i czy można takiego uproszczenia dokonywać.

W związku z tym, w literaturze tematu pojawiły się liczne prace (m.in. Kachanov i Sevostianov, 2005; Sevostianov i Kachanov, 2012), które dotyczą zagadnienia

odwrotnego teorii homogenizacji polegającego na identyfikacji takiej mikrostruktury zastępczej. Jednocześnie wprowadzono również pojęcie tzw. mikrostruktury ekwiwalentnej, przez co rozumie się taką morfologię mikrostruktury, która w ogólności może nie mieć nic wspólnego z morfologią rzeczywistą (w sensie ułożenia przestrzennego składników, ich kształtów itd.), ale użyta jako model wsadowy do danego schematu analitycznego ma zapewniać taką samą odpowiedź makroskopową jak mikrostruktura rzeczywista (Kachanov i Sevostianov, 2005; Sevostianov i Kachanov, 2012). Jak zostanie wykazane w dalszej części pracy, koncepcje ekwiwalentnej mikrostruktury zaproponowane w literaturze przedmiotu mają dwie główne wady. Po pierwsze, rzeczywiste udziały frakcyjne poszczególnych składników kompozytu w ogólności nie odpowiadają udziałom frakcyjnym ekwiwalentnej mikrostruktury. Innymi słowy zamiana ośrodka rzeczywistego na ekwiwalentny nie zachowuje udziałów frakcyjnych składników. Po drugie, mikrostruktury ekwiwalentne zależą od parametrów mechanicznych składników tworzących kompozyt. Oznacza, to że jakakolwiek zamiana parametrów mechanicznych komponentów powoduje konieczność ponownego rozwiązania zagadnienia odwrotnego i zdefiniowania nowej mikrostruktury ekwiwalentnej.

Przedstawione wyżej niedoskonałości stały się wobec tego motywacją do znalezienia takiej mikrostruktury ekwiwalentnej, która będzie niezmiennicza względem parametrów mechanicznych poszczególnych składników ośrodka i jednocześnie będzie zachowywała ich rzeczywiste udziały frakcyjne. Innymi słowy, tak określona ekwiwalentna mikrostruktura ma być jedynie funkcją morfologii mikrostruktury, jej geometrii, i nie ma zależeć od parametrów mechanicznych jej składników – ma być niezmiennicza ze względu na wartość tych parametrów. W tym sensie może być więc również interpretowana jako „ekwiwalentna” miara mikrostruktury – niezależnie od aktualnych wartości parametrów mechanicznych mikrostruktury implikuje makroskopową odpowiedź analogiczną jak rzeczywista mikrostruktura.

W pracy rozważania ograniczono do zagadnienia stacjonarnego przepływu ciepła przez makroskopowo izotropowe ośrodki porowate. Wobec tego wszędzie gdy mowa w pracy o parametrze efektywnym rozumie się przez to efektywny współczynnik przewodności cieplnej, λ^{eff} [$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$]. Parametr ten jest niezwykle ważny z punktu widzenia budownictwa, a w szczególności, zagadnień związanych z geotechnicznymi konstrukcjami energetycznymi, takimi jak np. termopale, termo-aktywne obudowy tuneli, energetyczne ściany szczelinowe, termo-kotwy gruntowe lub skalne, czy też budynki zagłębione w gruncie (Staniec & Nowak, 2015). W każdym z przypadków

o funkcjonalności danej konstrukcji geotechnicznej decyduje charakterystyka termiczna otaczającego ośrodka gruntowego, rozumiana jako zmienność przewodności cieplnej gruntu wywołana np. wahaniami stopnia nasycenia przestrzeni porowej wodą. I tak, np. grunt w stanie suchym charakteryzuje się efektywnym współczynnikiem przewodności cieplnej rzędu $0.2 - 0.5 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, podczas gdy w stanie pełnego nasycenia wodą parametr ten wynosić może $1 - 4 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$.

Wobec powyższego celem pracy jest: sformułowanie i zaproponowanie rozwiązania zagadnienia odwrotnego teorii homogenizacji prowadzącego do wyznaczenia ekwiwalentnej mikrostruktury ośrodka porowatego, która będzie niezmiennicza względem przewodności cieplnej płynu (cieczy lub gazu) wypełniającego przestrzeń porową. Mikrostruktura ta ma zachowywać udziały frakcyjne składników. Innymi słowy, ekwiwalentna mikrostruktura ma być uproszczonym modelem morfologii mikrostruktury, który wykorzystany w schemacie Mori-Tanaki bądź samouzgodnionego pola zapewni poprawną predykcję parametrów makroskopowych ośrodka porowatego, niezależnie od tego jakie medium wypełniać będzie jego przestrzeń porową oraz jakie medium będzie tworzyć szkielet ośrodka porowatego.

Materiał zawarty w niniejszej pracy podzielono na osiem rozdziałów. W rozdziale 2 w sposób poglądowy omówiono podstawowe zasady i techniki homogenizacji dla ośrodków losowych. Zaprezentowano dwa metodologicznie różne podejścia służące określaniu parametrów makroskopowych ośrodków niejednorodnych, tj. metody numeryczne oraz metody analityczne. Przedstawiono wady oraz zalety stosowania obu podejść. Główną uwagę skupiono na analitycznych schematach aproksymacyjnych, dla których wskazano dużą trudność w modelowaniu uproszczonej geometrii kompozytu w ramach tych schematów.

W rozdziale 3 dokonano przeglądu dostępnych w literaturze zagadnień odwrotnych prowadzących do identyfikacji ekwiwalentnej mikrostruktury ośrodków niejednorodnych. Zaproponowano autorskie, przez wprowadzenie funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej, sformułowanie zagadnienia odwrotnego teorii homogenizacji mające na celu zidentyfikowanie mikrostruktury ekwiwalentnej, która spełnia założenie o niezmienniczości względem parametrów składników oraz zachowuje oryginalny udział frakcyjny komponentów.

W rozdziale 4 sformulowano metodę rozwiązania bazującą na algorytmie symulowanego wyżarzania, którą wykorzystano do rozwiązania sformułowanego zagadnienia odwrotnego teorii homogenizacji, i którą konsekwentnie stosowano do

rozwiązania wszystkich rozważanych w pracy zagadnień odwrotnych. Rozdział ten kończy weryfikacja efektywności oraz poprawności zaproponowanej metody.

W kolejnym rozdziale, tj. rozdziale 5, pokazano, że zagadnienie odwrotne sformułowane w pracy jest tzw. zagadnieniem źle uwarunkowanym (w sensie Hadamarda) i, w konsekwencji, rozwiązanie jest niestabilne. Wobec tego dokonano jego „stabilizacji” korzystając z techniki regularyzacji Tichonowa z autorską procedurą określania optymalnej wartości współczynnika regularyzacji.

W rozdziale 6 przedstawiono podstawowe miary mikrostruktury ośrodków porowatych, które zobrazowano przykładami obliczeniowymi. W kolejnym kroku zaprezentowane miary użyto w celu opisu mikrostruktury rzeczywistego ośrodka porowatego, tj. ośrodka gruntowego, którego obraz mikrostruktury uzyskano z rentgenowskiego mikrotomografu komputerowego. W rozdziale tym rozwiązano zagadnienie odwrotne, którego celem było zidentyfikowane ekwiwalentnej mikrostruktury dla sekwencji mikrostruktur ośrodków porowatych oraz ośrodka gruntowego. W rozdziale 6.3.5 przedstawiono również autorską metodę oceny wartości współczynnika przewodności cieplnej szkieletu ośrodka porowatego.

Rozdział 7 przedstawia urządzenie, nazwane Tomografem Ciepłym, które wykonano w ramach realizacji pracy doktorskiej i jest konsekwencją wcześniej sformułowanych rozważań i rozwiązań teoretycznych.

Pracę kończy rozdział 8, w którym zawarto podsumowanie uzyskanych w pracy wyników oraz wnioski.

2. Metody predykcji wartości efektywnych stałych materiałowych – podstawy teorii homogenizacji

Jak powszechnie wiadomo, ośrodek jednorodny to taki, którego właściwości są jednakowe w każdym punkcie jego materii. Innymi słowy, mianem materiału jednorodnego określa się taki, z którego nie da się w żaden sposób (np. poprzez obróbkę mechaniczną) wydzielić różnych składników objętościowych. Przykładem takich materiałów mogą być np. papier, szkło lub metale. Oczywistym jednak jest, że jeśli przyjrzeć się bliżej strukturze dowolnego materiału, to można dojść do wniosku, że w zasadzie, niemal każdy materiał wykazuje pewną niejednorodność, w zależności od przyjętej skali obserwacji, przy czym w wielu przypadkach, tę niejednorodność zaobserwować można dopiero po przejściu do skali atomowej. Zatem, to czy dany materiał uznaje się za jednorodny lub niejednorodny, zależy od tego, w jakiej skali dokonuje się obserwacji.

Dla przykładu, jeden z najczęściej wykorzystywanych w budownictwie materiałów kompozytowych, jakim jest beton, w skali zastosowań inżynierskich, traktowany jest, jako materiał jednorodny. Jeśli jednak analizować beton w „niższej” skali, tj. w skali mezo, to wówczas z łatwością można wyodrębnić w betonie jednorodną (w tej skali) matrycę cementową, pory powietrza, a także kruszywo. Dalsze „obniżanie” skali obserwacji prowadzi do wyodrębnienia coraz to większej ilości składników (niejednorodności) mikrostruktury betonu. I tak, w skali mikro i nano, matryca cementowa przestaje być jednorodna i można w niej wyszczególnić np. niezhydratyzowane cząstki klinkieru, uwodnione krzemiany wapnia, czy kryształy wodorotlenku wapnia (Constantinides & Ulm, 2004).

W zależności od tego, jaki materiał podlega analizie, to charakterystyczny wymiar niejednorodności dla danej skali obserwacji, fizycznie, może przyjmować różne wartości. Na przykład dla gruntów spoistych, gdzie niejednorodność można stowarzyszyć ze skalą przestrzeni porowej, charakterystyczny wymiar będzie wynosił około kilkudziesięciu mikrometrów, podczas gdy dla podłoża gruntowego wzmocnionego kolumnami żwirowymi, wymiar niejednorodności może być określony w metrach. Wobec tego, dla ułatwienia śledzenia rozważań zawartych w tej pracy, należy jasno zaznaczyć, że zawsze, gdy mowa o skali mikro, należy przez to rozumieć skalę niejednorodności określoną

poprzez pewną długość charakterystyczną l_m . Natomiast, za każdym razem, gdy używa się pojęcia skala makro lub skala makroskopowa, rozumie się przez to skalę zastosowań inżynierskich, a więc taką, w której dany materiał jest traktowany, jako ośrodek jednorodny, przy czym charakterystyczna długość opisana jest wówczas symbolem l_M .

Zauważmy, że opis wielu procesów fizycznych w skali mikro, ze względu na złożoność mikrostruktury, tj. dużą ilość niejednorodności, jest zwykle zadaniem trudnym, a czasem wręcz niemożliwym do przeprowadzenia. Dlatego też, obecnie bardzo często korzysta się z metod homogenizacji celem określenia tzw. ekwiwalentnego/zastępczego ośrodka makroskopowego, którego odpowiedź mechaniczna opisana jest pewnym uśrednionym parametrem, tzw. parametrem makroskopowym / efektywnym / zhomogenizowanym (ang. *overall/effective/homogenized*) (np. Strzelecki i in., 1996). W ogólności, dany parametr makroskopowy Ψ^{hom} zależy od parametrów poszczególnych składników Ψ_j , które można wyodrębnić w skali mikro, ich udziałów frakcyjnych ϕ_j oraz od morfologii (geometrii) mikrostruktury, tj. (Torquato, 2013):

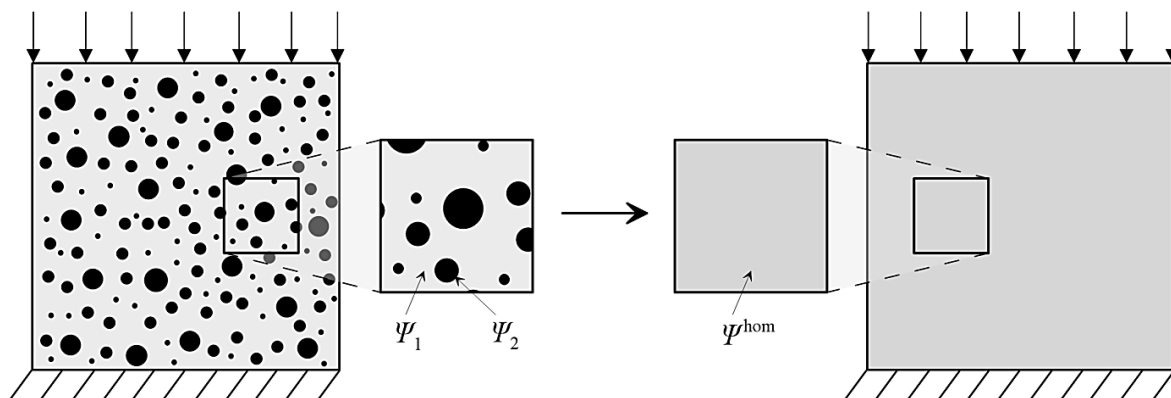
$$\Psi^{\text{hom}} = f(\Psi_1, \Psi_2, \dots, \phi_1, \phi_2, \dots, \Xi), \quad (2.1)$$

gdzie Ξ oznacza funkcje opisujące morfologię mikrostruktury zawierające informację wyższych rzędów, aniżeli udziały frakcyjne składników. Koncepcję ośrodka makroskopowo jednorodnego oraz parametru efektywnego, graficznie zobrazowano na rys. 2.1.

Proces przejścia ze skali mikro do skali makro, mówiąc najbardziej ogólnie, polega na uzyskaniu kompletnego opisu makroskopowego danego procesu fizycznego wychodząc z jego opisu sformułowanego w skali mikro. Na przykład, jeśli znane są w skali mikro: parametry składników, związki konstytutywne oraz równania zachowania, to w skali makro, powinniśmy uzyskać ekwiwalentny opis zawierający: parametry efektywne, makroskopowy związek konstytutywny oraz makroskopowe równanie zachowania. W zależności od zastosowanej techniki przejścia ze skali mikro do skali makro, wyróżnić możemy następujące metody homogenizacji, np. (podział przyjęto za (Łydźba, 2002)):

- metody uśredniania wagowego (np. Gilbert, 1990),
- metody uśredniania przestrzennego (np. Nigmatulin, 1981),
- metody homogenizacji ośrodków periodycznych/uporzędkowanych (np. Sanchez-Palencia, 1980),
- metody statystyczne (np. Rubinstein & Torquato, 1989),
- metody ciągłej mikromechaniki (m.in. Hill, 1965; Suquet, 1997).

W niniejszej pracy, wszystkie rozważania dotyczące określania parametrów efektywnych oparte są na ostatnim z wymienionych powyżej podejść, tzn. bazują na aparacie ciągłej mikromechaniki.



Rys. 2.1. Ogólny zarys teorii homogenizacji oraz koncepcja właściwości efektywnej

2.1. Reprezentatywna elementarna objętość (REO)

Mówiąc ogólnie, parametr efektywny to stała materiałowa w makroskopowym związku konstytutywnym stanowiącym relację między uśrednionymi polami fizycznymi. Procesu uśredniania pól fizycznych zwykle dokonuje się w obrębie wybranej objętości rozważanego ośrodka, tzw. reprezentatywnej elementarnej objętości (REO). Jej wymiar powinien być odpowiednio mały, z punktu widzenia skali makroskopowej, a jednocześnie odpowiednio duży, tak, aby objętość ta zawierała w sobie „wystarczającą ilość informacji” o rozważanym ośrodku. Niezależnie od typu mikrostruktury oraz rozważanego zjawiska fizycznego, charakterystyczny wymiar REO (rys. 2.2) musi spełniać warunek separacji skal (ang. *principle of scale separation*) (Geers i in., 2010):

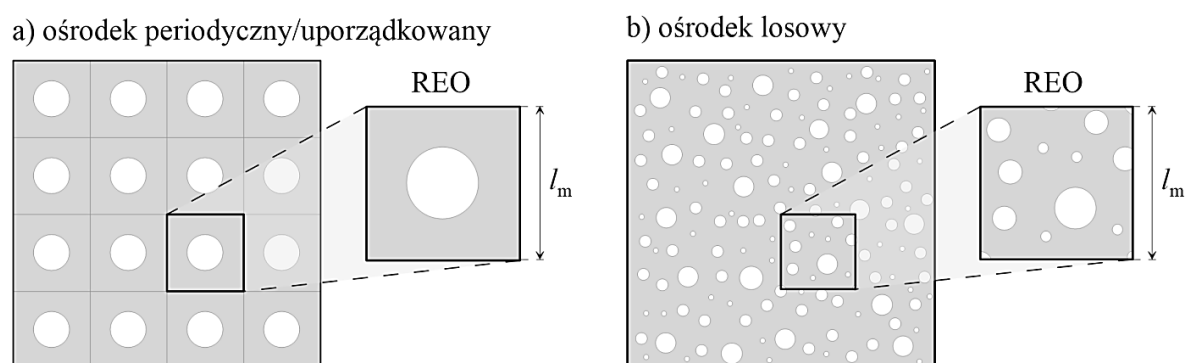
$$l_m/l_M \ll 1, \quad (2.2)$$

gdzie l_m oznacza w tym przypadku charakterystyczny wymiar REO natomiast l_M jest wielkością charakterystyczną obszaru makroskopowego. W pracy (Strzelecki i in., 1996) postuluje się, że proces homogenizacji jest możliwy, gdy $l_m/l_M < 0.1$.

Dla ośrodków periodycznych REO zdefiniować można w sposób intuicyjny, jako komórkę periodyczną (ang. *unit cell*) danej mikrostruktury (rys. 2.2a). Znacznie trudniej

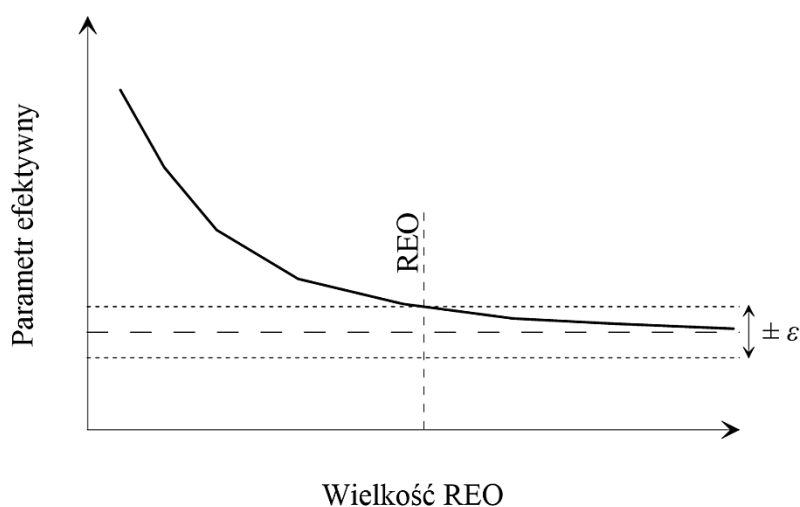
jest określić REO w przypadku ośrodków losowych (rys. 2.2b). Zazwyczaj, ze względu na losowy charakter mikrostruktury (wyrażony np. poprzez nieuporządkowane ułożenie składników w przestrzeni lub losową zmienność parametrów mechanicznych) wymiar REO określa się w terminach rachunku prawdopodobieństwa (Geers i in., 2010; Du & Ostoja-Starzewski, 2006). Jak pokazano w pracy (Geers i in., 2010), w przypadku ośrodków losowych, wielkość REO jest zależna od typu rozważanego zagadnienia (np. liniowa sprężystość, przewodnictwo ciepła, itd.), kontrastu pomiędzy parametrami składników, ich udziału frakcyjnego, założonego błędu aproksymacji, a także liczby realizacji mikrostruktury REO, które należy przeanalizować. Ta ostatnia wielkość, tj. liczba losowych realizacji REO, silnie zależy od wartości założonego błędu dla aproksymacji parametru efektywnego oraz prawdopodobieństwa (poziomu ufności), z jakim to oszacowanie jest określone.

Z reguły, dostępne w literaturze definicje REO nie dostarczają informacji o jej charakterystycznym wymiarze. I tak, np. w pracy (Van Mier, 1997) „REO definiuje się, jako minimalną objętość próbki laboratoryjnej, dla której uzyskane wyniki mogą być traktowane, jako reprezentatywne dla danego ośrodka”. Inna definicja, zaproponowana np. w pracy (Hashin, 1983), mówi, że „REO to model materiału używany do wyznaczania odpowiadającej mu właściwości efektywnej dla zhomogenizowanego modelu makroskopowego; REO powinna być wystarczająco duża, aby zawierać odpowiednią liczbę informacji o mikrostrukturze ośrodka, jednakże powinna być dużo mniejsza niż wielkość ośrodka makroskopowego”. Jak można zauważyć, z powyższych definicji nie wynika dokładny rozmiar REO. W tym sensie, są one zatem definicjami jakościowymi, a nie ilościowymi.



Rys. 2.2. REO dla ośrodka: a) periodycznego/uporządkowanego i b) losowego

Oczywistym jest, że aby idealnie ocenić wartości parametrów efektywnych ośrodka losowego należałoby wybrać do analizy taką objętość materiału, która zawiera pełną informację statystyczną o rozważanym ośrodku. Implikuje to, że analizie należałoby poddać nieskończenie dużą objętość materiału. Takie podejście jest oczywiście niemożliwe do zrealizowania z praktycznego punktu widzenia. Wobec tego, zazwyczaj zakłada się, że oszacowania parametru efektywnego dokonuje się z pewnym błędem aproksymacji ε . Wówczas, wielkość REO określić można np. w procedurze numerycznej poprzez obserwację zbieżności parametru makroskopowego do wartości asymptotycznej, reprezentującej wartość parametru efektywnego. Zbieżność ta obserwowana jest poprzez sukcesywne wyznaczanie parametru makroskopowego, dla co raz to większych objętości REO. Jak widać na rys. 2.3, istnieje zatem pewien minimalny wymiar reprezentatywnej elementarnej objętości, poniżej którego wyznaczany parametr może – z dużym prawdopodobieństwem – odbiegać od parametru efektywnego o więcej niż założony błąd ε . Warto podkreślić, że identyfikacja wielkości REO przy użyciu przedstawionej procedury może być czasochłonna, gdyż wymaga rozwiązywania dużej ilości zagadnień brzegowych dla każdej realizacji mikrostruktury.



Rys. 2.3. Procedura określania wielkości REO na podstawie zbieżności parametru makroskopowego wraz ze zwiększającą się objętością materiału

Wobec powyższego, w literaturze można znaleźć dość liczne próby zwiększenia efektywności (w sensie czasu obliczeń) procedury określania wielkości REO dla ośrodków losowych. Przykładem tego jest praca (Kanit i in., 2003), w której autorzy wykorzystują do tego celu miarę określającą statystyczne fluktuacje procesu stochastycznego, tzw. *integral range* (Lantuéjoul, 1991). Na jej podstawie proponuje się szacować wariancję

rozważanego parametru makroskopowego, a w konsekwencji identyfikować w sensie statystycznym minimalny wymiar REO. Niemniej jednak, aby dokonać określenia wielkości REO, wciąż wymagane jest wykonanie sekwencji obliczeń numerycznych celem określenia parametru makroskopowego, dla co najmniej 4-5 realizacji mikrostruktury o różnych wymiarach. Weryfikację procedury przedstawionej w (Kanit i in., 2003), na przykładach rzeczywistych mikrostruktur, dokonano w pracy (Kanit i in., 2006).

Wysocze efektywną procedurę określania minimalnej wielkości REO, tj. taką, która nie wymaga określenia parametrów makroskopowych dla różnych objętości ośrodka, sformułowano np. w pracy (Róžański, 2010). Wykazano, że dla przypadku przepływu ciepła przez dwuskładnikowe mikrostruktury 2D, minimalną wielkość REO określać można jedynie na podstawie informacji o morfologii mikrostruktury oraz o kontraście pomiędzy przewodnościami poszczególnych składników. W pracy (Łydzba & Róžański, 2014) sformułowano zmodyfikowaną procedurę oceny wielkości REO bazującą na wprowadzonej oryginalnej funkcji korelacji 2-punktowej. Ogólnie rzecz biorąc, procedura określania wielkości REO polega na numerycznym całkowaniu tej funkcji korelacji i określaniu na tej podstawie wariancji współczynnika przewodności cieplnej w funkcji wielkości rozważanego obszaru. Zakładając błąd aproksymacji dla współczynnika przewodności cieplnej dokonuje się oceny minimalnej wielkości REO. Zakres stosowalności, w konsekwencji, zweryfikowano dla zagadnienia przepływu ciepła. Z procedury określania minimalnego wymiaru REO zaproponowanej w pracy (Łydzba & Róžański, 2014) korzysta się w przykładach obliczeniowych zawartych w rozdziale 6.2.1. Podaje się tam również warunek, z którego wynika minimalny wymiar reprezentatywnej elementarnej objętości.

W literaturze znaleźć można jeszcze szereg innych procedur określania wielkości REO dla konkretnych zagadnień fizycznych oraz dla danego typu mikrostruktury, np. (Gusev, 1997; Stroeven i in., 2004; Du & Ostoj-Starzewski, 2006). Oczywiście określenie REO ma sens jedynie przy założeniu, że rozważany ośrodek jest statystycznie jednorodny, a więc jego funkcje mikrostruktury (np. udział frakcyjny) nie zależą od przyjętego układu współrzędnych. Nie można określić REO w przypadku materiałów wykazujących lokalizację zniszczenia – materiał traci wówczas statystyczną jednorodność (Gitman i in., 2007).

2.2. Ogólne sformułowanie zagadnienia brzegowego dla oceny efektywnej przewodności cieplnej

W niniejszej pracy rozważa się przewodność cieplną ośrodka porowatego. Proces stacjonarnego przepływu ciepła, bez dodatkowego źródła, opisuje:

- równanie bilansu:

$$\frac{\partial q_i}{\partial x_i} = 0, \quad \text{w } V, \quad (2.3)$$

- związek konstytutywny w postaci prawa Fouriera:

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad \text{w } V, \quad (2.4)$$

gdzie q_i [W/m^2] to strumień przepływającego ciepła, T [K] jest polem temperatury, λ [$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$] oznacza współczynnik przewodności cieplnej, a x_i to wektor współrzędnych przestrzennych. Powyższe sformułowanie zakłada, że przepływ ciepła występuje w materiale izotropowym i jednorodnym. W przypadku ośrodka niejednorodnego, np. ośrodka porowatego, składającego się z co najmniej dwóch składników, tj. matrycy/szkieletu o przewodności cieplnej λ_s oraz płynu (w całości wypełniającego przestrzeń porową) o przewodności cieplnej λ_f , sformułowanie to ((2.3) i (2.4)), po prostych przekształceniach, zapisać możemy w postaci:

$$-\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda(\mathbf{x}) \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) = 0, \quad \text{w } V, \quad (2.5)$$

$$\text{oraz } \lambda(\mathbf{x}) = I_s(\mathbf{x})\lambda_s + I_f(\mathbf{x})\lambda_f,$$

gdzie \mathbf{x} to wektor położenia, a $I_s(\mathbf{x})$ i $I_f(\mathbf{x})$ to funkcje indykatorowe, odpowiednio dla matrycy i przestrzeni porowej, zdefiniowane w następujący sposób:

$$I_\alpha(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{jeżeli } \mathbf{x} \in V_\alpha, \quad \alpha = s, f \\ 0, & \text{w przeciwnym wypadku} \end{cases} \quad (2.6)$$

Sformułowanie (2.5) uwzględnia niejednorodną naturę ośrodka, wobec czego w dalszej części pracy nazywać je będziemy sformułowaniem mikroskopowym. Jak wspomniano już wcześniej, jeżeli charakterystyczny wymiar niejednorodności ośrodka jest względnie mały w porównaniu do jego objętości w skali makro, wtedy ośrodek taki możemy traktować, jako makroskopowo jednorodny, charakteryzowany

zastępczą/efektywną przewodnością cieplną λ^{hom} . Innymi słowy, sformułowanie procesu przepływu ciepła jest analogiczne jak w przypadku równań (2.3) i (2.4), z tą różnicą, że występuje w nim tylko jedna stała materiałowa, λ^{hom} zdefiniowana następującym równaniem całkowym (Torquato, 2013; Li & Wang, 2008):

$$\lambda_{ij}^{\text{hom}} = \frac{1}{V_{\text{REO}}} \int_{V_{\text{REO}}} \lambda(\mathbf{x}) P_{ij}(\mathbf{x}) dV, \quad (2.7)$$

gdzie V_{REO} oznacza objętość materiału zajmowaną przez reprezentatywną elementarną objętość, natomiast $P_{ij}(\mathbf{x})$ jest to tzw. tensor lokalizacji, którego składowe definiuje następująca zależność (Torquato, 2013):

$$P_{ij}(\mathbf{x}) = \left(\delta_{ij} + \frac{\partial \chi_i(\mathbf{x})}{\partial x_j} \right). \quad (2.8)$$

W powyższym równaniu δ_{ij} reprezentuje symbol Kroneckera:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{jeżeli } i = j \\ 0, & \text{jeżeli } i \neq j \end{cases}, \quad (2.9)$$

natomiast $\chi_i(\mathbf{x})$ jest rozwiązaniem następującego zagadnienia brzegowego (Łydźba i in. 2018), sformułowanego dla objętości REO, tj.:

$$\begin{cases} -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda(\mathbf{x}) \delta_{ji} + \lambda(\mathbf{x}) \frac{\partial \chi_j}{\partial x_i} \right) = 0, & \text{w } V_{\text{REO}}, \\ + \text{warunki brzegowe,} & \text{na } \partial V_{\text{REO}} \end{cases}, \quad (2.10)$$

gdzie ∂V_{REO} oznacza brzeg obszaru.

Wobec powyższego (2.10), aby przejście ze skali mikro do skali makro było w pełni zrealizowane, należy opis mikroskopowy uzupełnić o odpowiednie warunki brzegowe. Według Suquet (Suquet, 1987), warunki brzegowe powinny odzwierciedlać, tak dobrze jak to tylko możliwe, rzeczywisty stan REO w obszarze rozważanego ośrodka. Uzupełnienie sformułowania mikroskopowego poprzez warunki brzegowe nazywane jest często „hipotezą zamykającą” (Łydźba, 2002). Najbardziej powszechnymi warunkami brzegowymi dla zagadnienia przepływu ciepła są (Nguyen i in., 2011):

- jednorodny gradient temperatury (∇T) na brzegu obszaru (BC_G):

$$T = G_i \cdot x_i \quad \forall x_i \in \partial V, \quad (2.11)$$

gdzie składowe G_i są stałymi niezależnymi od x_i ;

- jednorodny strumień ciepła na brzegu obszaru (BC_F):

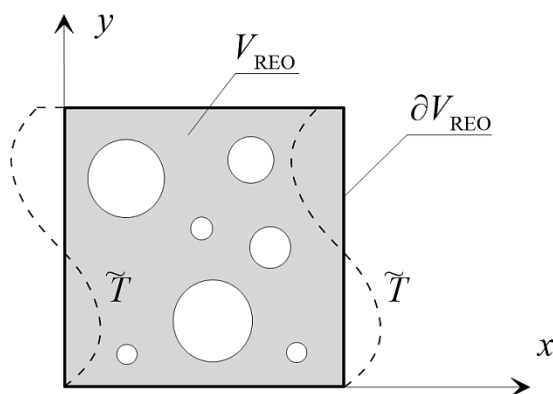
$$q_i \cdot n_i = Q_i \cdot x_i \quad \forall x_i \in \partial V, \quad (2.12)$$

gdzie Q_i to, analogicznie jak powyżej, składowa niezależna od x_i ;

- okresowe warunki brzegowe (BC_P):

$$T = G_i \cdot x_i + \tilde{T} \quad \forall x_i \in V, \quad (2.13)$$

gdzie \tilde{T} to tzw. korektor, którego obecność w równaniu (2.13) jest konsekwencją niejednorodności mikrostruktury implikującej zaburzenia/fluktuacje rozkładu temperatury. Zakłada się, że fluktuacje te są okresowe, co implikuje, że \tilde{T} ma te same wartości w dwóch punktach na przeciwległych brzegach obszaru (rys. 2.4). Pomimo, że okresowe warunki brzegowe wydają się naturalne jedynie dla kompozytów o okresowej mikrostrukturze, to jak pokazano np. w pracach (Terada i in., 2000) oraz (Van der Sluis i in., 2000), zastosowanie ich w przypadku ośrodków losowych również prowadzi do poprawnego oszacowania właściwości efektywnych.



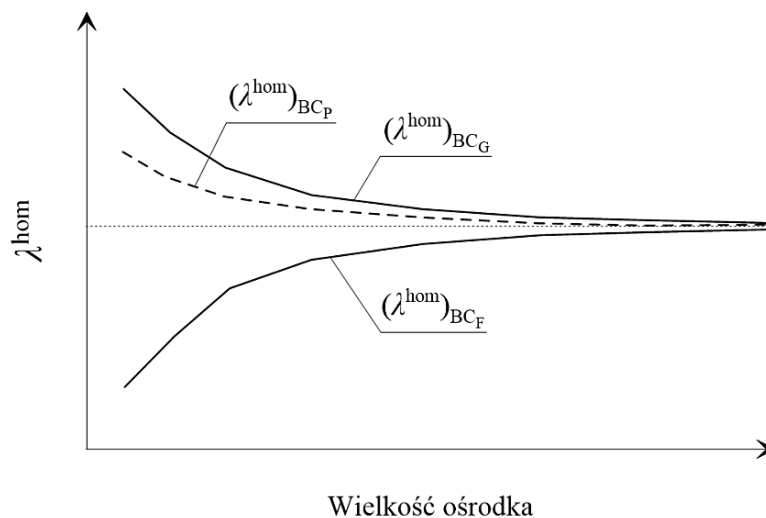
Rys. 2.4. Graficzna interpretacja okresowych warunków brzegowych

Jeśli określać parametr makroskopowy (tj. makroskopową przewodność cieplną) dla coraz to większej objętości materiału, to w zależności od rodzaju przyjętych warunków brzegowych, istnieje następująca zależność: λ zbiega asymptotycznie do λ^{hom} „od góry” lub „od dołu”, jeśli przyjmie się warunek brzegowy w postaci, odpowiednio, jednorodnego gradientu temperatury (BC_G) lub jednorodnego strumienia ciepła (BC_F). Ponadto, najszybszą zbieżność makroskopowej odpowiedzi ośrodka do wartości efektywnej uzyskuje się poprzez zastosowanie okresowych warunków brzegowych (rys. 2.5).

Zgodnie np. z (Suquet, 1987), można zapisać następującą sekwencję wartości parametru makroskopowego w zależności od przyjętego warunku brzegowego:

$$(\lambda^{\text{hom}})_{\text{BC}_F} \leq (\lambda^{\text{hom}})_{\text{BC}_P} \leq (\lambda^{\text{hom}})_{\text{BC}_G} . \quad (2.14)$$

Oczywistym jest zatem, że rodzaj przyjętych warunków brzegowych wpływa na rozmiar REO – wielkość reprezentatywnej elementarnej objętości jest najmniejsza w przypadku okresowych warunków brzegowych.



Rys. 2.5. Zbieżność parametru makroskopowego w zależności od rozważanej objętości ośrodka dla trzech różnych warunków brzegowych

2.3. Metody rozwiązywania zagadnienia brzegowego ciągłej mikromechaniki

W zależności od techniki użytej do określenia parametru makroskopowego, metody homogenizacji można podzielić na: analityczne – bazujące na rozwiązaniu zagadnienia pojedynczego wtrącenia w nieskończonym ośrodku ciągłym oraz numeryczne, często określane mianem tzw. obliczeniowej mikromechaniki. W przypadku tych pierwszych, określanie właściwości efektywnej z reguły jest mniej czasochłonne (w sensie czasu obliczeń) w porównaniu do metod numerycznych. Wynika to z faktu, że metody analityczne zakładają bardzo uproszczoną, w stosunku do rzeczywistej, geometrię ośrodka, np. w postaci sferoidalnych wtrąceń zanurzonych w jednorodnej matrycy. Opis wybranych metod analitycznych oraz numerycznych przedstawiono w rozdziale 2.3.1 oraz 2.3.2.

2.3.1. Obliczeniowa mikromechanika

Ze względu na fakt, iż rzeczywiste mikrostruktury ośrodków porowatych są bardzo złożone, określanie parametrów efektywnych z wykorzystaniem technik obliczeniowej mikromechaniki jest z reguły procesem wymagającym długiego czasu obliczeń. Celem zwiększenia efektywności procedur obliczeniowych, w ostatnich latach rozwinęły się techniki bazujące na określaniu parametru makroskopowego jako estymatora Monte–Carlo określonego na podstawie skończonej liczby rozwiązań uzyskanych dla relatywnie mniejszych objętości REO (np. Kanit i in., 2003; Łydźba & Różański, 2014). Innymi słowy, zamiast rozwiązywać zagadnienie brzegowe dla jednej, względnie dużej objętości REO, rozwiązuje się sekwencję zagadnień brzegowych dla znacznie mniejszych objętości ośrodka, a parametr makroskopowy określa się zgodnie z następującą zależnością:

$$\overline{\lambda}^{\text{hom}} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \langle \lambda(\omega_j) \rangle, \quad (2.15)$$

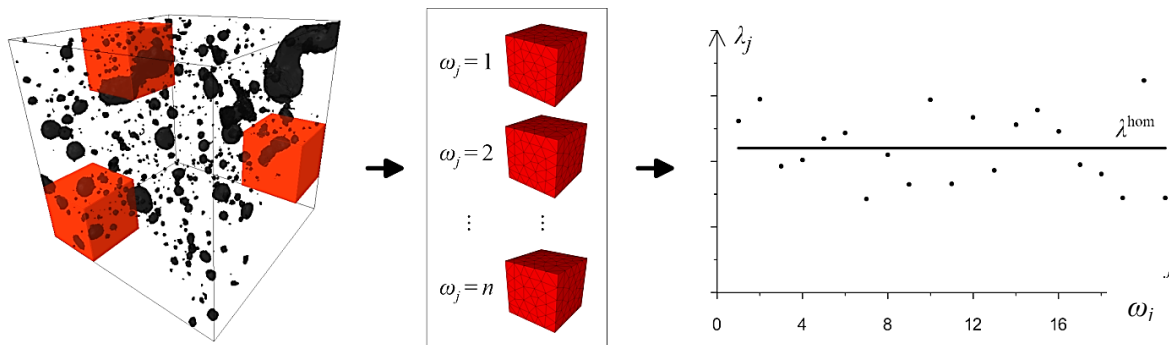
gdzie $\langle \lambda(\omega_j) \rangle$ jest uśrednionym objętościowo rozwiązaniem zagadnienia brzegowego (2.10) odpowiadającym realizacji ω_j mikrostruktury. W przypadku makroskopowo izotropowego ośrodka rozwiązanie to określone jest jako:

$$\langle \lambda(\omega_j) \rangle = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{V_{\text{REO}}} \int_{V_{\text{REO}}} (q_1^1 + q_2^2 + q_3^3) dx \right), \quad (2.16)$$

gdzie składowa wektora strumienia ciepła wyrażona jest w następujący sposób:

$$q_i^m = -\lambda(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x_i} [\delta_{mi} x_i + \tilde{T}^m(\mathbf{x})]. \quad (2.17)$$

W równaniach (2.16) oraz (2.17) q_i^m oznacza składową wektora strumienia ciepła wynikającą z rozwiązania zagadnienia brzegowego dla jednostkowego makroskopowego gradientu temperatury działającego na kierunku x_m . Ponadto, ze względu na wspomnianą wcześniej własność zbieżności odpowiedzi makroskopowej, bardzo często jako „hipotezę zamykającą”, stosuje się okresowe warunki brzegowe. Graficzną prezentację metody określania parametru makroskopowego z wykorzystaniem skończonej liczby losowych realizacji REO zaprezentowano na rys. 2.6.



Rys. 2.6. Zbiór n losowych realizacji REO dla przykładowego ośrodka losowego i określony na ich podstawie estymator Monte-Carlo

Należy zwrócić uwagę na fakt, iż w przedstawionej powyżej numerycznej procedurze określania parametru makroskopowego pojawiają się pewne problemy, z którymi należy sobie poradzić przed lub w trakcie wykonywania obliczeń. Po pierwsze, przed wykonywaniem obliczeń należy wyznaczyć minimalną wielkość REO wykorzystując jedną z technik, które opisano w poprzednich rozdziałach. Po drugie, dla określonej wielkości REO należy określić minimalną liczbę jej losowych realizacji n_{\min} . Minimalną liczbę realizacji zidentyfikować można np. na podstawie Centralnego Twierdzenia Granicznego (Feller, 1961) (por. np. Łydźba i in., 2017). Ze względu na fakt, że wartość oczekiwana parametru makroskopowego oraz wariancja nie są *a priori* znane, z reguły określenie liczby realizacji jest procesem iteracyjnym. Innymi słowy, dla ustalonego wymiaru REO rozwiązuje się kolejne zagadnienia brzegowe za każdym razem sprawdzając warunek wynikający np. z Centralnego Twierdzenia Granicznego. Jeśli po pewnej iteracji jest on spełniony, wówczas obliczenia są zatrzymywane, a wartość średnia (2.15) reprezentuje odpowiedź makroskopową (Łydźba & Róžański, 2014).

Kolejnymi problemami, które mogą się pojawić w trakcie obliczeń są te wynikające z zastosowania konkretnej metody numerycznej. Najczęściej stosowanymi metodami są: metoda elementów skończonych (MES), metoda objętości skończonych (MOS), metoda różnic skończonych (MRS) lub techniki obliczeniowe z wykorzystaniem np. szybkiej transformaty Fouriera (Li, 2015). Najczęstszymi problemami w metodach numerycznych są np.: brak zadowalającej zbieżności wynikający z dużego kontrastu pomiędzy parametrami składników, konieczność dysponowania dużą mocą obliczeniową ze względu na złożoność mikrostruktury – problem ten ujawnia się szczególnie w przypadku obliczeń 3D. W ostatnim czasie rozwinęły się również techniki pozwalające na wykonywanie obliczeń równoległych, co skutkuje znacznym skróceniem czasu obliczeń (np. Kanit i in., 2006).

Prezentując wyznaczanie parametrów makroskopowych ośrodków mikro niejednorodnych metodami numerycznymi/obliczeniowymi, wskazano szereg problemów z jakimi wiąże się to podejście. Dlatego też, w ostatnich latach ponownie na „atrakcyjności” zyskały analityczne metody szacowania parametrów efektywnych – wybrane metody opisuje się w kolejnym podrozdziale.

2.3.2. Metody analityczne

Jak już wspomniano, w niniejszej pracy rozważania dotyczą zagadnienia stacjonarnego przepływu ciepła przez ośrodek porowaty. W konsekwencji, metody analityczne, zobrazowane konkretnymi przykładami, prezentuje się jedynie dla tego właśnie procesu fizycznego. Oczywistym jest jednak, że ze względu na niemal identyczny opis matematyczny, w prosty sposób można przejść do analizy innych zagadnień transportu masy takich, jak np. dyfuzja molekularna czy przewodnictwo elektryczne. Ponadto, w literaturze dostępne są sformułowania dla zagadnień „czysto” mechanicznych, np. zagadnienie liniowej sprężystości (np. Torquato, 2013; Milton, 1985).

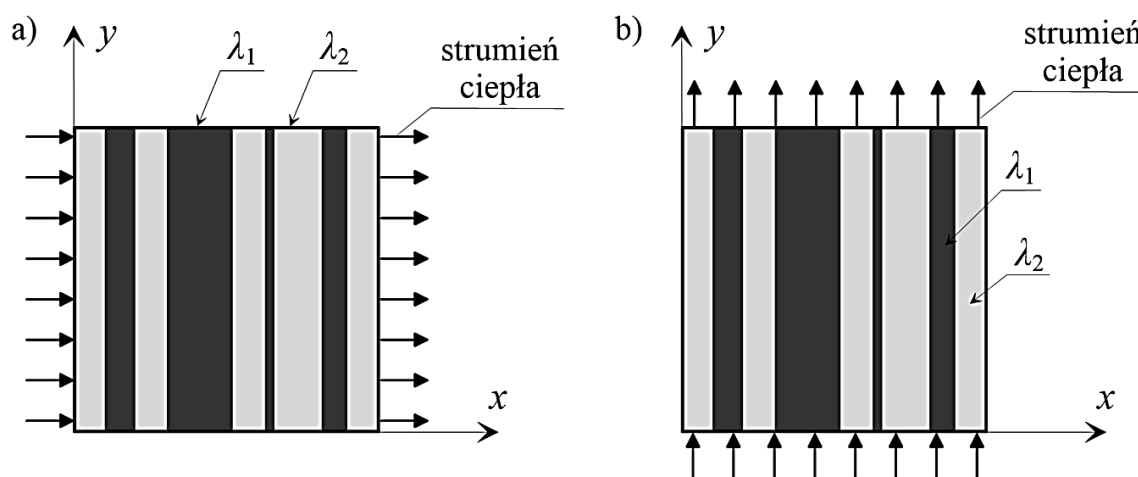
Jak zauważono wcześniej, aby idealnie wyznaczyć parametr efektywny ośrodka losowego wymagana jest znajomość „pełnej” informacji statystycznej o danym materiale. Z reguły dostępna jest jedynie pewna ograniczona informacja statystyczna; najczęściej znane są np. udziały frakcyjne składników, wartości ich parametrów mechanicznych oraz informacja o makroskopowej izotropii ośrodka. Wobec tego, dla ośrodków losowych, niemal zawsze gdy mowa o wyznaczaniu parametrów makroskopowych, należy to rozumieć w sensie oszacowania lub określenia przedziału możliwych wartości dla parametru makroskopowego (tzw. ograniczenia).

2.3.2.1. Ograniczenia Wienera

Dla kompozytu o M jednorodnych składnikach charakteryzujących się przewodnościami cieplnymi λ_i oraz udziałami frakcyjnymi ϕ_i , Wiener zaproponował następujące ograniczenia na wartość makroskopowej przewodności cieplnej (Hill, 1952):

$$\underbrace{\left(\sum_{i=1}^M \frac{\phi_i}{\lambda_i} \right)^{-1}}_{\text{Wiener}^-} \leq \boxed{\lambda^{\text{hom}}} \leq \underbrace{\sum_{i=1}^M \phi_i \lambda_i}_{\text{Wiener}^+}. \quad (2.18)$$

Jak łatwo można zauważyć, makroskopowa przewodność cieplna ograniczona jest od dołu poprzez średnią harmoniczną natomiast od góry poprzez średnią arytmetyczną. Dolne oraz górne oszacowanie przewodności cieplnej uzyskuje się, odpowiednio, dla szeregowego oraz równoległego układu poszczególnych składników względem kierunku przepływającego strumienia ciepła (rys. 2.7).



Rys. 2.7. Schemat połączenia: a) szeregowego – dolne oszacowanie Wienera oraz b) równoległego – górne oszacowanie Wienera

2.3.2.2. Ograniczenia Hashina-Shtrikmana

Zauważmy, że ograniczenia Wienera (2.18) należy traktować jedynie, jako dość zgrubne oszacowanie przedziału możliwych wartości przewodności cieplnej ośrodka porowatego, zwłaszcza jeśli różnica pomiędzy parametrami poszczególnych składników jest relatywnie duża – im wyższy kontrast pomiędzy przewodnościami składników, tym ograniczenia stają się „szersze”. Wyraźne zawężenie ograniczeń można uzyskać jeśli uwzględni się dodatkową informację o ośrodku, tj. założenie o jego makroskopowej izotropii. Wówczas „najwęższymi możliwymi ograniczeniami dla izotropowej odpowiedzi efektywnej kompozytu” (Zohdi & Wriggers, 2008) są te zaproponowane przez Hashina-Shtrikmana; dolne ($H-S^-$) oraz górne ($H-S^+$) ograniczenie definiuje następująca zależność (Hashin & Shtrikman, 1963):

$$\underbrace{\left(\sum_{i=1}^M \frac{\phi_i}{\kappa \cdot \lambda_{\min} + \lambda_i} \right)^{-1}}_{HS^-} - \kappa \cdot \lambda_{\min} \leq \boxed{\lambda^{\text{hom}}} \leq \underbrace{\left(\sum_{i=1}^M \frac{\phi_i}{\kappa \cdot \lambda_{\max} + \lambda_i} \right)^{-1}}_{HS^+} - \kappa \cdot \lambda_{\max}, \quad (2.19)$$

gdzie $\kappa=1$ dla zagadnienia 2D i $\kappa=2$ dla zagadnienia 3D (wprowadzony parametr κ , określający wymiar przestrzeni konsekwentnie stosuje się również w dalszej części pracy) oraz:

$$\begin{aligned}\lambda_{\min} &= \min_i (\lambda_i), \\ \lambda_{\max} &= \max_i (\lambda_i).\end{aligned}\tag{2.20}$$

W literaturze zdefiniowane są również „węższe” i bardziej złożone ograniczenia dla makroskopowej odpowiedzi kompozytów. Określone one są na podstawie miar statystycznych mikrostruktury wyższego rzędu niż udziały frakcyjne, a więc informacji, która w praktyce najczęściej jednak nie jest dostępna (por. np. Willis, 1977; Milton, 1981; Torquato, 2013).

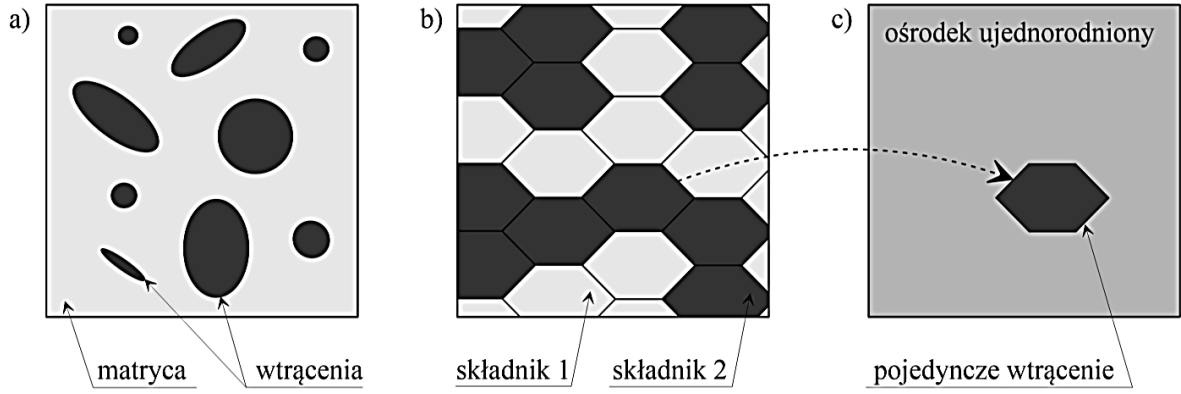
2.3.2.3. Schemat Mori-Tanaki oraz samouzgodnionego pola

Aproksymacyjne metody analityczne, takie jak np. schemat Maxwella, samouzgodnionego pola, czy Mori-Tanaki (ale również ich późniejsze modyfikacje) bazują w ogólności na rozwiązaniu pojedynczego elipsoidalnego wtrącenia zanurzonego w nieskończonym ośrodku ciągłym (tzw. rozwiązanie Eshelby’ego (Eshelby, 1957)). Atrakcyjność schematów analitycznych wynika głównie z ich matematycznej „prostoty”, która jest bezpośrednią konsekwencją uproszczeń dotyczących modelowania oddziaływań pomiędzy wtrąceniami. Ponadto, efektywność obliczeniowa schematów analitycznych wynika również z zakładanych w nich relatywnie prostych modeli mikrostruktury w odniesieniu do rzeczywistej morfologii mikrostruktury ośrodków porowatych; najczęściej stosuje się morfologię mikrostruktury w postaci ciągłej matrycy z zanurzonymi w niej wtrąceniami (sfery, sferoidy, supersfery, itp.) (Mori & Tanaka, 1973; Hill, 1965; Torquato, 2013; Giraud & Sevostianov, 2013). Jednakże, to proste podejście w odniesieniu do modelowania mikrostruktury, które prowadzi do atrakcyjności metod analitycznych, jest z drugiej strony główną wadą tych metod. Wynika to z faktu, iż niejednokrotnie tak uproszczone modelowanie np. przestrzeni porowej, która jest utworzona z elipsoidalnych wtrąceń, „nie przystaje”, w sensie geometrycznym, do mikrostruktury rzeczywistego ośrodka porowatego.

Przedstawienie i opis metod analitycznych ograniczono do dwóch najbardziej popularnych i równocześnie wykorzystywanych w niniejszej pracy, tj. schematu Mori-Tanaki (M-T) oraz schematu samouzgodnionego pola (S-C). W literaturze (np. Torquato, 2013) dostępne są bardzo ogólne sformułowania tych metod, np. w odniesieniu do liczby składników lub anizotropii ośrodka. Dla przejrzystości prezentacji, w dalszej części pracy zawęźa się rozważania do szczególnego przypadku, tj. zakłada się, że ośrodek porowaty:

- jest makroskopowo izotropowy,
- jest w pełni nasycony (przestrzeń porowa w całości wypełniona jest płynem),
- składa się z jednorodnego szkieletu o przewodności cieplnej λ_s i udziale frakcyjnym ϕ_s oraz przestrzeni porowej wypełnionej płynem o przewodności cieplnej λ_f i udziale frakcyjnym $\phi_f=1-\phi_s$.

Oba rozważane schematy różnią się założeniami dotyczącymi morfologii mikrostruktury. Schemat M-T zakłada morfologię ośrodka w postaci elipsoidalnych wtrąceń zanurzonych w ciągłej matrycy (rys. 2.8a). W przypadku schematu S-C zakłada się polikrystaliczną morfologię mikrostruktury (rys. 2.8b). Ze względu na fakt, iż sformułowanie schematu M-T nie uwzględnia oddziaływań pomiędzy poszczególnymi wtrąceniami, oczywistym jest, iż najlepsze oszacowania parametrów makroskopowych uzyskuje się w przypadkach relatywnie małych udziałów frakcyjnych wtrąceń w kompozycie. Ograniczenie to nie dotyczy schematu S-C ponieważ w schemacie tym oddziaływania pomiędzy składnikami kompozytu zamodelowane są poprzez zastąpienie ich przez oddziaływania poszczególnych składników z ujednorodnionym kompozytem (Berryman & Milton, 1988; Łydzba, 2002; Torquato, 2013) (rys. 2.8c). W konsekwencji, schemat M-T odpowiada zagadnieniu pojedynczego wtrącenia zanurzonego w jednorodnej matrycy o znanej przewodności cieplnej, podczas gdy w schemacie S-C zakłada się, że matryca charakteryzowana jest efektywną przewodnością cieplną kompozytu, która jest wartością poszukiwaną. Warto dodać, że schemat S-C jest schematem „realizowalnym” (dowód znaleźć można np. w (Milton, 1985), ponieważ niezależnie od otrzymanych parametrów makroskopowych na podstawie tego schematu można zawsze znaleźć odpowiadający mu ośrodek cechujący się parametrami zastępczymi wynikającymi z rozwiązania z tego schematu. Z kolei schemat M-T w ogólnym przypadku dla dowolnego kształtu wtrąceń może być „nierealizowalny” (Berryman & Berge, 1996; Łydzba, 2002; Torquato, 2013).



Rys. 2.8. Morfologia: a) typu matryca-wtrącenie (schemat M-T) i b) polikrystaliczna (schemat S-C) oraz c) modelowanie oddziaływań pomiędzy składnikami kompozytu w schemacie S-C

Zgodnie z przyjętymi założeniami, dla rozważanego dwu-składnikowego w pełni nasyconego ośrodka porowatego, efektywny współczynnik przewodności cieplnej według schematu M-T wyrazić można jako (por. np. Łydźba, 2011):

$$\lambda^{\text{hom}} = \frac{\phi_f \lambda_f P_{f,m} + \phi_s \lambda_s P_{s,m}}{\phi_f P_{f,m} + \phi_s P_{s,m}}, \quad (2.21)$$

gdzie $P_{\xi,m}$ to tzw. tensor lokalizacji dla składnika ξ , którego składowe określa następująca zależność (Torquato, 2013):

$$P_{\xi,m} = \frac{1}{\kappa+1} \cdot \sum_{j=1}^{\kappa+1} \frac{1}{1 + A_j \frac{\lambda_\xi - \lambda_s}{\lambda_s}}, \quad (2.22)$$

gdzie A_j to współczynniki, których wartości zdefiniowane są poprzez odpowiednie całki eliptyczne – określanie ich wartości szczegółowo omawiane jest w dalszej części rozdziału. Zauważmy, że w przypadku schematu M-T, tensor lokalizacji (2.22) dla składnika będącego matrycą (szkielet ośrodkowa porowatego) jest tensorem jednostkowym.

W analogiczny sposób wyrazić można efektywny współczynnik przewodności cieplnej dla przypadku schematu S-C, tj.:

$$\lambda^{\text{hom}} = \frac{\phi_f \lambda_f P_{f,\text{hom}} + \phi_s \lambda_s P_{s,\text{hom}}}{\phi_f P_{f,\text{hom}} + \phi_s P_{s,\text{hom}}}, \quad (2.23)$$

gdzie:

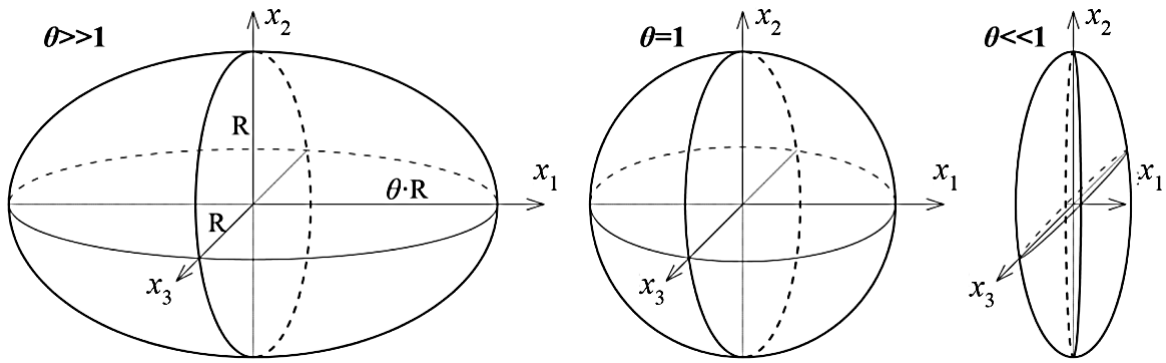
$$P_{\xi, \text{hom}} = \frac{1}{\kappa + 1} \cdot \sum_{j=1}^{\kappa+1} \frac{1}{1 + A_j \frac{\lambda_{\xi} - \lambda^{\text{hom}}}{\lambda^{\text{hom}}}}. \quad (2.24)$$

Należy podkreślić, że w przypadku schematu S-C poszukiwana wartość makroskopowego współczynnika przewodności cieplnej λ^{hom} występuje po obu stronach równania (2.23). Jest to bezpośrednią konsekwencją założeń dotyczących sformułowania metody – wartości poszczególnych składowych tensora lokalizacji (2.24) zależą od makroskopowego parametru λ^{hom} . Wobec powyższego nie jest możliwe wyznaczenie λ^{hom} w sposób bezpośredni, tak jak ma to miejsce w przypadku schematu M-T, gdzie makroskopowy parametr λ^{hom} wyznacza się bezpośrednio z równania (2.21). Schemat S-C jest zatem schematem niejawnym i jego rozwiązania poszukuje się np. metodami iteracyjnymi (Łydźba, 2002; Torquato, 2013).

Jak wspomniano powyżej, tensory lokalizacji (2.22) oraz (2.24) są funkcjami współczynników A_j , które w bezpośredni sposób zależą od przyjętej geometrii wtrąceń elipsoidalnych. Wartości współczynników A_j określa się na podstawie poniższej zależności:

$$A_j = 0.5 \cdot \prod_{j=1}^{\kappa+1} R_j \cdot \int_0^{\infty} \left((x + R_j^2) \cdot \sqrt{\prod_{j=1}^{\kappa+1} (x + R_j^2)} \right)^{-1} dx, \quad (2.25)$$

gdzie R_j to długość półosi elipsy (bądź elipsoidy dla zagadnienia 3D) w kierunku osi x_j . W zagadnieniach 3D najczęściej zawęża się rozważania do wtrąceń sferoidalnych, wówczas ich kształt charakteryzowany jest stosunkiem półosi θ (rys. 2.9). Stosowanie tego typu wtrąceń wynika z faktu, iż dla tego typu inkluzji w literaturze dostępne są rozwiązania zamknięte. Sferoidy o $\theta \gg 1$ to bryły w kształcie igieł (wykorzystywane do modelowania np. włókien), o $\theta = 1$ to sfery, a o $\theta \ll 1$ to bryły w kształcie dysków (wykorzystywane do modelowania spękań, m.in. (Giraud i in., 2015; Kazatchenko i in., 2006)). Analogicznie, w przypadku zagadnienia 2D parametr θ określa stosunek półosi elipsy wzdłuż osi x_1 oraz x_2 (rys. 2.9).



Rys. 2.9. Graficzna ilustracja parametru θ (stosunku pólosi sferoidy) dla zagadnienia 3D

W ogólności parametr θ może osiągać wartości nieujemne w zakresie od 0 do ∞ . Wartości współczynników A_j (zależne bezpośrednio od rodzaju wtrącenia charakteryzowanego parametrem θ) dla trzech wartości parametru θ , tj. dla $\theta \rightarrow 0$, $\theta = 1$ oraz $\theta \rightarrow \infty$, zestawiono w tabeli 2.1. Jednocześnie warto zauważyć, że dla współczynników A_j ważna jest następująca zależność (Torquato, 2013):

$$\sum_{j=1}^{\kappa+1} A_j = 1. \quad (2.26)$$

Tabela 2.1. Wartości A_j dla pólosi x_j wtrącenia eliptycznego (2D) bądź sferoidalnego (3D) dla trzech skrajnych wartości parametru θ

Wartość parametru θ	Wartości A_j dla pólosi x_j wtrącenia eliptycznego (2D) bądź sferoidalnego (3D)
$\theta \rightarrow 0$	2D: $\lim_{\theta \rightarrow 0} A_1 = 1, \quad \lim_{\theta \rightarrow 0} A_2 = 0,$ 3D: $\lim_{\theta \rightarrow 0} A_1 = 1, \quad \lim_{\theta \rightarrow 0} A_2 = \lim_{\theta \rightarrow 0} A_3 = 0.$
$\theta = 1$	2D: $A_1 = A_2 = 1/2,$ 3D: $A_1 = A_2 = A_3 = 1/3.$
$\theta \rightarrow \infty$	2D: $\lim_{\theta \rightarrow \infty} A_1 = 0, \quad \lim_{\theta \rightarrow \infty} A_2 = 1,$ 3D: $\lim_{\theta \rightarrow \infty} A_1 = 0, \quad \lim_{\theta \rightarrow \infty} A_2 = \lim_{\theta \rightarrow \infty} A_3 = 1/2.$

W ogólnym przypadku nie jest możliwe wyrażenie całki eliptycznej (2.25) w postaci zamkniętej. Wobec tego zazwyczaj konieczne jest określanie wartości współczynników A_j w sposób numeryczny. Jeżeli jednak zawężymy rozważania do wtrąceń sferoidalnych

(zagadnienie 3D) i dokonamy podziału przedziału możliwych wartości θ na: $\theta \in (0, 1)$, $\theta = 1$, oraz $\theta \in (1, \infty)$, to wówczas wyrażenie opisujące współczynniki A_j można przedstawić w postaci zamkniętej. W konsekwencji tensor lokalizacji (2.22) lub (2.24) również można wyrazić w formie analitycznej. I tak np. dla przypadku, gdy wartości parametru kształtu θ zawierają się w przedziale $(0, 1)$ można pokazać, że:

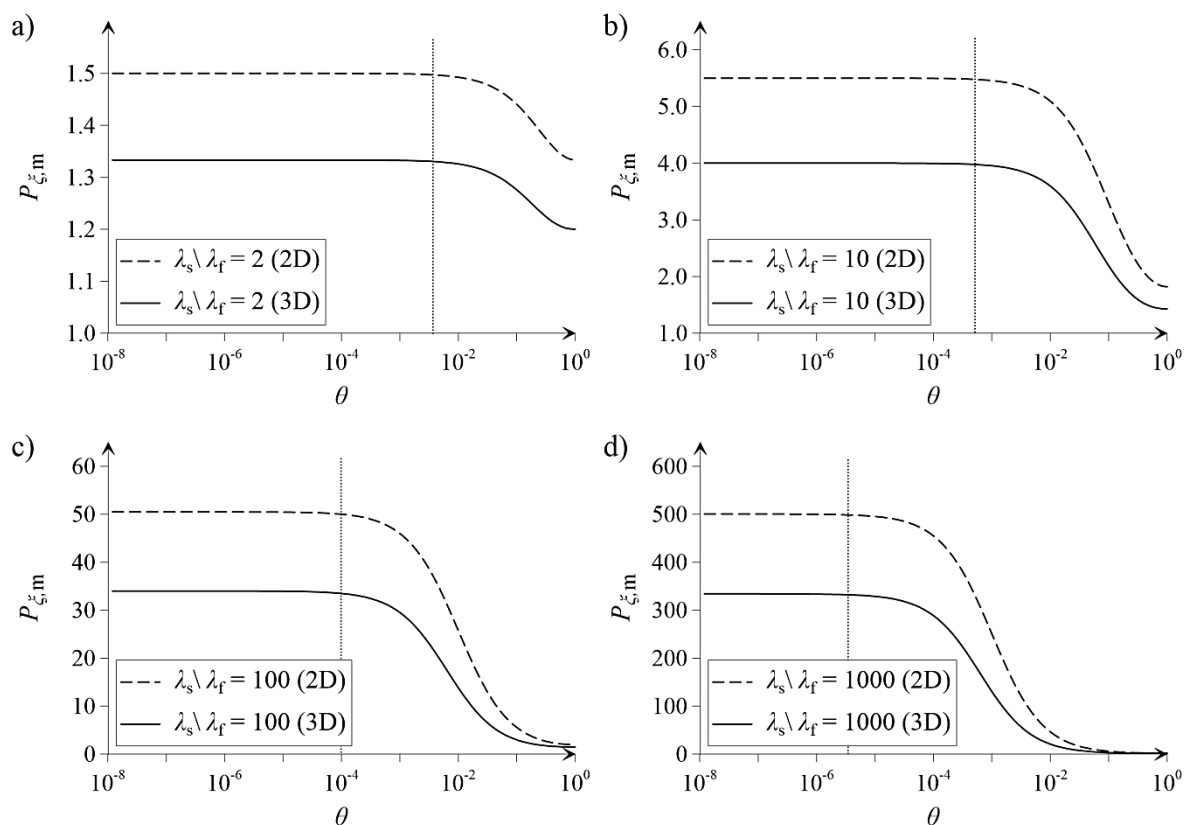
$$P_{\xi} = \frac{\lambda^*}{3} \left(\lambda^* + (\lambda^* - \lambda_{\xi}) \frac{\theta^2 - 1 + \text{ArcSec}\left(\frac{1}{\theta}\right) \theta^2 \sqrt{\frac{1}{\theta^2} - 1}}{(\theta^2 - 1)^2} \right)^{-1} + \frac{2\lambda^*}{3} \left(\lambda^* + (\lambda^* - \lambda_{\xi}) \frac{\theta \left(2\theta \sqrt{1 - \theta^2} - \pi + 2 \text{ArcSin}(\theta) \right)}{4(1 - \theta^2)^{3/2}} \right)^{-1}, \quad (2.27)$$

gdzie λ^* oznacza przewodność cieplną matrycy/szkieletu, tj. λ_s w schemacie M-T oraz poszukiwaną makroskopową przewodność cieplną λ^{hom} dla przypadku schematu S-C. W sposób analogiczny można pokazać, że dla zagadnienia 2D, w przedziale $\theta \in (0, 1)$, tensor lokalizacji określony jest następującą zależnością analityczną:

$$P_{\xi} = \frac{\lambda^*}{2} \left(\lambda^* + (\lambda^* - \lambda_{\xi}) \frac{\theta^2 - \theta}{\theta^2 - 1} \right)^{-1} + \frac{\lambda^*}{2} \left(\lambda^* + (\lambda_{\xi} - \lambda^*) \frac{\theta - 1}{\theta^2 - 1} \right)^{-1}. \quad (2.28)$$

Na rys. 2.10 zaprezentowano wartości składowych tensora lokalizacji (2.27) oraz (2.28) w funkcji parametru θ dla różnych wartości kontrastu (charakteryzowanego parametrem $\Theta = \lambda_s \backslash \lambda_f$) pomiędzy przewodnościami składników tworzących ośrodek. Wartości na osi poziomej przedstawiono w skali logarytmicznej. Obserwując wykresy wyraźnie widać, że jest pewien przedział wartości θ , dla którego składowe tensorów lokalizacji (2.27) i (2.28) mają niemal stałe wartości, przy czym szerokość tego przedziału zależy od kontrastu Θ .

W dalszej części, na podstawie trzech przykładów liczbowych, przedstawiono wpływ takich czynników, jak: kształt porów (przykład 2.1), udział frakcyjny przestrzeni porowej (przykład 2.2) oraz wartość przewodności cieplnej płynu wypełniającego przestrzeń porową (przykład 2.3) na efektywną przewodność cieplną ośrodka porowatego. Analizy przeprowadzono dla obu schematów analitycznych, tj. Mori-Tanaki oraz samouzgodnionego pola.

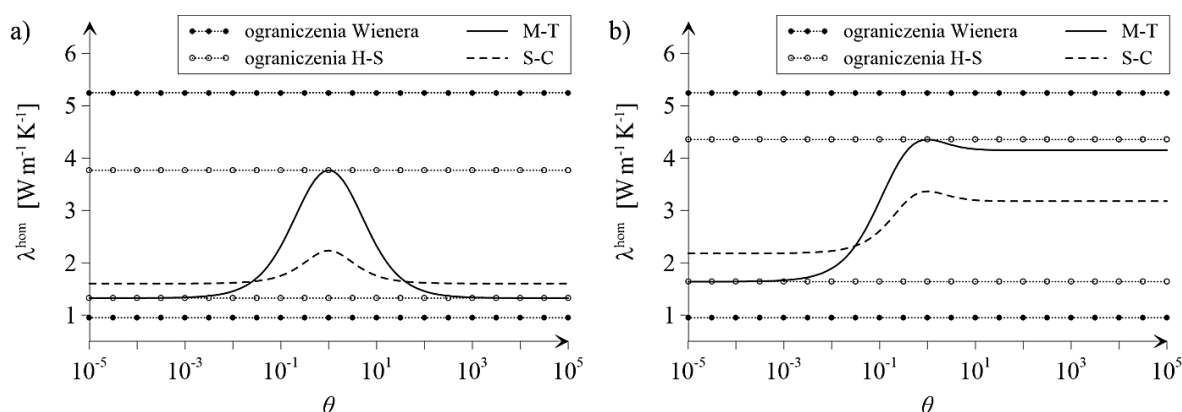


Rys. 2.10. Wartości składowych tensora $P_{\xi,m}$ w funkcji θ dla różnych wartości kontrastu: a) $\Theta = 2$, b) $\Theta = 10$, c) $\Theta = 100$ i d) $\Theta = 1000$

Przykład 2.1

Rozważmy dwu-składnikowy, w pełni nasycony, ośrodek porowaty o porowatości $\phi_f = 0.5$, przewodności cieplnej matrycy $\lambda_s = 10 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ i przewodności cieplnej płynu wypełniającego przestrzeń porową $\lambda_f = 0.5 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Za pomocą schematów M-T i S-C określono, dla tego ośrodka, makroskopową przewodność cieplną (λ^{hom}) w funkcji parametru opisującego kształt porów eliptycznych, tj. stosunku półosi θ (w przypadku schematu S-C, dodatkowo, konieczne jest założenie kształtu dla składnika, z którego tworzy się matrycę – przyjęto $\theta = 1$). Uzyskane wartości parametru makroskopowego, jak również ograniczenia Wienera oraz Hashina-Shtrikmana zaprezentowano na rys. 2.11. Wyraźnie widać efekt o którym wspomniano już wcześniej, a mianowicie, że ograniczenia H-S są znacznie węższe niż ograniczenia Wienera. Ponadto, można zauważyć, że dla $\theta \rightarrow 0$, a dla zagadnienia 2D również dla $\theta \rightarrow \infty$, oszacowanie uzyskane ze schematu M-T jest zbieżne z dolnym ograniczeniem H-S. Z drugiej strony, dla wtrąceń sferycznych, tj. gdy $\theta = 1$ rozwiązanie jest tożsame z górnym ograniczeniem H-S. W przypadku schematu S-C wpływ parametru θ na otrzymaną wartość λ^{hom} (w sensie przedziału

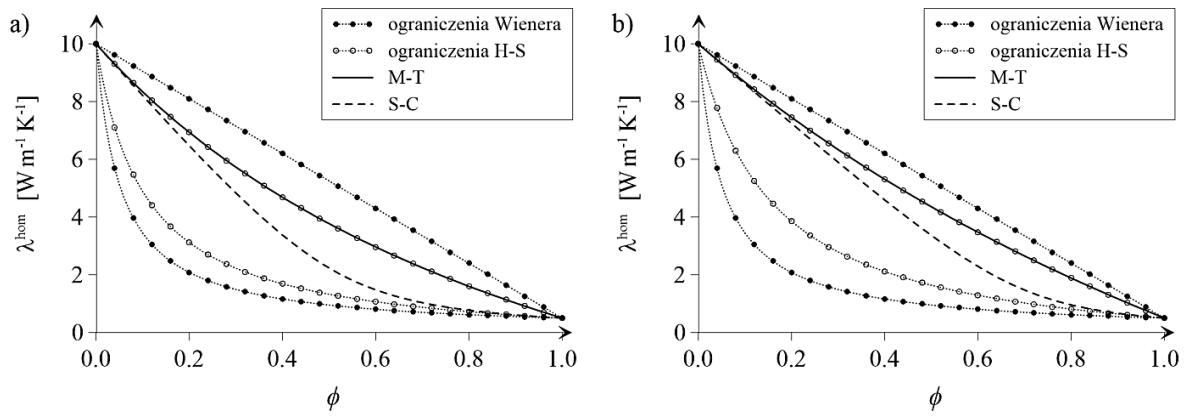
możliwych wartości) jest znacznie mniejszy i w konsekwencji ograniczenia H-S nie są osiągalne dla schematu S-C. Niezależnie jednak od użytego schematu aproksymacyjnego, kształt wtrąceń (wyrażony poprzez parametr θ) silnie determinuje otrzymaną wartość efektywnej przewodności cieplnej kompozytu. Wobec tego niezwykle ważnym, a jednocześnie bardzo trudnym zadaniem jest przyjęcie odpowiedniego kształtu wtrąceń (np. opisujących przestrzeń porową) w kompozycie. Dlatego też, bardzo często modeluje się wtrącenia w postaci kilku „rodzin” wtrąceń, np. dwóch typów wtrąceń sferoidalnych charakteryzujących się różnymi wartościami parametru θ .



Rys. 2.11. Zależność efektywnej przewodności cieplnej (λ^{hom}) od parametru θ wg schematu M-T i S-C dla zagadnienia: a) 2D i b) 3D, w odniesieniu do ograniczeń Wienera i Hashina-Shtrikmana

Przykład 2.2

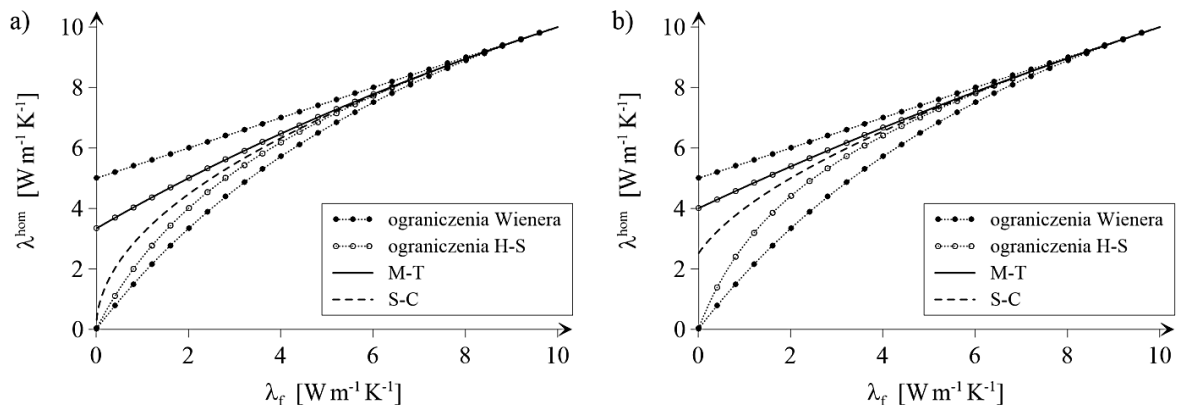
Ponownie rozważmy ten sam ośrodek porowaty, jak w poprzednim przykładzie, z tą różnicą, że tym razem skupimy się na określeniu makroskopowej przewodności cieplnej λ^{hom} w funkcji udziału frakcyjnego przestrzeni porowej ϕ_f . Przyjęto dla wtrąceń opisujących przestrzeń porową stałą wartość parametru $\theta = 1$. Wyniki sekwencji obliczeń zaprezentowano na rys. 2.12. Zauważmy, że $\lambda^{\text{hom}}(\phi_f)$ jest ciągłą, monotoniczną i malejącą funkcją udziału frakcyjnego ϕ_f (jednocześnie oczywistym jest, że dla $\lambda_s < \lambda_f$ byłaby funkcją rosnącą). Widać również, że rozwiązanie otrzymane przy użyciu schematu M-T dla $\theta = 1$ jest tożsame z górnym ograniczeniem H-S, co również zostało pokazane w przykładzie 2.1. Warty uwagi jest fakt, iż ograniczenie dolne H-S dla schematu M-T moglibyśmy osiągnąć nie zmieniając kształtu wtrąceń (zamiana $\theta \rightarrow 0$ na $\theta = 1$) (patrz rys. 2.11), a alternatywnie, zamieniając parametry przewodności cieplnej matrycy i szkieletu (tak, aby $\lambda_s < \lambda_f$).



Rys. 2.12. Efektywna przewodność cieplna (λ^{hom}) w funkcji porowatości (ϕ_f) wg schematu M-T i S-C w odniesieniu do ograniczeń Wienera i Hashina-Shtrikmana dla zagadnienia: a) 2D i b) 3D

Przykład 2.3

W przykładzie tym określono λ^{hom} w funkcji przewodności cieplnej płynu wypełniającego przestrzeń porową (λ_f). Pozostałe parametry przyjęto analogicznie jak w poprzednich przykładach, tj. przewodność cieplna szkieletu $\lambda_s = 10 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, porowatość $\phi_f = 0.5$ oraz parametr określający kształt wtrąceń opisujących przestrzeń porową $\theta = 1$. Wyniki obliczeń zaprezentowano na rys. 2.13. Można zauważyć, że wraz ze wzrostem wartości λ_f , i tym samym coraz to mniejszym kontrastem parametrów składników kompozytu, ograniczenia H-S i ograniczenia Wienera zaczynają być coraz węższe i zbiegają się dla $\lambda_f = \lambda_s$. Analogiczny trend, co oczywiste, wykazują również rozwiązania uzyskane na podstawie schematów M-T i S-C.



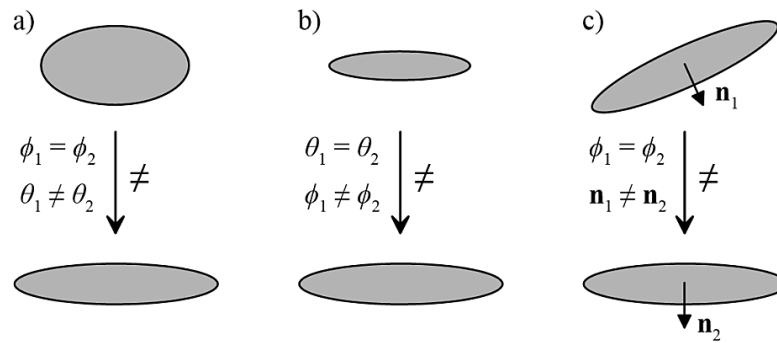
Rys. 2.13. Efektywna przewodność cieplna (λ^{hom}) w funkcji przewodności cieplnej płynu wypełniającego przestrzeń porową (λ_f) wg schematu M-T i S-C dla zagadnienia: a) 2D i b) 3D

2.3.2.4. Uwagi

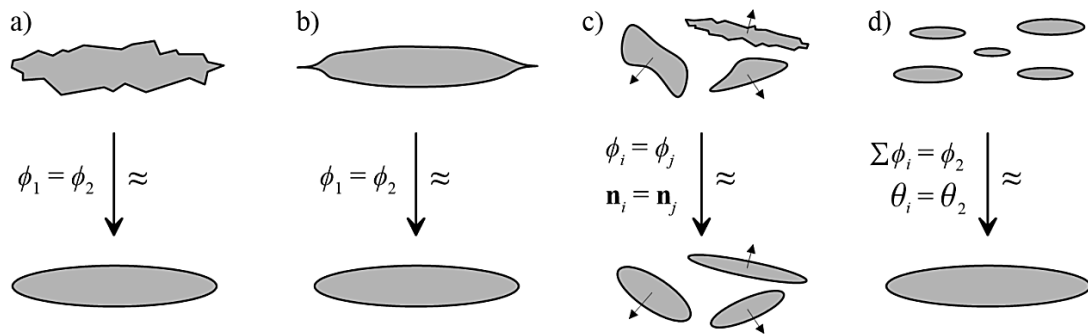
Jak wspomniano powyżej, w przypadku metod analitycznych złożona mikrostruktura rzeczywistego ośrodka porowatego zwykle zastępowana jest pewną uproszczoną mikrostrukturą, np. typu matryca – wtrącenie, gdzie wtrącenia (np. pory) aproksymowane są poprzez wtrącenia eliptyczne/elipsoidalne. Aby dokonać poprawnego uproszczenia (aproksymacji) kształtu wtrąceń należy uprzednio przeanalizować, które cechy wtrąceń mają istotny wpływ na efektywne/zastępcze parametry kompozytu.

Pierwszym istotnym czynnikiem wpływającym na efektywne parametry cieplne kompozytu jest kształt wtrąceń wyrażony poprzez parametr θ (rys. 2.14a) – zostało to zobrazowane na podstawie przykładu liczbowego 2.1. Drugim, niezwykle ważnym czynnikiem jest udział frakcyjny wtrąceń (rys. 2.14b), który ma wpływ nie tylko na uzyskane oszacowania na podstawie schematów M-T i S-C, ale również silnie oddziałuje na przedziały możliwych wartości parametru makroskopowego, tj. ograniczenia H-S i Wienera (przykład 2.2). Orientacja wtrąceń w przestrzeni ma wpływ na parametry efektywne kompozytu w jego poszczególnych kierunkach (Kachanov & Sevostianov, 2005) (rys. 2.14c). Nie jest natomiast uwzględniana i nie ma wpływu w przypadku ośrodków makroskopowo izotropowych, dla których zakłada się, że rozkład wtrąceń jest idealnie nieuporządkowany, tj. brak preferowanej orientacji wtrąceń.

Czynniki, które mają mniej znaczący wpływ na procesy przepływu ciepła są: niewielka „szorstkość” brzegów wtrąceń (rys. 2.15a), ostrość punktów narożnych wtrąceń (rys. 2.15b), a także nieowalny kształt licznych wtrąceń, jeżeli nie są zaburzone ich średnie wymiary i orientacja (rys. 2.15c) (Kachanov & Sevostianov, 2005). Ponadto możliwe jest również zastąpienie wielu wtrąceń o danym kształcie poprzez jedno większe, jeżeli ich sumaryczny udział frakcyjny będzie porównywalny z udziałem wtrącenia zastępczego (rys. 2.15d). Stwierdzenie to jest jednak prawdziwe tylko przy założeniu idealnego kontaktu na granicy składników kompozytu. Przedstawione wyżej czynniki mające mniej lub bardziej istotny wpływ na proces przepływu ciepła odnoszą się również do innych procesów transportu, a także zagadnień liniowej sprężystości (patrz np. Kachanov & Sevostianov, 2005).



Rys. 2.14. Wybrane cechy wtrąceń mające znaczący wpływ na proces przepływu ciepła w kompozycie



Rys. 2.15. Wybrane cechy wtrąceń mające mało istotny wpływ na proces przepływu ciepła w kompozycie

2.4. Podsumowanie

Teoria homogenizacji umożliwia zastąpienie ośrodka mikro niejednorodnego poprzez ekwiwalentny ośrodek jednorodny opisany parametrem zastępczym / efektywnym / makroskopowym. W ogólności, wyznaczenie właściwości efektywnych ośrodka mikro niejednorodnego przy użyciu ciągłej mikromechaniki polega na rozwiązaniu odpowiednio sformułowanego zagadnienia brzegowego zdefiniowanego dla REO (patrz rozdział 2.2). W celu jego rozwiązania zazwyczaj korzysta się z dwóch, metodologicznie różnych, podejść, tj. metod numerycznych / obliczeniowych (rozdział 2.3.1) oraz metod analitycznych (rozdział 2.3.2).

Metody numeryczne pozwalają na zamodelowanie niezwykle skomplikowanych geometrii mikrostruktury, jednak wymagają rozwiązania stowarzyszonych z tym podejściem licznych problemów takich jak, np.: wyznaczenie odpowiedniej wielkości REO, określenie liczby losowych realizacji REO, przyjęcie odpowiednich warunków brzegowych, dobór metody numerycznej, możliwy długi czas obliczeń, problem ze

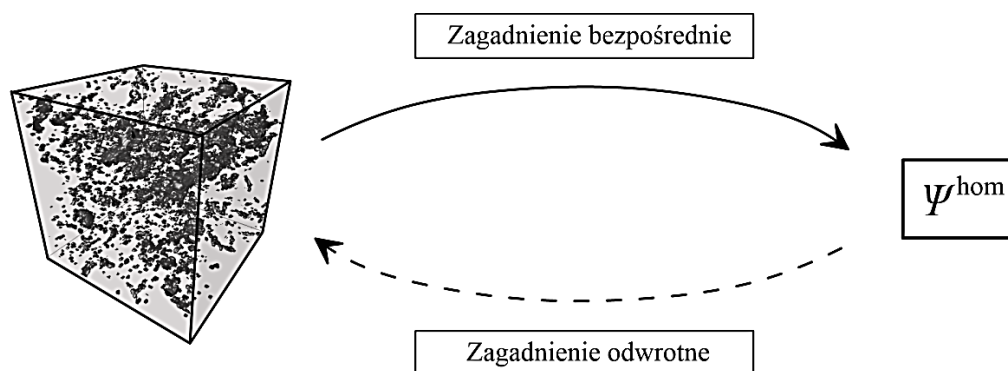
zbieżnością wyników dla wysokich kontrastów pomiędzy parametrami poszczególnych składników kompozytu.

W ostatnim czasie metody analityczne ponownie zyskały na atrakcyjności i bardzo często są wykorzystywane do szacowania parametrów makroskopowych. Metody te, zwykle bazujące na rozwiązaniu pojedynczego wtrącenia zanurzonego w nieskończonym ośrodku ciągłym, cechują się matematyczną „prostotą”, która jest konsekwencją uproszczeń dotyczących modelowania oddziaływań pomiędzy wtrąceniami. W porównaniu do metod numerycznych są one znacznie bardziej wydajne, w sensie efektywności obliczeniowej. Jednak poprzez założoną uproszczoną morfologię mikrostruktury schematy te nie są w stanie w wielu przypadkach poprawnie odzwierciedlić rzeczywistej mikrostruktury kompozytu. Możliwe jest natomiast dokonanie aproksymacji kształtu składników kompozytu i zastąpienie ich poprzez wtrącenia eliptyczne / elipsoidalne, choć należy mieć na uwadze, że jest to proces stosunkowo trudny.

3. Ekwiwalentna mikrostruktura ośrodka porowatego – sformułowanie matematyczne zagadnienia odwrotnego

Dwa matematyczne zagadnienia możemy nazwać odwrotnymi do siebie, jeżeli sformułowanie pierwszego z nich zawiera w sobie rozwiązanie tego drugiego, i odwrotnie. Na pierwszy rzut oka, zgodnie z tą definicją, trudno wyróżnić zagadnienie pierwotne (bezpośrednie) oraz zagadnienie do niego odwrotne. Jednakże, jedno z nich jest zazwyczaj łatwiejsze do rozwiązania i znacznie obszerniej rozpoznane, podczas gdy drugie, zdecydowanie trudniejsze i rozpoznane w mniejszym stopniu. Wówczas, to pierwsze z nich nazywane jest zagadnieniem pierwotnym (bezpośrednim) natomiast drugie – zagadnieniem odwrotnym (Kress i in., 1989).

W przypadku analitycznej, jak i obliczeniowej mikromechaniki zwykle rozwiązuje się zagadnienia bezpośrednio celem wyznaczenia makroskopowej (zhomogenizowanej) odpowiedzi ośrodka niejednorodnego. Sformułowania zagadnień bezpośrednich teorii homogenizacji dla przepływu ciepła przedstawione zostały w rozdziale 2. W zagadnieniach tych, znając (bądź zakładając) morfologię mikrostruktury (wzajemne ułożenie w przestrzeni poszczególnych składników mikrostruktury, ich kształt, udziały frakcyjne, itp.) oraz parametry materiałowe składników jednoznacznie możemy wyznaczyć parametr makroskopowy kompozytu (Ψ^{hom}). Do tak przedstawionego zagadnienia zawsze można jednak sformułować zagadnienie odwrotne, które polegałoby na identyfikacji/rekonstrukcji morfologii mikrostruktury pod warunkiem, że znana jest wartość parametru makroskopowego (Ψ^{hom}). Oba te zagadnienia, bezpośrednie oraz zagadnienie do niego odwrotne, graficznie zilustrowano na rys. 3.1.



Rys. 3.1. Graficzna ilustracja zagadnienia bezpośredniego i odwrotnego teorii homogenizacji

Opisane powyżej zagadnienie bezpośrednie teorii homogenizacji, przy zadanej morfologii mikrostruktury oraz wartościach parametrów poszczególnych składników, zapewnia jedną odpowiedź makroskopową, tj. Ψ^{hom} . Zagadnienie odwrotne, a więc identyfikacja mikrostruktury na podstawie znajomości odpowiedzi makroskopowej, w ogólnym przypadku, posiada nieskończenie wiele rozwiązań. Innymi słowy, istnieje nieskończenie wiele mikrostruktur (różniących się udziałami frakcyjnymi składników, ich przestrzennym ułożeniem, kształtami, itd.), które charakteryzują się tą samą wartością parametru makroskopowego. Sformułowane w ten sposób zagadnienie cechuje się więc niejednoznacznością rozwiązania.

Aby przedstawione na rys. 3.1 zagadnienie odwrotne dało się rozwiązać w sposób jednoznaczny, konieczne byłoby uzupełnienie go o dodatkowe informacje dotyczące morfologii mikrostruktury ośrodka, tj. zbiór statystycznych funkcji korelacyjnych, które charakteryzują mikrostrukturę ośrodka w terminach rachunku prawdopodobieństwa (Torquato, 2013). Wyznaczanie funkcji korelacji n -punktowej dla $n \geq 3$ jest dość trudne, a uzyskanie wszystkich funkcji korelacji, z oczywistych względów, niemożliwe. W praktyce posiadana informacja o mikrostrukturze ośrodka jest bardzo ograniczona i sprowadza się, najczęściej, do znajomości korelacji 1-punktowej, tj. porowatości ośrodka (szczegóły dotyczące n -punktowych funkcji korelacyjnych przedstawiono w dalszej części pracy, w rozdziale 6.1.1). Dlatego zagadnienie odwrotne wykorzystujące w sformułowaniu funkcje korelacji wyższych rzędów nie ma swojego praktycznego uzasadnienia.

W związku z powyższym w literaturze (Kachanov i Sevostianov, 2005; Sevostianov i Kachanov, 2012) wprowadzono koncepcję ekwiwalentnej mikrostruktury, przy czym poprzez pojęcie ekwiwalentnej mikrostruktury rozumie się pewną wirtualną mikrostrukturę, której odpowiedź makroskopowa jest tożsama z odpowiedzią ośrodka rzeczywistego (jej morfologia, w najbardziej ogólnym przypadku, może być kompletnie inna od morfologii rzeczywistego ośrodka). W konsekwencji, w takim przypadku rozwiązanie zagadnienia odwrotnego polega na poszukiwaniu pewnej wirtualnej mikrostruktury, będącej ekwiwalentem mikrostruktury ośrodka rzeczywistego.

Wciąż jednak, aby takie zagadnienie posiadało jednoznaczne rozwiązanie musi być ono uzupełnione o dodatkową informację w postaci *a priori* narzuconego „typu” mikrostruktury (np. ciągła matryca z identycznymi, w sensie kształtu, wtrąceniami). Wówczas rozwiązanie takiego zagadnienia w ujęciu np. analitycznej mikromechaniki sprowadza się do określenia tzw. parametru koncentracji (ang. *concentration parameter*),

który jest jawnym argumentem funkcji charakteryzującej parametr makroskopowy (Sevostianov & Kachanov, 2015). Zakładając ekwiwalentną mikrostrukturę np. w postaci sfer zanurzonych w ciągłej matrycy, zagadnienie odwrotne w ujęciu schematu M-T, sprowadza się do określenia udziału frakcyjnego wtrąceń (ϕ). Podobne zagadnienie zostało sformułowane i rozwiązane przez Kachanowa i Sevostianova (2005), którzy udowodnili, że jakakolwiek izotropowa „mieszanina” dowolnych niejednorodności jest ekwiwalentna, w sensie makroskopowej przewodności cieplnej, do pewnego określonego udziału frakcyjnego sfer (ϕ).

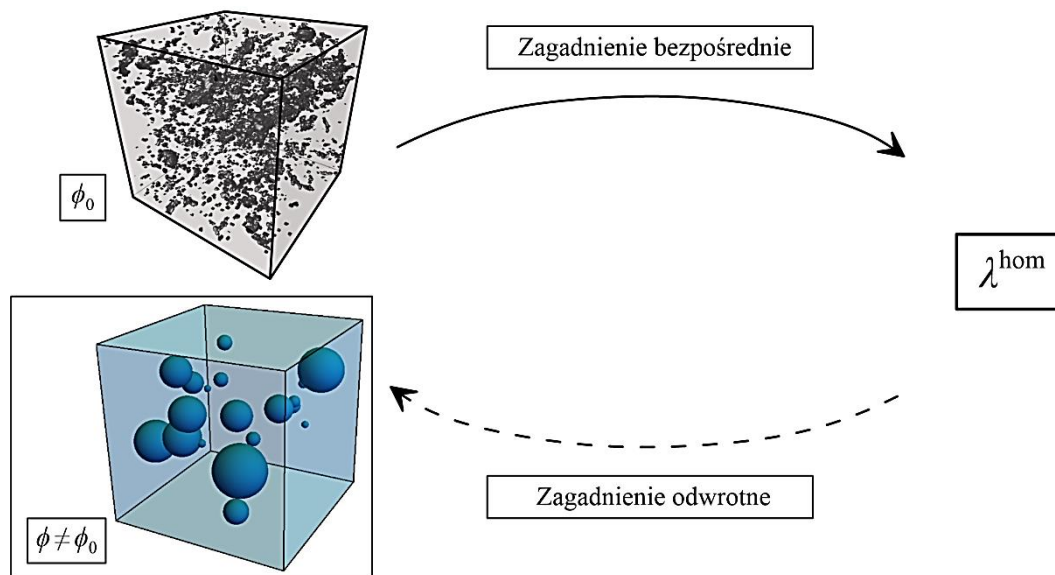
Zatem rozwiązanie problemu zdefiniowanego przez Kachanowa i Sevostianova (2005) dla zagadnienia przepływu ciepła (gdzie Ψ^{hom} oznacza makroskopową przewodność cieplną ośrodka (λ^{hom})) sprowadza się do wyznaczenia udziału frakcyjnego sferycznych porów dla ekwiwalentnej mikrostruktury (rys. 3.2). Pokazać to można przekształcając równanie schematu Mori-Tanaki dla zagadnienia bezpośredniego (2.21) do postaci, w której po jednej stronie równania występuje tylko udział frakcyjny wtrąceń, tj.:

$$\phi = \frac{(\lambda^{\text{hom}} - \lambda_m) \cdot (\lambda_m + \xi \cdot (\lambda_f - \lambda_m))}{(\lambda_f - \lambda_m) \cdot (\lambda_m + \xi \cdot (\lambda^{\text{hom}} - \lambda_m))}, \quad (3.1)$$

gdzie ξ wynosi 1/2 lub 1/3 odpowiednio dla zagadnienia 2D lub 3D. Zauważmy, że taka ekwiwalentna mikrostruktura, charakteryzowana parametrem koncentracji (ϕ), obowiązuje dla jednej wartości makroskopowej przewodności cieplnej (λ^{hom}) i nie jest niezmiennicza względem parametrów mechanicznych poszczególnych składników. Innymi słowy, zależy ona od przewodności składników tworzących ośrodek, tj. λ_m oraz λ_f .

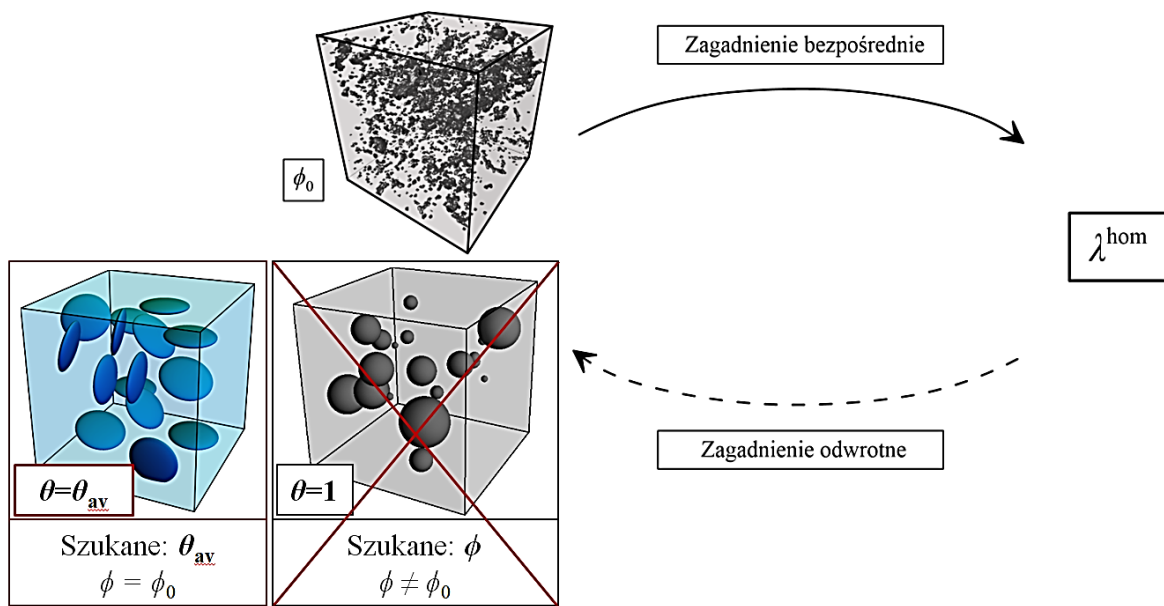
Aby to lepiej zobrazować, rozważmy rzeczywisty ośrodek porowaty, którego przestrzeń porowa wypełniana jest (jeden pod drugim) płynami o różnych przewodnościach cieplnych, tj. $\lambda_{f,1}$, $\lambda_{f,2}$, ..., itd. Za każdym razem, gdy przestrzeń porowa jest w pełni wypełniona, wyznaczamy (np. poprzez pomiar laboratoryjny) makroskopową przewodność cieplną. Uzyskujemy zatem pewien zbiór odpowiedzi makroskopowych, tj. $\lambda^{\text{hom},1}$, $\lambda^{\text{hom},2}$, ..., etc. Rozwiązując zagadnienie odwrotne dla każdego przypadku makroskopowej przewodności cieplnej, otrzymane ekwiwalentne mikrostruktury, a mianowicie udziały frakcyjne wtrąceń sferycznych, będą za każdym razem różne; otrzymamy sekwencję parametrów koncentracji: ϕ_1 , ϕ_2 , ..., itp. Zatem, tak określona ekwiwalentna mikrostruktura nie może być rozumiana, jako ”ogólna”, a raczej jako

dedykowana konkretnej odpowiedzi makroskopowej. Ponadto, zauważmy, że jako zwykły parametr dopasowania, wartość ϕ , w ogólnym przypadku, nie jest zgodna z porowatością ośrodka rzeczywistego.



Rys. 3.2. Graficzna ilustracja zagadnienia odwrotnego wg Kachanowa i Sevostianova (2005)

W pracy (Sevastianov i Kachanov, 2012), w celu zachowania porowatości ośrodka rzeczywistego, autorzy wprowadzili koncepcję „uśrednionego kształtu wtrąceń” (ang. *average shape*). Koncepcja ta polega na zastąpieniu morfologii ośrodka rzeczywistego poprzez ekwiwalentną mikrostrukturę w postaci ciągłej matrycy i jednej rodziny sferoidalnych wtrąceń, jednak tym razem o dowolnym kształcie wtrąceń, opisanych parametrem $\theta = \theta_{av}$. „Uśredniony kształt wtrąceń”, a więc wartość parametru θ_{av} , ponownie określa się poprzez rozwiązanie zagadnienia odwrotnego. Przeformułowane zagadnienie odwrotne graficznie zilustrowano na rys. 3.3. Stosując to podejście zachowujemy oryginalny udział frakcyjny wtrąceń, w przeciwieństwie do wcześniej sformułowanego zagadnienia odwrotnego, jednak uzyskane rozwiązanie nadal nie jest niezmiennicze względem parametrów mechanicznych poszczególnych składników ośrodka. Oznacza to, że jeżeli dla ośrodka o zadanej morfologii i zestawu parametrów określimy „uśredniony kształt wtrąceń”, powiedzmy $\theta_{av,1}$, to gdy przestrzeń porową tego ośrodka wypełnimy płynem o innej przewodności cieplnej, wówczas otrzymamy inny „uśredniony kształt wtrąceń”, tj. $\theta_{av,2} \neq \theta_{av,1}$.



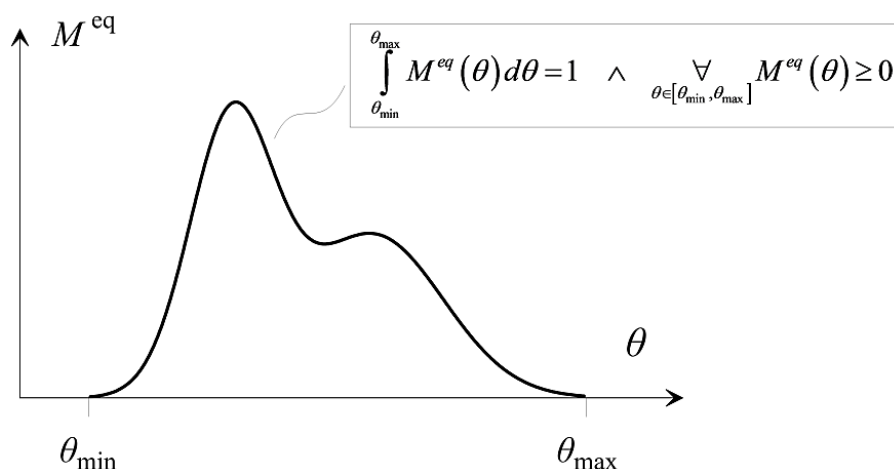
Rys. 3.3. Graficzna ilustracja przeformułowanego zagadnienia odwrotnego wg Sevostianova i Kachanova (2012)

Na podstawie powyższych rozważań pojawia się zatem naturalne pytanie, czy istnieje taka ekwiwalentna (wirtualna) mikrostruktura dla ośrodka porowatego, która nie będzie zależała od przewodności cieplnej płynu wypełniającego przestrzeń porową tego ośrodka?

Celem niniejszej pracy jest odpowiedź na tak postawione pytanie. Intencją jest natomiast znalezienie, dla zadanej przestrzeni porowej ośrodka (zazwyczaj reprezentowanej przez „mieszanie” różnych kształtów), ekwiwalentnej mikrostruktury zapewniającej satysfakcjonującą predykcję przewodności cieplnej ośrodka porowatego dla każdej wartości przewodności cieplnej płynu wypełniającego przestrzeń porową. Innymi słowy, zastąpienie ośrodka rzeczywistego ekwiwalentną (wirtualną) mikrostrukturą ma być „niezakłócone” (pozostać niezmiennie) nawet jeśli zmieni się przewodność cieplna płynu, który wypełnia pory ośrodka rzeczywistego.

Aby zidentyfikować taką ekwiwalentną mikrostrukturę proponuje się jakościowe przeformułowanie zagadnień odwrotnych przedstawionych na rys. 3.2 i rys. 3.3. Relaksuje się problem przez założenie, że morfologia ekwiwalentnego ośrodka zastępczego jest w postaci matrycy z zanurzonymi w niej rodzinami wtrąceń w postaci sferoid. Inkluzje różnicuje się stosunkiem ich pól θ (rys. 2.9). Jak wspomniano w rozdziale 2, klasycznie, w schematach M-T i S-C, morfologia mikrostruktury „modelowana” jest poprzez przyjęcie pewnej skończonej liczby (np. jednej, dwóch) „rodzin” wtrąceń (poprzez pojęcie „rodziny” rozumie się tu wtrącenia o ustalonej wartości parametru θ). Relaksacje problemu

(matematycznie rozumiane jako dodanie do problemu dodatkowych „stopni swobody”) polega na tym, że: liczba „rodzin” wtrąceń jest nieskończona i jest charakteryzowana poprzez ciągłą funkcję gęstości prawdopodobieństwa, $M(\theta)$. Funkcja ta opisuje oczywiście częstość wystąpienia porów w kształcie sferoid o stosunku półosi θ w ciągłej matrycy ośrodka porowatego. Jeśli funkcja $M(\theta)$ wykorzystana w schematach analitycznych, np. M-T lub S-C, zapewni satysfakcjonującą predykcję przewodności cieplnej dla ośrodka rzeczywistego wówczas będzie ona określana mianem ekwiwalentnej mikrostruktury (M^{eq}) – rys. 3.4.



Rys. 3.4. Przykładowa funkcja ekwiwalentnej mikrostruktury (M^{eq}) opisująca częstość wystąpienia sferoid o stosunku półosi θ w ciągłej matrycy ośrodka porowatego

Oczywistym jest, że zaproponowane „zrelaksowanie” problemu powoduje zwiększenie możliwości łatwiejszego zidentyfikowania wirtualnej morfologii, ze względu na to, iż liczba możliwych konfiguracji mikrostruktury, jest nieskończona. Brak jest jednoznaczności rozwiązania oraz zapewnienia, iż będzie niezmiennicza ze względu na przewodności cieplne składników tworzących ośrodek rzeczywisty.

3.1. Funkcja makroskopowej odpowiedzi materiałowej

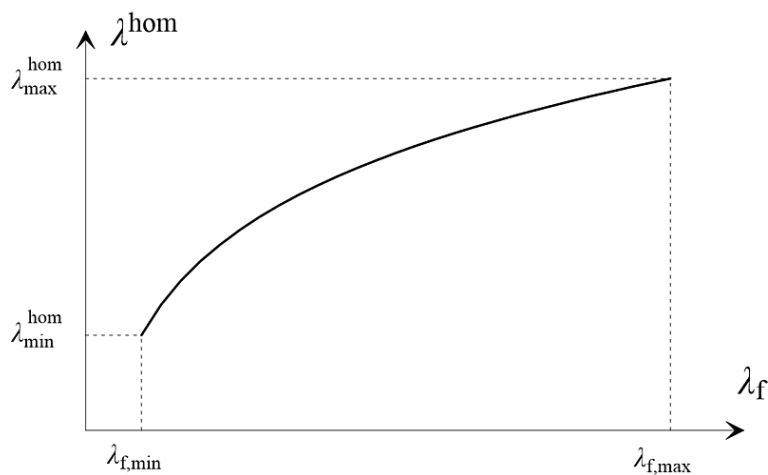
Wprowadza się kolejną modyfikację zagadnienia odwrotnego. Klasycznie, jak to było zobrazowane w zagadnieniu przedstawionym na rys. 3.2, wirtualna mikrostruktura identyfikowana jest na podstawie znajomości jednej wartości makroskopowej przewodności cieplnej ośrodka, λ^{hom} . Modyfikacja polega zatem na tym, iż znana nie jest pojedyncza wartość λ^{hom} ale pewna funkcja opisująca relację pomiędzy efektywną

przewodnością cieplną ośrodka λ^{hom} a przewodnością płynu wypełniającego przestrzeń porową λ_f . Wobec tego sformułowane zagadnienie bazować będzie nie na jednym parametrze efektywnym λ^{hom} dla danego λ_f , a dla całej sekwencji/zbioru $\lambda^{\text{hom}}(\lambda_f)$. Funkcja ta, ze względu na jej „charakter fizyczny, określana będzie mianem funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej (F^{mom}). Dla rozważanego zagadnienia stacjonarnego przepływu ciepła funkcję F^{mom} zdefiniować można, jako:

$$F^{\text{mom}} : \Lambda_f \rightarrow \Lambda^{\text{hom}}, \quad (3.2)$$

gdzie Λ_f i Λ^{hom} to odpowiednio dziedzina (zbiór przewodności cieplnej płynów [$\lambda_{f,\text{min}}$, $\lambda_{f,\text{max}}$]) i przeciwdziedzina (zbiór efektywnej przewodności cieplnej ośrodka [$\lambda_{\text{min}}^{\text{hom}}$, $\lambda_{\text{max}}^{\text{hom}}$]) funkcji F^{mom} . Przykładową funkcję F^{mom} przedstawiono na rys. 3.5 (analogię do funkcji F^{mom} zobaczyć można w przykładzie 2.3).

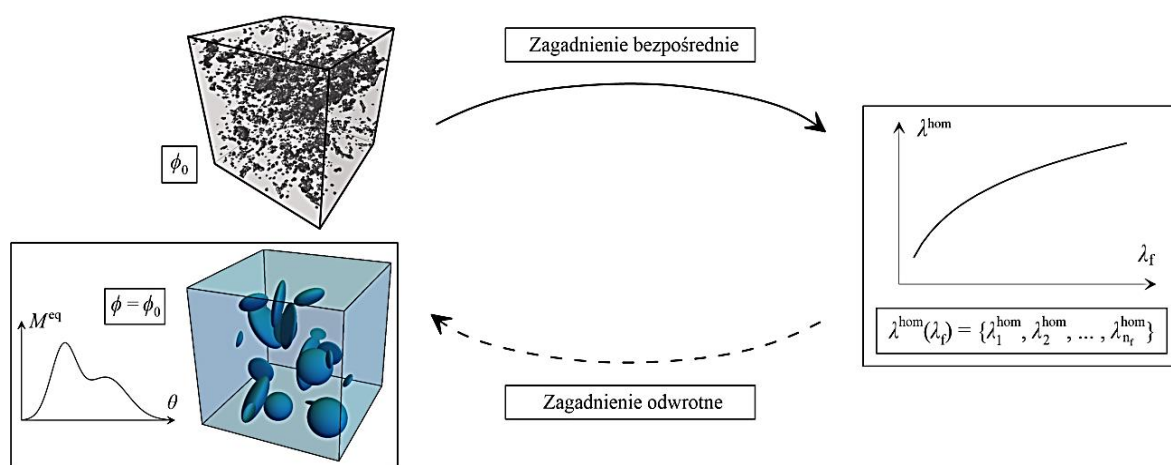
Funkcję F^{mom} otrzymać można w różny sposób, np. poprzez badania laboratoryjne lub na podstawie symulacji numerycznych. W badaniach laboratoryjnych uzyskać ją możemy poprzez sekwencyjne nasycanie ośrodka porowatego płynami o znanej/zbadanej przewodności cieplnej i wyznaczanie odpowiadającej jej makroskopowej przewodności cieplnej. Z kolei w obliczeniach numerycznych skorzystać możemy z aparatu obliczeniowej mikromechaniki przedstawionej w rozdziale 2.3.1. W tym przypadku, należy określić λ^{hom} dla różnych wartości λ_f bazując np. na morfologii mikrostruktury uzyskanej z mikrotomografu komputerowego.



Rys. 3.5. Przykładowa funkcja makroskopowej odpowiedzi materiałowej (F^{mom})

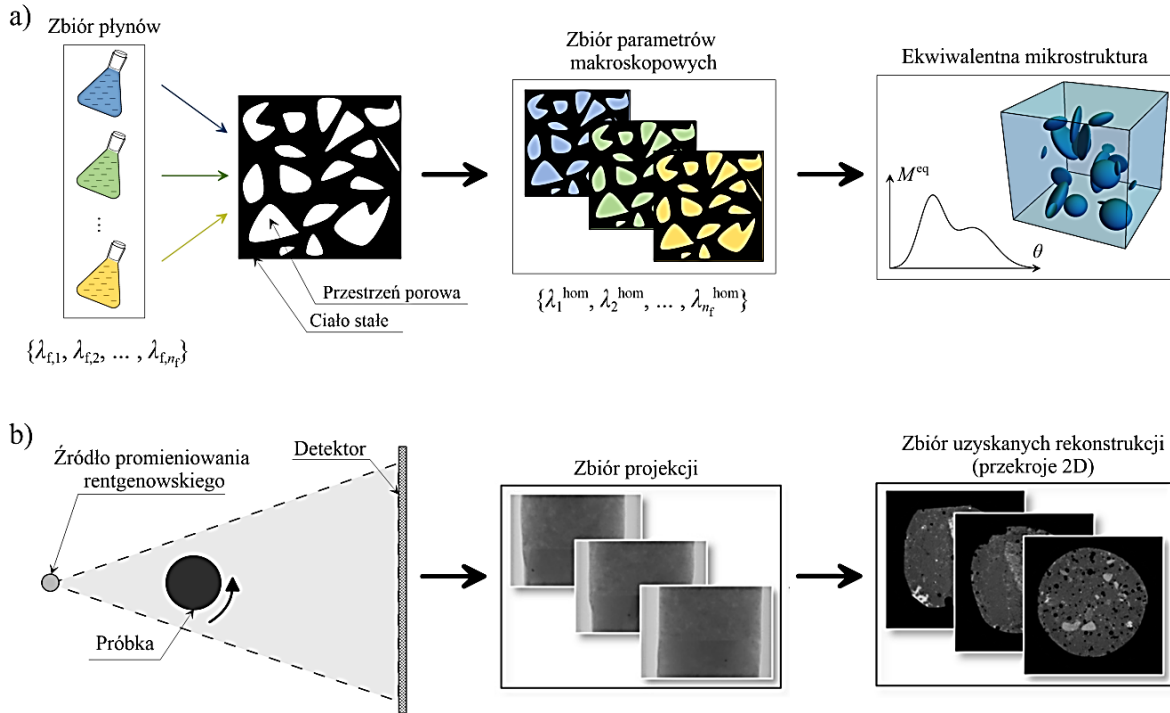
Wobec powyższego, sformułowane w niniejszej pracy zagadnienie odwrotne można opisać w następujący sposób: znając funkcję makroskopowej odpowiedzi materiałowej

F^{mom} , wyznacz taką funkcję $M(\theta)$, która wykorzystana w schematach M-T lub S-C, zapewni satysfakcjonująco dobre dopasowanie do makroskopowej przewodności cieplnej rzeczywistego ośrodka, niezależnie od tego jakie medium (różnicowane przewodnością cieplną) wypełnia jego przestrzeń porową. Dodatkowo narzuca się zachowanie porowości ośrodka rzeczywistego (mikrostruktura ekwiwalentna ma taki sam udział frakcyjny porów jak ośrodek rzeczywisty). Jeśli taka funkcja, $M(\theta)$, istnieje, może być określana mianem ekwiwalentnej mikrostruktury, $M^{\text{eq}}(\theta)$. Zagadnienie to, schematycznie przedstawione zostało na rys. 3.6, jest oczywiście matematycznie znacznie trudniejsze od zagadnienia bezpośredniego.



Rys. 3.6. Graficzna ilustracja zagadnienia odwrotnego teorii homogenizacji przedstawionego w niniejszej pracy

W sformułowanym powyżej zagadnieniu odwrotnym teorii homogenizacji można zauważyć analogię do zagadnienia odwrotnego rentgenowskiej mikrotomografii komputerowej (microCT), w którym rekonstrukcja mikrostruktury odbywa się na podstawie skończonego zbioru projekcji uzyskanych pod różnymi kątami. W naszym przypadku, a więc dla zagadnienia omawianego w tej pracy, funkcja F^{mom} może być rozumiana jako zbiór projekcji/rzutowań przewodności cieplnej płynu λ_f na przestrzeń możliwych parametrów makroskopowych. Zatem, odnosząc się do tomografii komputerowej, zbiór parametrów makroskopowych ($\lambda^{\text{hom}}(\lambda_f) = \{\lambda_1^{\text{hom}}, \lambda_2^{\text{hom}}, \dots, \lambda_n^{\text{hom}}\}$) utożsamiamy ze zbiorem projekcji, natomiast zbiór wartości parametrów płynów wypełniających przestrzeń porową ($\lambda_f = \{\lambda_{f,1}, \lambda_{f,2}, \dots, \lambda_{f,n}\}$) z różnymi kątami. Powyższą analogię przedstawiono na rys. 3.7.



Rys. 3.7. Analogia zagadnienia odwrotnego teorii homogenizacji (a) do zagadnienia odwrotnego rentgenowskiej mikrotomografii komputerowej (b)

3.2. Sformułowanie matematyczne zagadnienia odwrotnego – równanie całkowe Fredholma I-go rodzaju

Poniżej przedstawia się matematyczne sformułowanie zagadnienia odwrotnego wprowadzonego powyżej. Jak wspomniano, rozważa się dwa schematy aproksymacyjne, tj. schemat Mori-Tanaki i samouzgodnionego pola. Rozważmy zatem ponownie zagadnienie bezpośrednie w schemacie M-T i S-C. Wprowadzenie ciągłej gęstości prawdopodobieństwa „rodzin” sferoidalnych, a więc funkcji $M^{eq}(\theta)$, implikuje, że klasyczne sformułowanie schematów M-T i S-C, tj. równania (2.21) i (2.23), przekształcają się do następującej postaci:

$$\lambda^{\text{hom}} = \frac{\phi_f \lambda_f \int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} P_{f,m}(\theta) M^{eq}(\theta) d\theta + \phi_s \lambda_s P_{s,m}}{\phi_f \int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} P_{f,m}(\theta) M^{eq}(\theta) d\theta + \phi_s P_{s,m}}, \quad (3.3)$$

dla schematu M-T oraz:

$$\lambda^{\text{hom}} = \frac{\phi_f \lambda_f \int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} P_{f,\text{hom}}(\theta) M^{\text{eq}}(\theta) d\theta + \phi_s \lambda_s P_{s,\text{hom}}}{\phi_f \int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} P_{f,\text{hom}}(\theta) M^{\text{eq}}(\theta) d\theta + \phi_s P_{s,\text{hom}}}, \quad (3.4)$$

dla schematu S-C.

Ze względu na podobną strukturę równań (3.3) oraz (3.4), w prosty sposób wprowadzić można ujednocioną postać równania dla obu schematów:

$$\lambda^{\text{hom}} = \frac{\phi_f \lambda_f \int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} P_f(\theta) M^{\text{eq}}(\theta) d\theta + \phi_s \lambda_s P_s}{\phi_f \int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} P_f(\theta) M^{\text{eq}}(\theta) d\theta + \phi_s P_s}. \quad (3.5)$$

W powyższym równaniu tensory P_f i P_s odpowiadają tensorom $P_{f,m}$ i $P_{s,m}$ z równania (3.3) (dla schematu M-T) i tensorom $P_{f,\text{hom}}$ i $P_{s,\text{hom}}$ z równania (3.4) (dla schematu S-C).

Jak pokazano w pracy (Łydźba i in., 2018), równanie (3.5) można przekształcić do równania całkowego. Aby uzyskać tę formę, wykonajmy kilka przekształceń algebraicznych. W pierwszej kolejności należy przemnożyć obie strony równania (3.5) przez mianownik, co prowadzi do poniższej zależności:

$$\lambda^{\text{hom}} \phi_f \int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} P_f(\theta) M^{\text{eq}}(\theta) d\theta + \lambda^{\text{hom}} \phi_s P_s = \lambda_f \phi_f \int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} P_f(\theta) M^{\text{eq}}(\theta) d\theta + \lambda_s \phi_s P_s. \quad (3.6)$$

Następnie, przenosząc człony zawierające M^{eq} na lewą stronę równania mamy:

$$\lambda^{\text{hom}} \phi_f \int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} P_f(\theta) M^{\text{eq}}(\theta) d\theta - \lambda_f \phi_f \int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} P_f(\theta) M^{\text{eq}}(\theta) d\theta = \lambda_s \phi_s P_s - \lambda^{\text{hom}} \phi_s P_s. \quad (3.7)$$

Wobec czego:

$$\phi_f \int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} P_f(\theta) M^{\text{eq}}(\theta) d\theta (\lambda^{\text{hom}} - \lambda_f) = \phi_s P_s (\lambda_s - \lambda^{\text{hom}}). \quad (3.8)$$

Ostatecznie, otrzymujemy równanie całkowite w postaci:

$$\int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} P_f(\theta) M^{\text{eq}}(\theta) d\theta = \frac{\phi_s}{\phi_f} \frac{\lambda_s - \lambda^{\text{hom}}}{\lambda^{\text{hom}} - \lambda_f} P_s. \quad (3.9)$$

Prawą stroną równania możemy oznaczyć jako nową funkcję g zależną, w sposób jawny, od parametrów składników oraz od makroskopowej (znanej) przewodności cieplnej:

$$g(\lambda_s, \lambda_f, \lambda^{\text{hom}}(\lambda_f)) = \frac{\phi_s}{\phi_f} \frac{\lambda_s - \lambda^{\text{hom}}}{\lambda^{\text{hom}} - \lambda_f} P_s. \quad (3.10)$$

Wykorzystując zależność (3.10), równanie (3.9) zapisać można w następującej formie:

$$\int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} P_f(\lambda_f, \theta) M^{\text{eq}}(\theta) d\theta = g(\lambda_s, \lambda_f, \lambda^{\text{hom}}(\lambda_f)). \quad (3.11)$$

Powyższe równanie znane jest powszechnie, jako równanie Fredholma I-go rodzaju. Takie sformułowanie, w postaci równania (3.11), prowadzi do następującego zagadnienia odwrotnego: znając „jądro” równania $P_f(\lambda_f, \theta)$ oraz funkcję $g(\lambda_s, \lambda_f, \lambda^{\text{hom}}(\lambda_f))$ zidentyfikuj funkcję gęstości prawdopodobieństwa, czyli ekwiwalentną mikrostrukturę, M^{eq} . Zauważmy jednak, że pomimo tego, iż problem ten sprowadza się do rozwiązania standardowego równania Fredholma I-go rodzaju, to jego rozwiązanie jest jednak dodatkowo uwarunkowane. Wynika to z faktu, że poszukiwana funkcja M^{eq} jest gęstością prawdopodobieństwa, a zatem musi spełniać poniższe warunki:

$$\int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} M^{\text{eq}}(\theta) d\theta = 1 \quad \text{i} \quad \forall_{\theta \in [\theta_{\min}, \theta_{\max}]} M^{\text{eq}}(\theta) \geq 0. \quad (3.12)$$

Oczywiście funkcja M^{eq} musi spełniać (3.11) dla każdej wartości λ_f .

Warto w tym miejscu nadmienić, że większość powszechnie znanych zagadnień odwrotnych również sprowadza się do matematycznej postaci w formie równań całkowych. Przykładami mogą być tu takie zagadnienia, jak:

- rekonstrukcja obrazu w mikrotomografii komputerowej (Bertero & Boccacci, 1998),
- wykrycie nieciągłości materiału w badaniach nieniszczących (Liu & Han, 2003),
- wyznaczenie prądów morskich (Wunsch, 1996),
- wyznaczenie źródeł bioelektrycznych elektrokardiografii (Jiang, 2010).

3.3. Podsumowanie

W niniejszym rozdziale sformułowano zagadnienie odwrotne teorii homogenizacji, którego celem jest identyfikacja ekwiwalentnej mikrostruktury (uproszczonej względem mikrostruktury rzeczywistej) dla ośrodka porowatego. Ekwiwalentna mikrostruktura rozumiana jest w taki sposób, że prowadzi do takiej odpowiedzi makroskopowej rozważanego ośrodka, w szczególności makroskopowej przewodności cieplnej, jak jego mikrostruktura rzeczywista, niezależnie od przewodności cieplnej płynu wypełniającego przestrzeń porową tego ośrodka. Postuluje się istnienie ekwiwalentnej mikrostruktury w postaci ciągłej matrycy i przestrzeni porowej w kształcie sferoidalnych wtrąceń, gdzie rozkład wtrąceń opisany jest przez funkcję gęstości prawdopodobieństwa nazywaną funkcją ekwiwalentnej mikrostruktury ($M^{eq}(\theta)$).

Funkcja $M^{eq}(\theta)$ stowarzyszona jest z odpowiednim schematem aproksymacyjnym, tj. Mori-Tanaki bądź samouzgodnionego pola. Matematycznie zagadnienie odwrotne to liniowe równanie Fredholma I-go rodzaju (3.11) z dodatkowymi ograniczeniami (3.12).

4. Rozwiązanie zagadnienia odwrotnego teorii homogenizacji – stochastyczna optymalizacja

Jak wcześniej wspomniano, do rozwiązania zagadnienia odwrotnego teorii homogenizacji sformułowanego w niniejszej pracy (3.11) nie możemy skorzystać z klasycznych metod rozwiązywania równania całkowego Fredholma I-go rodzaju ze względu na wprowadzone dodatkowe ograniczenia (3.12). W pracy proponuje się zatem skorzystanie ze stochastycznej metody optymalizacji, tj. metody symulowanego wyżarzania (ang. *simulated annealing*), określanej w dalszej części pracy, jako metoda SA.

Pierwsza praca opisująca wykorzystanie metody SA dotyczyła optymalizacji drogi „wędrownego sprzedawcy”, który ma odwiedzić n miast, przy czym jego droga ma być możliwie najkrótsza (Kirkpatrick i in., 1983). Zagadnienie to znane jest pod nazwą problemu komiwojażera (ang. *travelling salesman problem*, TSP) i jest rozwinięciem problemu optymalizacyjnego polegającego na znalezieniu minimalnego cyklu Hamiltona w pełnym grafie ważonym.

W ogólności metoda symulowanego wyżarzania polega na wyszukaniu alternatywnych rozwiązań danego zagadnienia i wytypowaniu tych najlepszych poprzez minimalizację pewnej funkcji, zwanej funkcją celu (ang. *cost function*). Liczne wykorzystania metody symulowanego wyżarzania wykazały zarówno jej zalety jak i wady (Ingber, 1993). Metoda SA znalazła swoje liczne zastosowania w matematyce, np. w analizie obrazu (Black & Anandan, 1991), jak i również w innych dziedzinach nauki, m.in. w biologii (Bohr & Brunak, 1989), fizyce (Marinari & Parisi, 1992), geofizyce (Rothman, 1985) czy ekonomii (Goffe i in., 1994).

Do jej głównych zalet zaliczyć można to, iż:

- znajduje globalne, a nie lokalne, minimum funkcji celu,
- dobrze sprawdza się dla funkcji celu zawierających nieliniowości i nieciągłości,
- pozwala „nakładać” dodatkowe uwarunkowania na funkcję celu,
- jej zaimplementowanie do konkretnego problemu jest relatywnie łatwe w porównaniu do innych metod optymalizacyjnych.

Z drugiej strony największymi wadami metody SA są :

- relatywnie wolna zbieżność, przez co obliczenia są czasochłonne,
- konieczność dobierania parametrów kontrolnych osobno dla każdego zagadnienia, zwykle określa się je poprzez obliczenia testowe (metodą „prób i błędów”).

Ze względu na wskazane powyżej jej wady metoda ta doczekała się wielu modyfikacji. Modyfikacje te głównie dotyczą zmiany sposobu akceptacji poszczególnych konfiguracji podczas progresywnych iteracji metody w celu uzyskania szybszej zbieżności rozwiązania (patrz np. Cai & Shao, 2002; Szu & Hartley, 1987; Pant i in., 2014). Jednak każda modyfikacja klasycznego sformułowania metody SA zmniejsza jej uniwersalność i często dana modyfikacja staje się użyteczna tylko dla jednego typu zagadnień. Ponadto, algorytm metody SA można przyspieszyć bez konieczności jej bezpośredniej modyfikacji, a poprzez wykorzystanie większej mocy obliczeniowej, np. wskutek obliczeń równoległych (wielowątkowych/wieloprocessorowych), bądź korzystając z procesora karty graficznej.

W niniejszej pracy, celem rozwiązania zagadnienia odwrotnego teorii homogenizacji, wykorzystano klasyczne sformułowanie metody SA, do którego zaimplementowano kilka, dedykowanych rozwiązywanemu problemowi, modyfikacji. Szczegóły przedstawiono w dalszej części rozdziału.

4.1. Klasyczne sformułowanie metody SA

Klasyczny algorytm symulowanego wyżarzania oparty jest na czterech podstawowych „składnikach”, tj. (Rutenbar, 1989):

- konfiguracje – możliwe rozwiązania problemu, spośród którego szukamy tego najlepszego (optymalnego),
- modyfikacje – zbiór możliwych zmian prowadzących do przejścia z jednej konfiguracji do drugiej,
- funkcja celu (E) – miara dostarczająca informacji o „jakości” danej konfiguracji,
- schemat schładzania – schemat, według którego kontrolowany jest stopień akceptacji kolejnych konfiguracji wraz z postępującymi iteracjami metody.

Metoda SA jest algorytmem iteracyjnym. Zapoczątkowanie procesu optymalizacji wymaga zdefiniowania pewnej „konfiguracji” początkowej. Zazwyczaj jest ona wybierana w sposób losowy ze zbioru możliwych rozwiązań. Następnie obliczana jest funkcja celu

(E_0) oraz dobrana zostaje wartość „temperatury” początkowej (T_0) będąca fikcyjnym parametrem kontrolnym metody. Fikcyjna temperatura pojawia się w klasycznym sformułowaniu metody SA ze względu na fakt, iż swoje podstawy fizyczne metoda ta czerpie z analogii do pewnych zjawisk fizycznych – mowa tu np. o wyżarzaniu stali. W kolejnym kroku początkowa konfiguracja zostaje zmieniona losowo poprzez jedną modyfikację. Dla nowej konfiguracji obliczana jest ponownie funkcja celu (E) oraz jej zmiana w stosunku do poprzedniej konfiguracji ($\Delta E = E - E_0$). Jeżeli wartość funkcji celu nie wzrasta, tj. $\Delta E \leq 0$, wtedy nowa konfiguracja zostaje bezwarunkowo zaakceptowana. Jeżeli natomiast wartość funkcji celu wzrasta ($\Delta E > 0$), to wówczas nowa konfiguracja zostaje zaakceptowana z określonym prawdopodobieństwem wg schematu Metropolis (Metropolis i in., 1953):

$$P\{\Delta E\} = \exp\left(-\frac{\Delta E}{T}\right). \quad (4.1)$$

Zauważmy zatem, że algorytm metody SA, ze względu na postać warunku (4.1), pozwala również na akceptację konfiguracji „gorszych”, a więc takich, dla których wartość funkcji celu jest wyższa niż w poprzednim kroku. Dzięki temu algorytm ten potrafi w określonych warunkach wyjść ze znalezionej minimum lokalnego i w kolejnych iteracjach podążać w kierunku rozwiązania optymalnego, minimum globalnego.

Każda zmiana konfiguracji nazywana jest i -tą iteracją. Następnie po n_i iteracjach wartość T zostaje zmniejszona z postępowaniem geometrycznym:

$$T = \chi \cdot T_0 \quad \text{dla} \quad \chi \in (0,1), \quad (4.2)$$

gdzie χ to parametr określający szybkość „schładzania” układu, zazwyczaj przyjmowany z zakresu 0.8–0.95 (takie stopniowe obniżanie wartości parametru T , a więc fikcyjnej temperatury, jest nawiązaniem do procesu wyżarzanie stali, gdzie po utrzymywaniu materiału w wysokiej temperaturze następuje powolne jego schładzanie). Liczba iteracji, po których następuje zmiana T , to j -ta pętla algorytmu. Zauważmy, że ze względu na zależność (4.1), dla sukcesywnie obniżanej wartości parametru T , prawdopodobieństwo akceptacji konfiguracji, która powoduje wzrost funkcji celu, ulega zmniejszeniu. W ekstremalnym przypadku, gdy $T \rightarrow 0$ prawdopodobieństwo to zbiega do zera i akceptowane są tylko zmiany, które powodują zmniejszenie wartości E . Algorytm postępuje do momentu, aż rozwiązanie się ustabilizuje i zmiana funkcji celu nie

przekroczy wcześniej zadanego (oczekiwanego) błędu. Liczba iteracji w danej pętli (n_i), ilość pętli (n_j), parametr χ oraz temperatura początkowa (T_0) to parametry, których wartości zazwyczaj dobiera się metodą „prób i błędów”. Są to parametry dedykowane dla określonego zagadnienia. Nieprawidłowy dobór tych parametrów powoduje np. niebezpieczeństwo uzyskania lokalnego, a nie globalnego, minimum funkcji E .

4.2. Procedura numerycznego rozwiązywania zagadnienia odwrotnego teorii homogenizacji

Do rozwiązania zagadnienia odwrotnego teorii homogenizacji wykorzystana zostanie metoda stochastycznej optymalizacji w postaci algorytmu SA. Wobec tego, pierwotne sformułowanie zagadnienia odwrotnego, równanie (3.11) z ograniczeniami (3.12), należy przeformułować do zagadnienia optymalizacji.

Podajmy jeszcze raz pierwotne sformułowanie matematyczne zagadnienia odwrotnego, tj. znaleźć $M^{\text{eq}}(\theta)$ takie, że:

$$\int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} P_f(\lambda_f, \theta) M^{\text{eq}}(\theta) d\theta = g(\lambda_s, \lambda_f, \lambda^{\text{hom}}(\lambda_f)), \quad \forall \lambda_f \in [\lambda_{f,\min}, \lambda_{f,\max}], \quad (4.3)$$

przy ograniczeniach:

$$\int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} M^{\text{eq}}(\theta) d\theta = 1 \quad \text{i} \quad \forall_{\theta \in [\theta_{\min}, \theta_{\max}]} M^{\text{eq}}(\theta) \geq 0. \quad (4.4)$$

W celu sformułowania zagadnienia optymalizacji, równoważnego problemowi (4.3), zauważmy, że funkcja $M^{\text{eq}}(\theta)$ spełniająca (4.4) jest również elementem minimalizującym następującą „energię”, tj.:

$$E(M) = \int_{\lambda_{f,\min}}^{\lambda_{f,\max}} \left[\int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} P_f(\lambda_f, \theta) M(\theta) d\theta - g(\lambda_s, \lambda_f, \lambda^{\text{hom}}(\lambda_f)) \right]^2 d\lambda_f. \quad (4.5)$$

Oczywiście wartość minimalna, dla $M = M^{\text{eq}}$, jest równa $E(M^{\text{eq}}) = 0$.

Zagadnienie odwrotne teorii homogenizacji w postaci problemu optymalizacyjnego można więc przedstawić następująco, znajdź $M^{\text{eq}}(\theta)$ takie, że:

$$\begin{cases} E(M^{\text{eq}}) = \min_M \int_{\lambda_{f,\min}}^{\lambda_{f,\max}} \left[\int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} P_f(\lambda_f, \theta) M(\theta) d\theta - g(\lambda_s, \lambda_f, \lambda^{\text{hom}}(\lambda_f)) \right]^2 d\lambda_f \\ \int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} M^{\text{eq}}(\theta) d\theta = 1 \quad \text{i} \quad \forall_{\theta \in [\theta_{\min}, \theta_{\max}]} M^{\text{eq}}(\theta) \geq 0 \end{cases} \quad (4.6)$$

Oczywiście tylko gdy $E(M^{\text{eq}}) = 0$ wtedy element M^{eq} jest rozwiązaniem (4.3) z ograniczeniami (4.4).

Sformułowanie numerycznej procedury do rozwiązania zagadnienia optymalizacyjnego (4.6), bazującej na algorytmie SA jest już naturalne. Postać funkcji celu jest konsekwencją wyrażenia na „energię” w zagadnieniu (4.6).

Zauważmy, że zależność (4.6) jest sformułowaniem funkcji celu, dla przypadku, gdy zarówno F^{mom} , jak i $M(\theta)$ są funkcjami ciągłymi. Jednakże, jak wspomniano wcześniej, jednym ze sposobów uzyskania funkcji makroskopowej odpowiedzi (F^{mom}) jest sekwencja badań laboratoryjnych przy nasyceniu ośrodka porowatego określoną liczbą (n_f) płynów. W takim podejściu funkcja (3.2) dana jest zatem w postaci funkcji dyskretnej. Ponadto, w procedurze numerycznej dokonuje się również dyskretyzacji funkcji $M(\theta)$. Konieczne jest zatem przeformułowanie warunku (4.6) do postaci dyskretnej. Dziedzinę funkcji $M(\theta)$ dzieli się na $n_\theta = 50$ przedziałów indeksowanych symbolem k , każdy o długości Δ_k , tj. $[\theta_k - \Delta_k/2, \theta_k + \Delta_k/2]$. Każdemu przedziałowi przypisuje się dyskretną wartość prawdopodobieństwa, tj. $M(\theta_k) \cdot \Delta_k$. W konsekwencji, powyższe prowadzi do następującej dyskretnej postaci funkcji celu, tj.:

$$E_D = \frac{1}{n_f} \sum_{l=1}^{n_f} \left(\left(\sum_{k=1}^{n_\theta} P_{f,l}(\lambda_{f,l}, \theta_k) M(\theta_k) \Delta_k - g(\lambda_{f,l}) \right) / g(\lambda_{f,l}) \right)^2 \quad (4.7)$$

Zależność (4.7), w odróżnieniu od funkcji (4.6), zawiera dodatkowo funkcję wagową $1/g(\lambda_f)^2$. Współczynnik ten jest dodany w celu uzyskania błędu względnego tego samego rzędu dla wszystkich punktów pomiarowych ($\lambda_f = \{\lambda_{f,1}, \lambda_{f,2}, \dots, \lambda_{f,n_f}\}$).

Jako konfigurację początkową przyjęto funkcję $M(\theta)$ w postaci równomiernego rozkładu gęstości prawdopodobieństwa θ . Innymi słowy, każda z dyskretnych „rodzin” wtrąceń jest równo prawdopodobna. W dalszych krokach dokonuje się modyfikacji konfiguracji początkowej (i kolejnych) w celu odnalezienia optymalnego przebiegu funkcji $M(\theta)$, czyli uzyskania tzw. ekwiwalentnej mikrostruktury $M^{\text{eq}}(\theta)$. Modyfikacja danej

konfiguracji polega na losowym wybraniu dwóch różnych przedziałów dyskretnej funkcji $M(\theta)$, powiedzmy θ_p i θ_q . Następnie dokonuje się zmiany ich wartości $M(\theta_p) \cdot \Delta_p$ i $M(\theta_q) \cdot \Delta_q$ o wartość $\pm 0.002/n_\theta$ (oznacza to, że jedno prawdopodobieństwo wzrasta a drugie maleje o zadaną wartość). Wybór, które wzrasta, a które maleje dokonuje się z prawdopodobieństwem 0,5. Dodatkowo, sprawdza się czy taka modyfikacja nie powoduje, iż funkcja $M(\theta)$ uzyskuje wartości ujemne. Jeżeli warunek ten nie jest spełniony (np. jedna z wartości prawdopodobieństwa jest ujemna) wówczas wybrana zostaje losowo inna para θ_p i θ_q i dokonuje się nowej zmiany konfiguracji. Tak sformułowana procedura zmiany konfiguracji zachowuje uwarunkowania dla dyskretnej funkcji gęstości prawdopodobieństwa:

$$\sum_{k=1}^{n_\theta} M(\theta_k) \Delta_k = 1 \quad \text{i} \quad \forall_{\theta_k} M(\theta_k) \Delta_k \geq 0. \quad (4.8)$$

Dla danej iteracji i wyznaczenie wartości E_D (4.7), ze względu na dużą liczbę dyskretnych podrozdziałów k , jest bardzo czasochłonne. Zauważmy, że dla pojedynczej iteracji wartość prawdopodobieństwa zmienia się jedynie dla dwóch jej przedziałów, tj. θ_p i θ_q . Wobec czego, w procedurze numerycznej obliczenia dla wszystkich dyskretnych przedziałów funkcji $M(\theta)$ wystarczy wykonać tylko dla pierwszej iteracji. Dla kolejnych iteracji (i) człon odpowiadający lewej stronie równania całkowego z poprzedniej iteracji ($i-1$) należy zmodyfikować o sumy odpowiadające tylko zmodyfikowanym interwałom funkcji $M(\theta_p$ i $\theta_q)$. Modyfikację tę, dla danego punktu pomiarowego $\lambda_{f,l}$, zapisać można w następującej postaci:

$$P_{f,l}(\lambda_{f,l}, \theta_p) (M_i(\theta_p) - M_{i-1}(\theta_p)) \Delta_p + P_{f,l}(\lambda_{f,l}, \theta_q) (M_i(\theta_q) - M_{i-1}(\theta_q)) \Delta_q. \quad (4.9)$$

Takie uproszczenie algorytmu skutkuje niemal 25-krotnym przyspieszeniem obliczeń w stosunku, gdy obliczenia prowadzi się dla wszystkich przedziałów.

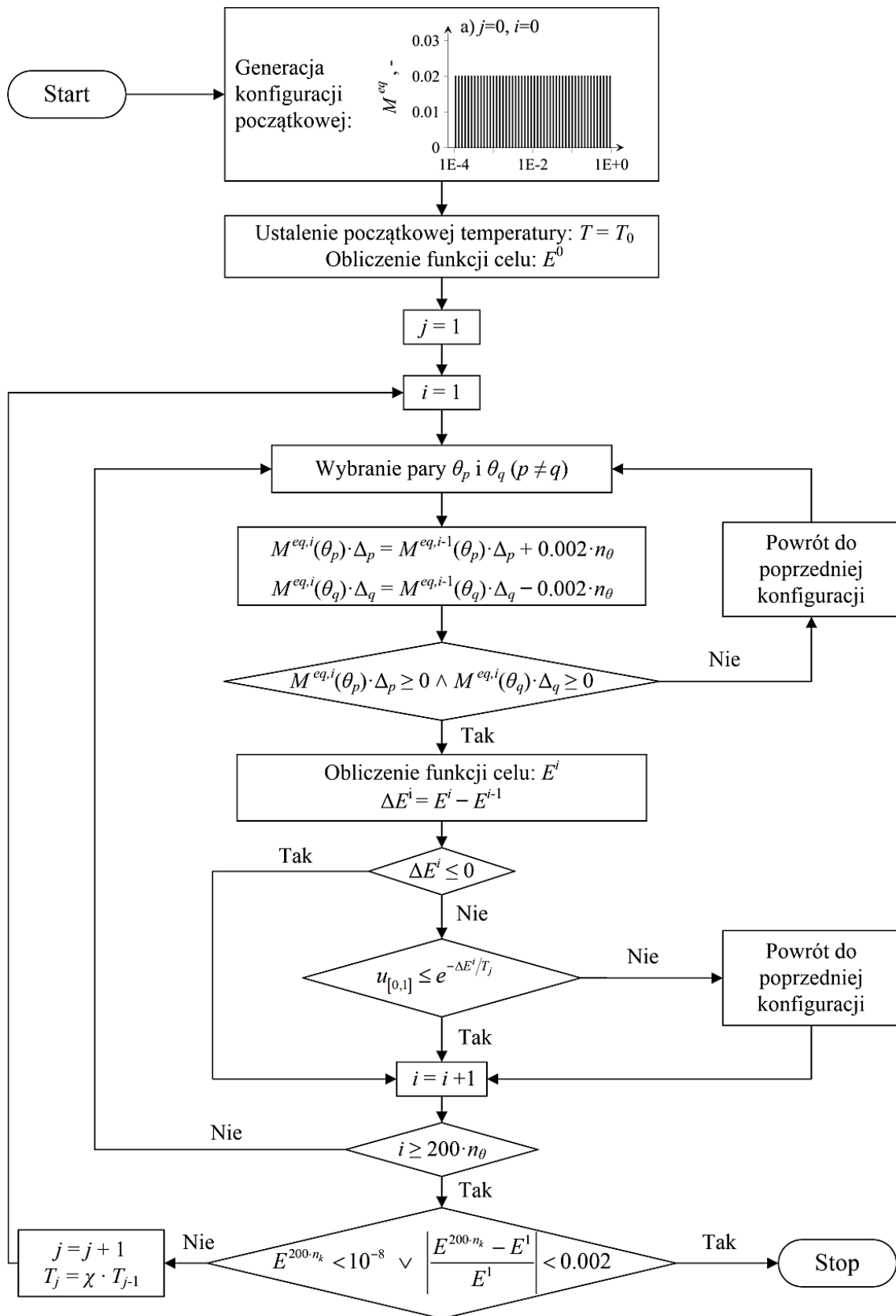
Parametry kontrolne metody SA zostały dobrane na podstawie wielu obliczeń testowych. W ich wyniku przyjęto, że liczba iteracji w danej pętli wynosi $n_i = 200 \cdot n_\theta = 10^4$. Jednocześnie wartość parametru, który definiuje obniżanie fikcyjnej temperatury T określono jako $\chi = 0.9$. Temperatura początkowa (T_0) została przyjęta tak, aby liczba akceptacji wszystkich modyfikacji w pierwszej pętli $j=1$ wynosiła około 50%. Cały

algorytm zatrzymywany jest w momencie, gdy spełniony zostaje jeden z poniższych warunków:

- wartość funkcji celu „spadnie” poniżej założonego błędu ($E_D < 10^{-10}$),
- wartość funkcji celu, na koniec danej pętli, nie zmieni się o więcej niż 0.2% w stosunku do jej wartości na początku tej pętli,
- liczba pętli j przekroczy wartość 200.

Ważnym aspektem całej procedury jest przyjęcie odpowiedniej dziedziny funkcji $M(\theta)$. Parametr θ może osiągać wartości nieujemne w zakresie od 0 do ∞ , jednak w celu uniknięcia niejednoznaczności rozwiązania zagadnienia odwrotnego przyjmuję się go z zakresu od 0 do 1. Aby uzasadnić ten wybór powołajmy się na przykład 2.1 przedstawiony w rozdziale 2.3.2.3. Na wykresie na rys. 2.11 można zauważyć, że możliwe jest uzyskanie pełnego zakresu parametru efektywnego dla obu użytych schematów aproksymacyjnych dla $\theta \in (0, 1]$. Ponadto funkcja $\lambda^{\text{hom}}(\theta)$ nie jest różnowartościowa dla pełnego zakresu $\theta \in (0, \infty)$. Wobec czego, dla pewnego zakresu parametru efektywnego w 3D (i dla pełnego zakresu w 2D) stowarzyszyć moglibyśmy równoważnie jedną rodzinę wtrąceń z zakresu $(0, 1]$, a drugą z zakresu $[1, \infty)$, i uzyskalibyśmy tę samą wartość parametru efektywnego λ^{hom} . W konsekwencji przyjęcie parametru θ w zakresie od 0 do ∞ skutkowałoby niejednoznacznością rozwiązania. Dodatkowo w procedurze numerycznej dziedzinę parametru θ zawęża się do $\theta \in (10^{-4}, 1)$, przedziału obustronnie niedomkniętego. Dzięki temu tensor P_{Γ} w równaniu (4.7) wyrażony jest poprzez analityczną postać równania, tj. (2.27) i (2.28), odpowiednio, dla zagadnienia 2D i 3D.

Zaproponowaną w niniejszym podrozdziale autorską procedurę numerycznego rozwiązywania zagadnienia odwrotnego teorii homogenizacji symulowanego wyżarzania (SA) przedstawiono na schemacie blokowym na rys. 4.1. Poprawność zaprezentowanej procedury oraz jej efektywność zweryfikowano w kolejnym rozdziale.



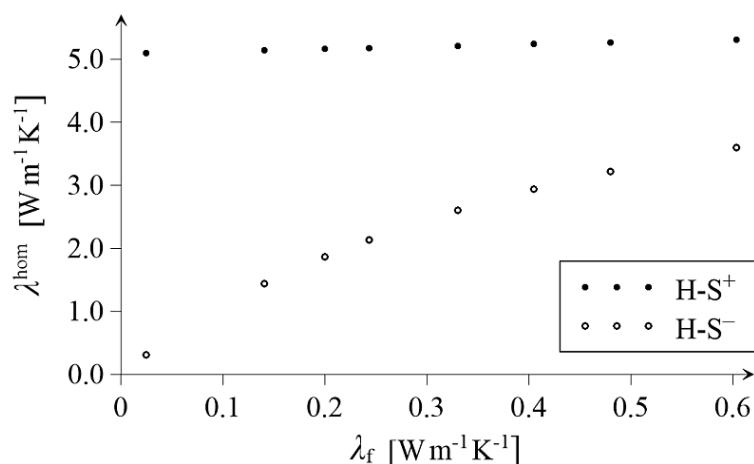
Rys. 4.1. Schemat blokowy autorskiej procedury rozwiązania zagadnienia odwrotnego teorii homogenizacji metodą SA

4.3. Efektywność i poprawność sformułowanej procedury

Poprawność oraz efektywność zaproponowanej metody optymalizacyjnej zweryfikowano w niniejszym rozdziale poprzez rozwiązanie odpowiednio dobranych zagadnień odwrotnych teorii homogenizacji. Za każdym razem rozważano dwu-składnikowy ośrodek porowaty o udziale frakcyjnym porów $\phi_f=0.2$ i przewodności cieplnej fazy stałej (szkieletu) $\lambda_s=7.0 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Założono, że przestrzeń porowa wypełniana będzie różnymi płynami charakteryzującymi się przewodnością cieplną z przedziału $\lambda_{f,\min}=0.025 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ (powietrze) do $\lambda_{f,\max}=0.603 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ (woda).

4.3.1. Ograniczenia Hashina-Shtrikmana

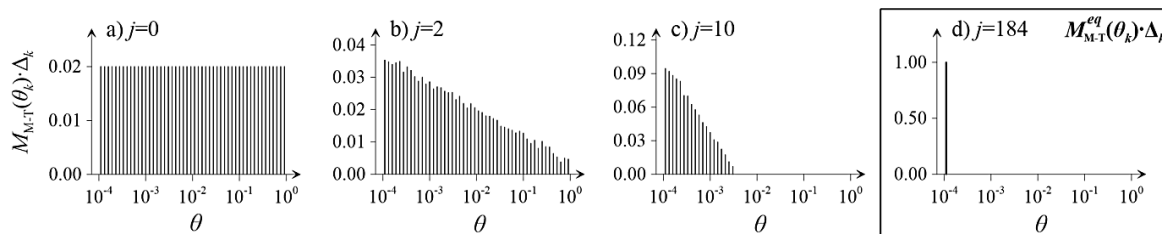
Jak wspomniano już wcześniej, rozwiązania zagadnienia odwrotnego poszukuje się na podstawie znajomości funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej F^{mom} . Niech funkcje F^{mom} dane są w formie dolnego oraz górnego ograniczenia Hashina-Shtrikmana ($H-S^-$ i $H-S^+$). Korzystając z $H-S^-$ i $H-S^+$ określono makroskopową przewodność cieplną (λ^{hom}) dla poszczególnych dyskretnych wartości λ_f (rys. 4.2).



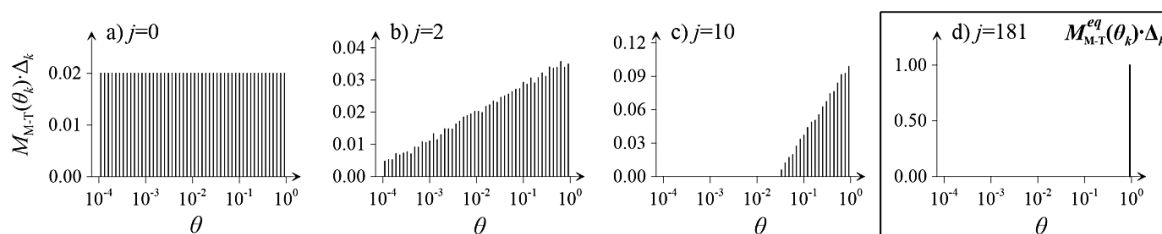
Rys. 4.2. Makroskopowa funkcja odpowiedzi materiałowej zgodna z dolnym i górnym ograniczeniem Hashina-Shtrikmana ($H-S^-$ i $H-S^+$)

Następnie, z wykorzystaniem autorskiej metody optymalizacji, przedstawionej w poprzednim podrozdziale, rozwiązano zagadnienie odwrotne (3.11) dla dwóch funkcji odpowiedzi makroskopowej. Obliczenia wykonano zarówno w ujęciu schematu M-T, jak i zgodnie z metodą samouzgodnionego pola (S-C). Na rys. 4.3 i rys. 4.4 przedstawiono ewolucje funkcji ekwiwalentnej mikrostruktury dla wybranych kroków iteracyjnych

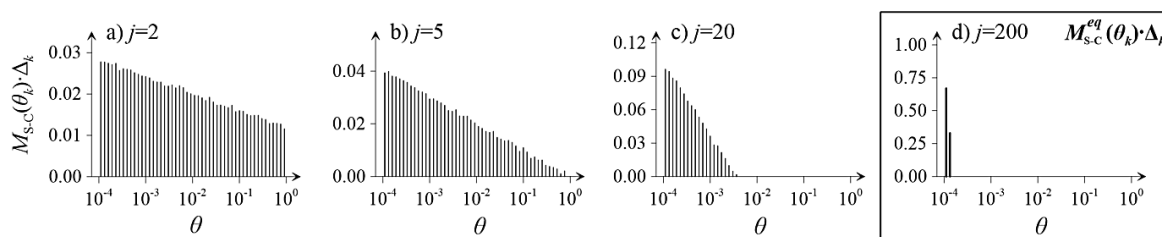
w ujęciu schematu M-T ($M_{M-T} \cdot \Delta$), odpowiednio, dla dolnego i górnego ograniczenia H-S. Z kolei na rys. 4.5 i rys. 4.6 zaprezentowano, w analogicznej formie, wyniki dla schematu S-C. Za każdym razem, funkcję $M(\theta)$, dla której następowало zatrzymanie wykonywania algorytmu, przedstawiono w ostatniej kolumnie (w prostokątnej ramce).



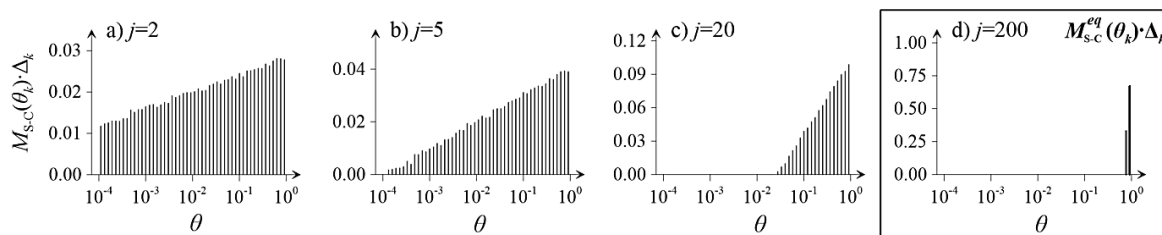
Rys. 4.3. Ewolucja funkcji ekwiwalentnej mikrostruktury dla schematu M-T ($M_{M-T} \cdot \Delta$) dla H-S⁻



Rys. 4.4. Ewolucja funkcji ekwiwalentnej mikrostruktury dla schematu M-T ($M_{M-T} \cdot \Delta$) dla H-S⁺



Rys. 4.5. Ewolucja funkcji ekwiwalentnej mikrostruktury dla schematu S-C ($M_{S-C} \cdot \Delta$) dla H-S⁻

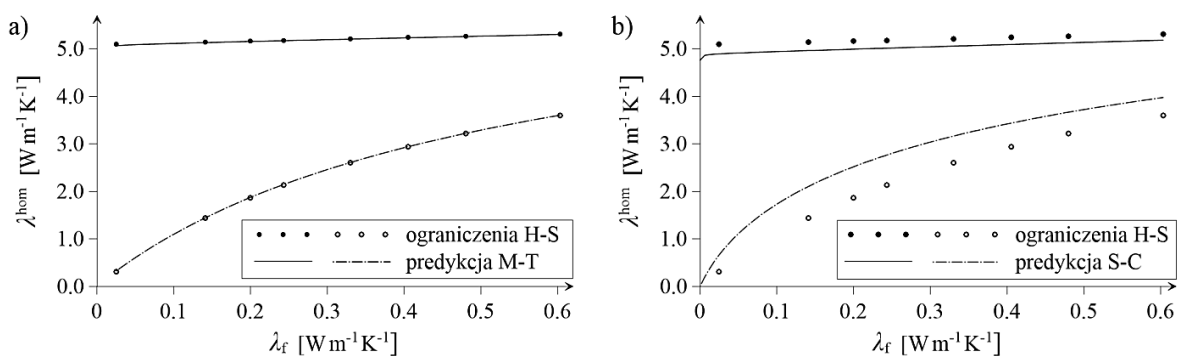


Rys. 4.6. Ewolucja funkcji ekwiwalentnej mikrostruktury dla schematu S-C ($M_{S-C} \cdot \Delta$) dla H-S⁺

Dla schematu M-T, w przypadku F^{mom} w postaci dolnego ograniczenia H-S⁻, funkcja ekwiwalentnej mikrostruktury, w skali logarytmicznej, koncentruje się przy $\theta \rightarrow 0$ (w procedurze numerycznej przy $\theta \rightarrow 10^{-4}$), co implikuje pory w kształcie spękań/szczelin – rys. 4.3d. Z kolei dla przypadku drugiego, tj. dla H-S⁺, funkcja M^{eq} , wskazuje istnienie jednego typu wtrąceń o $\theta \rightarrow 1$ – są to zatem pory idealnie sferyczne (rys. 4.4d). Podobne

wyniki uzyskano dla schematu S-C, choć w tym przypadku rezultaty wskazują na istnienie dwóch rodzin wtrąceń dla $\theta \rightarrow 0$ ($H-S^-$) i $\theta \rightarrow 1$ ($H-S^+$).

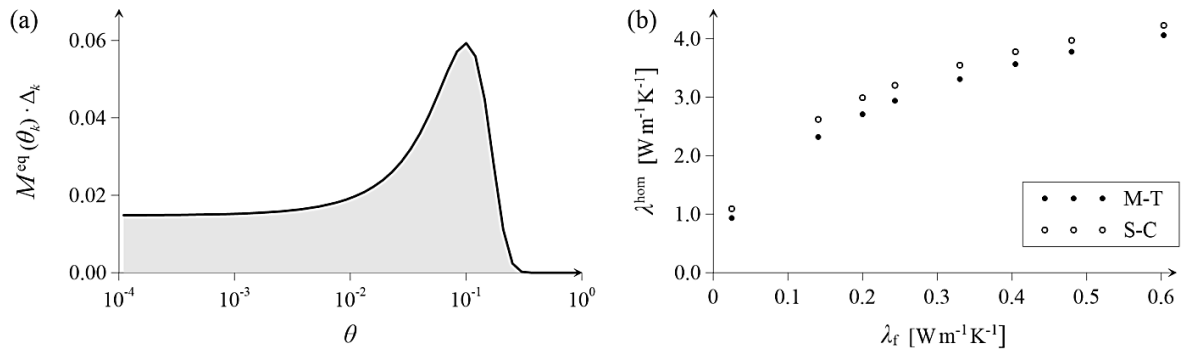
Uzyskane funkcje ekwiwalentnej mikrostruktury użyte zostały ponownie w schemacie M-T i S-C, w sposób bezpośredni, w celu uzyskania zhomogenizowanej wartości przewodności cieplnej dla różnych wartości λ_f . Miało to na celu sprawdzenie, czy zidentyfikowane mikrostruktury, a więc funkcje $M^{eq}(\theta)$, zapewniają satysfakcjonującą predykcję z góry założonej funkcji F^{mom} . Otrzymane rezultaty naniesiono na wykres z rys. 4.2 i przedstawiono, w formie zbiorczej, na rys. 4.7. Dla schematu M-T uzyskano pełną zgodność wyników (rys. 4.7a); predykcja na podstawie funkcji $M^{eq}(\theta)$ jest niemal idealna. Co więcej, należy również podkreślić, że uzyskane ekwiwalentne mikrostruktury są również prawidłowe. Wynika to z powszechnie znanego faktu, że schemat Mori-Tanaka dla wtrąceń kulistych jest tożsamy z górnym ograniczeniem Hashina-Shtrikmana ($H-S^+$), natomiast dla wtrąceń dyskowych, gdy $\theta \rightarrow 0$, ograniczeniem dolnym ($H-S^-$) (własność ta pokazana została w przykładzie 2.1). Potwierdza to poprawność procedury rozwiązywania zagadnienia odwrotnego. W przykładzie 2.1 pokazano również, że ograniczenia H-S nie są osiągalne przez schemat S-C. Wobec tego dla schematu S-C mimo, że otrzymaliśmy poprawne parametry mikrostruktury ($\theta \rightarrow 0$ dla $H-S^-$ i $\theta \rightarrow 1$ dla $H-S^+$), to nie uzyskaliśmy zgodności w funkcji F^{mom} (rys. 4.7b). Zatem, tak uzyskane mikrostruktury nie są ekwiwalentnymi, a należy je traktować jako tzw. mikrostruktury „optymalne”, tzn. takie, które zapewniają minimum funkcji kosztu E_D (3.26). Powyższe jest konsekwencją tego, iż schemat S-C, przy założeniu, że maczyca utworzona jest z wtrąceń o $\theta = 1$, nie zapewnia pełnego spektrum wartości λ^{hom} przebiegającego od dolnego do górnego ograniczenia Hashina-Shtrikmana (patrz rys. 2.11).



Rys. 4.7. Makroskopowa funkcja odpowiedzi materiałowej dla dolnego i górnego ograniczenia Hashina-Shtrikmana ($H-S^-$ i $H-S^+$) uzyskana dla rozwiązania zagadnienia bezpośredniego oraz predykcje schematu: a) M-T i b) S-C, uzyskane dla zagadnienia odwrotnego

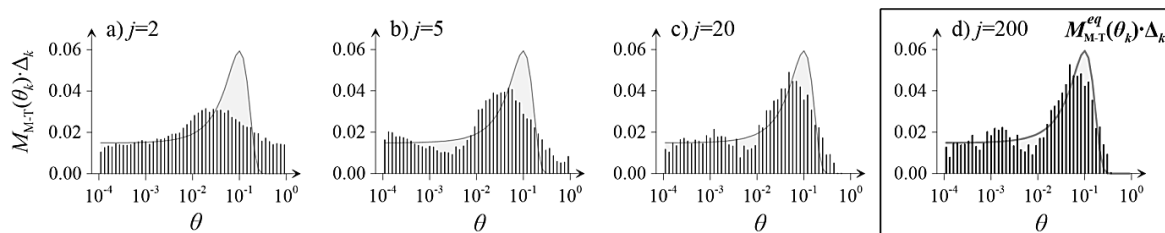
4.3.2. Założona funkcja ekwiwalentnej mikrostruktury

W niniejszym przykładzie poprawność procedury zweryfikowano w odmienny sposób. Przyjęto z góry postać ekwiwalentnej mikrostruktury, a następnie sprawdza się czy algorytm rozwiązania poprawnie zidentyfikuje z góry założoną funkcję $M^{eq}(\theta)$. Rozważamy więc ponownie ośrodek porowaty o tych samych parametrach ($\phi = 0.2$, $\lambda_s = 7.0 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$). Ponadto, założymy funkcję ekwiwalentnej mikrostruktury w postaci jak na rys. 4.8a. Następnie na jej podstawie określono funkcję makroskopowej odpowiedzi materiałowej rozwiązując zagadnienie pierwotne schematem M-T oraz niezależnie schematem S-C (rys. 4.8b). Zauważmy, że w zależności od użytego schematu aproksymacyjnego, ta sama funkcja $M^{eq}(\theta)$ generuje różne wartości funkcji F^{mom} .

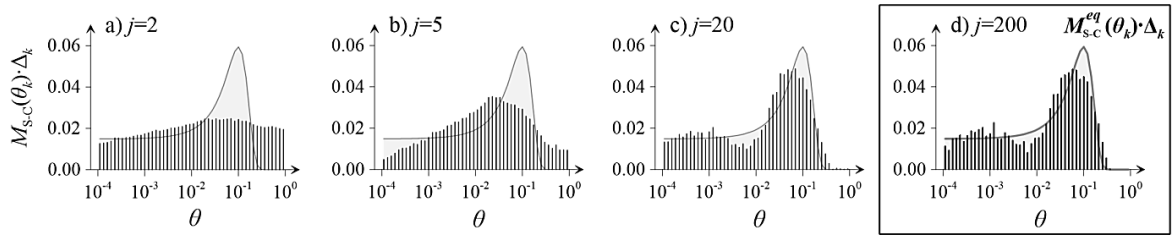


Rys. 4.8. a) Założona funkcja ekwiwalentnej mikrostruktury oraz b) odpowiadające jej makroskopowe funkcje odpowiedzi materiałowej dla schematu M-T i S-C

Rozwiązując zagadnienie odwrotne w ujęciu schematu M-T i S-C poszukujemy następnie funkcji ekwiwalentnej mikrostruktury metodą SA. Innymi słowy, weryfikujemy, czy algorytm doprowadzi nas do założonej funkcji $M^{eq}(\theta)$ przedstawionej na rys. 4.8a. Ponownie, startując z rozkładu jednostajnego (rys. 4.9a i rys. 4.10a) w kolejnych krokach funkcja ekwiwalentnej mikrostruktury ewoluuje aż do postaci ostatecznej (zatrzymującej procedurę), przedstawionej na rys. 4.9d (dla schematu M-T) i na rys. 4.10d (dla schematu S-C).



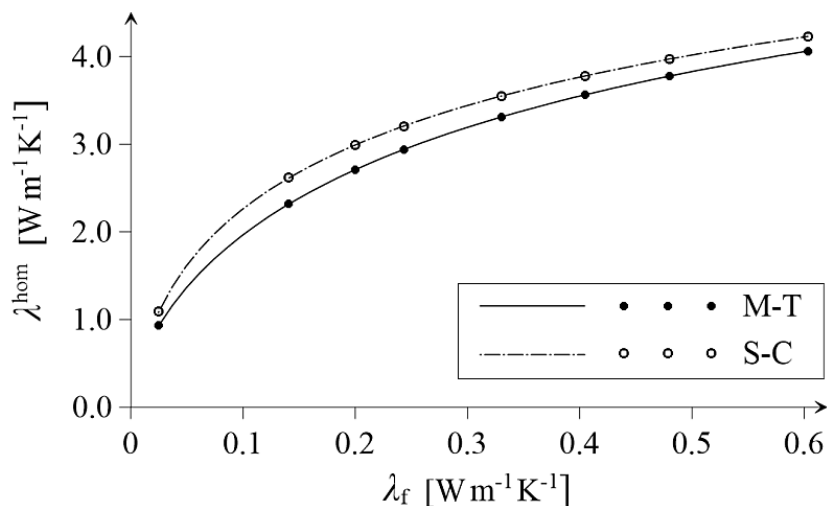
Rys. 4.9. Ewolucja funkcji ekwiwalentnej mikrostruktury dla schematu M-T ($M_{M-T} \cdot \Delta$)



Rys. 4.10. Ewolucja funkcji ekwiwalentnej mikrostruktury dla schematu S-C ($M_{S-C} \cdot \Delta$)

Wyraźnie widać, że w ujęciu obu schematów (M-T i S-C) funkcja ekwiwalentnej mikrostruktury ewoluuje do postaci takiej, jak pierwotnie została założona (rys. 4.8a). Zauważalne są drobne różnice, co jednak jak zostanie za chwilę pokazane, nie ma większego znaczenia na poprawność predykcji przewodności cieplnej. Dla lepszego zobrazowania uzyskanych zgodności, na każdym z rysunków, linią ciągłą przedstawiono założoną postać funkcji ekwiwalentnej mikrostruktury.

Uzyskane funkcje ekwiwalentnej mikrostruktury dla obu schematów zostały następnie wykorzystane w celu wyznaczenia predykcji funkcji F^{mom} (rys. 4.11). Pomimo wspomnianych wcześniej różnic (pomiędzy założoną a zidentyfikowaną funkcją $M(\theta)$) uzyskano dobrą zgodność wyników dla funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej, co ponownie dowodzi poprawności sformułowanej metody rozwiązania zagadnienia odwrotnego teorii homogenizacji przy użyciu metody stochastycznej optymalizacji w sformułowaniu algorytmu symulowanego wyżarzania.



Rys. 4.11. Funkcja makroskopowej odpowiedzi materiałowej uzyskana dla rozwiązania zagadnienia bezpośredniego (punkty dyskretne) i odwrotnego (linie ciągłe) dla schematu M-T i S-C

4.4. Podsumowanie

W rozdziale sformułowano procedurę numerycznego rozwiązywania zagadnienia odwrotnego teorii homogenizacji. Metodę sformułowano wykorzystując równoważne zagadnienie optymalizacyjne. Procedurę zaproponowano wykorzystując metodę stochastycznej optymalizacji. Wykonane obliczenia zagadnień testowych ewidentnie potwierdzają jej poprawność oraz efektywność.

5. Ekwiwalentna mikrostruktura ośrodka porowatego – regularyzacja zagadnienia odwrotnego

W poprzednim rozdziale poprawność procedury rozwiązywania zagadnienia odwrotnego zweryfikowano na przykładach, w których makroskopowa funkcja odpowiedzi materiałowej (F^{mom}) była dokładnie znana. W rzeczywistości funkcję F^{mom} wyznaczyć można np. w badaniach laboratoryjnych poprzez sekwencyjne nasycanie ośrodka porowatego płynami o znanej przewodności cieplnej i wyznaczenie odpowiadającej jej makroskopowej przewodności cieplnej. W takim przypadku, dyskretne wyniki funkcji F^{mom} mogą być zaburzone błędami pomiarowymi. W niniejszym rozdziale analizuje się zatem wpływ błędów pomiarowych na identyfikację ekwiwalentnej mikrostruktury.

5.1. Wrażliwość rozwiązania zagadnienia odwrotnego na błędy pomiarowe

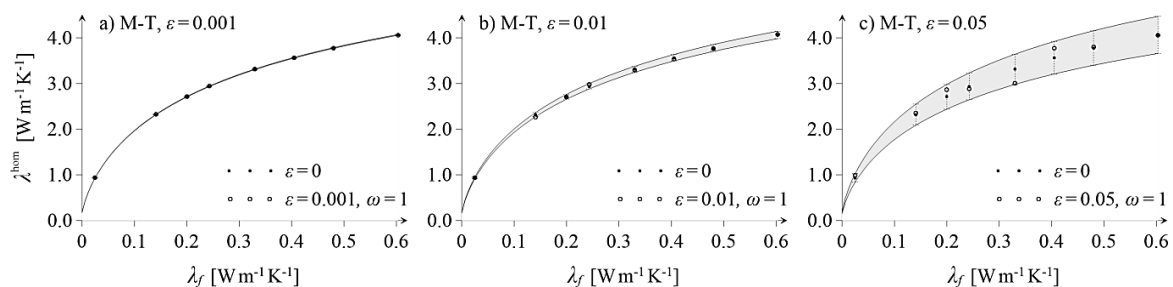
Stabilność rozwiązania zagadnienia odwrotnego, jego wrażliwość na „dane wsadowe” zbadano wykorzystując ekwiwalentną mikrostrukturę z rozdziału 4.3.2. Przyjęto więc, że oryginalna ekwiwalentna mikrostruktura dana jest funkcją z rys. 4.8a. Następnie, dla kilku wartości przewodności cieplnej płynów wypełniających przestrzeń porową określono funkcję F^{mom} w ujęciu schematu M-T i S-C. Do tak uzyskanych rezultatów przypisano, w sposób losowy, pewne ich rozrzuty, „imitujące” błędy pomiarowe. Generowanie błędów pomiarowych realizowane jest poprzez dodanie do poszczególnych dyskretnych wartości λ_i^{hom} (rys. 4.8b) losowej liczby z rozkładu normalnego o wartości średniej równej 0 oraz odchyleniu standardowemu $\varepsilon \cdot \lambda_i^{\text{hom}}$, tj.:

$$\lambda_i^{\text{hom}*} = \lambda_i^{\text{hom}} + rv(0, \varepsilon \cdot \lambda_i^{\text{hom}}), \quad (5.1)$$

gdzie $rv(\psi, \sigma)$ jest liczbą losową z rozkładu normalnego charakteryzowanego wartością średnią ψ i odchyleniem standardowym σ (przyjęto $\psi=0$ oraz $\sigma = \varepsilon \cdot \lambda_i^{\text{hom}}$, gdzie ε to założona wartość błędów pomiarowych).

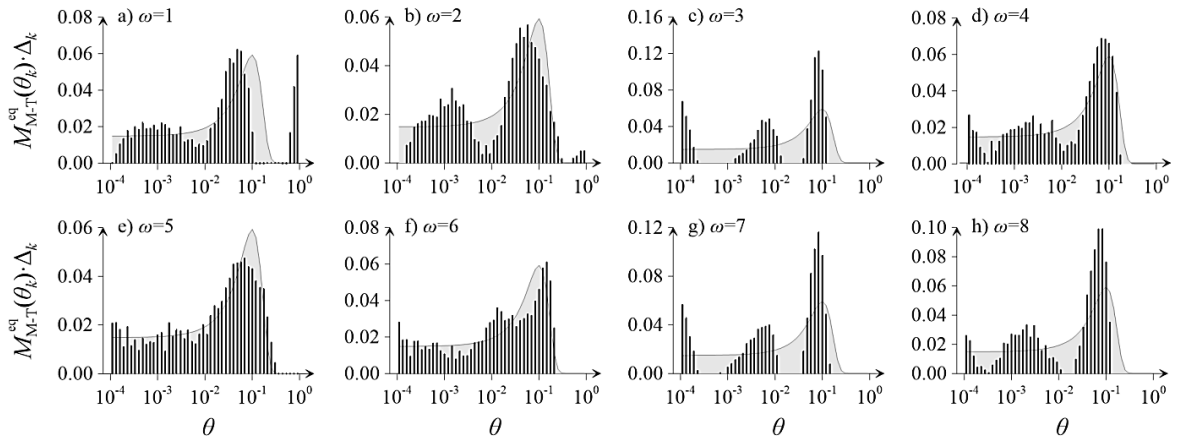
Należy podkreślić, że ze względu na losowy charakter przypisywania błędów pomiarowych, oczywistym jest, że istnieje nieskończenie wiele realizacji funkcji F^{mom} . Realizacje te opisywać będziemy symbolem ω .

Przyjęto trzy różne wartości błędu ε , tj. $\varepsilon = 0.001$, $\varepsilon = 0.01$ oraz $\varepsilon = 0.05$. Funkcję F^{mom} (rys. 4.8b), niezależnie dla schematu M-T oraz S-C, zaburzono błędami pomiarowymi zgodnie z opisaną powyżej procedurą. Dla każdej wartości ε wygenerowano 30 losowych realizacji F^{mom} . Przykładową realizację, $\omega = 1$, wygenerowaną dla schematu M-T, dla trzech różnych wartości błędu ε , przedstawiono na rys. 5.1. Liniami ciągłymi oznaczono maksymalne wartości, jakie mogłyby zostać przypisane do poszczególnych punktów (na poziomie ufności 95%). Zakresowany obszar jest zatem polem, które określa możliwe wartości przewodności cieplnej, które wynikają z zaburzenia błędami pomiarowymi.

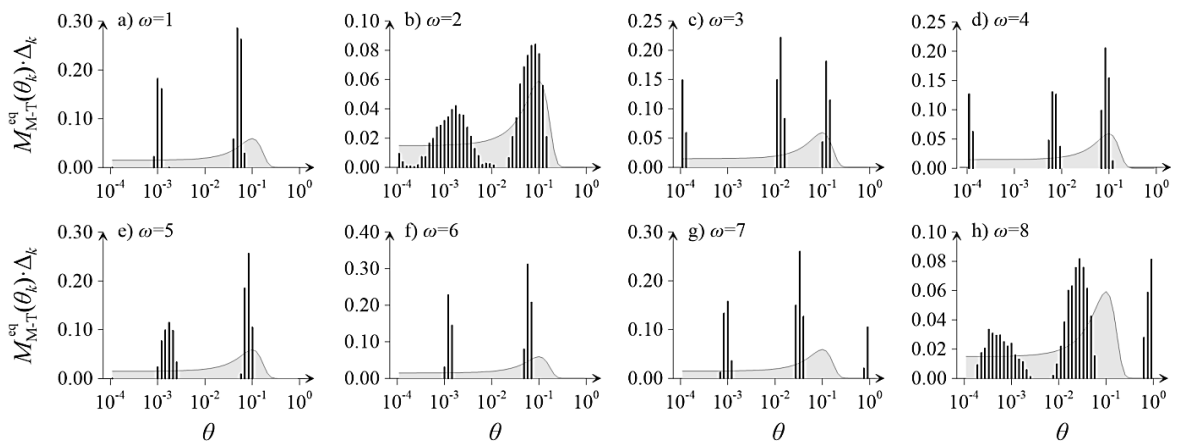


Rys. 5.1. Funkcja F^{mom} bez błędu pomiarowego ($\varepsilon = 0$) oraz przykładowa realizacja $\omega = 1$ funkcji F^{mom} zaburzona błędami pomiarowymi dla schematu M-T dla: a) $\varepsilon = 0.001$, b) $\varepsilon = 0.01$ i c) $\varepsilon = 0.05$

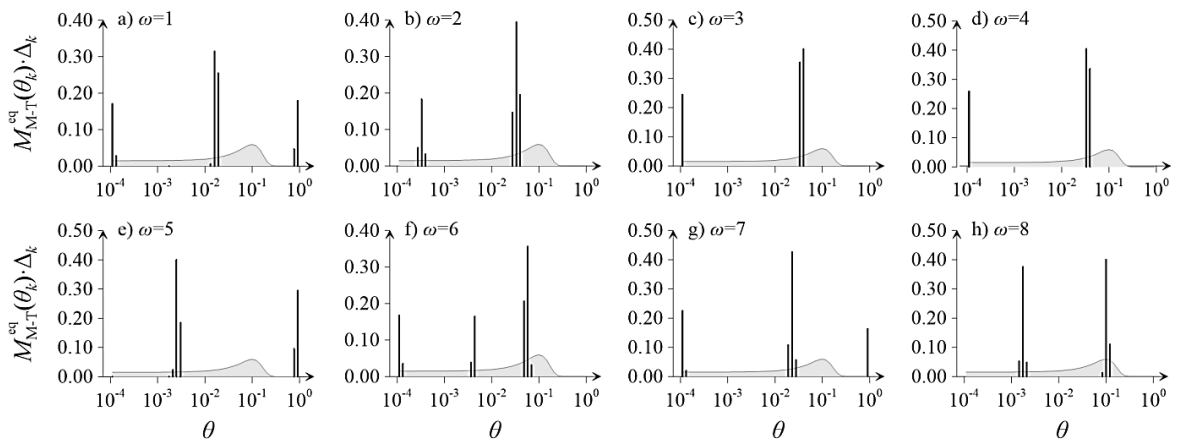
W kolejnym kroku rozwiązano sekwencję zagadnień odwrotnych poszukując funkcji $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ na podstawie „zaburzonych” funkcji F^{mom} . Ostateczne formy $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla schematu M-T przedstawiono na rys. 5.2 dla $\varepsilon = 0.001$, na rys. 5.3 dla $\varepsilon = 0.01$ oraz na rys. 5.4 dla $\varepsilon = 0.05$. Innymi słowy, przedstawione na rysunkach poniżej funkcje $M(\theta)$ są tymi, które zatrzymały procedurę optymalizacji. Ze względu na dużą liczbę analizowanych realizacji ω , wyniki zaprezentowano tylko dla pierwszych ośmiu losowych sekwencji błędów pomiarowych. W analogicznej formie zaprezentowano wyniki dla schematu S-C, kolejno na rys. 5.5, rys. 5.6 oraz rys. 5.7.



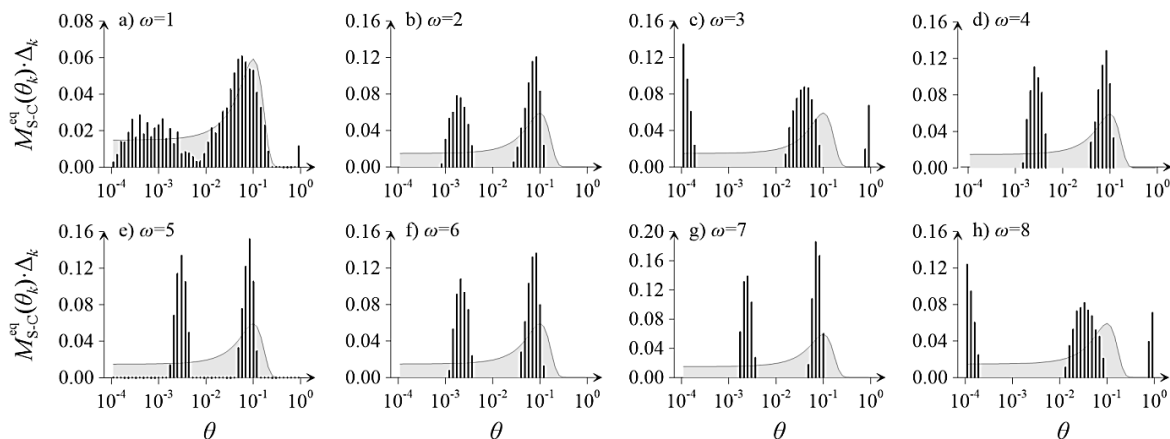
Rys. 5.2. Funkcja $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla schematu M-T dla przykładowych ośmiu realizacji ω ; $\varepsilon = 0.001$



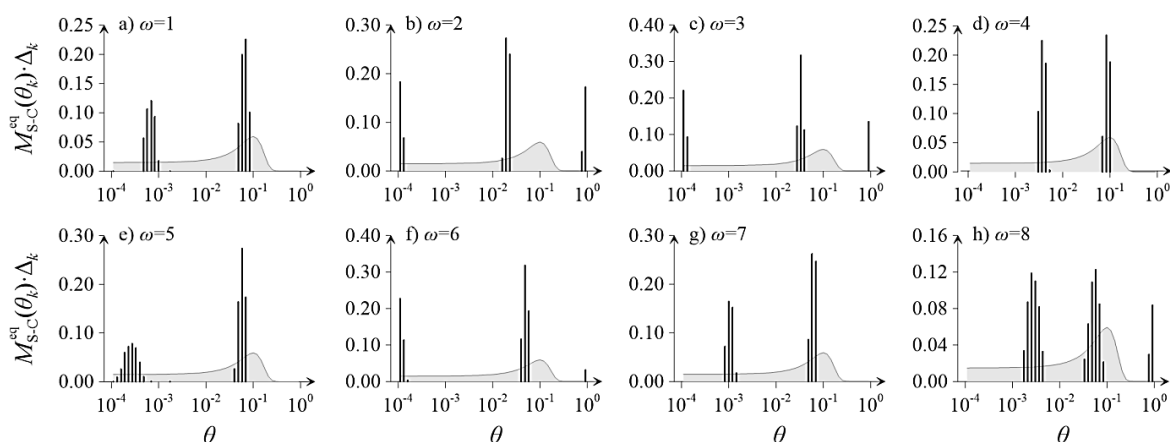
Rys. 5.3. Funkcja $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla schematu M-T dla przykładowych ośmiu realizacji ω ; $\varepsilon = 0.01$



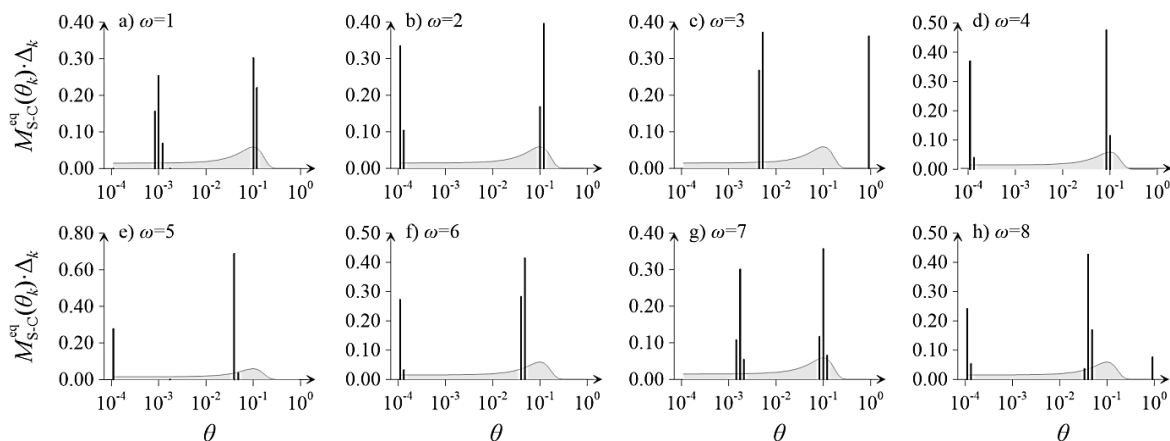
Rys. 5.4. Funkcja $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla schematu M-T dla przykładowych ośmiu realizacji ω ; $\varepsilon = 0.05$



Rys. 5.5. Funkcja $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla schematu S-C dla przykładowych ośmiu realizacji ω ; $\varepsilon = 0.001$



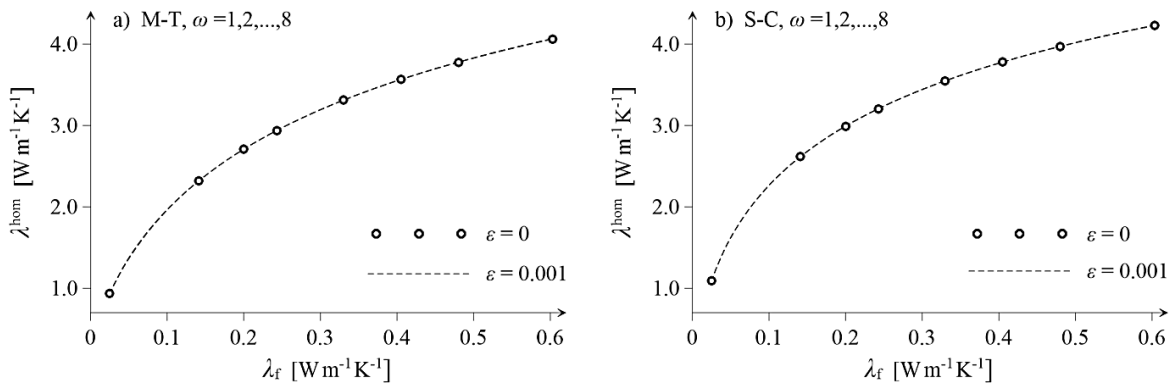
Rys. 5.6. Funkcja $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla schematu S-C dla przykładowych ośmiu realizacji ω ; $\varepsilon = 0.01$



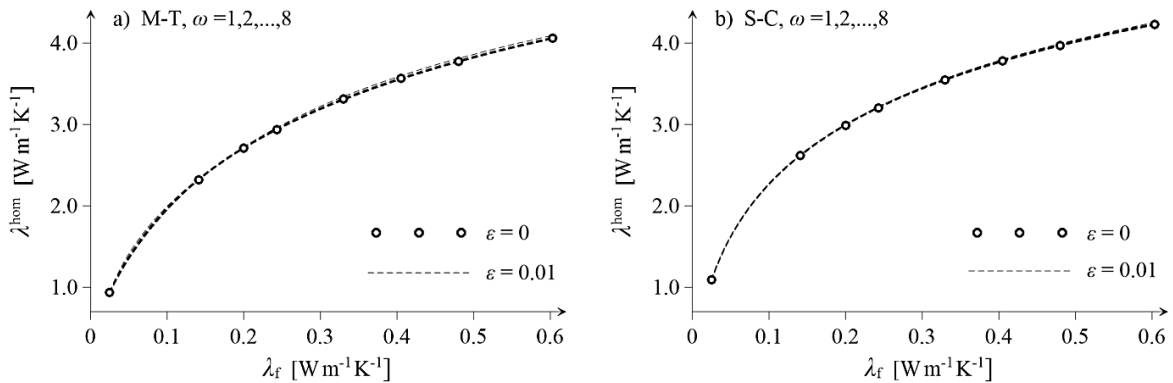
Rys. 5.7. Funkcja $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla schematu S-C dla przykładowych ośmiu realizacji ω ; $\varepsilon = 0.05$

Wyraźnie widać, że wraz ze zwiększającą się wartością ε zidentyfikowane funkcje $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ coraz bardziej odbiegają od postaci takiej, jaka odpowiada rozwiązaniu idealnemu (bez „zaburzonych” danych wejściowych). Dodatkowo wraz ze zwiększającą się wartością ε funkcja $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ ma charakter coraz bardziej dyskretny i dla $\varepsilon = 0.05$ otrzymujemy rozwiązanie w postaci 2-3 dyskretnych „rodzin” wtrąceń. Ponadto, już dla $\varepsilon = 0.001$

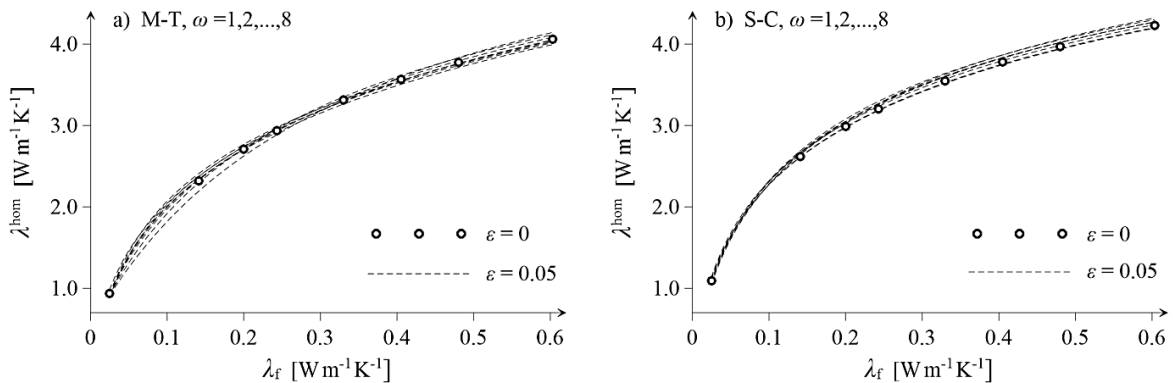
rozwiązanie jest niestabilne, ponieważ dla każdej realizacji ω otrzymujemy inną postać $M^{eq} \cdot \Delta$, dla obu schematów aproksymacyjnych. Widać zatem, że niewielkie błędy pomiarowe funkcji F^{mom} prowadzą do dużej niestabilności rozwiązania zagadnienia odwrotnego. Rosnący błąd rozwiązania (niezgodność zidentyfikowanej funkcji $M(\theta)$ z pierwotnie założoną) wraz ze wzrastającym błędem ε zauważyć można również w przypadku predykcji przewodności cieplnej. Zaprezentowano to na rys. 5.8 – rys. 5.10, gdzie uzyskane predykcje zestawiono wraz z funkcją F^{mom} wynikająca z założonej *a priori* funkcji ekwiwalentnej mikrostruktury bez uwzględniania błędów pomiarowych ($\varepsilon = 0$).



Rys. 5.8. F^{mom} dla przykładowych ośmiu realizacji ω dla schematu: a) M-T i b) S-C; $\varepsilon = 0.001$



Rys. 5.9. F^{mom} dla przykładowych ośmiu realizacji ω dla schematu: a) M-T i b) S-C; $\varepsilon = 0.01$



Rys. 5.10. F^{mom} dla przykładowych ośmiu realizacji ω dla schematu: a) M-T i b) S-C; $\varepsilon = 0.05$

Widać, że wraz ze wzrostem wartości ε pogarsza się jakość predykcji. Najważniejsze jednak są „drastyczne” zmiany funkcji ekwiwalentnej mikrostruktury w konsekwencji „niewielkich” zaburzeń danych wejściowych. Oznacza to, że zagadnienie odwrotne teorii homogenizacji, w jej sformułowaniu zaproponowanym w rozdziale 3, jest niestabilne. Metodę stabilizacji rozwiązania zagadnienia odwrotnego zaproponowano w następnym podrozdziale.

5.2. Stabilizacja rozwiązania zagadnienia odwrotnego

W 1923 roku Hadamard (Kress i in., 1989) postulował istnienie trzech warunków dla zagadnień matematycznych występujących w fizyce:

- rozwiązanie zagadnienia istnieje,
- rozwiązanie jest jednoznaczne,
- rozwiązanie jest stabilne – w sposób ciągły zależą od danych wejściowych.

Jeżeli dane zagadnienie spełnia powyższe trzy warunki, wtedy nazywane jest dobrze uwarunkowanym (ang. *well-posed*). W przeciwnym wypadku, gdy nie spełnia choćby jednego z nich, nazywane jest źle uwarunkowanym (ang. *ill-posed*).

Najczęściej fizyczne zagadnienia odwrotne nie spełniają trzeciego postulatu Hadamarda, tj. małe zmiany w danych wejściowych implikują duże zmiany rozwiązania, przez co zagadnienie odwrotne staje się źle uwarunkowane. Sformułowane w poprzednim rozdziale zagadnienie odwrotne teorii homogenizacji również jest źle uwarunkowane (patrz rozdział 5). Jeżeli funkcja makroskopowej odpowiedzi materiałowej (dane wejściowe) obarczona została nawet niewielkimi błędami pomiarowymi (jak pokazano w licznych przykładach obliczeniowych) skutkowało to dużymi błędami i niestabilnością funkcji ekwiwalentnej mikrostruktury (dane wyjściowe).

Aby ustabilizować rozwiązanie źle uwarunkowanego zagadnienia stosuje się techniki regularyzacji. Jedną z najstarszych i najbardziej popularnych jest technika regularyzacji Tichonowa. Została opracowana niezależnie przez Andrieja Tichonowa (Tichonow, 1963) i Davida Phillipsa (Phillips, 1962). David Phillips użył jej z powodzeniem do numerycznego rozwiązania równania Fredholma I-go rodzaju. W swojej pracy wskazał wiele innych metod rozwiązywania tego typu równań, ale zaznaczył, że żadna z nich nie jest skuteczna w przypadku, gdy prawa strona równania jest wyznaczona z pewnym nieznanym błędem.

5.2.1. Procedura regularyzacji Tichonowa

Dyskretyzacja liniowego problemu odwrotnego zazwyczaj sprowadza się do liniowego układu równań (Calvetti i in., 2000):

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \quad \mathbf{b} \in \mathbb{R}^m, \quad (5.2)$$

gdzie \mathbf{x} to wektor niewiadomych, \mathbf{b} to wektor danych wejściowych obarczony błędami pomiarowymi, a A to źle uwarunkowana macierz będąca „jądrem” K w przypadku równania Fredholma I-go rodzaju.

W swojej najprostszej postaci, regularyzacja Tichonowa zastępuje układ równań (5.2) poprzez następujący układ:

$$(A^T A + \mu I)\mathbf{x} = A^T \mathbf{b}, \quad (5.3)$$

gdzie I to macierz jednostkowa, natomiast $\mu \geq 0$ to parametr regularyzacji. Dla każdego $\mu > 0$, układ równań (5.3) ma jednoznaczne rozwiązanie:

$$\mathbf{x}_\mu = (A^T A + \mu I)^{-1} A^T \mathbf{b}. \quad (5.4)$$

Niezwykle ważnym, a jednocześnie bardzo trudnym, zadaniem jest wyznaczenie odpowiedniej wartości parametru regularyzacji μ . Do jego wyznaczenia stosować można różne techniki - najczęściej korzysta się jednak z metod bazujących na tzw. „krzywej L ” (ang. *L-curve*) (Lawson & Hanson, 1995). Jeśli φ jest rosnącą, monotoniczną funkcją (np. $\varphi(t) = t$ dla $t > 0$), wtedy dla $\mu > 0$ krzywą L zdefiniować możemy jako zbiór punktów odpowiadających różnym wartościom parametru μ , tj.:

$$L(\mu) = \left\{ \varphi\left(\|\mathbf{x}_\mu\|^2\right), \varphi\left(\|\mathbf{d}_\mu\|^2\right) \right\}, \quad (5.5)$$

gdzie \mathbf{d}_μ to różnica pomiędzy uzyskanym rozwiązaniem dla wartości μ , a danymi wejściowymi:

$$\mathbf{d}_\mu = A\mathbf{x}_\mu - \mathbf{b}. \quad (5.6)$$

Ponadto, w równaniu (5.5), symbol $\|\cdot\|$ oznacza normę euklidesową. Krzywa (5.5) nazywana jest krzywą L , ponieważ jej kształt, w większości przypadków, przypomina literę „ L ”. Po raz pierwszy użyli ją Lawson i Hanson (Lawson & Hanson, 1995), a jej własności obszernie opisane zostały przez Hansena (Hansen, 1998).

Jak wspomniano wyżej, w podejściu takim, najważniejsze jest wyznaczenie optymalnej wartości parametru regularyzacji. Hansen i O’Leary (Hansen & O’Leary, 1993) postulowali, że najbardziej optymalną wartością parametru regularyzacji (oznaczając ją będziemy jako μ_{opt}) jest ta, która „wyznacza” punkt załamania krzywej L . Użycie tak określonej wartości μ_{opt} , jako parametru regularyzacji, nie jest uniwersalne i nie gwarantuje zawsze najlepszego rozwiązania dla każdego zagadnienia. Zostanie to również pokazane w dalszej części tego rozdziału.

Opisana powyżej koncepcja regularyzacji Tichonowa wykorzystywała sformułowanie algebraiczne (5.2) zagadnienia odwrotnego. Sformułowanie optymalizacyjne (5.2) to:

$$\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2, \quad (5.7)$$

i w konsekwencji regularyzacji Tichonowa prowadzi do:

$$\min_{\mathbf{x}} \left(\|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2 + \mu \|\mathbf{x}\|^2 \right). \quad (5.8)$$

W przypadku analizowanego w niniejszej rozprawie zagadnienia odwrotnego regularyzacja Tichonowa prowadzi do następującej modyfikacji problemu (4.6), tj.:

$$\min_M \left\{ \int_{\lambda_f, \min}^{\lambda_f, \max} \left[\int_{\theta, \min}^{\theta, \max} P_f(\lambda_f, \theta) M(\theta) d\theta - g(\lambda_s, \lambda_f, \lambda^{\text{hom}}(\lambda_f)) \right]^2 d\lambda_f + \mu \cdot \int_{\theta, \min}^{\theta, \max} M^2(\theta) d\theta \right\}. \quad (5.9)$$

Zaproponowany w rozdziale 4.2 algorytm numerycznego rozwiązywania zagadnienia odwrotnego wykorzystywał, dodatkowo, w zagadnieniu optymalizacyjnym (4.6) funkcję wagi $1/g(\lambda_f)^2$. W dalszej części nadal wykorzystywane będzie pierwotne sformułowanie (4.6) z uwzględnieniem jednak regularyzacji Tichonowa, a zatem:

$$\min_M \left\{ \int_{\lambda_f, \min}^{\lambda_f, \max} \left[\frac{\int_{\theta, \min}^{\theta, \max} P_f(\lambda_f, \theta) M(\theta) d\theta - g(\lambda_s, \lambda_f, \lambda^{\text{hom}}(\lambda_f))}{g(\lambda_s, \lambda_f, \lambda^{\text{hom}}(\lambda_f))} \right]^2 d\lambda_f + \mu \cdot \int_{\theta, \min}^{\theta, \max} M^2(\theta) d\theta \right\}. \quad (5.10)$$

5.2.2. Implementacja regularyzacji Tichonowa do zagadnienia odwrotnego

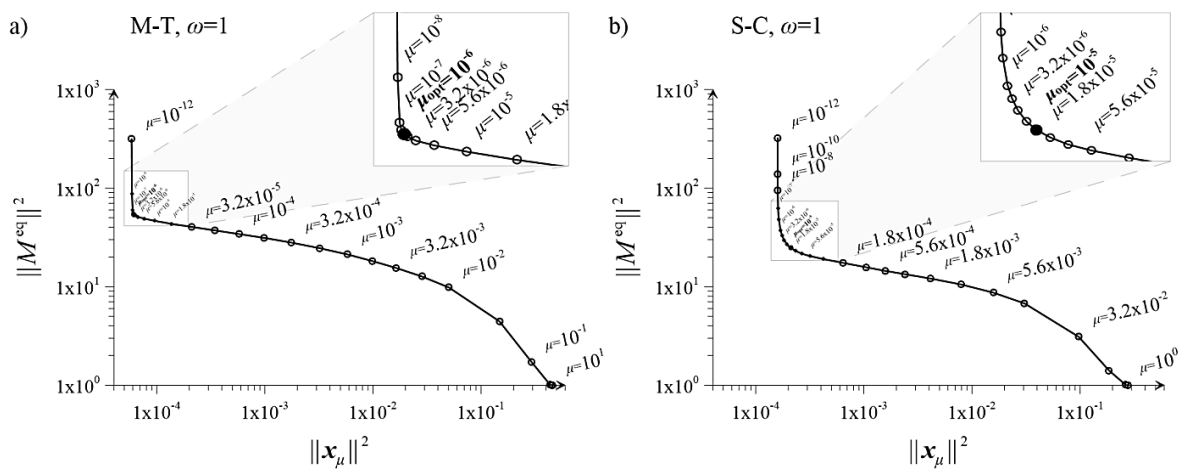
W celu ustabilizowania rozwiązania zagadnienia odwrotnego sformułowanego w rozdziale 3 zastosowano koncepcję regularyzacji Tichonowa przedstawioną w rozdziale 5.2.1. Implementacja techniki regularyzacji polega w tym przypadku na przekształceniu funkcji celu (4.7) w metodzie stochastycznej optymalizacji symulowanego wyżarzania (metodzie SA) do następującej postaci:

$$E_D = \frac{1}{n_f} \sum_{l=1}^{n_f} \left(\frac{\sum_{k=1}^{n_\theta} P_f(\lambda_{r,l}, \theta_k) M(\theta_k) \Delta_k - g(\lambda_{r,l})}{g(\lambda_{r,l})} \right)^2 + \mu \cdot \sum_{k=1}^{n_\theta} M^2(\theta_k) \Delta_k. \quad (5.11)$$

Obecność w powyższym równaniu dodatkowego członu, względem pierwotnej postaci (4.7), jest konsekwencją sformułowanej wcześniej techniki regularyzacji. Kluczowym aspektem jest oczywiście określenie optymalne wartości dla parametru regularyzacji, tj. μ_{opt} . Warto zauważyć, że dla wartości parametru regularyzacji $\mu=0$ powyższa funkcja „powraca” do pierwotnej postaci (4.7). Z kolei gdy $\mu \rightarrow \infty$ rozwiązanie funkcji M^{eq} zbiega do rozkładu równomiernego, tzn. wszystkie dyskretne „rodziny” wtrąceń są wówczas równo prawdopodobne. Korzystając z przekształconej funkcji zawierającej parametr regularyzacji (5.11) ponownie analizowano zagadnienie odwrotne jak z rozdziału 4.3.2. Obliczenia wykonano dla różnych wartości współczynnika regularyzacji μ , w zakresie od 10^{-12} do 10^2 ; przyjęto łącznie 28 różnych wartości μ . Poszukiwano funkcji $M^{eq} \cdot \Delta$ dla trzydziestu przykładowych realizacji ω , tj. sekwencji błędów pomiarowych nałożonych na funkcję F^{mom} (postać tej funkcji bez błędów pomiarowych prezentuje rys. 4.8b). Ponownie rozważono trzy przypadki różniące się wartościami błędu ε ($\varepsilon = 0.001$, $\varepsilon = 0.01$ oraz $\varepsilon = 0.05$).

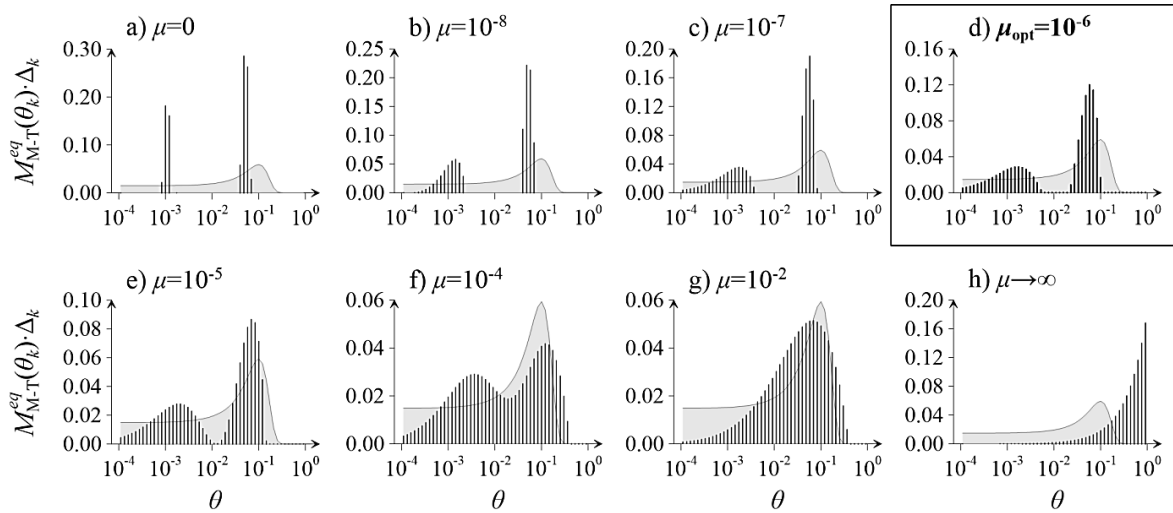
Należy tu podkreślić, że implementacja techniki regularyzacji do rozważanego zagadnienia odwrotnego ma w zasadzie dwa zasadnicze cele. Pierwszy z nich wiąże się z ustabilizowaniem rozwiązania, tzn. dążymy do tego, aby wyznaczyć taką ekwiwalentną mikrostrukturę, która niezależnie od losowej sekwencji błędów pomiarowych (realizacja ω) będzie pozostawać praktycznie niezmienna. Drugim celem jest to, aby tak określona mikrostruktura wciąż zapewniała dobrą predykcję przewodności cieplnej w zadanym zakresie przewodności cieplnej.

W dalszym ciągu zastosowano technikę określania optymalnej wartości parametru regularyzacji na podstawie krzywej L , a więc określono wartość μ_{opt} , jako odpowiadającą punktowi załamania krzywej L , zgodnie z propozycją Hansen i O’Leary (Hansen & O’Leary, 1993). Krzywą L , dla przykładowej realizacji $\omega = 1$ dla $\varepsilon = 0.05$, zaprezentowano na rys. 5.11. Przedstawiono wyniki uzyskane za pomocą obu schematów analitycznych, tj. Mori-Tanaki (rys. 5.11a) i samouzgodnionego pola (rys. 5.11b). Na wykresach zaprezentowano również przyjmowane w obliczeniach wartości parametru μ oraz określone wartości optymalne μ_{opt} .

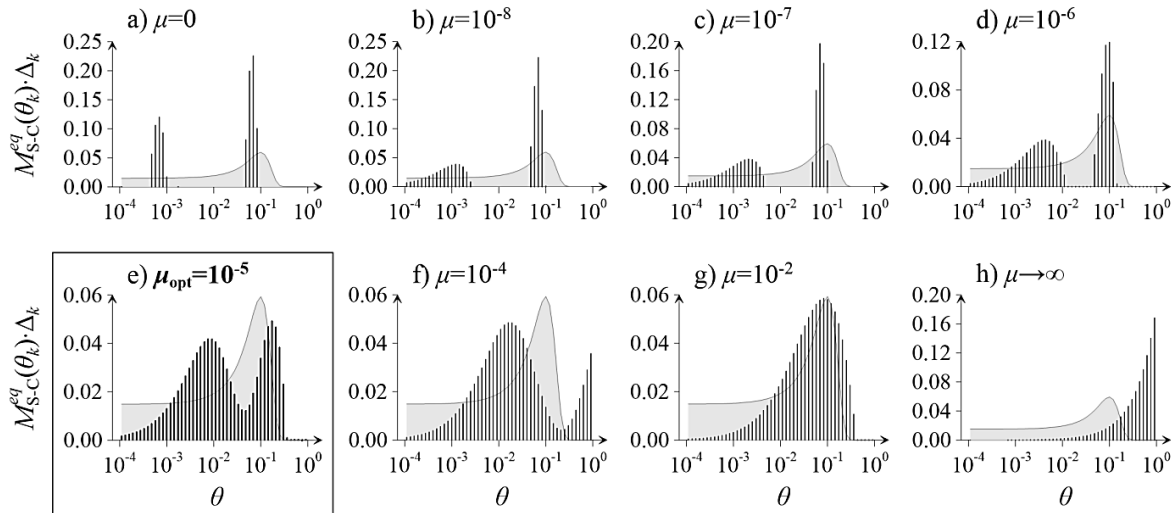


Rys. 5.11. Krzywa L dla przykładowej realizacji $\omega = 1$ dla schematu: a) M-T i b) S-C; $\varepsilon = 0.05$

Otrzymane (z uwzględnieniem techniki regularyzacji) funkcje $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla przykładowych ośmiu wartości μ przedstawiono na rys. 5.12 dla schematu M-T oraz na rys. 5.13 dla schematu S-C. Dla małych wartości μ , funkcje $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ mają bimodalny (w skali logarytmicznej) charakter, zbliżony do tego, jaki uzyskano w przypadku braku użycia techniki regularyzacji. W miarę wzrostu wartości μ rozwiązanie przybliża się do postaci „ciągłej” i ostatecznie dla $\mu \rightarrow \infty$, $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ zbiega do rozkładu jednostajnego (należy tu zwrócić uwagę, że kształt funkcji $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ nie jest podobny do klasycznego rozkładu równomiernego ze względu na logarytmiczny podział w odniesieniu do długości przedziałów Δ). Na poniższych wykresach wyróżniono (przedstawiono jako obramowane) funkcje $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ uzyskane dla μ_{opt} , które jak widać dość znacznie różnią się dla obu użytych schematów i wciąż odbiegają od postaci takiej, jak została pierwotnie założona.

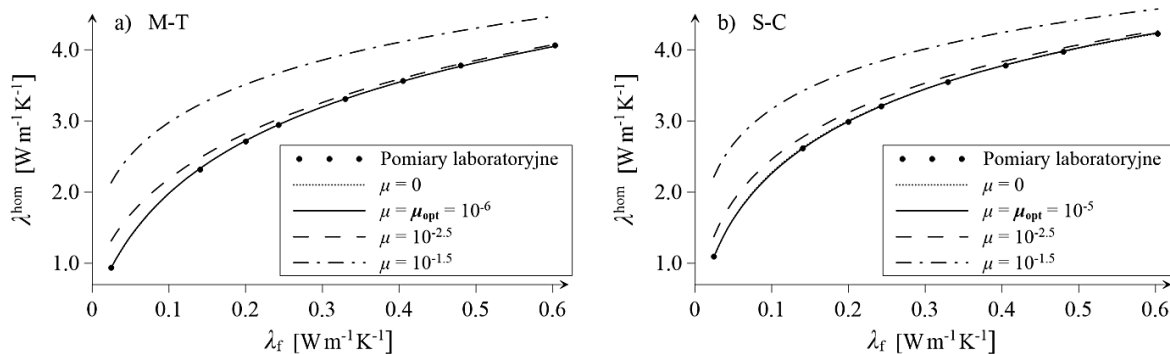


Rys. 5.12. Funkcja $M^{eq} \cdot \Delta$ dla przykładowych ośmiu współczynników regularyzacji dla schematu M-T; $\omega = 1$, $\varepsilon = 0.05$



Rys. 5.13. Funkcja $M^{eq} \cdot \Delta$ dla przykładowych ośmiu współczynników regularyzacji dla schematu S-C; $\omega = 1$, $\varepsilon = 0.05$

Uzyskane funkcje M^{eq} dla schematu M-T oraz S-C wykorzystane zostały następnie w sposób bezpośredni w celu wyznaczenia predykcji przewodności cieplnej rozważanego ośrodka (rys. 5.14). Dla małych wartości współczynnika regularyzacji, predykcja oraz założona funkcja F^{mom} praktycznie się ze sobą pokrywają. Natomiast po przekroczeniu pewnej wartości granicznej μ predykcja zaczyna co raz bardziej odbiegać od założonej postaci funkcji F^{mom} .

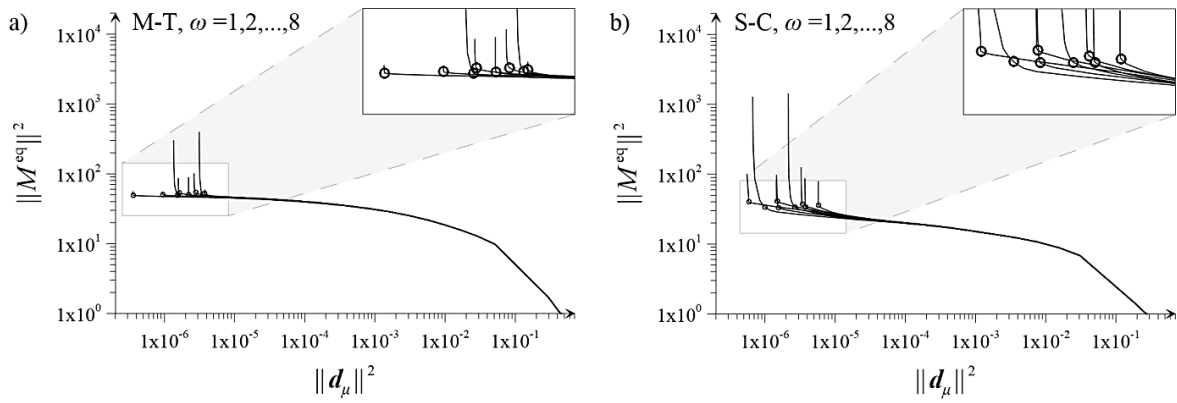


Rys. 5.14. Funkcja F^{mom} dla przykładowych czterech wartości μ ($\mu=0$ – brak regularyzacji) dla schematu: a) M-T i b) S-C; $\omega=1$, $\varepsilon=0.05$

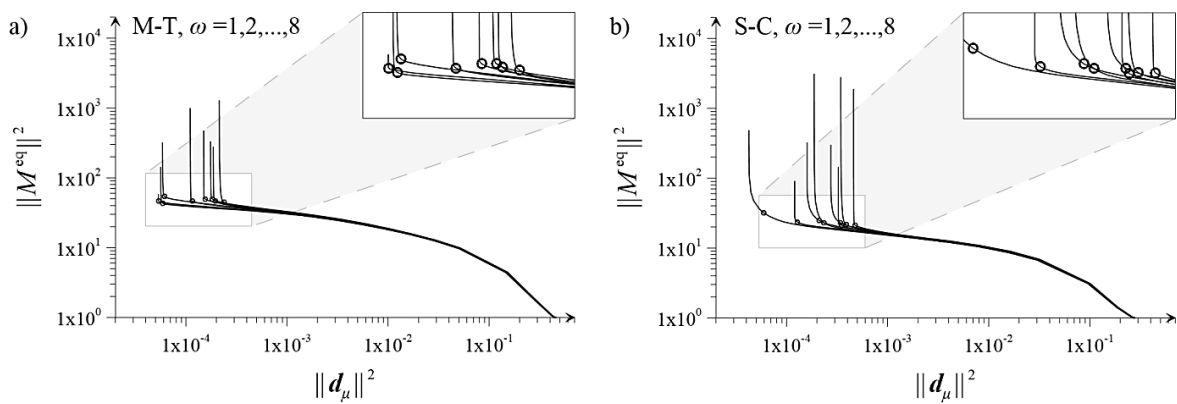
Na kolejnych wykresach prezentuje się wyniki zbiorcze dla ośmiu przykładowych realizacji błędów pomiarowych ω . Krzywe L , wraz z zaznaczonymi w miejscu załamania krzywych wartościami μ_{opt} , przedstawiono na rys. 5.15 dla $\varepsilon=0.001$, rys. 5.16 dla $\varepsilon=0.01$ i rys. 5.17 dla $\varepsilon=0.05$. Dla tak określonych wartości współczynnika regularyzacji μ_{opt} (tabela 5.1) funkcje $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla trzech rozważanych wartości ε zaprezentowano na rys. 5.19 – rys. 5.21 dla schematu M-T i rys. 5.22 – rys. 5.24 dla schematu S-C. Zestawienie krzywych L dla jednej przykładowej realizacji ω dla trzech różnych wartości błędu ε zobrazowano na rys. 5.18. Analizując wyniki dla wszystkich trzydziestu wykonanych realizacji ω można określić przedziały wartości μ_{opt} jakie otrzymano dla poszczególnych wartości ε :

- $10^{-8.75} - 10^{-7.25}$ dla schematu M-T i $10^{-7.5} - 10^{-6.5}$ dla schematu S-C dla $\varepsilon=0.001$,
- $10^{-6.5} - 10^{-5}$ dla schematu M-T i $10^{-5.75} - 10^{-4.25}$ dla schematu S-C dla $\varepsilon=0.01$,
- $10^{-4.25} - 10^{-3}$ dla schematu M-T i $10^{-3.75} - 10^{-2.75}$ dla schematu S-C dla $\varepsilon=0.05$.

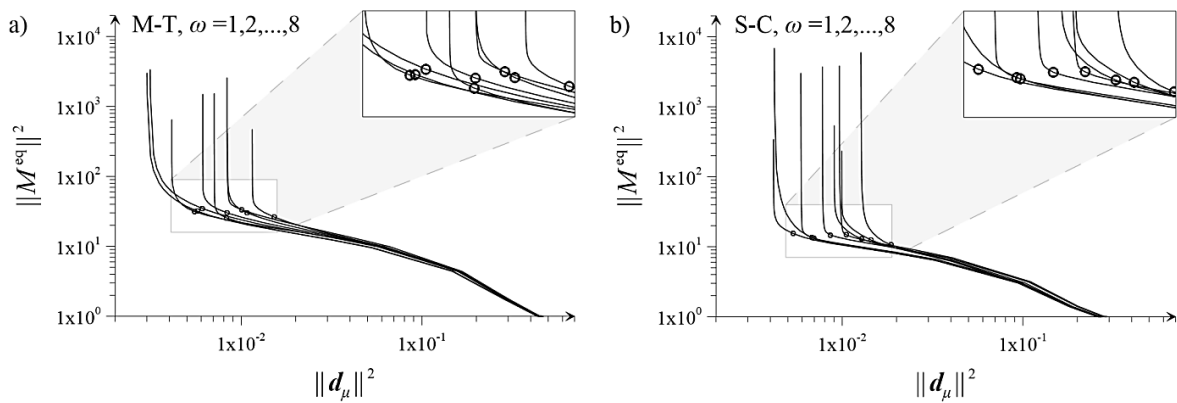
Widać, że wraz ze zwiększającą się wartością błędu ε wartość μ_{opt} również wzrasta. Ponadto, dla schematu M-T otrzymujemy niższe wartości μ_{opt} niż dla schematu S-C. Niemniej jednak nie da się jednoznacznie określić jednej/optymalnej wartości μ_{opt} określonej na podstawie załamania krzywych L , ponieważ wartość ta różni się w zależności od danej realizacji ω , błędu ε , a także użytego schematu aproksymacyjnego. Dodatkowo tak określone μ_{opt} nie stabilizuje rozwiązania zagadnienia odwrotnego ponieważ rozwiązanie $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ nadal różni się w zależności od danej realizacji błędów pomiarowych (rys. 5.19 – rys. 5.24). Oczywiście, różnica ta jest znacznie mniejsza niż w przypadku braku użycia techniki regularyzacji (rys. 5.2 – rys. 5.7).



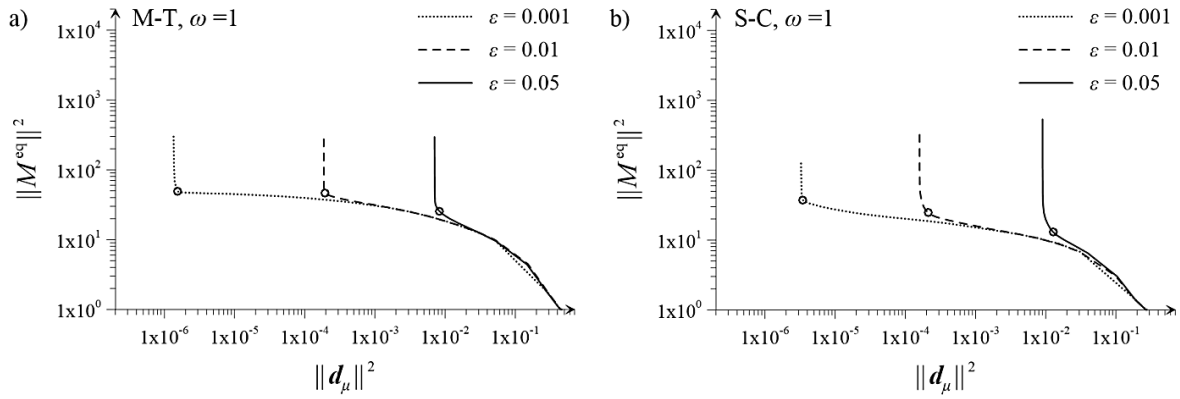
Rys. 5.15. Krzywa L dla przykładowych ośmiu realizacji ω dla schematu: a) M-T i b) S-C;
 $\varepsilon = 0.001$



Rys. 5.16. Krzywa L dla przykładowych ośmiu realizacji ω dla schematu: a) M-T i b) S-C;
 $\varepsilon = 0.01$



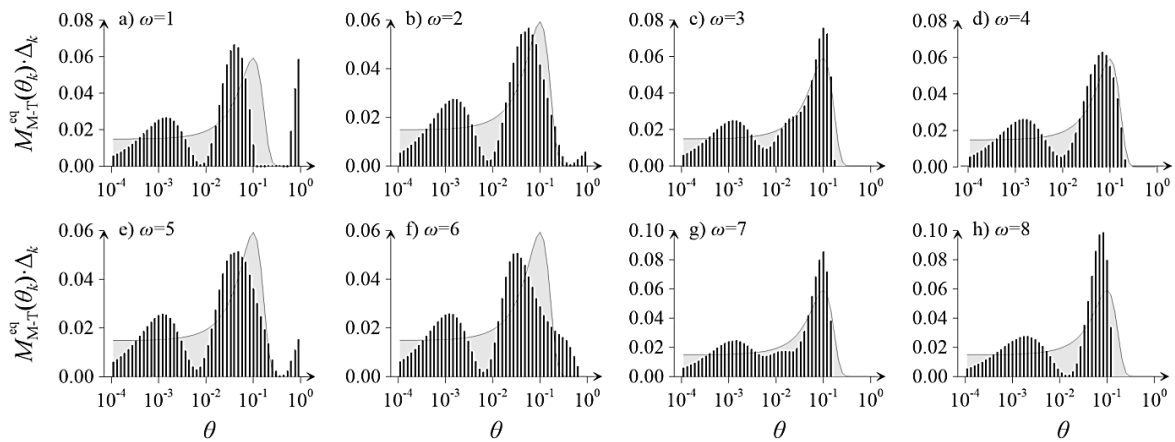
Rys. 5.17. Krzywa L dla przykładowych ośmiu realizacji ω dla schematu: a) M-T i b) S-C;
 $\varepsilon = 0.05$



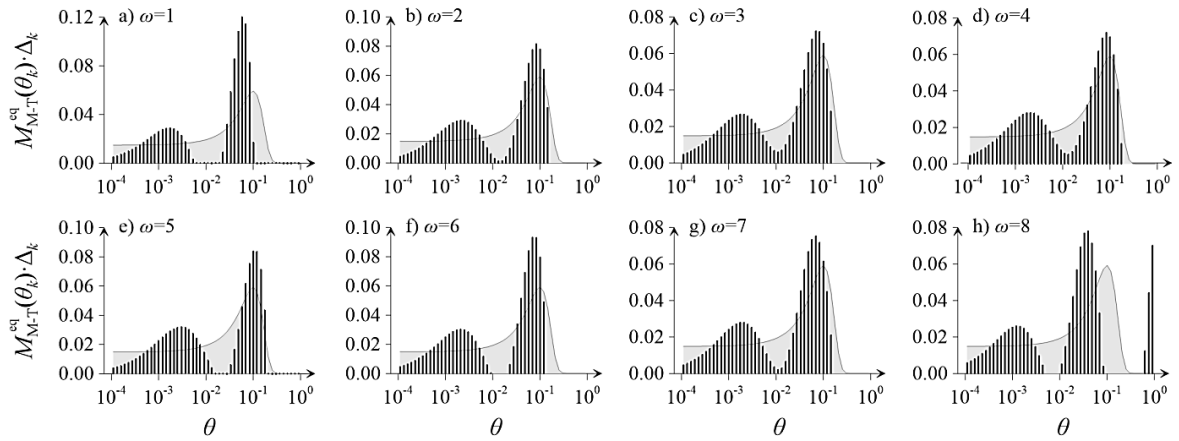
Rys. 5.18. Krzywa L dla jednej przykładowej realizacji ω dla schematu: a) M-T i b) S-C; dla trzech wartości błędu ε , tj. $\varepsilon = 0.001$, $\varepsilon = 0.01$ oraz $\varepsilon = 0.05$

Tabela 5.1. Wartość współczynnika regularyzacji μ_{opt} określona w miejscu załamania krzywej L dla ośmiu przykładowych realizacji ω dla trzech rozważanych wartości ε

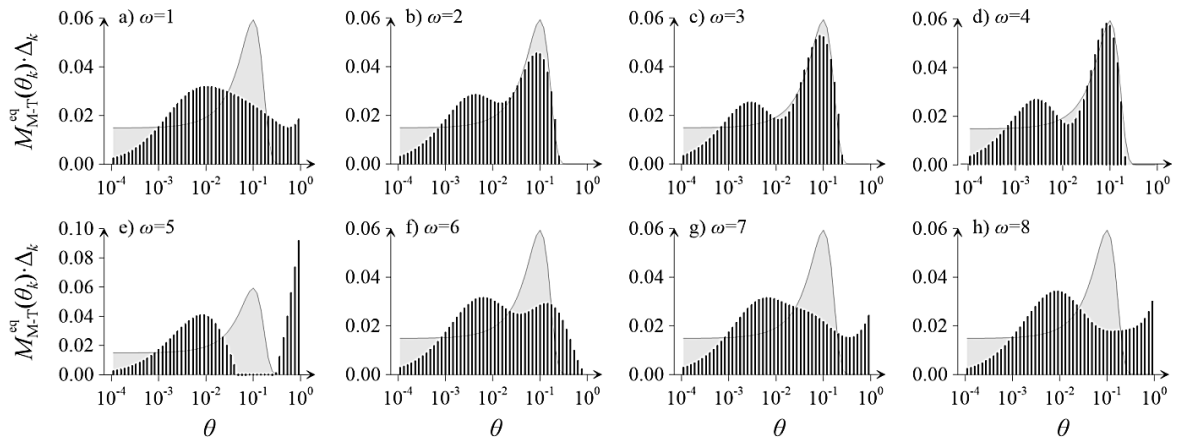
ω	Schemat M-T			Schemat S-C		
	$\varepsilon = 0.001$	$\varepsilon = 0.01$	$\varepsilon = 0.05$	$\varepsilon = 0.001$	$\varepsilon = 0.01$	$\varepsilon = 0.05$
1	$10^{-7.25}$	$10^{-6.00}$	$10^{-3.50}$	$10^{-7.00}$	$10^{-5.00}$	$10^{-3.00}$
2	$10^{-7.50}$	$10^{-6.00}$	$10^{-3.75}$	$10^{-7.25}$	$10^{-4.75}$	$10^{-2.75}$
3	$10^{-7.25}$	$10^{-5.25}$	$10^{-3.75}$	$10^{-7.00}$	$10^{-4.75}$	$10^{-3.00}$
4	$10^{-7.50}$	$10^{-5.50}$	$10^{-3.75}$	$10^{-7.00}$	$10^{-4.75}$	$10^{-3.25}$
5	$10^{-7.50}$	$10^{-5.75}$	$10^{-3.50}$	$10^{-7.25}$	$10^{-5.75}$	$10^{-3.25}$
6	$10^{-7.25}$	$10^{-5.50}$	$10^{-3.50}$	$10^{-7.50}$	$10^{-5.00}$	$10^{-3.25}$
7	$10^{-7.50}$	$10^{-5.50}$	$10^{-3.50}$	$10^{-7.00}$	$10^{-4.75}$	$10^{-3.50}$
8	$10^{-7.75}$	$10^{-6.50}$	$10^{-3.25}$	$10^{-7.50}$	$10^{-5.25}$	$10^{-3.25}$



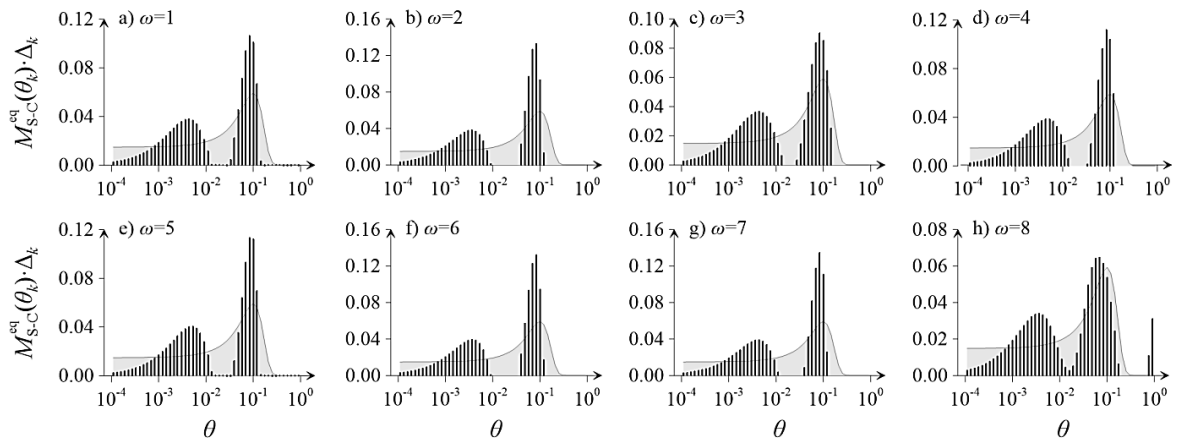
Rys. 5.19. Funkcja $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla schematu M-T dla przykładowych ośmiu realizacji błędów pomiarowych funkcji F^{mom} dla optymalnego współczynnika regularyzacji μ_{opt} ; $\varepsilon = 0.001$



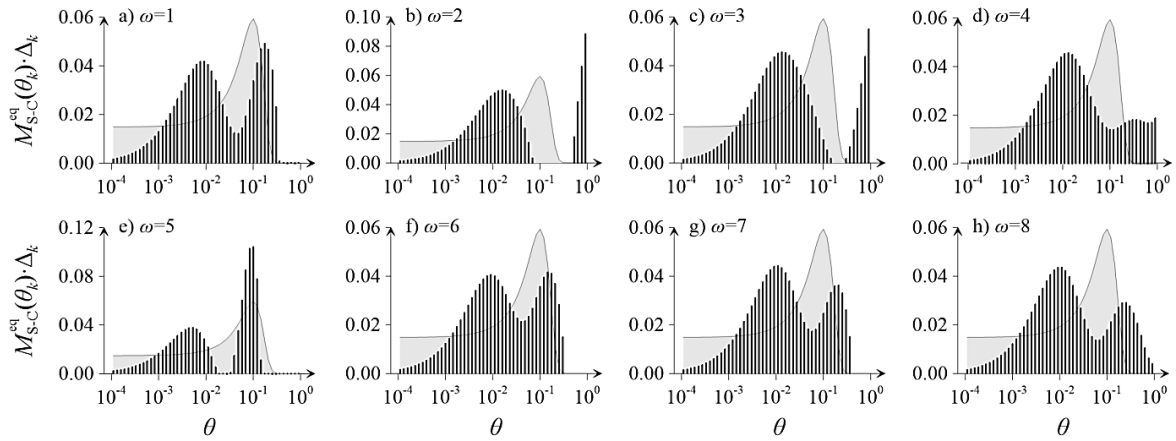
Rys. 5.20. Funkcja $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla schematu M-T dla przykładowych ośmiu realizacji błędów pomiarowych funkcji F^{mom} dla optymalnego współczynnika regularyzacji μ_{opt} ; $\varepsilon = 0.01$



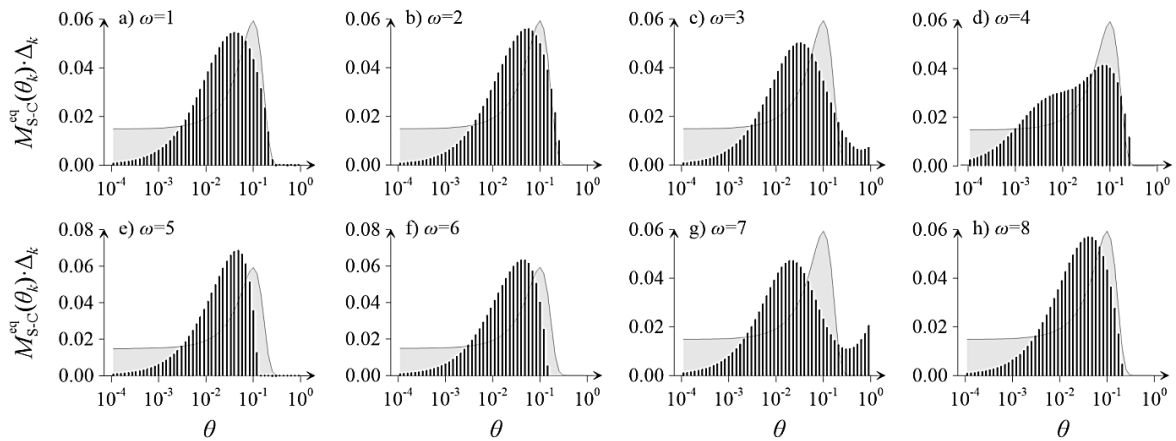
Rys. 5.21. Funkcja $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla schematu M-T dla przykładowych ośmiu realizacji błędów pomiarowych funkcji F^{mom} dla optymalnego współczynnika regularyzacji μ_{opt} ; $\varepsilon = 0.05$



Rys. 5.22. Funkcja $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla schematu S-C dla przykładowych ośmiu realizacji błędów pomiarowych funkcji F^{mom} dla optymalnego współczynnika regularyzacji μ_{opt} ; $\varepsilon = 0.001$

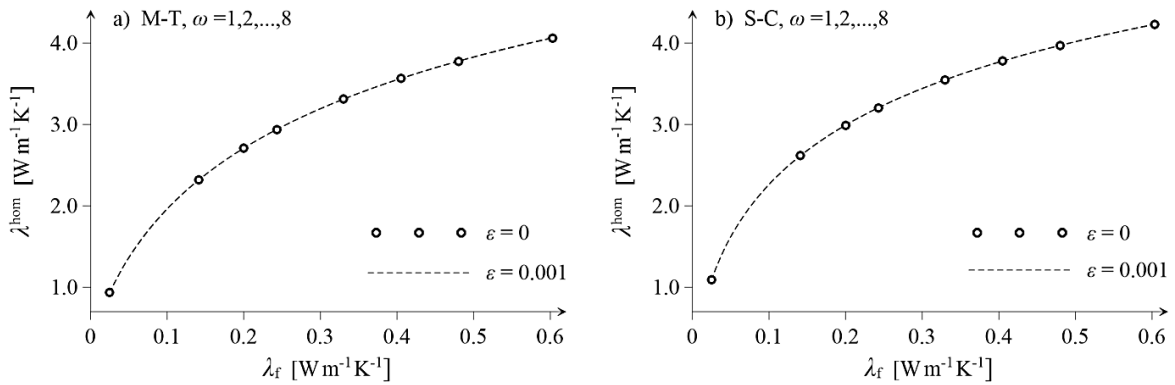


Rys. 5.23. Funkcja $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla schematu S-C dla przykładowych ośmiu realizacji błędów pomiarowych funkcji F^{mom} dla optymalnego współczynnika regularyzacji μ_{opt} ; $\varepsilon = 0.01$

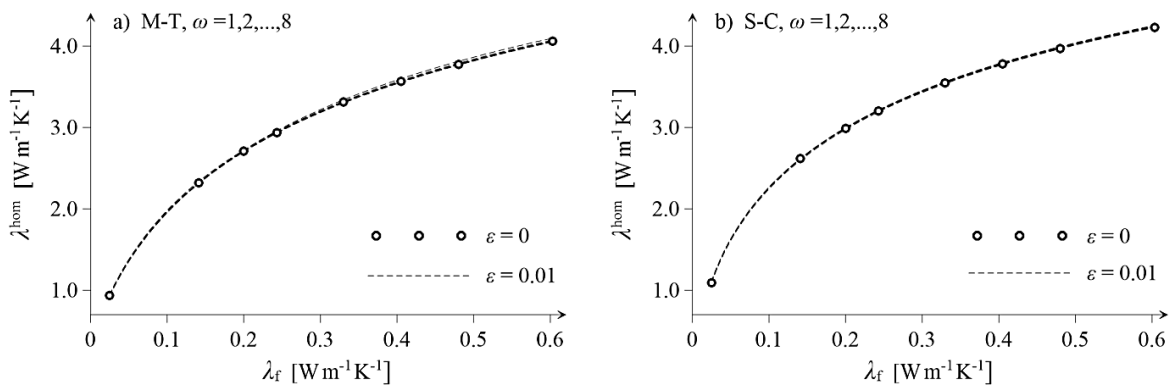


Rys. 5.24. Funkcja $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla schematu S-C dla przykładowych ośmiu realizacji błędów pomiarowych funkcji F^{mom} dla optymalnego współczynnika regularyzacji μ_{opt} ; $\varepsilon = 0.05$

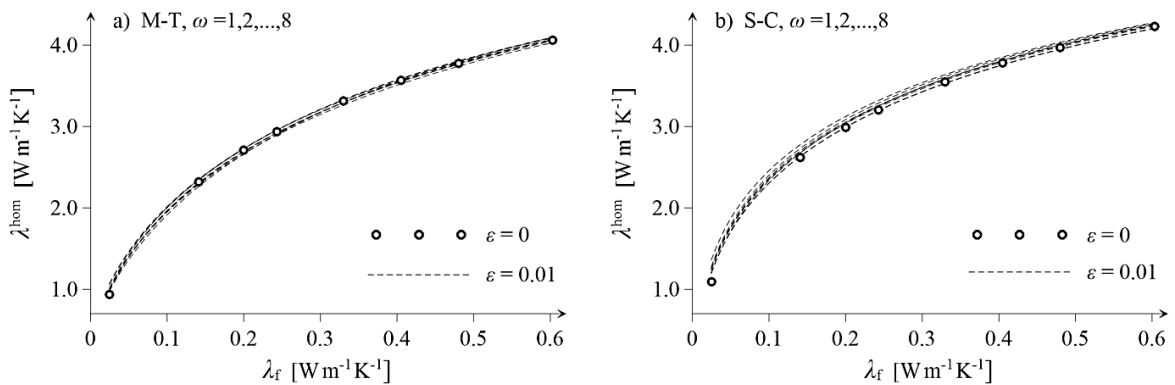
W kolejnym kroku na podstawie funkcji M^{eq} dla optymalnych współczynników regularyzacji μ_{opt} wyznaczono funkcje makroskopowej odpowiedzi materiałowej F^{mom} (rys. 5.25 dla $\varepsilon = 0.001$, rys. 5.26 dla $\varepsilon = 0.01$ oraz rys. 5.27 dla $\varepsilon = 0.05$). Porównując uzyskane wyniki dla $\mu = \mu_{\text{opt}}$ (rys. 5.27) z wynikami bez regularyzacji dla $\mu = 0$ (rys. 5.10) widać również poprawę stabilizacji w funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej.



Rys. 5.25. F^{mom} dla optymalnych współczynników regularyzacji μ_{opt} dla przykładowych ośmiu realizacji ω dla schematu: a) M-T i b) S-C; $\varepsilon = 0.001$



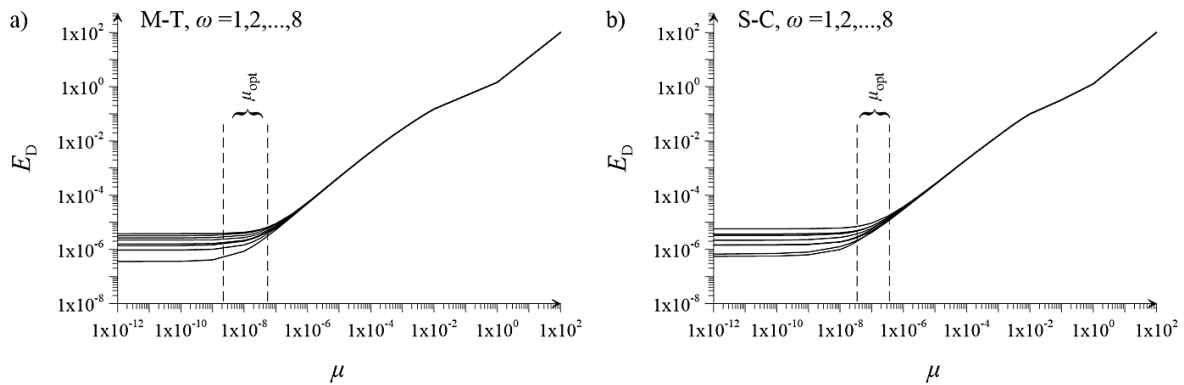
Rys. 5.26. F^{mom} dla optymalnych współczynników regularyzacji μ_{opt} dla przykładowych ośmiu realizacji ω dla schematu: a) M-T i b) S-C; $\varepsilon = 0.01$



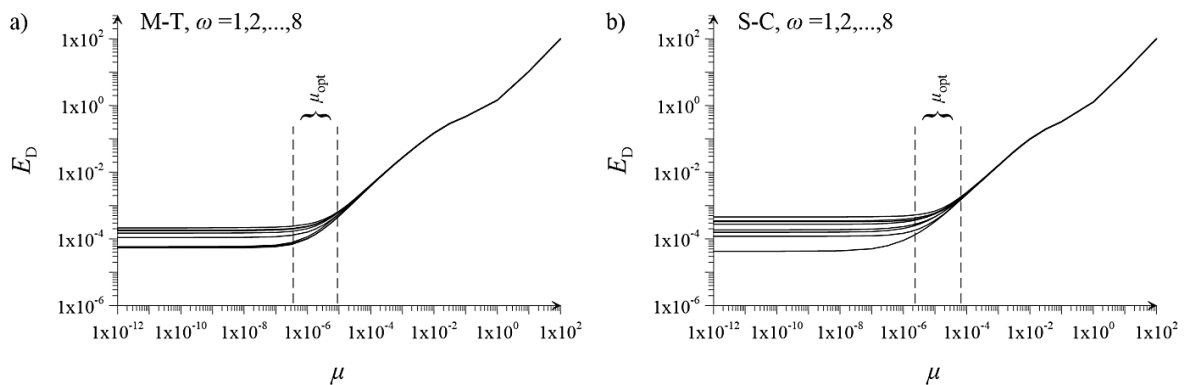
Rys. 5.27. F^{mom} dla optymalnych współczynników regularyzacji μ_{opt} dla przykładowych ośmiu realizacji ω dla schematu: a) M-T i b) S-C; $\varepsilon = 0.05$

Wykonano również obliczenia, w których analizowano zachowanie się (w sensie uzyskiwanych wartości) funkcji celu E_D (5.11) w zależności od przyjętej wartości parametru μ . Uzyskane wartości funkcji celu względem współczynnika regularyzacji μ , dla ośmiu przykładowych realizacji ω , przedstawiono na rys. 5.28 – rys. 5.30. Wartości E_D odpowiadają oczywiście wartości minimalnej, a więc określonej w ostatniej iteracji procesu optymalizacji. Dodatkowo na wykresach tych przedstawiono również przedziały

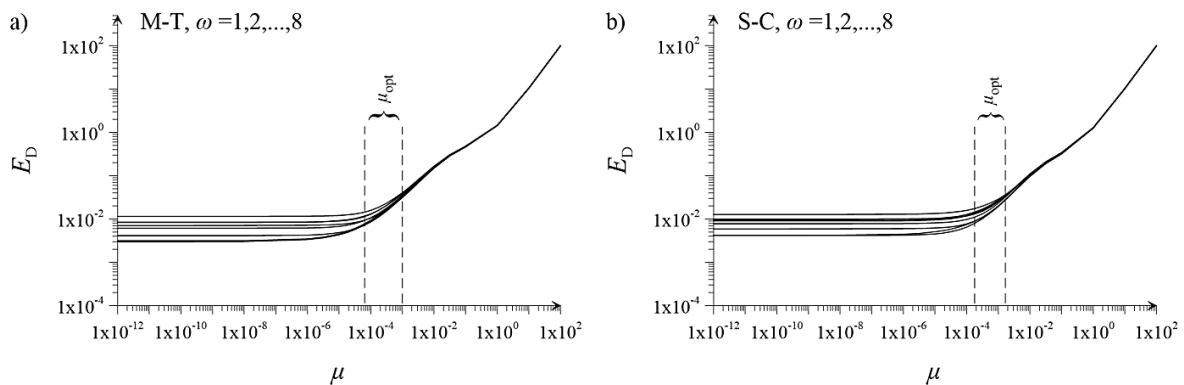
wartości parametru μ_{opt} wyznaczonych na podstawie identyfikacji miejsc załamania krzywych L . Jak łatwo zauważyć, w obu przypadkach (tj. schemat M-T oraz S-C) wartości funkcji celu E_D stabilizują się dla nieco większych wartości parametru μ , niż te określone na podstawie krzywej L . I tak, np. w przypadku schematu M-T dla $\varepsilon = 0.001$ (rys. 5.28a) zakres optymalnych wartości μ (określonych na podstawie krzywej L) wynosi od $10^{-8.75}$ do $10^{-7.25}$. Tymczasem, stabilność wartości funkcji celu zapewnia dopiero wartość parametru regularyzacji nie mniejsza niż $\sim 10^{-6.5}$.



Rys. 5.28. Wartość E_D względem współczynnika regularyzacji μ dla przykładowych ośmiu realizacji ω dla schematu: a) M-T i b) S-C; $\varepsilon = 0.001$



Rys. 5.29. Wartość E_D względem współczynnika regularyzacji μ dla przykładowych ośmiu realizacji ω dla schematu: a) M-T i b) S-C; $\varepsilon = 0.01$



Rys. 5.30. Wartość E_D względem współczynnika regularyzacji μ dla przykładowych ośmiu realizacji ω dla schematu: a) M-T i b) S-C; $\varepsilon = 0.05$

Podsumowując, użycie wartości parametru regularyzacji μ_{opt} – jako wartości wyznaczającej punkt załamania krzywej L – dla rozważanego w niniejszej pracy zagadnienia odwrotnego częściowo stabilizuje rozwiązanie. Jednakże, stabilizacja wciąż daleka jest od oczekiwań Autora pracy. Dodatkowo, określona na podstawie krzywej L wartość μ_{opt} różni się w zależności od danej realizacji ω , błędu ε , a także użytego schematu aproksymacyjnego. Powoduje to, iż nie można określić jednej (ogólnej) optymalnej wartości parametru regularyzacji dla rozważanego zagadnienia. W zasadzie, każda realizacja błędów pomiarowych wymagałaby osobnych analiz i dobierania dedykowanej do danej realizacji wartości μ_{opt} . Wobec powyższego, w kolejnym podrozdziale proponuje się autorską metodę określenia optymalnej wartości współczynnika regularyzacji, dedykowanej rozwiązywaniu zagadnieniu odwrotnemu teorii homogenizacji.

5.2.3. Autorska metoda wyznaczania optymalnej wartości współczynnika regularyzacji

Jak wspomniano już wcześniej, najbardziej pożądanym rozwiązaniem zagadnienia odwrotnego jest określenie stabilnej funkcji M^{eq} , która zapewnia jednocześnie dobrą predykcję makroskopowej przewodności cieplnej ośrodka (w sensie zgodności z założoną funkcją makroskopowej odpowiedzi materiałowej (F^{mom})). Pokazano, że stosując technikę regularyzacji Tichonowa, jeżeli współczynnik regularyzacji rośnie, to rozwiązanie, owszem, staje się coraz bardziej stabilne, niestety kosztem rosnącego błędu predykcji funkcji F^{mom} . Problem regularyzacji sprowadza się zatem do określenia optymalnej wartości parametru regularyzacji, a więc takiej, która zapewni rozsądny kompromis pomiędzy predykcją funkcji F^{mom} a stabilnością rozwiązania. Jak pokazano w poprzednim podrozdziale, jest to zadanie trudne, a współczynnik regularyzacji określany na podstawie punktu załamania krzywej L , w przypadku rozważanego zagadnienia odwrotnego, nie przynosi zadowalających rezultatów.

Zwróćmy jednak uwagę na fakt, iż w sformułowanym tutaj zagadnieniu poszukujemy funkcji M^{eq} , która jest funkcją „ekwiwalentnej” (wirtualnej) mikrostruktury. Wobec tego zagadnienie to różni się w znacznym stopniu od powszechnie znanych zagadnień odwrotnych. Dla przykładu, w mikrotomografii komputerowej poszukujemy morfologii badanego materiału i interesuje nas tylko i wyłącznie dobra rekonstrukcja jej

rzeczywistej mikrostruktury. Z kolei w rozważanym w tej pracy zagadnieniu interesuje nas głównie to, aby zidentyfikowana funkcja M^{eq} zapewniała dobrą predykcję funkcji F^{mom} . Nie poszukujemy zatem rzeczywistej mikrostruktury ośrodka, ale takiej, która zapewnia dobrą predykcję jego odpowiedzi makroskopowej. Innymi słowy, nie interesuje nas tak naprawdę konkretna postać funkcji M^{eq} , a raczej jej efekt, w sensie dobrej predykcji przewodności cieplnej ośrodka.

We wcześniejszych rozważaniach postulowano, że jeśli wartość funkcji celu zbiega do zera ($E_D \rightarrow 0$), to określona funkcja M staje się poszukiwaną funkcją ekwiwalentnej mikrostruktury M^{eq} . Jeżeli jednak funkcja F^{mom} , a więc np. pomiary laboratoryjne, obarczone są pewnym błędem pomiarowym, to wtedy wartość E_D zbiega do pewnej, względnie małej wartości. Wobec tego, można określić pewną wartość graniczną dla funkcji celu, nazwijmy ją E_D^* , poniżej, której rozwiązanie zagadnienia odwrotnego uznaje się jako ekwiwalentną mikrostrukturę, tj.:

$$M \rightarrow M^{eq} \Leftarrow E_D \leq E_D^*. \quad (5.12)$$

Wobec powyższego, jeżeli określimy wartość graniczną błędu rozwiązania (E_D^*), to wówczas można postulować, że optymalna wartość współczynnika regularyzacji μ^*_{opt} , to taka dla której spełniona jest następująca zależność:

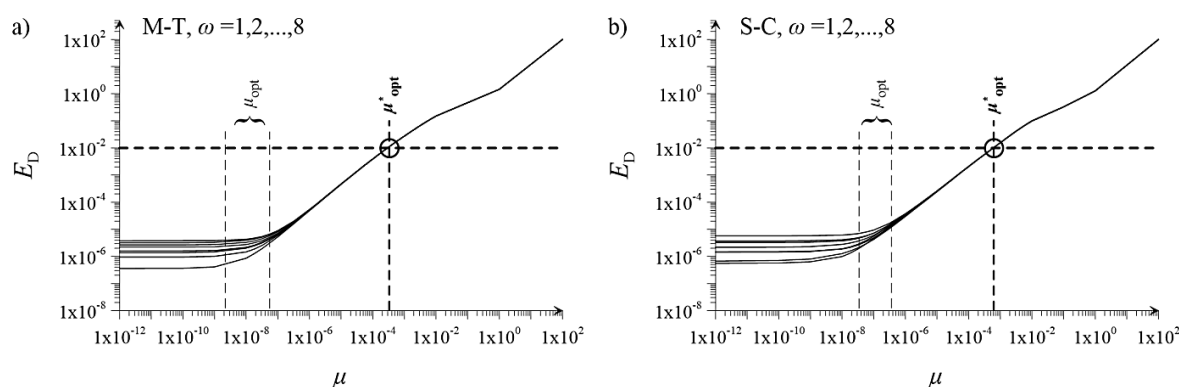
$$\mu \rightarrow \mu^*_{opt} \Leftarrow E_D(\mu^*_{opt}) = E_D^*. \quad (5.13)$$

Definiując w ten sposób zmodyfikowaną wartość współczynnika regularyzacji, μ^*_{opt} , otrzymamy możliwie najbardziej stabilne rozwiązanie M^{eq} , jednocześnie nie przekraczające założonego błędu dla predykcji makroskopowej przewodności cieplnej ośrodka (czyli dopasowania do zadanej funkcji F^{mom}). W dalszych rozważaniach weryfikuje się takie podejście.

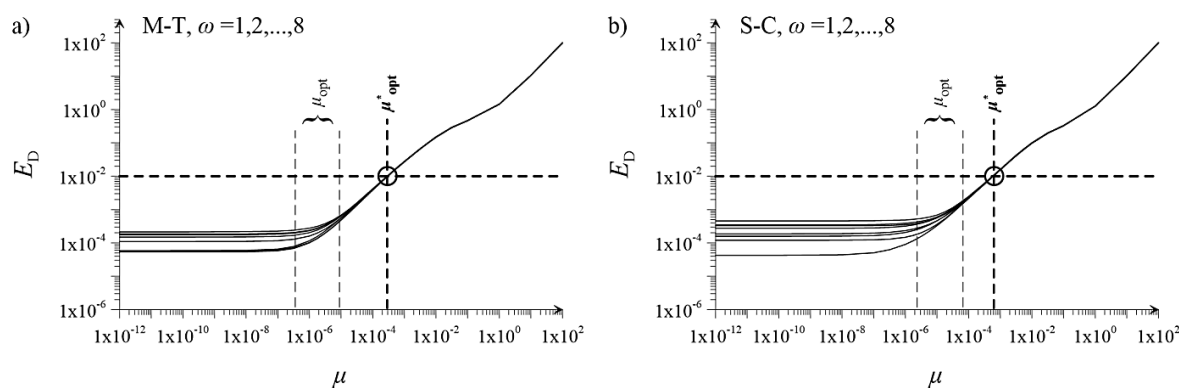
Przyjmuje się, że graniczna wartość funkcji celu E_D^* wynosi 0.01. Następnie, dla tak przyjętego E_D^* określono μ^*_{opt} , o ile było to możliwe, dla poszczególnych wartości ε . Analizuje się ten sam przykład obliczeniowy, jak w przypadku rozważań prowadzonych techniką bazującą na krzywej L . Na rys. 5.31 ($\varepsilon = 0.001$) oraz na rys. 5.32 ($\varepsilon = 0.01$) przedstawiono funkcję $E_D(\mu)$ dla ośmiu przykładowych realizacji ω z naniesioną wartością E_D^* i określonymi wartościami μ^*_{opt} . Dla $\varepsilon = 0.001$ i $\varepsilon = 0.01$ otrzymano $\mu^*_{opt} = 10^{-3.5}$ dla schematu M-T i $\mu^*_{opt} = 10^{-3.25}$ dla schematu S-C. Dodatkowo, dla porównania, na

wykresach przedstawia się też zakresy optymalnej wartości parametru regularyzacji określone w poprzednim podrozdziale, gdzie bazowano na analizie krzywej L .

Dla $\varepsilon = 0.05$, w przypadku obu schematów aproksymacyjnych, wartość E_D , dla większości z analizowanych realizacji błędów pomiarowych ω , przekroczyła wartość dopuszczalną E_D^* . Wynika z tego, że jeżeli funkcja F^{mom} jest obciążona zbyt dużymi błędami pomiarowymi, wówczas nie jest możliwe znalezienie stabilnego rozwiązania M^{eq} , które z zadowalającym błędem potrafiłoby odtworzyć parametry makroskopowe ośrodka, niezależnie od płynu wypełniającego jego przestrzeń porową.



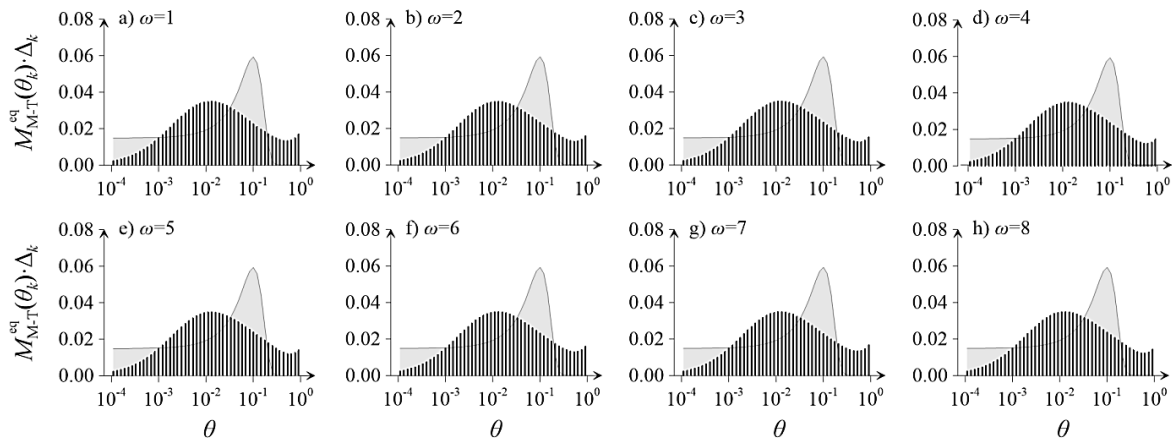
Rys. 5.31. Wartość E_D względem współczynnika regularyzacji μ dla przykładowych ośmiu realizacji ω dla schematu: a) M-T i b) S-C; $\varepsilon = 0.001$



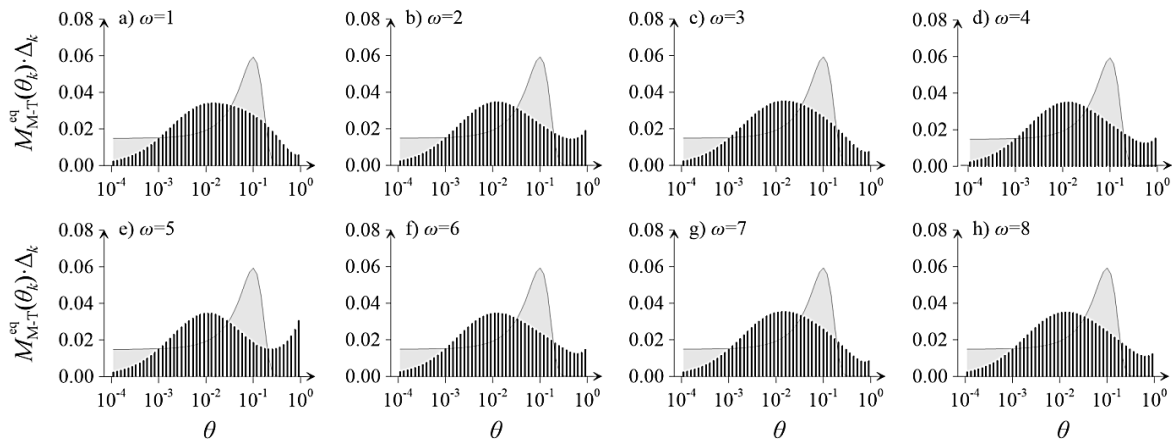
Rys. 5.32. Wartość E_D względem współczynnika regularyzacji μ dla przykładowych ośmiu realizacji ω dla schematu: a) M-T i b) S-C; $\varepsilon = 0.01$

Dla tak określonych μ^*_{opt} funkcje $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla $\varepsilon = 0.001$ oraz $\varepsilon = 0.01$ zaprezentowano na rys. 5.33 – rys. 5.34 i rys. 5.35 – rys. 5.36, odpowiednio, dla schematu M-T i S-C. Oczywiście, zidentyfikowane funkcje odbiegają od założonej postaci funkcji ekwiwalentnej mikrostruktury. Różnią się również między sobą w zależności od użytego schematu aproksymacyjnego, tj. M-T lub S-C. Jednakże można zauważyć, że dla obu użytych schematów aproksymacyjnych, funkcje $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$, niezależnie od danej realizacji ω , są stabilne.

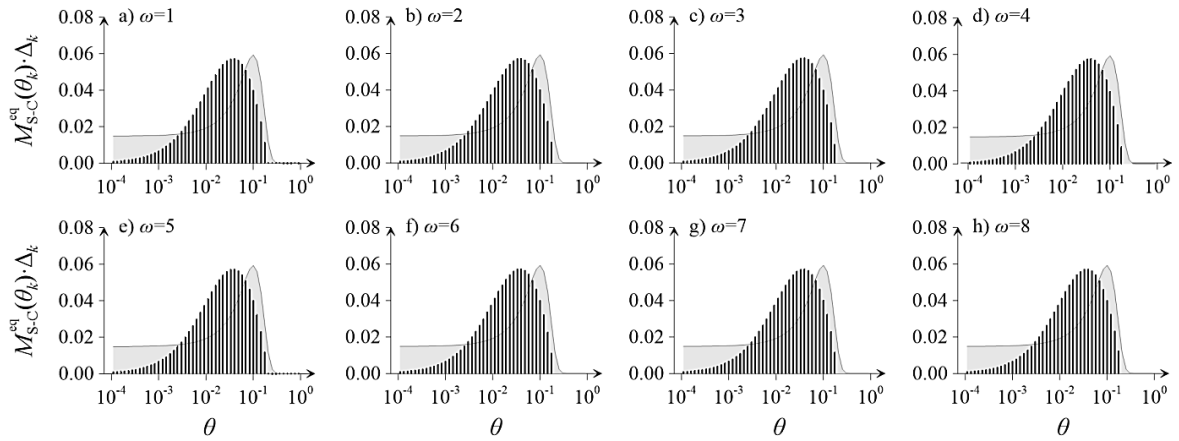
W kolejnym kroku na podstawie funkcji $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla zmodyfikowanego współczynnika regularyzacji (μ^*_{opt}) określono predykcje przewodności cieplnej celem sprawdzenia czy uzyskane mikrostruktury zapewniają zgodność predykcji z założoną funkcją F^{mom} . Wyniki zaprezentowano na rys. 5.37 i rys. 5.38, odpowiednio, dla $\varepsilon = 0.001$ i $\varepsilon = 0.01$. Widać, że mimo iż wartości μ^*_{opt} są znacząco wyższe niż μ_{opt} (a więc te określone na podstawie krzywej L) to dopasowanie do funkcji F^{mom} nadal ma wysoką zgodność, jest prawie idealne.



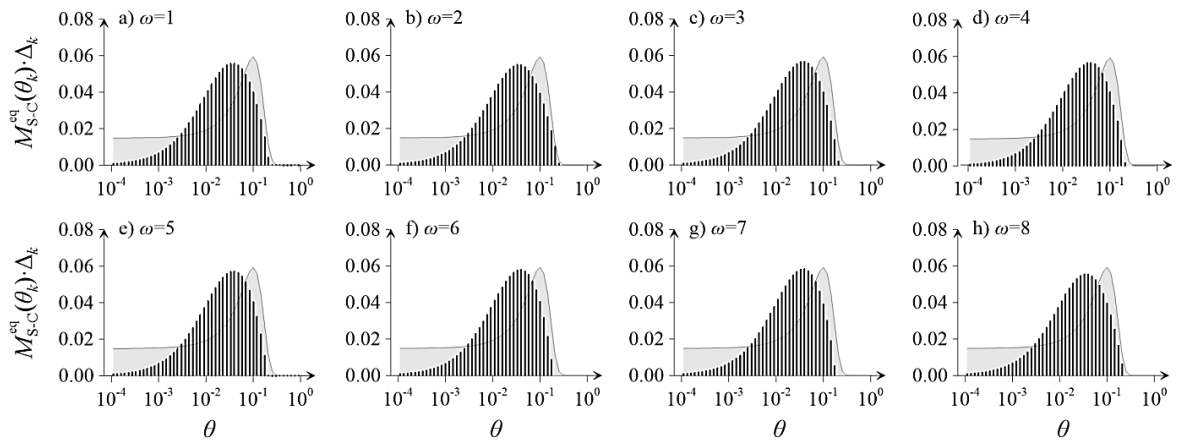
Rys. 5.33. Funkcja $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla schematu M-T dla przykładowych ośmiu realizacji błędów pomiarowych funkcji F^{mom} dla zmodyfikowanego współczynnika regularyzacji μ^*_{opt} ; $\varepsilon = 0.001$



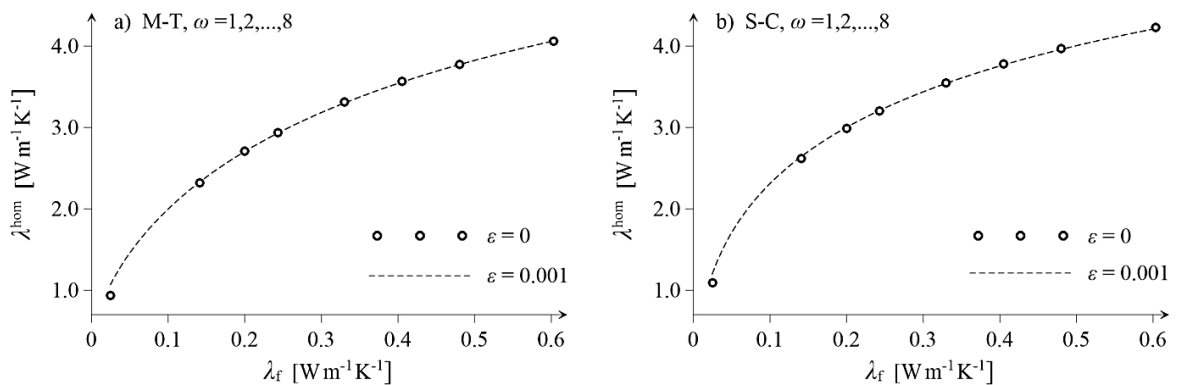
Rys. 5.34. Funkcja $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla schematu M-T dla przykładowych ośmiu realizacji błędów pomiarowych funkcji F^{mom} dla zmodyfikowanego współczynnika regularyzacji μ^*_{opt} ; $\varepsilon = 0.01$



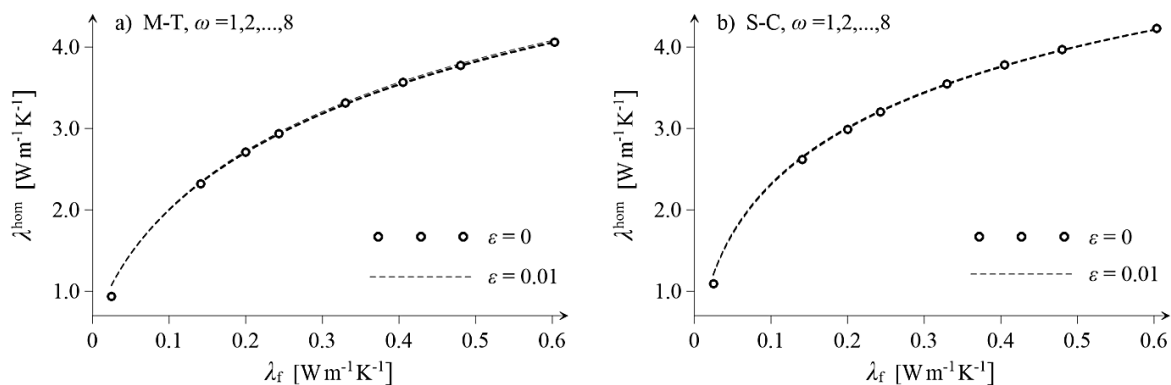
Rys. 5.35. Funkcja $M_{S-C}^{eq} \cdot \Delta$ dla schematu S-C dla przykładowych ośmiu realizacji błędów pomiarowych funkcji F^{mom} dla zmodyfikowanego współczynnika regularyzacji μ_{opt}^* ; $\varepsilon = 0.001$



Rys. 5.36. Funkcja $M_{S-C}^{eq} \cdot \Delta$ dla schematu S-C dla przykładowych ośmiu realizacji błędów pomiarowych funkcji F^{mom} dla zmodyfikowanego współczynnika regularyzacji μ_{opt}^* ; $\varepsilon = 0.01$



Rys. 5.37. F^{mom} dla zmodyfikowanego współczynnika regularyzacji μ_{opt}^* dla przykładowych ośmiu realizacji ω dla schematu: a) M-T i b) S-C; $\varepsilon = 0.001$



Rys. 5.38. F^{mom} dla zmodyfikowanego współczynnika regularyzacji μ_{opt}^* dla przykładowych ośmiu realizacji ω dla schematu: a) M-T i b) S-C; $\varepsilon = 0.01$

5.3. Podsumowanie

W niniejszym rozdziale pokazano, iż sformułowane w rozdziale 3 zagadnienie odwrotne teorii homogenizacji jest źle uwarunkowane (niestabilne), ponieważ niewielkie błędy w danych wejściowych implikują duże zmiany w rozwiązaniu. Wobec tego w celu ustabilizowania rozwiązania skorzystano z techniki regularyzacji Tichonowa.

Korzystając z techniki regularyzacji najważniejsze jest wyznaczenie optymalnej wartości parametru regularyzacji. W pracy (Hansen & O’Leary, 1993) autorzy postulowali, że najbardziej optymalną wartością parametru regularyzacji jest wartość, która „wyznacza” punkt załamania krzywej L . Nie mniej jednak procedura ta zastosowana do zagadnienia odwrotnego teorii homogenizacji nie przyniosła zadowalających rezultatów (patrz rozdział 5.2.2). Wobec tego, w rozdziale 5.2.3 przedstawiono zmodyfikowaną procedurę wyznaczenia najbardziej optymalnej wartości współczynnika regularyzacji wg zależności (5.13). Tak zdefiniowana zmodyfikowana wartość współczynnika regularyzacji, μ_{opt}^* , gwarantuje możliwie najbardziej stabilne rozwiązanie M^{eq} , jednocześnie nie przekraczające założonego błędu dla predykcji makroskopowej przewodności cieplnej ośrodka (czyli dopasowania do zadanej funkcji F^{mom}).

6. Ekwiwalentne mikrostruktury wybranych ośrodków porowatych

W niniejszym rozdziale prezentuje się zastosowanie sformułowanego wcześniej zagadnienia odwrotnego celem zidentyfikowania ekwiwalentnej mikrostruktury, w ujęciu analitycznych schematów aproksymacyjnych, dla wybranych mikrostruktur ośrodków porowatych.

W szczególności, w rozdziale 6.2 rozwiązuje się sekwencję zagadnień odwrotnych, w których poszukuje się funkcji ekwiwalentnej mikrostruktury dla cyfrowych reprezentacji wybranych mikrostruktur. W tym przypadku, funkcję makroskopowej odpowiedzi materiałowej, która jest daną w zagadnieniu odwrotnym, określono w sposób numeryczny, poprzez rozwiązanie sekwencji zagadnień brzegowych, w ramach obliczeniowej mikromechaniki.

W rozdziale 6.3 poszukuje się ekwiwalentnej mikrostruktury dla rzeczywistego ośrodka gruntowego, tj. piasku średniego, który pod względem złożoności mikrostruktury omówiono w rozdziale 6.3.1. Odpowiadającą temu ośrodkowi funkcję makroskopowej odpowiedzi, tj. zależność makroskopowej przewodności cieplnej od przewodności cieplnej płynu wypełniającego przestrzeń porową, tym razem określono w badaniach laboratoryjnych (rozdział 6.3.3). Metodę oraz procedurę badania omówiono w dalszej części rozdziału.

Rozdział uzupełniono również o opis statystycznych miar mikrostruktury ośrodków porowatych (rozdział 6.1).

6.1. Statystyczne miary mikrostruktury ośrodków porowatych

Materiały porowate są przedmiotem wielu badań ze względu na ich złożoną mikrostrukturę, powszechne występowanie oraz możliwe zastosowania. Morfologia losowych ośrodków porowatych, przede wszystkim tych naturalnych, jest bardzo skomplikowana. Jest to konsekwencją m.in. różnych wymiarów, kształtów, orientacji w przestrzeni, a także koncentracji ziaren bądź porów w ośrodku. Te cechy morfologiczne, wpływają w sposób jakościowy i ilościowy na makroskopową odpowiedź materiału.

Wobec czego, celem uzyskania poprawnej predykcji odpowiedzi makroskopowej ośrodka porowatego, pod kątem właściwości mikrostrukturalnych, konieczne jest opisanie jego morfologii w terminach rachunku prawdopodobieństwa, poprzez odpowiednie statystyczne miary mikrostruktury, m.in.: funkcję prawdopodobieństwa n -punktowego, funkcję prawdopodobieństwa odcinkowego (ang. *lineal-path*), krętość, funkcję rozkładu wielkości porów, itp. (np. Torquato, 2002). W dalszej części podrozdziału omówiono wybrane miary mikrostruktury, a następnie wykorzystano je do opisu rzeczywistego ośrodka porowatego – gruntu.

Rozważania dotyczące podstawowych miar mikrostruktury zawężono do ośrodków losowych, dwu-składnikowych, statystycznie jednorodnych, izotropowych i ergodycznych. Poprzez ośrodek statystycznie jednorodny rozumie się taki, w którym nie ma uprzywilejowanego układu odniesienia przez co jego właściwości, w sensie statystycznym, są niezmiennie względem dowolnej pozycji układu odniesienia. Właściwości ośrodka statystycznie izotropowego są dodatkowo niezmiennie względem rotacji układu odniesienia. Z kolei założenie o ergodyczności ośrodka losowego skutkuje tym, że wartość oczekiwaną dowolnej funkcji charakteryzującej mikrostrukturę można określać jako średnią objętościową przy założeniu, że objętość ośrodka zdąża do nieskończoności.

Oczywistym jest, że analiza ośrodka nieskończonego, nie jest możliwa do przeprowadzenia w praktyce. Jeżeli jednak pozwolimy na pewien błąd oszacowania określanej właściwości ośrodka, to rozważania zawęzić możemy do odpowiednio dużej, ale skończonej, objętości ośrodka, tzw. reprezentatywnej elementarnej objętości (REO), którą omawiano już wcześniej w rozdziale 2.1.

6.1.1. Prawdopodobieństwo n -punktowe

Przy wspomnianych wyżej założeniach, funkcja prawdopodobieństwa n -punktowego dla i -tego składnika ($S_n^{(i)}$) określa prawdopodobieństwo, że n punktów ($\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$) znajduje się w składniku i . Wykorzystując funkcje indykatorowe dla danego składnika, prawdopodobieństwo n -punktowe można wyrazić, jako (np. Torquato, 2013):

$$S_n^{(i)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = P(I_1(\mathbf{x}_1) = 1, I_2(\mathbf{x}_2) = 1, \dots, I_n(\mathbf{x}_n) = 1), \quad (6.1)$$

gdzie I_i to funkcja indykatorowa (2.6) dla której V_i to obszar zajmowany przez i -ty składnik, a \mathbf{x}_k to wektor położenia k -tego punktu w przestrzeni.

Prawdopodobieństwo 1-punktowe

Szczególnym przypadkiem funkcji $S_n^{(i)}$ jest prawdopodobieństwo 1-punktowe dla i -tego składnika ($S_1^{(i)}$), określające prawdopodobieństwo, że losowo „umieszczony” w danej mikrostrukturze punkt znajdzie się w składniku i (rys. 6.1a). Łatwo pokazać, że $S_1^{(i)}$ przyjmuje stałą wartość równą udziałowi frakcyjnemu składnika i :

$$S_1^{(i)} = \phi_i. \quad (6.2)$$

Dysponując dyskretną reprezentacją mikrostruktury ośrodka, tj. w formie obrazu cyfrowego (uzyskaną np. z obrazowania w tomografie komputerowym), porowatość wyznaczyć można, jako stosunek liczby pikseli przynależącej do przestrzeni porowej materiału (N_f) do całkowitej liczby pikseli zawartej w obrazie cyfrowym (N_t):

$$\phi_f = \frac{N_f}{N_t}, \quad (6.3)$$

W badaniach laboratoryjnych, przeprowadzanych na rzeczywistym materiale, porowatość określić można na podstawie znajomości gęstości właściwej (ρ_s) i gęstości objętościowej (ρ_d) materiału:

$$\phi_f = \frac{\rho_s - \rho_d}{\rho_s}. \quad (6.4)$$

Powyższa metoda jest najbardziej popularną metodą określania porowatości ośrodków gruntowych. Gęstość właściwą gruntu wyznaczyć można metodą piknometryczną bądź, w przypadku gruntu zawierającego sole mineralne i/lub części organiczne, metodą kolby Le Chateliera. Z kolei gęstość objętościową gruntu określa się najczęściej metodą pierścienia (grunty spoiste) lub metodą cylindra (grunty niespoiste).

Funkcja prawdopodobieństwa 2-punktowego

Funkcja prawdopodobieństwa 2-punktowego dla i -tego składnika ($S_2^{(i)}(r)$) to prawdopodobieństwo, że oba końce losowo „umieszczonego” w danej mikrostrukturze odcinka o długości r znajdą się jednocześnie w składniku i (rys. 6.1b). Dyskretne wartości funkcji $S_2^{(i)}(r)$, dla sekwencji długości r , wyznaczyć można korzystając np. z symulacji Monte-Carlo. Mówiąc bardzo ogólnie, algorytm określania wartości prawdopodobieństwa 2-punktowego polega wówczas na wielokrotnym generowaniu położenia odcinka

o zadanej długości r i zliczaniu przypadków, w których oba końce tego odcinka znalazły się w składniku i (*sukces*). Wartość prawdopodobieństwa 2-punktowego wyraża się wtedy jako stosunek liczby *sukcesów* do liczby wszystkich *prób* (wszystkie losowe położenia odcinka o długości r).

Dla dwu-składnikowego ośrodka losowego prawdziwe są następujące zależności:

$$\begin{aligned} S_2^{(1)}(r) &= \phi_1 - 0.5 \cdot S_2^{(12)}(r), \\ S_2^{(2)}(r) &= \phi_2 - 0.5 \cdot S_2^{(12)}(r), \\ S_2^{(1)}(r) + S_2^{(12)}(r) + S_2^{(2)}(r) &= 1, \end{aligned} \quad (6.5)$$

gdzie $S_2^{(12)}(r)$ to prawdopodobieństwo znalezienia się dwóch końców odcinka o długości r w dwóch różnych składnikach.

Funkcja $S_2^{(i)}(r)$ osiąga maksymalną wartość równą udziałowi frakcyjnemu składnika i dla $r \rightarrow 0$ i zwykle zbiega asymptotycznie do wartości ϕ_i^2 dla $r \rightarrow \infty$. Zazwyczaj, funkcja $S_2^{(i)}(r)$ osiąga wartość ϕ_i^2 wyraźnie wcześniej, powiedzmy dla $r \rightarrow r^*$. Wówczas wartość r^* wyraża tzw. promień korelacji. Oznacza to, że dwa punkty oddalone od siebie o dystans większy niż r^* nie są już ze sobą skorelowane (Róžański, 2010).

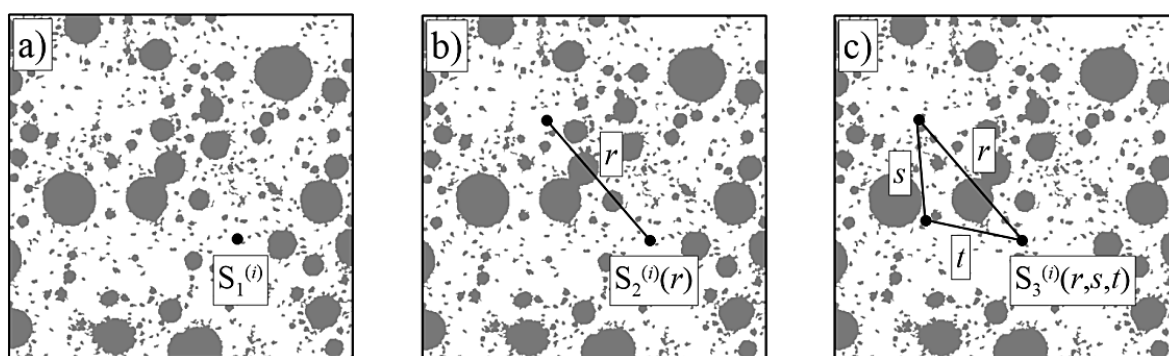
Ponadto, dla zdyskretyzowanego dwu-wymiarowego ośrodka, dla którego r przyjmuje dyskretne wartości, miara ta dostarcza informacji na temat powierzchni właściwej (SSA) ośrodka porowatego, zgodnie z następującą zależnością (Berryman & Milton, 1988):

$$SSA = -4 \left. \frac{d}{dr} S_2^{(i)}(r) \right|_{r=0}. \quad (6.6)$$

Funkcję prawdopodobieństwa 2-punktowego wykorzystać można również do:

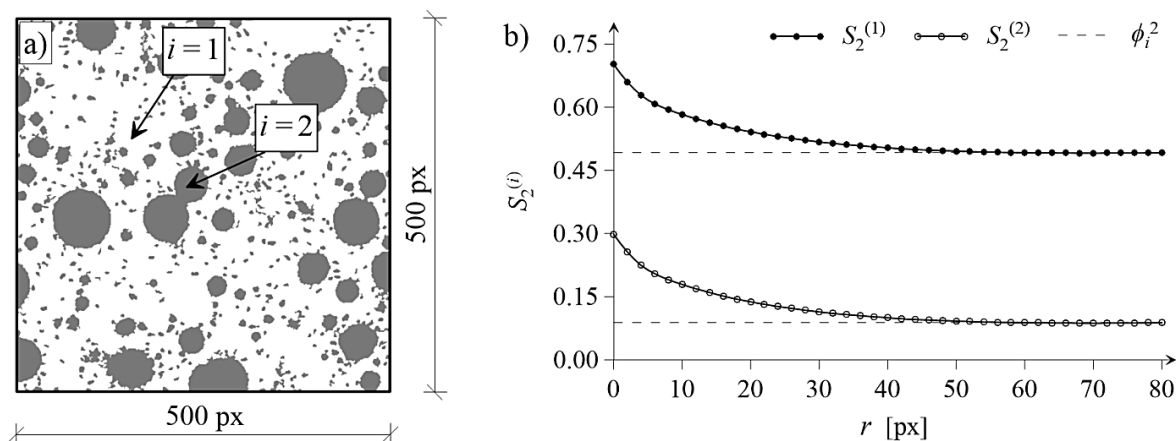
- szacowania efektywnych parametrów mechanicznych ośrodków losowych (Zeman & Šejnoha, 2001),
- określania ograniczeń parametrów mechanicznych kompozytów (Brown Jr, 1955),
- szacowania przepuszczalności płynów przez ośrodek porowaty (Berryman & Blair, 1986),
- rekonstrukcji mikrostruktury kompozytów losowych (Berryman & Blair, 1986; Torquato, 2013),
- numerycznego wyznaczania wielkości REO ośrodków losowych (Łydźba & Róžański, 2014).

W analogiczny sposób, jak prawdopodobieństwo 1-punktowe czy 2-punktowe, zdefiniować można funkcje wyższych rzędów. Geometryczną interpretację np. prawdopodobieństwa 3-punktowego, dla i -tego składnika $S_3^{(i)}$, przedstawić można, jako prawdopodobieństwo znalezienia się w składniku i jednocześnie trzech wierzchołków trójkąta (losowo ułożonego w mikrostrukturze ośrodka) (rys. 6.1c). Znajomość funkcji prawdopodobieństwa n -punktowego wyższych rzędów pozwala znacznie zawęzić oszacowania parametrów efektywnych (np. Torquato, 2002).



Rys. 6.1. Schemat wykorzystywany do określania metodą Monte Carlo funkcji prawdopodobieństwa: a) 1-punktowego, b) 2-punktowego i c) 3-punktowego, przy założeniach zawartych w rozdziale 6.1

Dla ilustracji funkcji $S_2^{(i)}(r)$, wykorzystano dwu-składnikową mikrostrukturę zaprawy gipsowej otrzymaną dzięki technice rentgenowskiej mikrotomografii komputerowej (rys. 6.2a). Analizowana mikrostruktura 2D składa się z 250 tys. pikseli. Składnik mikrostruktury $i=1$ o udziale frakcyjnym $\phi_1=0.702$ oznaczono kolorem białym, natomiast składnik $i=2$ o udziale frakcyjnym $\phi_2=0.298$ – kolorem szarym. Na rys. 6.2b zaprezentowano dyskretne wartości funkcji prawdopodobieństwa 2-punktowego dla obu składników. Widać, że dla $r \rightarrow 0$ wartości $S_2^{(1)}$ i $S_2^{(2)}$ zbiegają do udziałów frakcyjnych odpowiednio składnika 1. oraz składnika 2. Z kolei dla odcinków o długości $r > r^* \approx 60-80$ px (pikseli) prawdopodobieństwo 2-punktowe zbiega do wartości, odpowiednio, $\phi_1^2=0.493$ i $\phi_2^2=0.089$. Można zatem stwierdzić, że dla rozważanej mikrostruktury, promień korelacji wynosi około 60–80 px. Warto zauważyć, że największe wtrącenie składnika 2. ma średnicę tego samego rzędu wynoszącą około 70 px.



Rys. 6.2. a) Przykładowa mikrostruktura 2D oraz b) funkcje prawdopodobieństwa 2-punktowego dla obu składników

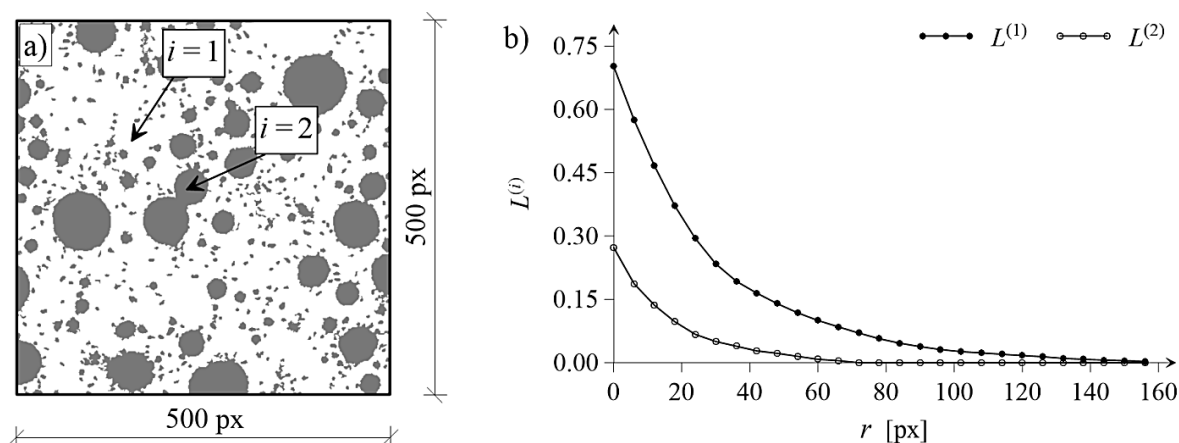
6.1.2. Funkcja prawdopodobieństwa odcinkowego

Funkcja prawdopodobieństwa odcinkowego (ang. *lineal-path*) dla i -tego składnika ($L^{(i)}(r)$) określa prawdopodobieństwo, że losowo „umieszczony” w mikrostrukturze odcinek o długości r znajdzie się w całości w obrębie składnika i (Lu & Torquato, 1992). Zauważmy, że miara ta zbliżona jest do prawdopodobieństwa 2-punktowego, jednak zawiera większą informację dotyczącą połączenia poszczególnych ziaren/porów mikrostruktury. Jest to konsekwencją tego, iż cały odcinek, a nie tylko oba jego końce, mają się znaleźć w składniku i .

Funkcja prawdopodobieństwa odcinkowego jest malejącą funkcją długości odcinka r ograniczoną następującymi wartościami granicznymi: $L^{(i)}(0) = \phi_i$ oraz $L^{(i)}(\infty) = 0$. Wyznaczyć ją można w analogiczny sposób jak prawdopodobieństwo 2-punktowe, tj. np. w procesie symulacji Monte-Carlo. Więcej szczegółów oraz wykorzystanie funkcji $L^{(i)}(r)$ w analizie ośrodków mikroniejednorodnych można znaleźć np. w pracy (Quintanilla & Torquato, 1996).

W celu zilustrowania tej miary zastosowano tę samą dwu-składnikową mikrostrukturę rozważaną wcześniej. Dyskretne wartości funkcji $L^{(i)}(r)$ przedstawiono na rys. 6.3b. Widać, że dla odcinka $r=0$ funkcje $L^{(1)}$ i $L^{(2)}$ osiągają, wartości równe udziałom frakcyjnym, tj. ϕ_1 i ϕ_2 . Jest to oczywiście konsekwencją tego, iż dla $r=0$ funkcja prawdopodobieństwa odcinkowego (podobnie zresztą jak prawdopodobieństwo 2-punktowe) zbiega po prostu do wartości wyrażonej przez prawdopodobieństwo 1-punktowe.

Długość odcinka, dla której funkcja prawdopodobieństwa odcinkowego osiąga wartość bliską 0 różni się dla obu składników i wynosi w przybliżeniu 160 px dla składnika 1. oraz 80 px dla składnika 2. Dowodzi to wcześniejszemu stwierdzeniu, że miara ta znacznie lepiej przedstawia informację o połączeniu poszczególnych składników mikrostruktury niż prawdopodobieństwo 2-punktowe. Na przedstawionym przykładzie widać wyraźnie, że „wygaszenie” funkcji $L^{(1)}$ jest znacznie wolniejsze niż w przypadku funkcji $L^{(2)}$, ponieważ składnik 1. to ciągła matryca, podczas gdy składnik 2. to w dużej mierze odseparowane od siebie wtrącenia.



Rys. 6.3. a) Przykładowa mikrostruktura 2D oraz b) odpowiadające jej funkcje prawdopodobieństwa odcinkowego

6.1.3. Krętość

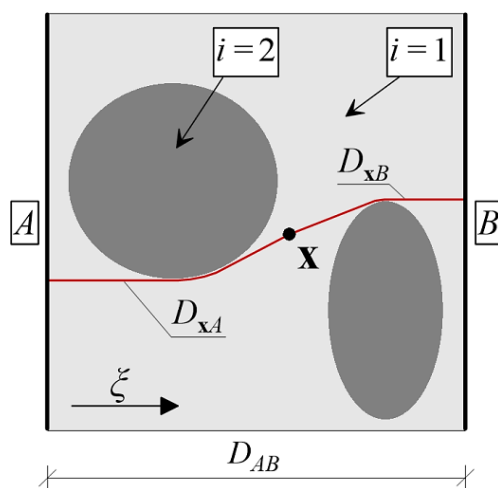
Krętość to miara szczególnie istotna w procesach, które przebiegają zasadniczo w jednej, spójnej fazie. Z tego powodu jest powszechnie stosowana w praktycznych zagadnieniach, odnoszących się do przepływu płynów przez ośrodki granulowane. W takim przypadku przepływ przebiega jedynie w przestrzeni porowej, podczas gdy ziarna stanowią swoistą „przeszkodę” dla przepływu. Krętość w takim wypadku określa stopień „złożoności” przestrzeni porowej. Jest to miara tensorowa. Fizyczna interpretacja składowej krętości na wybranym kierunku może być zdefiniowana w zagadnieniu przepływu jako stosunek faktycznej drogi, którą musi pokonać cząstka płynu do grubości warstwy przez którą odbywa się przepływ.

Rozważmy przepływ przez myślowo wyodrębnioną warstwę ośrodka porowatego, ograniczoną dwiema równoległymi powierzchniami A i B o normalnej zgodnej z kierunkiem przepływu (osią ξ). Dla danego punktu \mathbf{x} w obrębie rozważanego składnika

mikrostruktury krętość na kierunku ζ ($T_\zeta(\mathbf{x})$) można zdefiniować następującym wzorem (Wojtacki, 2015):

$$T_\zeta(\mathbf{x}) = \frac{D_{xA} + D_{xB}}{D_{AB}}, \quad (6.7)$$

gdzie D_{xA} (D_{xB}) to najkrótsza droga z punktu \mathbf{x} do płaszczyzny A (B), a D_{AB} to odległość pomiędzy płaszczyzną A i B . Graficzną interpretację występujących we wzorze (6.7) wielkości podano na rys. 6.4.



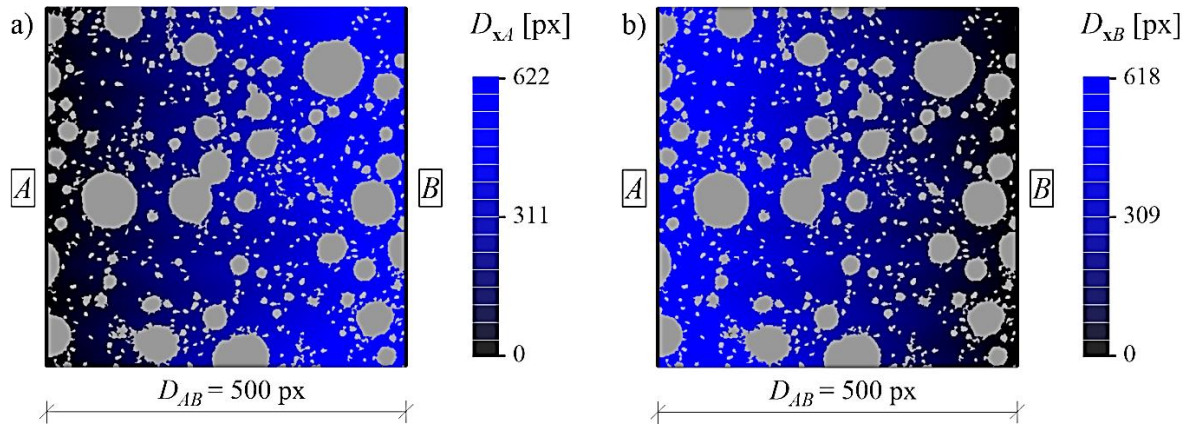
Rys. 6.4. Graficzna interpretacja krętości punktu \mathbf{x} w obrębie składnika $i = 1$ na kierunku ζ

Numeryczną procedurę szacowania rozkładów krętości podano np. w pracy (Wojtacki, 2015). Krętość może osiągnąć wartość minimalną równą 1 co oznacza, że cząsteczka przechodząca przez dany punkt \mathbf{x} pokonuje drogę z płaszczyzny A do B po linii prostej prostopadłej do obu płaszczyzn nie napotykając na swojej drodze żadnych przeszkód. Im wyższa wartość krętości tym większa „złożoność” przestrzeni porowej.

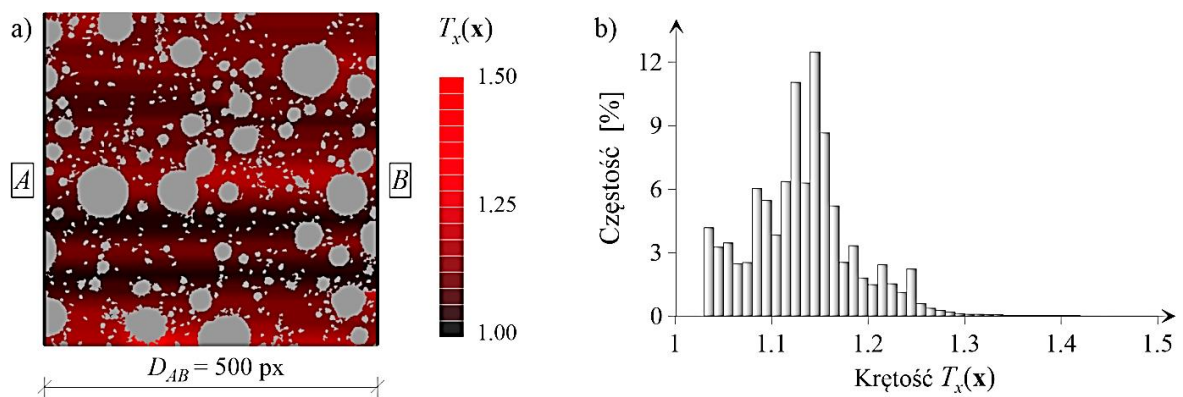
Opisana wyżej wielkość jest powszechnie stosowana w analizie przepływu płynu przez ośrodki porowate (np. grunty, skały). Możliwe jest bowiem szacowanie przepuszczalności takiego ośrodka z wykorzystaniem np. wzoru Kozeny-Carmana (por. np. Jiang i in., 2016), przy dodatkowej znajomości średniej szerokości i udziału frakcyjnego porów.

Analogicznie jak przy poprzednich miarach w celu zilustrowania krętości ponownie rozważono dwu-składnikową mikrostrukturę 2D z rys. 6.2a. Rozkłady krętości określono za pomocą procedury przedstawionej w pracy (Wojtacki, 2015). Na rys. 6.5 przedstawiono mapy D_{xA} i D_{xB} dla składnika 1. Z kolei na rys. 6.6 zaprezentowano mapę krętości wraz z jej histogramem. Zauważmy, że dla rozpatrywanej przykładowej mikrostruktury

wyznaczenie $T_x(\mathbf{x})$ dla składnika 2. nie miałyby fizycznego uzasadnienia ze względu na brak spójności obszaru zajmowanego przez ten składnik. Ujmując to prościej, składnik 2. jest „niedrożny” na tym kierunku – brak połączenia brzegu A z brzegiem B w obrębie tego składnika.



Rys. 6.5. Mapa: a) D_{xA} oraz b) D_{xB} ; dla przykładowej mikrostruktury w obrębie składnika 1. na kierunku x



Rys. 6.6. a) Mapa oraz b) histogram; krętości w obrębie składnika 1. na kierunku x

6.2. Ekwiwalentna mikrostruktura – identyfikacja na podstawie obrazów cyfrowych struktury wewnętrznej ośrodka

W niniejszym podrozdziale zidentyfikowano ekwiwalentne mikrostruktury dla dyskretnych obrazów cyfrowych przedstawiających:

- ośrodek porowaty – mikrostruktura zaprawy gipsowej zobrazowana w microCT,
- losową szachownicę (ang. *random checkerboard*),
- mikrostrukturę modelu Debye (dla trzech różnych wartości porowatości),
- mikrostrukturę modelu Isinga (dla trzech różnych wielkości klastrów).

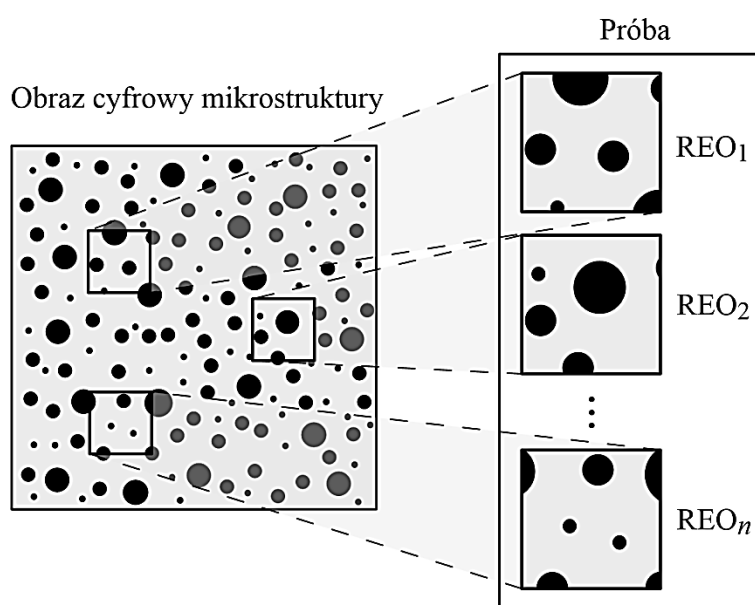
Wszystkie rozważane mikrostruktury prezentowane są w postaci dwu-wymiarowych obrazów binarnych, gdzie przestrzeń porowa oznaczona jest kolorem białym, a matryca/szkielet – kolorem czarnym. Obrazy cyfrowe mikrostruktur Debye oraz Isinga zaczerpnięto z pracy doktorskiej promotora pomocniczego Adriana Różańskiego (Różański, 2010). Dyskretną postać funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej uzyskano poprzez rozwiązanie numeryczne sekwencji zagadnień brzegowych sformułowanych dla cyfrowych obrazów mikrostruktury, co szczegółowo opisano w następnym podrozdziale. Identyfikację funkcji F^{mom} przeprowadzono dla siedmiu różnych wartości współczynników przewodności cieplnej płynu wypełniającego przestrzeń porową, λ_f , tj. 0.01, 0.05, 0.15, 0.25, 0.50, 0.75, 1.00 [$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$]. Dla wszystkich mikrostruktur założono tę samą wartość przewodności cieplnej matrycy $\lambda_s = 5 \text{ W m}^{-1} \text{K}^{-1}$. Identyfikację ekwiwalentnej mikrostruktury zrealizowano bez procedury regularyzacji.

6.2.1. Funkcja makroskopowej odpowiedzi materiałowej – identyfikacja numeryczna

Określenie funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej dla cyfrowego obrazu mikrostruktury wymaga wykonania sekwencji obliczeń numerycznych, w których dla różnych wartości współczynników przewodności cieplnej płynu wypełniającego przestrzeń porową (λ_f) rozwiązuje się zagadnienie brzegowe (2.10). W symulacjach numerycznych zakłada się periodyczne warunki brzegowe dla pola korektorowego na brzegach REO. Przyjęcie takich warunków brzegowych wynika z faktu, iż prowadzi to do najszybszej zbieżności odpowiedzi makroskopowej do parametru efektywnego (patrz rys. 2.5).

W konsekwencji gwarantuje to możliwie najkrótszy czas obliczeń potrzebny do wyznaczenia funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej.

Dla zadanej wartości λ_f , makroskopową przewodność cieplną (λ^{hom}) wyznacza się stosując podejście opisane w rozdziale 2.3.1. W szczególności, wartość λ^{hom} określa się z zależności (2.15). W procesie obliczeniowym pojedynczą realizacją mikrostruktury REO, ω_j , tworzy się poprzez losowe wybranie pewnej podobności z obszaru cyfrowej reprezentacji mikrostruktury (rys. 6.7). Zbiór n losowych realizacji REO tworzy tzw. próbę. Jak wspomniano w rozdziale 2.3.1 wykorzystywane tutaj podejście wymaga, przed wykonaniem obliczeń, wyznaczenia minimalnej wielkości REO (N_{min}) oraz określenia liczebności próby n_{min} .



Rys. 6.7. Graficzna prezentacja koncepcji próby zawierającej skończoną liczbę losowych realizacji reprezentatywnej elementarnej objętości (REO)

W celu określenia wielkości REO skorzystano z metody zaproponowanej w pracach (Różański, 2010; Łydźba & Różański, 2014). W rozpatrywanych tutaj przypadkach, a więc dwuskładnikowych ośrodków porowatych, których składniki są izotropowe i cechują się przewodnościami cieplnymi λ_s oraz λ_f , najmniejszy możliwy wymiar REO, N_{min} , określa się jako minimalną liczbę pikseli, dla której spełniony jest następujący warunek (Łydźba & Różański, 2014):

$$\forall N \geq N_{\text{min}} \Rightarrow f_N(N) = \left(\frac{\eta(\Theta) - 1}{\varphi + (1 - \varphi)\eta(\Theta)} \right)^2 g(N) \leq \varepsilon, \quad (6.8)$$

gdzie N oznacza liczbę pikseli w wierszu/kolumnie cyfrowego obrazu mikrostruktury o wymiarach $N \times N$, $\varphi = \max\{\phi_s, \phi_f\}$, $\eta(\Theta) = \min\{\Theta, 1/\Theta\}$, przy czym Θ jest parametrem

opisującym kontrast pomiędzy przewodnościami cieplnymi składników, tj. $\Theta = \lambda_s/\lambda_f$. Ponadto, ε jest założonym błędem aproksymacji. We wszystkich rozpatrywanych poniżej przypadkach N_{\min} określano dla $\varepsilon = 1\%$. Obecna w równaniu (6.8) funkcja $g(N)$ jest wariancją tzw. lokalnego udziału frakcyjnego. Jak pokazano w pracy Torquato (2002), w ogólnym przypadku, wartości funkcji $g(N)$ określa się na podstawie funkcji prawdopodobieństwa dwu-punktowego $S_2(r)$ (omówionej szczegółowo w poprzednim podrozdziale) wyznaczonej dla jednego ze składników ośrodka. Dla zagadnienia 2D obowiązuje następująca zależność (Torquato, 2002):

$$g(N) = \frac{4}{N^4} \int_0^N \int_0^N \left(S_2^{(f)}(r) \left(\sqrt{x_1^2 + x_2^2} \right) - \phi_f^2 \right) (N - x_1)(N - x_2) dx_1 dx_2, \quad (6.9)$$

przy czym x_i ($i = 1, 2$) definiuje lokalny układ współrzędnych dla REO. Ze względu na fakt, iż dla obrazów cyfrowych funkcja $S_2(r)$ podana jest w postaci dyskretnej, określenie $g(N)$ wg zależności (6.9) wymaga zastosowania całkowania numerycznego – w niniejszej pracy skorzystano z procedury bazującej na metodzie Monte Carlo opisaną szczegółowo w pracy (Różański, 2010).

Minimalną liczbę losowych realizacji n_{\min} (liczebność próby) określano na podstawie Centralnego Twierdzenia Granicznego jako liczbę realizacji dla której spełniona jest następująca nierówność, według sformułowania zaproponowanego w pracy (Łydźba & Różański, 2014):

$$H(n) = \frac{1}{n} \left(\frac{\sigma}{\lambda^{\text{hom}} \varepsilon} \right)^2 \left(\Phi^{-1} \left\{ 1 - \frac{\beta}{2} \right\} \right)^2 \leq 1, \quad (6.10)$$

gdzie σ to odchylenie standardowe zmiennej losowej $\langle \lambda(\omega_j) \rangle$ (patrz zależność (2.15)), Φ to dystrybuanta rozkładu normalnego, a β to poziom ufności. Zakładając, że $\beta = 1\%$, nierówność (6.10) można przekształcić do następującej postaci:

$$H(n) = \frac{1}{n} \left(\frac{2.575 \cdot \sigma}{\varepsilon \cdot \lambda^{\text{hom}}} \right)^2 \leq 1. \quad (6.11)$$

W rezultacie, minimalną liczbę realizacji n_{\min} dla danej wielkości REO zdefiniować można jako minimalną wartość n dla której spełniona jest nierówność (6.11), tj.:

$$n_{\min} = \left(\frac{2.575 \cdot \sigma}{\varepsilon \cdot \lambda^{\text{hom}}} \right)^2. \quad (6.12)$$

Zauważmy, że w ogólnym przypadku, wartość średnia (2.15) oraz wariancja poszukiwanego parametru makroskopowego przewodności cieplnej nie jest *a priori* znana. Wobec tego n_{\min} wyznacza się stosując procedurę iteracyjną, która zostaje zatrzymana (wskazując wymaganą liczbę n_{\min}) wówczas, gdy spełniony jest warunek (6.11), przy czym dla danego kroku iteracyjnego wariancję σ^2 wyznacza się z następującej zależności:

$$\sigma^2 = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \left(\langle \lambda(\omega_j) \rangle - \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \langle \lambda(\omega_j) \rangle \right)^2. \quad (6.13)$$

Należy wspomnieć, iż rozważane zagadnienie brzegowe (2.10) za każdym razem rozwiązywano wykorzystując oprogramowanie stworzone przez promotora pomocniczego Adriana Różańskiego w ramach jego pracy doktorskiej (Różański, 2010). Aplikacja bazująca na metodzie objętości skończonych została stworzona w języku programowania C++. Oryginalnie program służył określeniu parametru transportu dla pojedynczej realizacji mikrostruktury przedstawionej w postaci dwuwymiarowego binarnego obrazu cyfrowego. W ramach niniejszej pracy, aplikacja została przystosowana do określania makroskopowej funkcji odpowiedzi materiałowej. Zostało to zrealizowane poprzez modyfikację pierwotnej postaci skryptu języka C++ tak, aby po jednym uruchomieniu pliku wykonywalnego (*.exe) program rozwiązywał sekwencję zagadnień brzegowych dla zbioru zadanych wartości przewodności cieplnej płynu wypełniającego przestrzeń porową ośrodka. Zarządzanie danymi wejściowymi oraz wyjściowymi odbywa się z poziomu środowiska programu Wolfram Mathematica. Wspomniane modyfikacje skutkowały kilkukrotnym przyspieszeniem obliczeń w stosunku do pierwotnego skryptu.

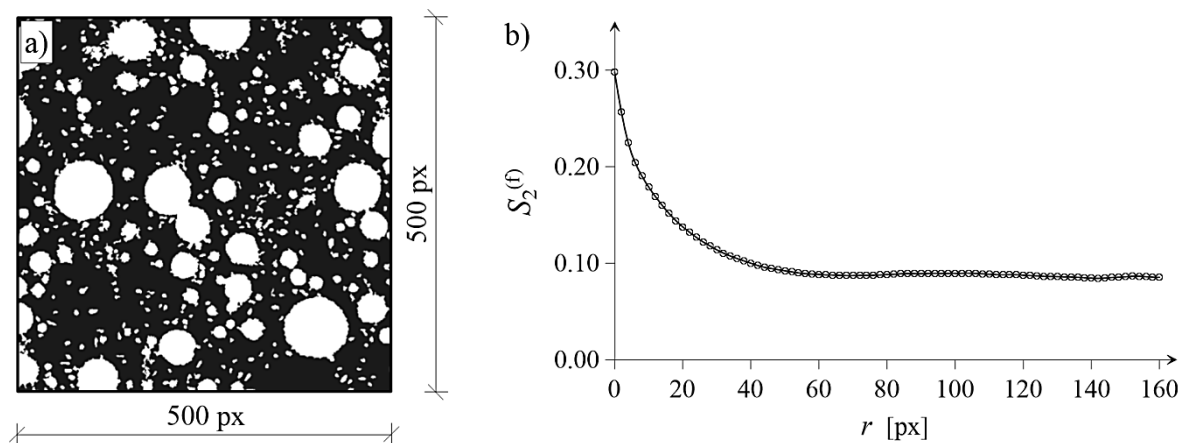
Szczegółowe wyniki dotyczące określania minimalnego wymiaru REO, liczby realizacji oraz wartości funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej przedstawiono w dalszej części tego podrozdziału, oddzielnie dla każdej z rozpatrywanych mikrostruktur.

Mikrostruktura zaprawy gipsowej zobrazona w microCT

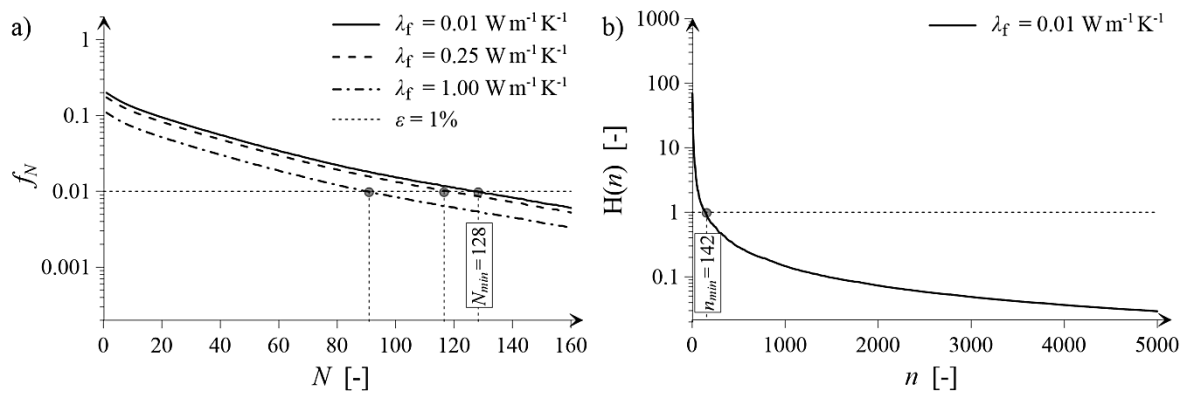
Obraz mikrostruktury zaprawy gipsowej zobrazonej w microCT ($\phi_f = 0.298$) oraz odpowiadającą jej funkcję prawdopodobieństwa dwu-punktowego dla przestrzeni porowej przedstawiono na rys. 6.8. Zgodnie z przedstawioną powyżej procedurą minimalny wymiar REO określono z warunku (6.8). Zauważmy jednak, że identyfikacja funkcji F^{mom} wymaga wykonania sekwencji obliczeń dla różnych wartości λ_f . W rezultacie, każde zagadnienie

brzegowe cechuje się innym kontrastem przewodności cieplnej składników charakteryzowanym parametrem $\Theta = \lambda_s/\lambda_f$. Wobec tego, zgodnie z warunkiem (6.8), każdy przypadek, rozumiany tu jako wypełnienie przestrzeni porowej płynem o konkretnej wartości λ_f , implikuje inny wymiar N_{\min} . Wobec tego, na rys. 6.9a przedstawiono przebieg funkcji f_N dla trzech wybranych wartości λ_f , tj. 0.01, 0.25 oraz 1.00 [W m⁻¹ K⁻¹]. Można zauważyć, że dla rozważanej mikrostruktury, przy założeniu, że błąd aproksymacji $\varepsilon = 1\%$, wymiar N_{\min} dla poszczególnych przypadków (danego λ_f) wynosi, odpowiednio, 128, 119 oraz 91. Z uwagi na fakt, iż tak określony wymiar REO jest wymiarem minimalnym, możliwe jest przyjęcie dla wszystkich rozważanych przypadków wspólnego wymiaru REO, tj. N_{\min} , które odpowiada największemu kontrastowi parametrów: $\Theta = \lambda_s/\lambda_f = 5/0.01 = 500$. W konsekwencji, do dalszych obliczeń przyjęto $N_{\min} = 128$. Dla tak określonego wymiaru REO, minimalną liczbę realizacji n_{\min} wyznaczono według przebiegu funkcji $H(n)$ (6.11) przy założeniu obowiązywania warunku (6.12). Analogicznie jak przy określaniu minimalnego wymiaru REO, kontrast parametru Θ istotnie wpływa także na minimalną liczbę realizacji n_{\min} – oczywistym jest, że największa wartość n_{\min} odpowiada największemu kontrastowi pomiędzy przewodnościami cieplnymi składników. Taką liczbę realizacji przyjmowano dla wszystkich wartości λ_f . Przebieg funkcji $H(n)$ dla $\lambda_f = 0.01$ W m⁻¹ K⁻¹ ($\Theta = 500$) przedstawiono na rys. 6.9b. Jak można zauważyć, minimalna liczba realizacji dla rozważanej mikrostruktury wyniosła $n_{\min} = 142$.

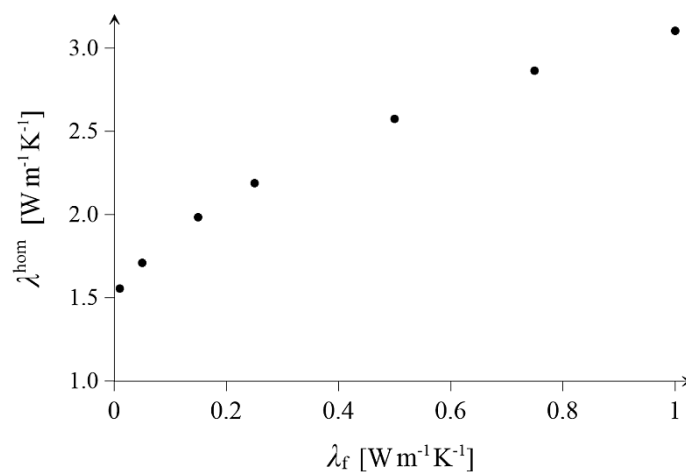
Zidentyfikowaną numerycznie dyskretną postać funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej dla rozważanej mikrostruktury przedstawiono na rys. 6.10.



Rys. 6.8. a) Obraz binarny mikrostruktury oraz b) funkcja prawdopodobieństwa dwu-punktowego dla przestrzeni porowej



Rys. 6.9. a) Przebieg funkcji f_N względem wymiaru N ; b) funkcja $H(n)$ względem liczby realizacji n dla REO o $N_{\min} = 128$



Rys. 6.10. Funkcja makroskopowej odpowiedzi materiałowej uzyskana dla rozwiązania zagadnienia bezpośredniego

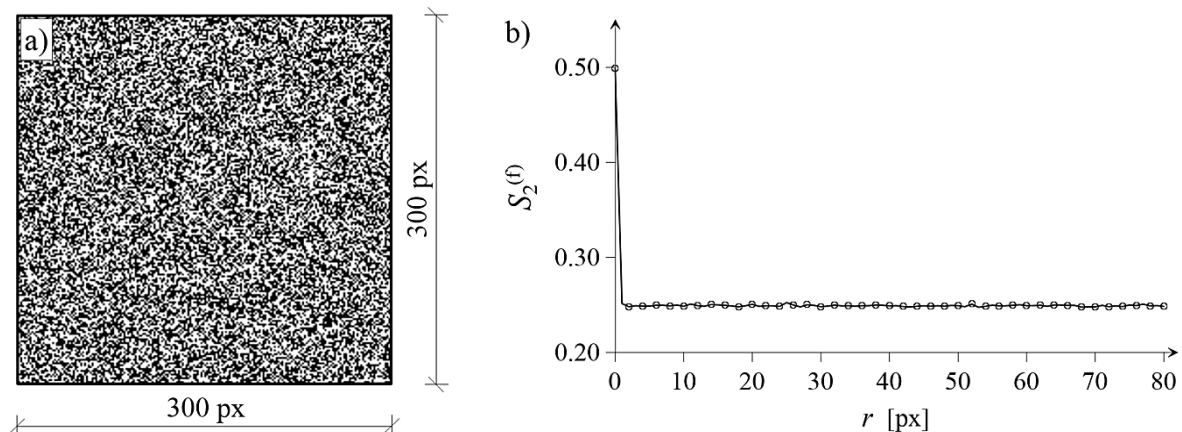
Prezentacja wyników dla mikrostruktur rozważanych w dalszej części tego rozdziału zrealizowana jest w sposób analogiczny, jak dla analizowanej powyżej mikrostruktury zaprawy gipsowej uzyskanej z zobrazowania w microCT. W rezultacie dla każdej mikrostruktury przedstawia się:

- obraz binarny mikrostruktury wraz z odpowiadającą jej funkcją prawdopodobieństwa dwu-punktowego dla przestrzeni porowej,
- zależność funkcji f_N od wymiaru N dla trzech wybranych wartości λ_f , tj. 0.01, 0.25 oraz 1.00 [$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$],
- zależność funkcji H od liczby realizacji n (dla uprzednio określonego wymiaru N_{\min}) dla największego kontrastu parametrów $\Theta = 500$,
- funkcję makroskopowej odpowiedzi materiałowej.

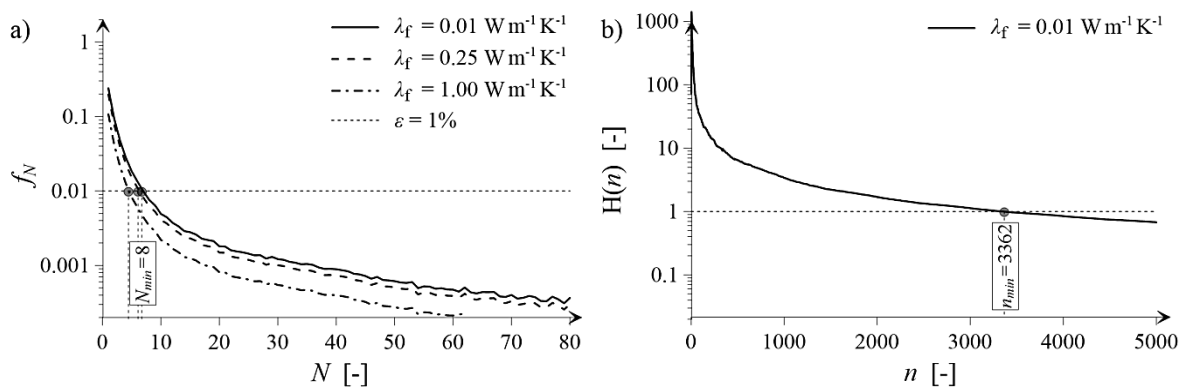
Mikrostruktura losowej szachownicy (ang. *random checkerboard*)

Rozważana w tym przykładzie mikrostruktura w postaci tzw. losowej szachownicy (ang. *random checkerboard*) generowana jest za pomocą procesu stochastycznego Bernoulliego. Oznacza to, że piksele białe lub czarne pojawiają się w sposób niezależny od siebie, z wcześniej założonym prawdopodobieństwem. Prawdopodobieństwo to, w przypadku białych pikseli (reprezentujących przestrzeń porową) równe jest oczywiście porowatości ośrodka. W literaturze spotkać można liczne zastosowania takiej mikrostruktury do określania makroskopowych odpowiedzi różnego rodzaju materiałów kompozytowych, np. w pracy (Łydźba i in., 2017) wykorzystano model 3D losowej szachownicy do określenia przewodność cieplnej gruntu.

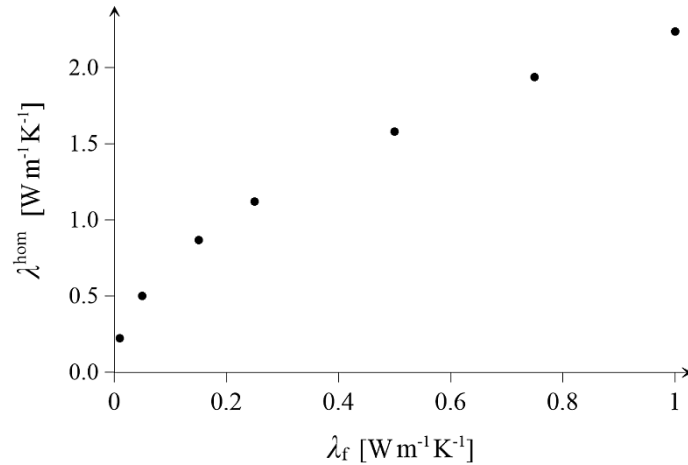
Wygenerowaną, dwu-składnikową mikrostrukturę losowej szachownicy przedstawiono na rys. 6.11a ($\phi_f = 0.5$). Odpowiadającą jej funkcję prawdopodobieństwa dwu-punktowego dla przestrzeni porowej zaprezentowano na rys. 6.11b. Minimalny wymiar REO wyniósł $N_{\min} = 8$ (rys. 6.12a), z kolei liczebność próby $n_{\min} = 3362$ (rys. 6.12b). Wyznaczoną dla tej mikrostruktury funkcję makroskopowej odpowiedzi materiałowej przedstawiono na rys. 6.13.



Rys. 6.11. a) Obraz binarny mikrostruktury oraz b) funkcja prawdopodobieństwa dwu-punktowego dla przestrzeni porowej



Rys. 6.12. a) Przebieg funkcji f_N względem wymiaru N ; b) funkcja $H(n)$ względem liczby realizacji n dla REO o $N_{\min} = 8$



Rys. 6.13. Funkcja makroskopowej odpowiedzi materiałowej uzyskana dla rozwiązania zagadnienia bezpośredniego

Mikrostruktura dla modelu Debye

W kolejnym przykładzie rozważono mikrostrukturę modelu Debye, którą analizowano np. w pracy (Różański, 2010), gdzie określano minimalną wielkość REO dla dwu-składnikowych kompozytów losowych. Jak pokazano np. w pracach (Torquato, 2002; Różański, 2010) obraz binarny mikrostruktury Debye uzyskuje się poprzez matematyczną rekonstrukcję, której celem jest zidentyfikowanie takiego obrazu cyfrowego, dla którego obliczona funkcja prawdopodobieństwa dwu-punktowego jest zgodna z założoną funkcją $S_2(r)$. W przypadku mikrostruktury Debye zakłada się następującą postać funkcji prawdopodobieństwa dwu-punktowego (Torquato, 2002):

$$S_2^{(f)}(r) = \phi_f \phi_s \exp\left(-\frac{r}{a}\right) + \phi_f^2, \quad (6.14)$$

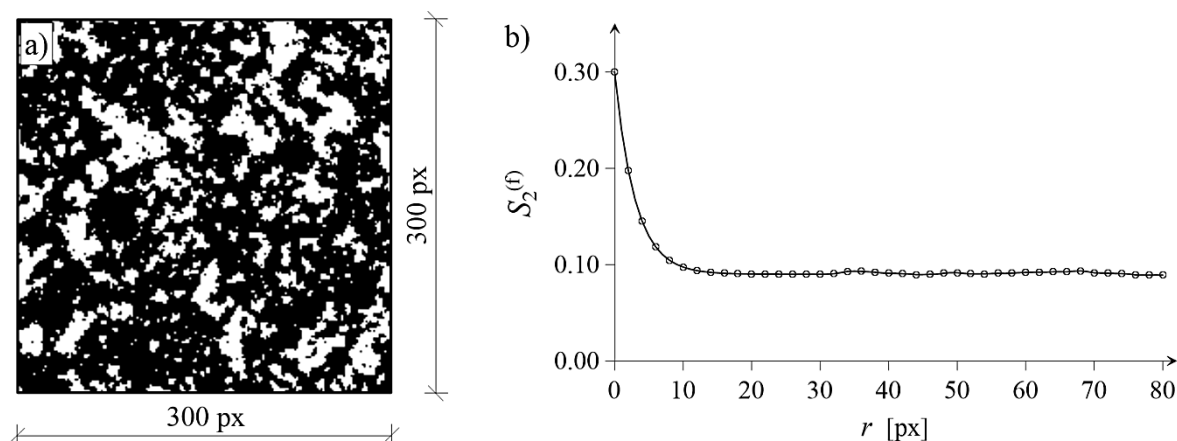
gdzie a jest parametrem opisującym morfologię mikrostruktury; w pracy przyjęto, że $a = 3$.

Przeanalizowano trzy przypadki mikrostruktury Debye, które różnicowano wartością porowatości, tj. $\phi_f = 0.3$ (rys. 6.14a), $\phi_f = 0.5$ (rys. 6.17a) oraz $\phi_f = 0.7$ (rys. 6.20a). Odpowiadające tym trzem mikrostrukturom funkcje prawdopodobieństwa dwu-punktowego dla przestrzeni porowej zestawiono, odpowiednio, na rys. 6.14b, rys. 6.17b oraz rys. 6.20b. Wartości w zakresie minimalnego wymiaru REO oraz liczebności próby, tym razem, zestawiono w tabeli 6.1.

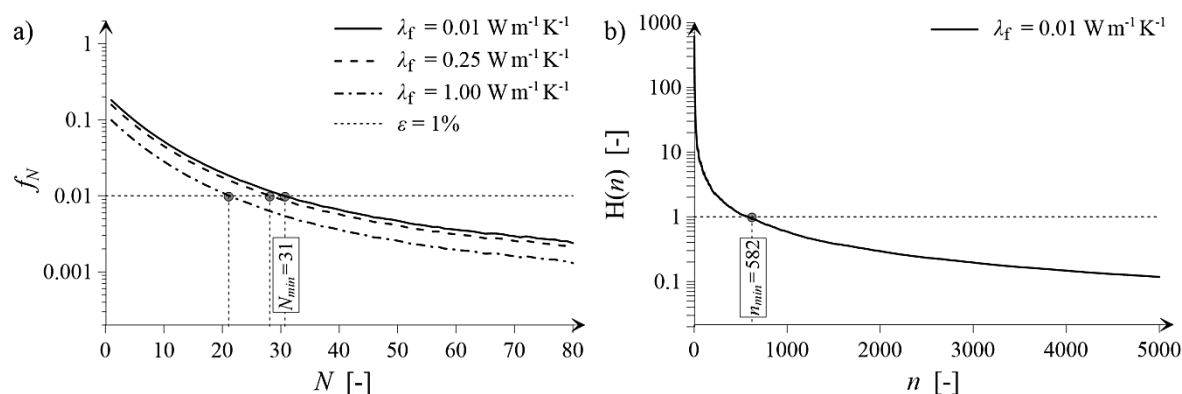
Tabela 6.1. Minimalny wymiar REO (N_{\min}) oraz liczebności próby (n_{\min}) określona dla trzech rozważanych mikrostruktur Debye

Mikrostruktura Debye	N_{\min}			n_{\min}
	$\lambda_f = 1.00$ [W m ⁻¹ K ⁻¹]	$\lambda_f = 0.25$ [W m ⁻¹ K ⁻¹]	$\lambda_f = 0.01$ [W m ⁻¹ K ⁻¹]	$\lambda_f = 0.01$ [W m ⁻¹ K ⁻¹]
$\phi_f = 0.3$	22	29	31	582
$\phi_f = 0.5$	32	49	56	1304
$\phi_f = 0.7$	33	44	47	3840

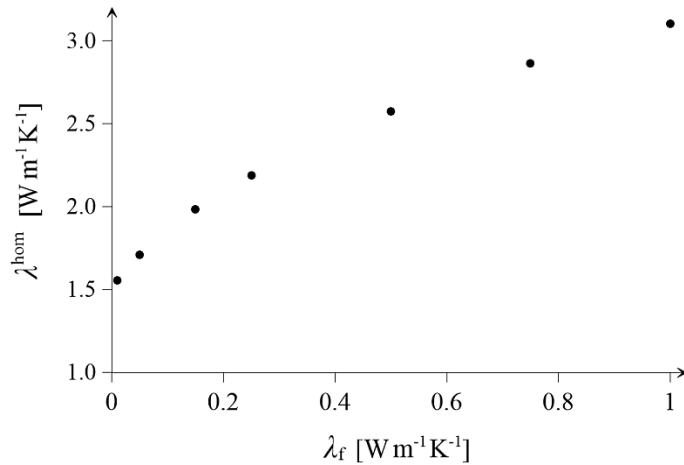
Funkcje makroskopowej odpowiedzi materiałowej dla rozważanych wyżej mikrostruktur przedstawiono na rys. 6.16, rys. 6.19 oraz rys. 6.22.



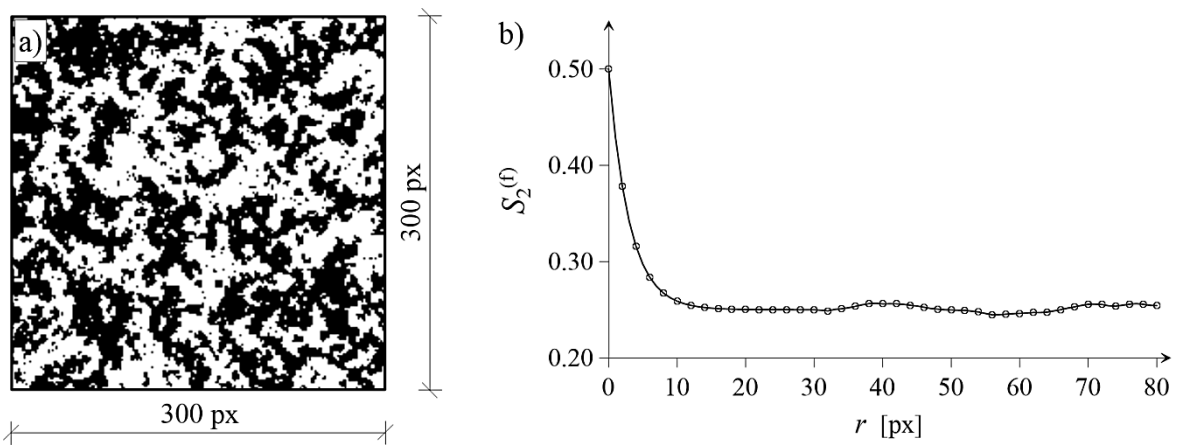
Rys. 6.14. a) Obraz binarny mikrostruktury Debye ($\phi_f = 0.3$) oraz b) funkcja prawdopodobieństwa dwu-punktowego dla przestrzeni porowej



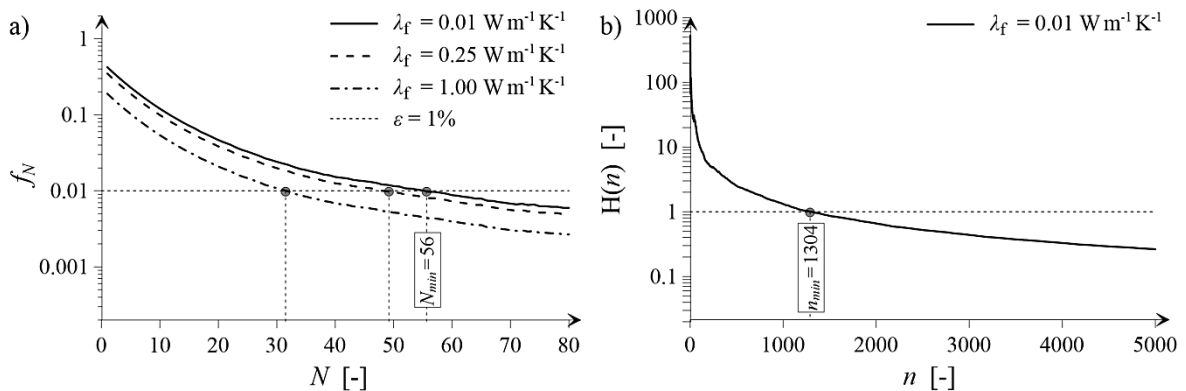
Rys. 6.15. a) Przebieg funkcji f_N względem wymiaru N ; b) funkcja $H(n)$ względem liczby realizacji n dla REO o $N_{\min} = 31$



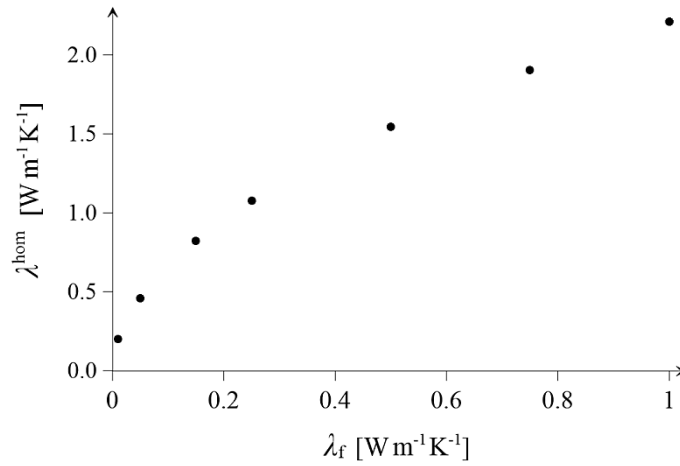
Rys. 6.16. Funkcja makroskopowej odpowiedzi materiałowej uzyskana dla rozwiązania zagadnienia bezpośredniego dla mikrostruktury modelu Debye ($\phi_f=0.3$)



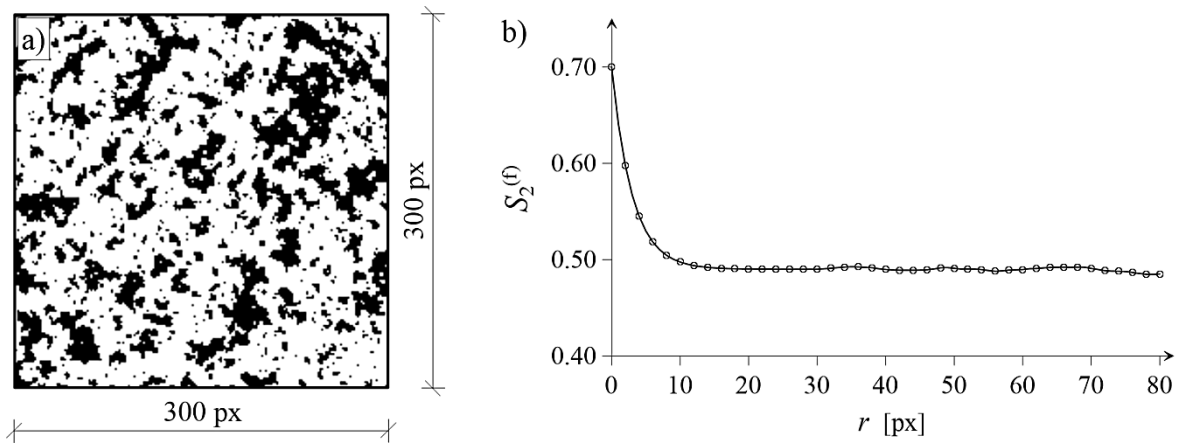
Rys. 6.17. a) Obraz binarny mikrostruktury Debye ($\phi_f=0.5$) oraz b) funkcja prawdopodobieństwa dwu-punktowego dla przestrzeni porowej



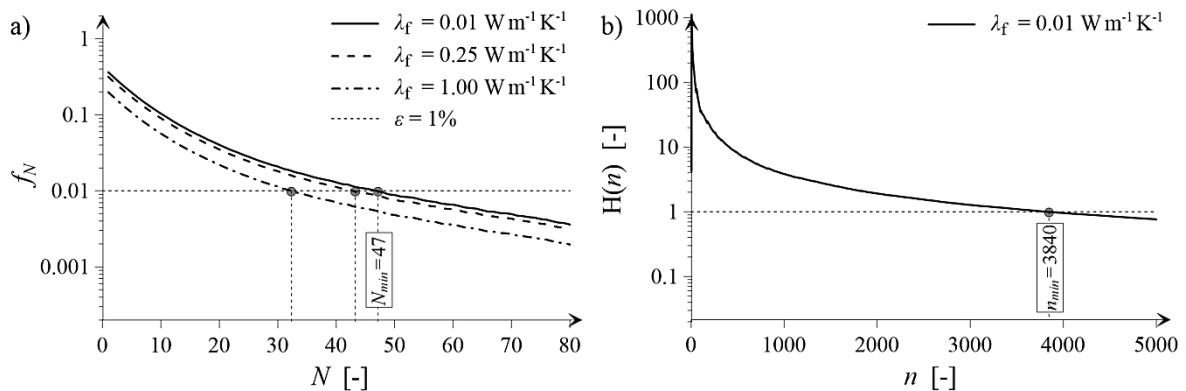
Rys. 6.18. a) Przebieg funkcji f_N względem wymiaru N ; b) funkcja $H(n)$ względem liczby realizacji n dla REO o $N_{\text{min}}=56$



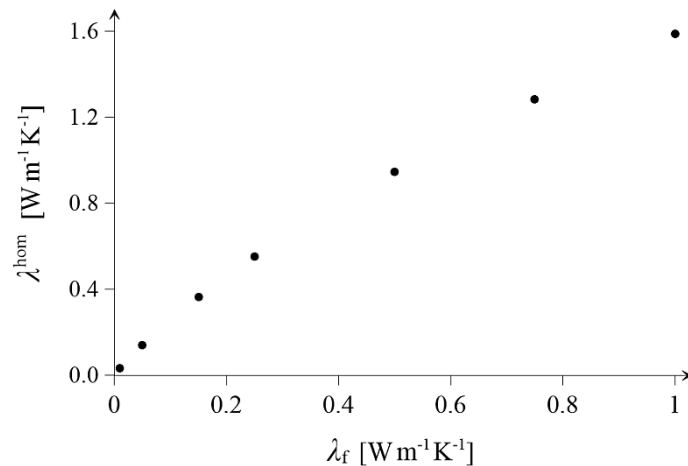
Rys. 6.19. Funkcja makroskopowej odpowiedzi materiałowej uzyskana dla rozwiązania zagadnienia bezpośredniego dla mikrostruktury modelu Debye ($\phi_f=0.5$)



Rys. 6.20. a) Obraz binarny mikrostruktury Debye ($\phi_f=0.7$) oraz b) funkcja prawdopodobieństwa dwu-punktowego dla przestrzeni porowej



Rys. 6.21. a) Przebieg funkcji f_N względem wymiaru N ; b) funkcja $H(n)$ względem liczby realizacji n dla REO o $N_{\min}=47$



Rys. 6.22. Funkcja makroskopowej odpowiedzi materiałowej uzyskana dla rozwiązania bezpośredniego dla mikrostruktury modelu Debye ($\phi_f = 0.7$)

Mikrostruktura dla modelu Isinga

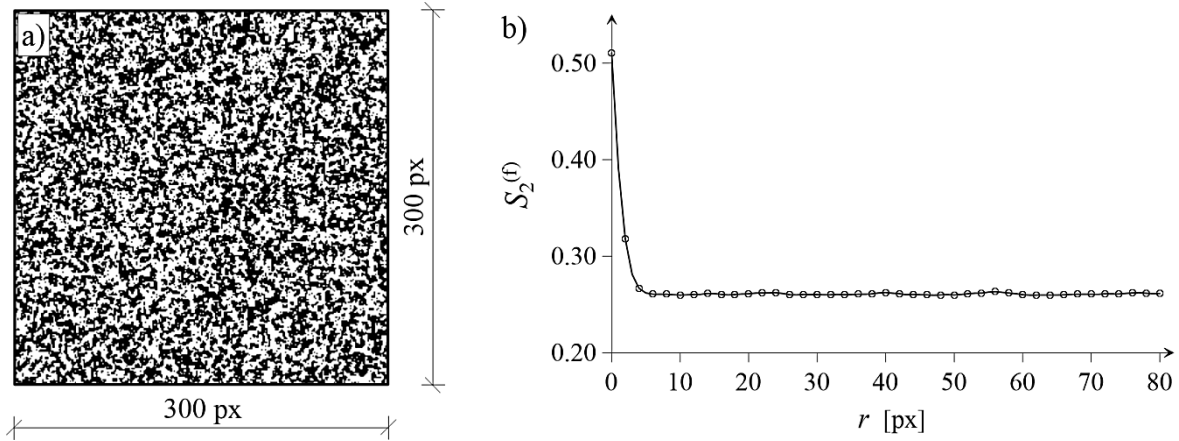
Ostatni przykład dotyczy trzech mikrostruktur wygenerowanych za pomocą modelu Isinga (patrz np. Różański, 2010). Wszystkie mikrostruktury charakteryzowane są taką samą wartością porowatości ($\phi_f \approx 0.5$), a różnicuje się je wielkościami klastrow: typ A – najmniejsza wielkość klastrow (rys. 6.23a), typ B – średnia wielkość klastrow (rys. 6.26a) oraz typ C – największa wielkość klastrow (rys. 6.29a). Różne wielkości klastrow uzyskano poprzez odpowiedni dobór parametrów modelu. Odpowiadające tym trzem mikrostrukturom funkcje prawdopodobieństwa dwu-punktowego dla przestrzeni porowej zestawiono, odpowiednio, na rys. 6.23b, rys. 6.26b oraz rys. 6.29b.

Podobnie jak dla mikrostruktur Debye, tak i w tym przypadku, wartości minimalnego wymiaru REO oraz liczebność próby zestawiono w tabeli 6.2.

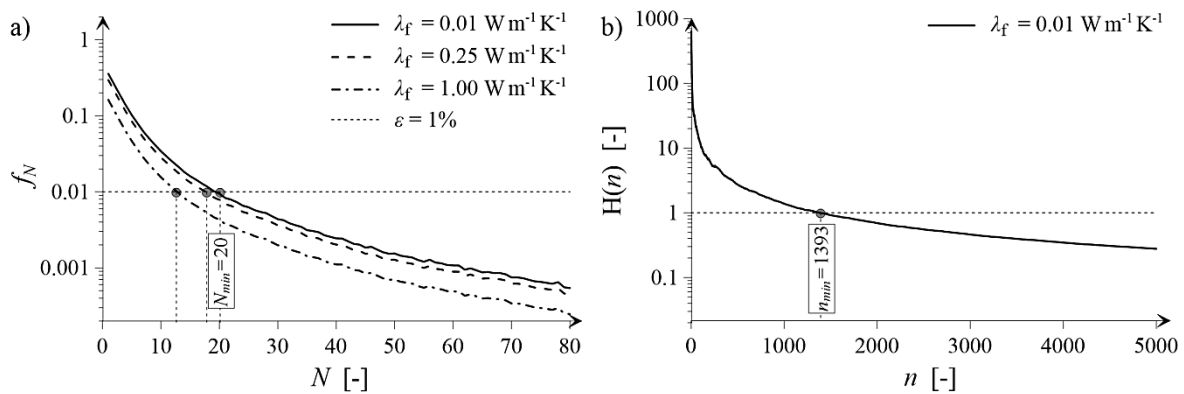
Tabela 6.2. Minimalny wymiar REO (N_{\min}) oraz liczebności próby (n_{\min}) określona dla trzech rozważanych mikrostruktur Isinga

Mikrostruktura Isinga	N_{\min}			n_{\min}
	$\lambda_f = 1.00$ [W m ⁻¹ K ⁻¹]	$\lambda_f = 0.25$ [W m ⁻¹ K ⁻¹]	$\lambda_f = 0.01$ [W m ⁻¹ K ⁻¹]	$\lambda_f = 0.01$ [W m ⁻¹ K ⁻¹]
Typ A	13	18	20	1393
Typ B	24	34	37	1342
Typ C	30	39	42	1365

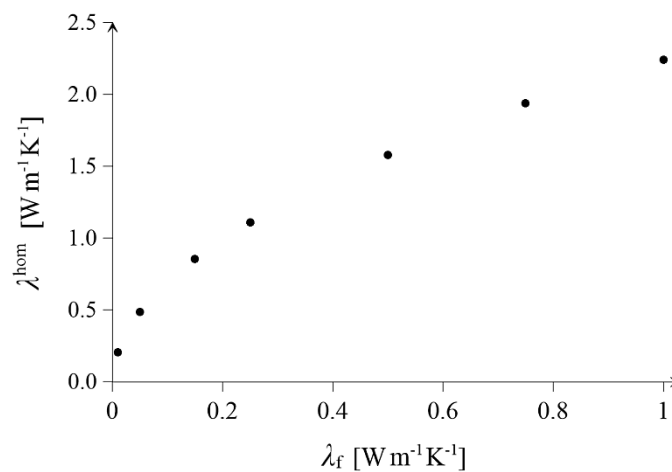
Rozwiązując sekwencję zagadnień brzegowych w ramach obliczeniowej mikromechaniki określono odpowiadające tym mikrostrukturom funkcje F^{mom} . Zestawiono je graficznie na (rys. 6.25, rys. 6.28 i rys. 6.31).



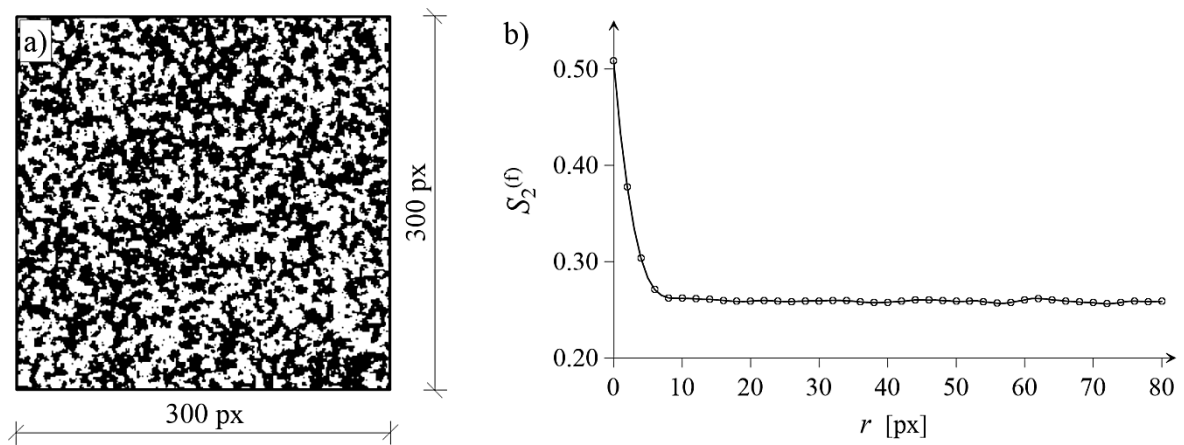
Rys. 6.23. a) Obraz binarny mikrostruktury Isinga (typ A) oraz b) funkcja prawdopodobieństwa dwu-punktowego dla przestrzeni porowej



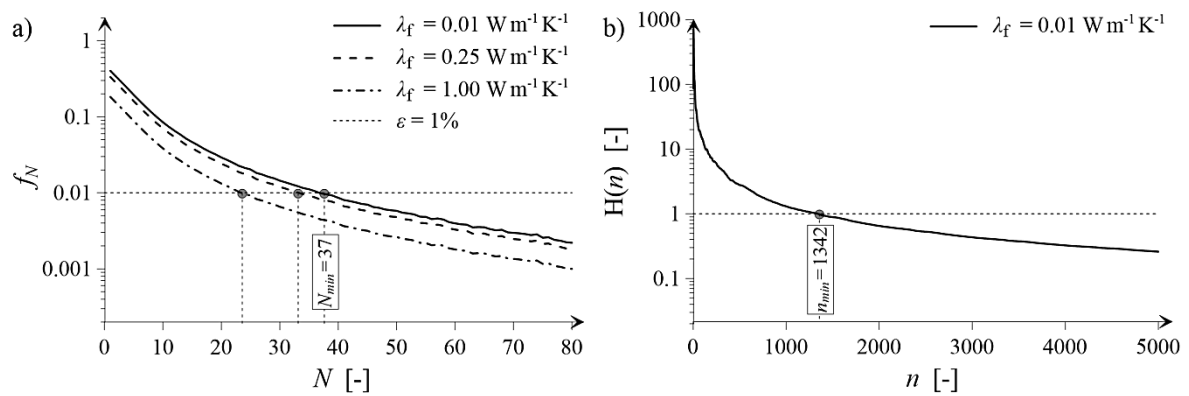
Rys. 6.24. a) Przebieg funkcji f_N względem wymiaru N ; b) funkcja $H(n)$ względem liczby realizacji n dla REO o $N_{\min} = 31$



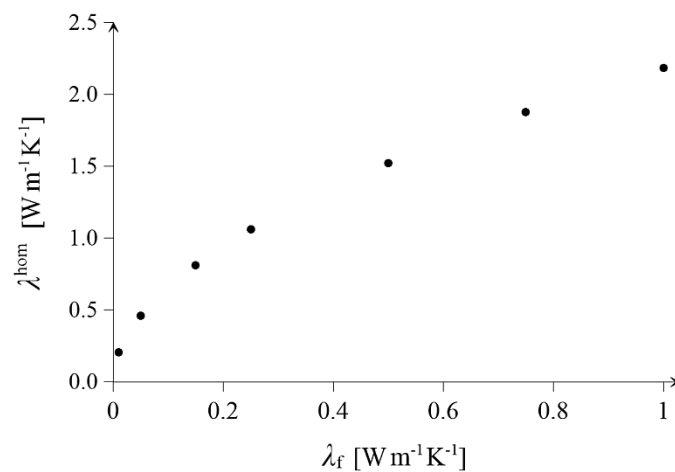
Rys. 6.25. Funkcja makroskopowej odpowiedzi materiałowej uzyskana dla rozwiązania zagadnienia bezpośredniego dla mikrostruktury Isinga (typ A)



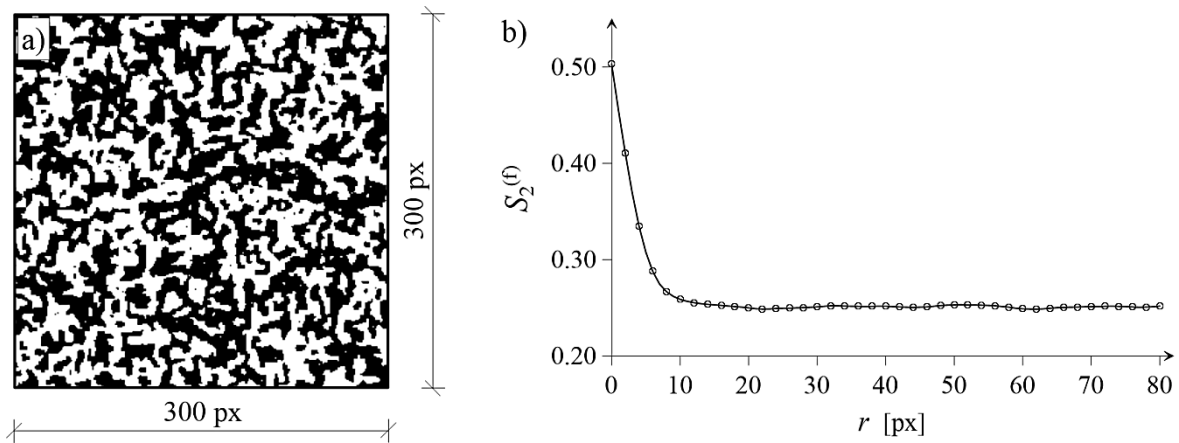
Rys. 6.26. a) Obraz binarny mikrostruktury Isinga (typ B) oraz b) funkcja prawdopodobieństwa dwu-punktowego dla przestrzeni porowej



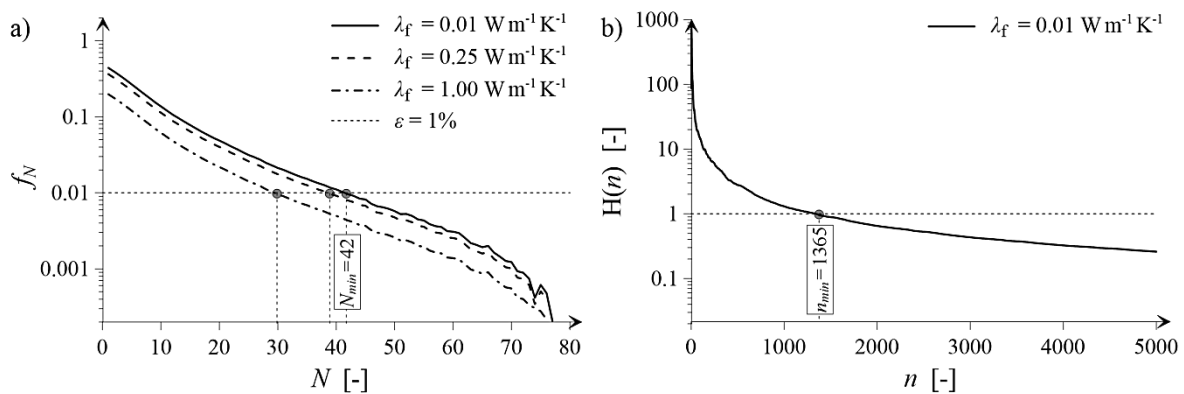
Rys. 6.27. a) Przebieg funkcji f_N względem wymiaru N ; b) funkcja $H(n)$ względem liczby realizacji n dla REO o $N_{\min} = 56$



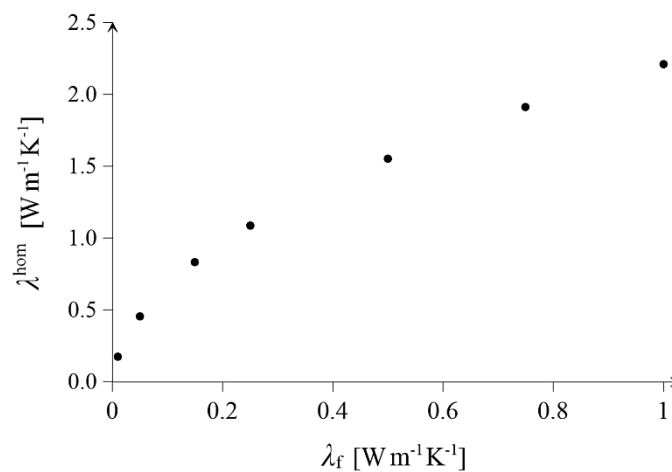
Rys. 6.28. Funkcja makroskopowej odpowiedzi materiałowej uzyskana dla rozwiązania zagadnienia bezpośredniego dla mikrostruktury Isinga (typ B)



Rys. 6.29. a) Obraz binarny mikrostruktury Isinga (typ C) oraz b) funkcja prawdopodobieństwa dwu-punktowego dla przestrzeni porowej



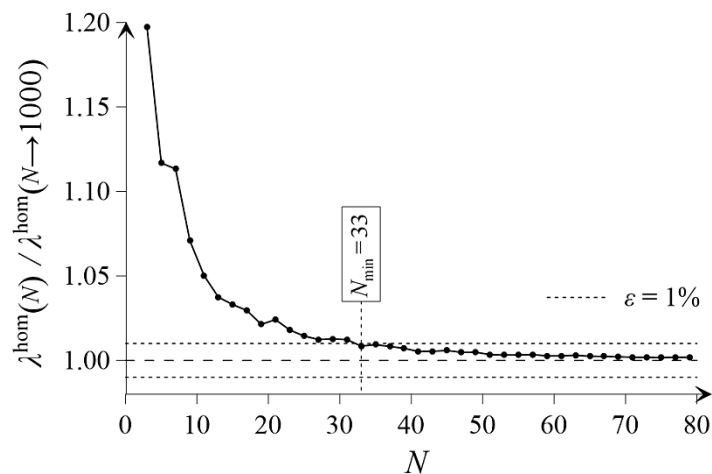
Rys. 6.30. a) Przebieg funkcji f_N względem wymiaru N ; b) funkcja $H(n)$ względem liczby realizacji n dla REO o $N_{\min} = 47$



Rys. 6.31. Funkcja makroskopowej odpowiedzi materiałowej uzyskana dla rozwiązania zagadnienia bezpośredniego dla mikrostruktury Isinga (typ C)

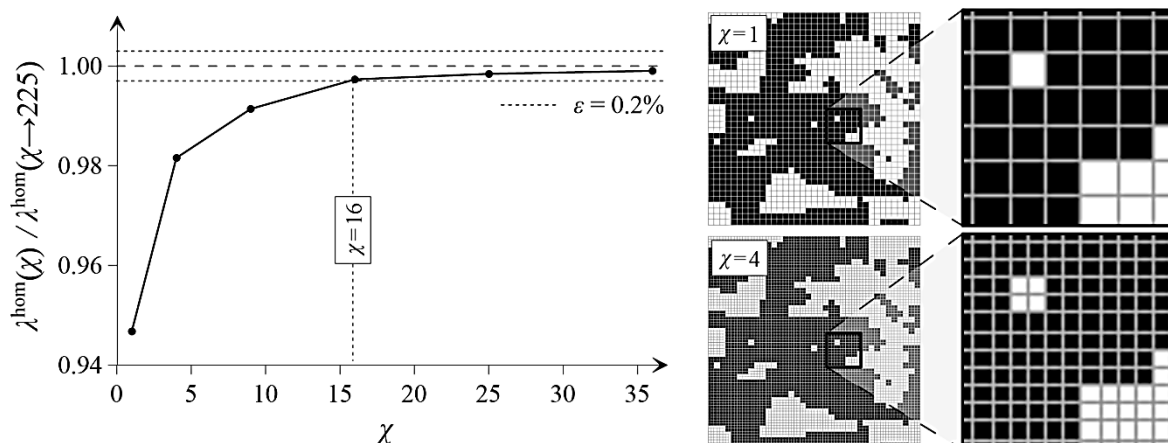
6.2.1.1. Uwagi

Warto nadmienić, że wyznaczone z warunku (6.8) minimalne wielkości REO dla każdej z rozważanych mikrostruktur były weryfikowane poprzez analizę zbieżności parametru makroskopowego dla co raz to większych objętości REO, zgodnie z procedurą przedstawioną na rys. 2.3. Na rys. 6.32 przedstawiono zbieżność estymatora Monte Carlo (2.15) względem wymiaru N dla jednej, przykładowej mikrostruktury, tj. modelu Isinga (typ B). Można zauważyć, że określony w ten sposób minimalny wymiar REO ($N_{\min} = 34$) jest mniejszy niż wymiar REO określony z warunku (6.8), dla którego N_{\min} wyniósł 37. Dla wszystkich pozostałych mikrostruktur stwierdzono identyczną zależność, tj. wymiar N_{\min} określony z warunku (6.8) był nie mniejszy niż ten wynikający ze zbieżności parametru makroskopowego, przy czym różnice w minimalnych wymiarach REO nie były większe niż kilkanaście procent. W konsekwencji minimalne wymiary REO określone w rozdziale 6.2.1 na podstawie warunku (6.8) są oczywiście poprawne.



Rys. 6.32. Zbieżność estymatora Monte Carlo (2.15) względem wymiaru N

Dodatkowo przed wykonaniem obliczeń docelowych, w których wyznaczono dyskretne wartości funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej wykonano wstępne symulacje numeryczne, których celem było wyznaczenie wymaganej dyskretyzacji obrazu cyfrowego objętościami kontrolnymi. W szczególności analizowano zbieżność parametru makroskopowego w funkcji liczby objętości kontrolnych dyskretyzujących pojedynczy piksel (χ) cyfrowej reprezentacji mikrostruktury. Liczne analizy wykazały, że podział pojedynczego piksela na 16 objętości kontrolnych ($\chi = 16$) gwarantuje błąd rozwiązania poniżej 0.2% względem rozwiązania uzyskanego dla $\chi = 225$. Na rys. 6.33 przedstawiono przykład zbieżności parametru makroskopowego względem parametru χ , ponownie dla mikrostruktury modelu Isinga (typ B) dla $\lambda_f = 0.01 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ (kontrast parametru $\Theta = 500$).



Rys. 6.33. Wpływ gęstości siatki metody objętości skończonych na wyznaczoną wartość λ^{hom}

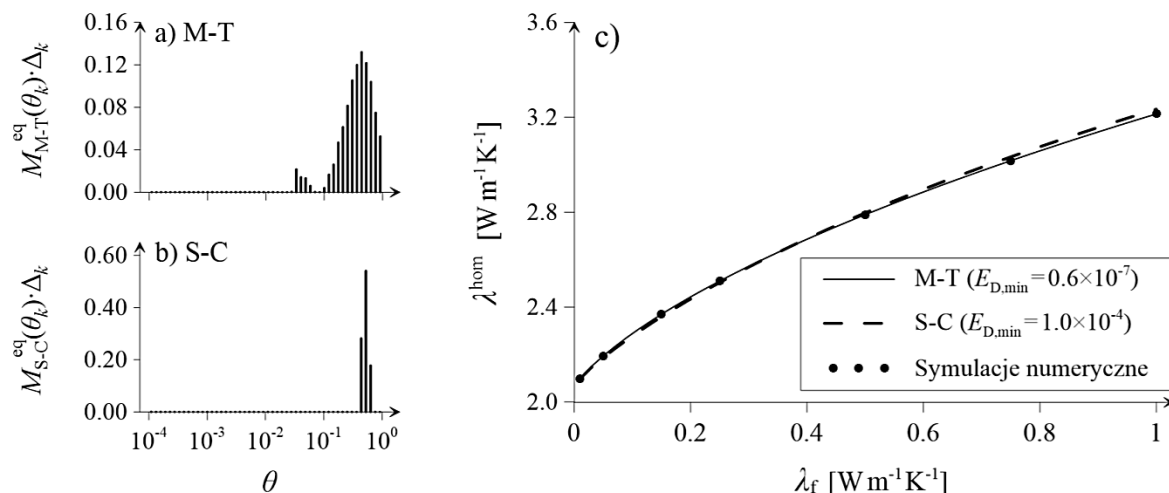
6.2.2. Funkcje ekwiwalentnej mikrostruktury dla obrazów cyfrowych

Dla wszystkich omawianych w punkcie 6.2.1. cyfrowych reprezentacji mikrostruktur oraz stowarzyszonych z nimi funkcji makroskopowych odpowiedzi materiałowych rozwiązano zagadnienie odwrotne w ujęciu schematów analitycznych M-T oraz S-C, celem określenia mikrostruktur ekwiwalentnych. Za każdym razem zagadnienie odwrotne rozwiązano wykorzystując sformułowaną wcześniej metodę stochastycznej optymalizacji i w efekcie, dla każdego przypadku, określono funkcję $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ w ujęciu obu wspomnianych schematów analitycznych.

Dla wszystkich rozważanych mikrostruktur prezentacje uzyskanych wyników zrealizowano w ten sam sposób. Oznacza to, że dla każdego przypadku zaprezentowano funkcje $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ określone na podstawie rozwiązania zagadnienia odwrotnego w ramach schematu M-T i S-C. Ponadto prezentuje się również odpowiadające im predykcje funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej.

Mikrostruktura zaprawy gipsowej zobrazona w microCT

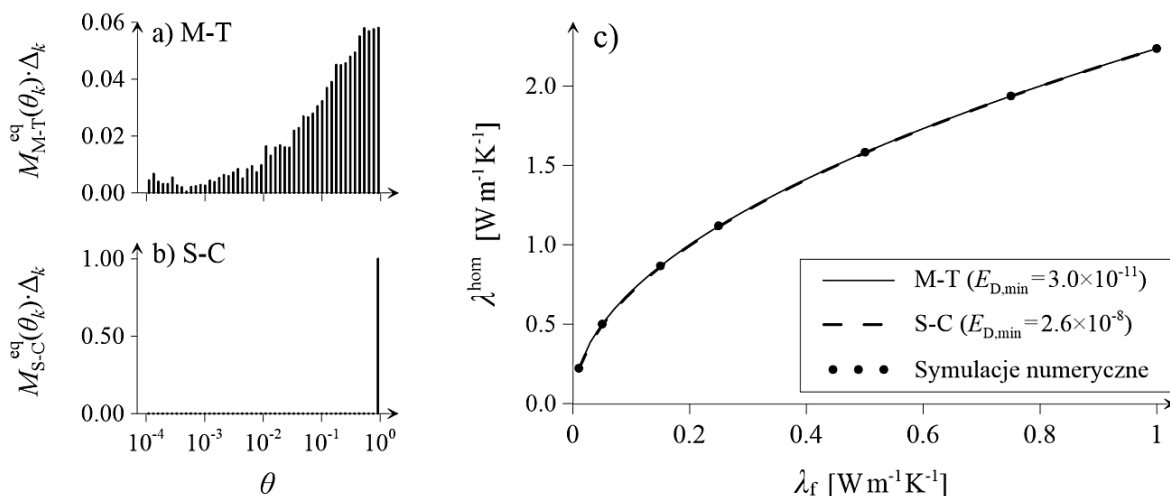
Na podstawie uzyskanych wyników widać, że funkcje $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla schematu M-T (rys. 6.34a) oraz schematu S-C (rys. 6.34b) wyraźnie różnią się od siebie. Co jednak ważniejsze, w obu przypadkach, otrzymano wręcz idealną predykcję założonej funkcji makroskopowej odpowiedzi (rys. 6.34c). Zatem, zidentyfikowane mikrostruktury, tj. funkcje gęstości prawdopodobieństwa są ekwiwalentnymi mikrostrukturami w sensie, w jakim zdefiniowano to w rozdziale 4.3. Na wykresach zawarto również wartości funkcji celu, dla której zatrzymano algorytm symulowanego wyżarzania. W przypadku rozważanej mikrostruktury wartość ta była na poziomie 10^{-7} oraz 10^{-4} , odpowiednio, dla analitycznego schematu aproksymacyjnego M-T i S-C.



Rys. 6.34. Funkcja $M^{eq} \cdot \Delta$ dla schematu: a) M-T i b) S-C, oraz c) odpowiadające im funkcje makroskopowej odpowiedzi materiałowej dla schematu M-T i S-C

Mikrostruktura losowej szachownicy (ang. *random checkerboard*)

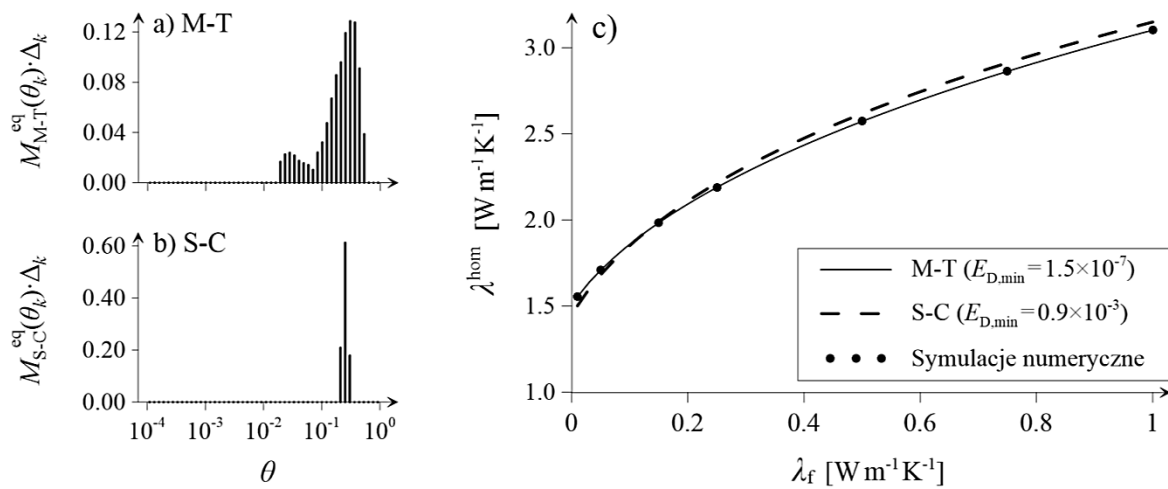
Analizując wyniki dla mikrostruktury losowej szachownicy widać, że tak jak poprzednio, funkcje ekwiwalentnej mikrostruktury różnią się w zależności od użytego schematu (patrz rys. 6.35a oraz rys. 6.35b). Ponadto, wartym uwagi jest fakt, iż w ramach schematu M-T zidentyfikowano w miarę ciągły rozkład prawdopodobieństwa, podczas gdy w schemacie S-C ekwiwalentna mikrostruktura, w zasadzie, utworzona jest z jednej dyskretnej rodziny wtrąceń o $\theta = 1$. Podobnie, jak w poprzednim przykładzie, zidentyfikowane mikrostruktury są ekwiwalentnymi, gdyż zapewniają wręcz idealną predykcję funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej (rys. 6.35c) – wartość funkcji celu jest na poziomie 10^{-8} oraz 10^{-11} , odpowiednio, dla schematu S-C oraz M-T.



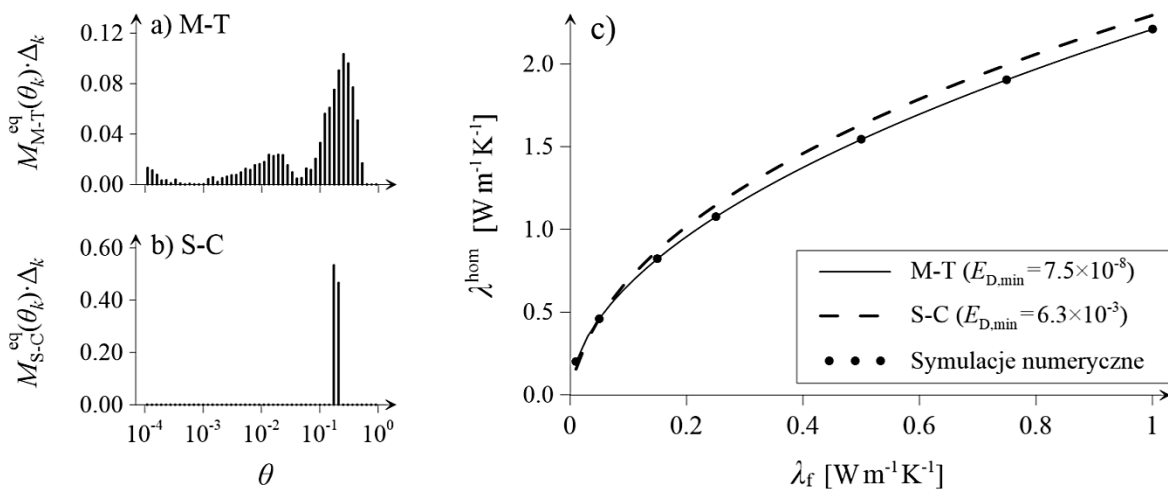
Rys. 6.35. Funkcja $M^{eq} \cdot \Delta$ dla schematu: a) M-T i b) S-C, oraz c) odpowiadające im funkcje makroskopowej odpowiedzi materiałowej dla schematu M-T i S-C

Mikrostruktura dla modelu Debye

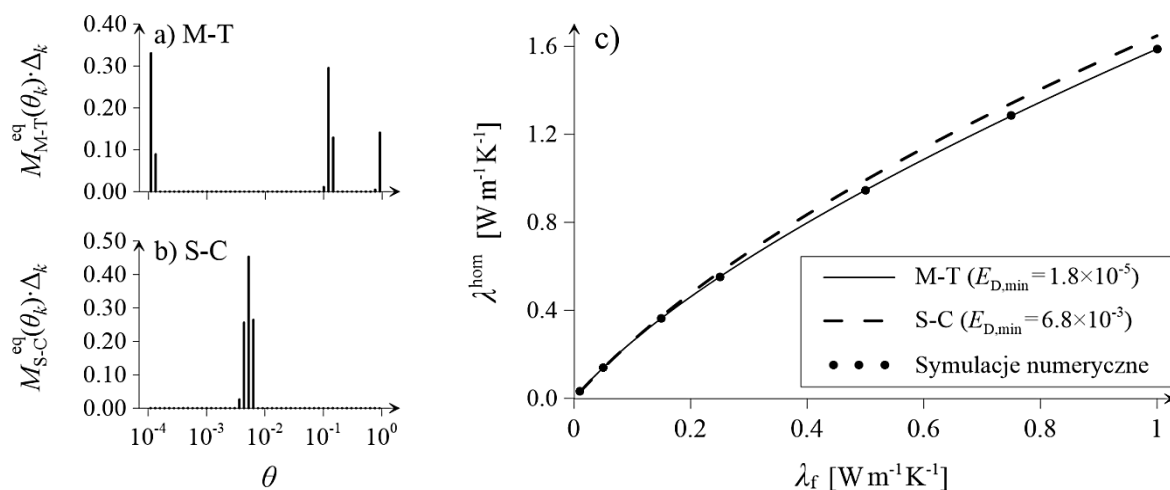
Ponownie, funkcje zidentyfikowane dla mikrostruktury modelu Debye znacząco się różnią w zależności od użytego w zagadnieniu schematu aproksymacyjnego (patrz rys. 6.36a-b, rys. 6.37a-b oraz rys. 6.38a-b). W szczególności, dla schematu M-T w przypadku $\phi_f = 0.3$ i $\phi_f = 0.5$ otrzymano funkcję $M^{eq} \cdot \Delta$ w postaci ciągłej, natomiast dla $\phi_f = 0.7$ funkcja ta zbiega do trzech dyskretnych rodzin wtrąceń. Dla schematu S-C funkcję $M^{eq} \cdot \Delta$, za każdym razem, zidentyfikowano w postaci jednej dyskretnej rodziny wtrąceń. Ponadto, wartość zidentyfikowanego parametru θ dla schematu S-C maleje wraz ze wzrostem porowatości mikrostruktury.



Rys. 6.36. Funkcja $M^{eq} \cdot \Delta$ mikrostruktury Debye ($\phi_f = 0.3$) dla schematu: a) M-T i b) S-C, oraz c) odpowiadające im funkcje makroskopowej odpowiedzi materiałowej dla schematu M-T i S-C



Rys. 6.37. Funkcja $M^{eq} \cdot \Delta$ mikrostruktury Debye ($\phi_f = 0.5$) dla schematu: a) M-T i b) S-C, oraz c) odpowiadające im funkcje makroskopowej odpowiedzi materiałowej dla schematu M-T i S-C



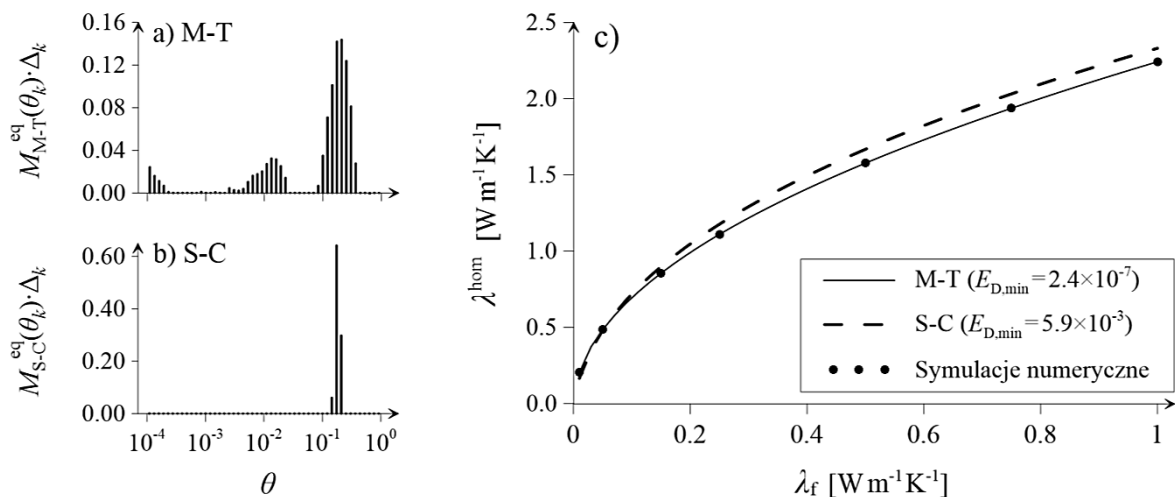
Rys. 6.38. Funkcja $M^{eq} \cdot \Delta$ mikrostruktury Debye ($\phi_f = 0.7$) dla schematu: a) M-T i b) S-C, oraz c) odpowiadające im funkcje makroskopowej odpowiedzi materiałowej dla schematu M-T i S-C

Zauważmy, że dla wszystkich trzech rozważanych przypadków schemat M-T zapewnia idealną predykcję funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej – minimalna wartość funkcji celu ($E_{D,min}$) jest na poziomie $10^{-5} - 10^{-8}$. Zatem dla tego schematu z pewnością zidentyfikowane mikrostruktury można określić mianem ekwiwalentnych.

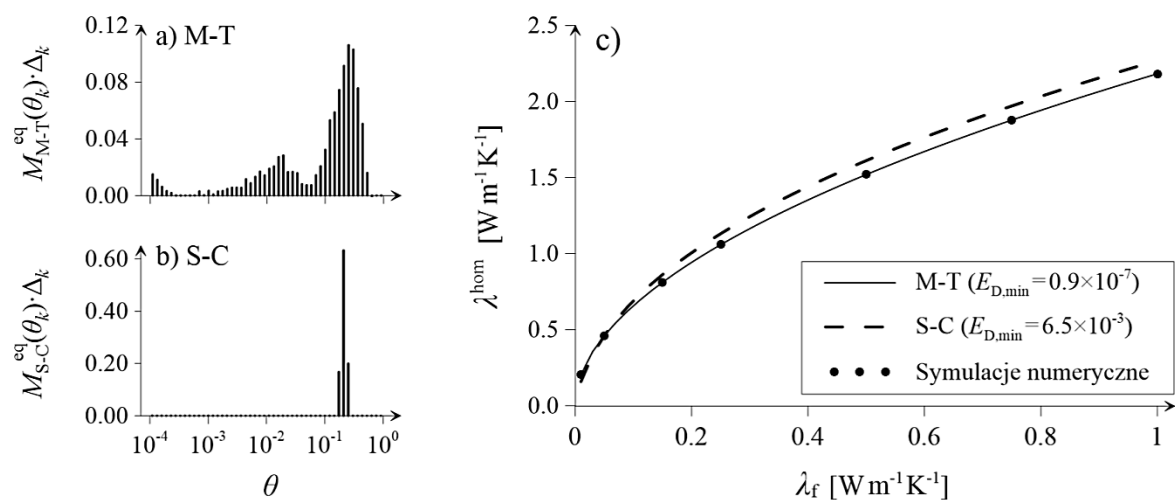
W przypadku schematu S-C, osiągnięto wartości funkcji celu $E_{D,min}$ na poziomie 10^{-3} . Oznacza to, że predykcja makroskopowej odpowiedzi ośrodka jest wyraźnie gorsza, w stosunku do tej uzyskanej za pomocą schematu M-T. Zauważmy zatem, że rozwiązania zagadnień odwrotnych zachowują się w bardzo podobny sposób do tego jaki uzyskano w przypadku zadania testowego, w którym funkcja F^{mom} dana była w postaci dolnego oraz górnego ograniczenia H-S (rozdział 4.3.1). Konsekwencją tego jest to, iż w przypadku schematu S-C zidentyfikowane mikrostruktury nie powinny być uznawane za ekwiwalentne, a należy je traktować bardziej jako mikrostruktury „optymalne”, tzn. takie, które zapewniają minimum funkcji celu E_D .

Mikrostruktura dla modelu Isinga

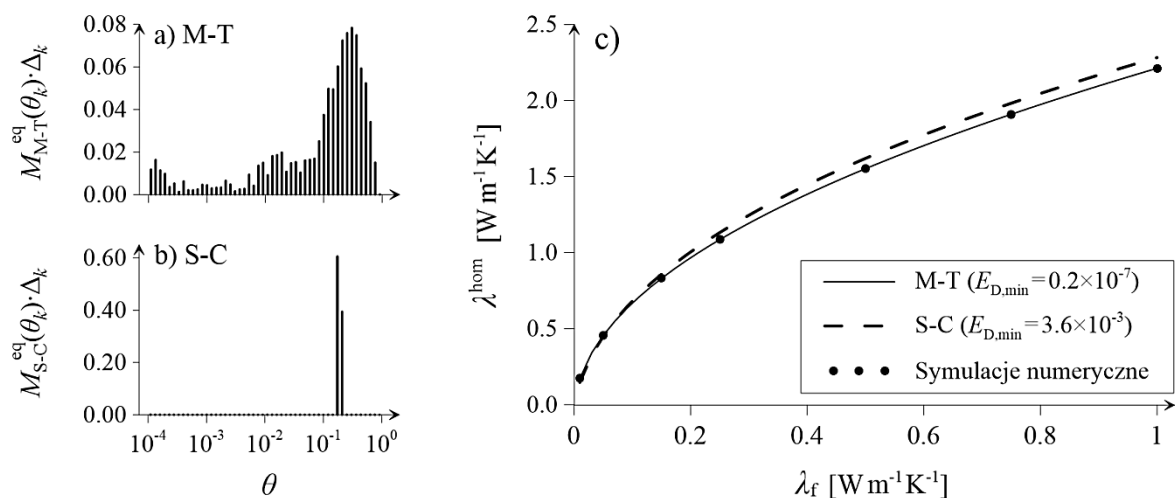
Sposób prezentacji wyników uzyskanych dla trzech mikrostruktur Isinga (typ A, B oraz C) jest analogiczny jak w poprzednich przykładach. Zauważmy, że uzyskane rezultaty są bardzo zbliżone do tych prezentowanych w przykładzie z mikrostrukturą według modelu Debye. Schemat M-T identyfikuje praktycznie ciągłe rozkłady i zapewnia bardzo dobrą predykcję funkcji makroskopowej odpowiedzi. W przypadku schematu S-C uzyskuje się ponownie niemal dyskretny rozkład funkcji $M^{eq} \cdot \Delta$. Zidentyfikowane w tym schemacie funkcje nie zapewniają tak dobrej predykcji odpowiedzi makroskopowej jak dla schematu M-T. Ponownie, zidentyfikowane dla schematu S-C mikrostruktury należy określić mianem „optymalnych”.



Rys. 6.39. Funkcja $M^{eq} \cdot \Delta$ mikrostruktury Isinga (typ B) dla schematu: a) M-T i b) S-C, oraz c) odpowiadające im funkcje makroskopowej odpowiedzi materiałowej dla schematu M-T i S-C



Rys. 6.40. Funkcja $M^{eq} \cdot \Delta$ mikrostruktury Isinga (typ A) dla schematu: a) M-T i b) S-C, oraz c) odpowiadające im funkcje makroskopowej odpowiedzi materiałowej dla schematu M-T i S-C



Rys. 6.41. Funkcja $M^{eq} \cdot \Delta$ mikrostruktury Isinga (typ C) dla schematu: a) M-T i b) S-C, oraz c) odpowiadające im funkcje makroskopowej odpowiedzi materiałowej dla schematu M-T i S-C

6.3. Ekwiwalentna mikrostruktura – identyfikacja na podstawie laboratoryjnego oznaczania makroskopowej funkcji odpowiedzi materiałowej

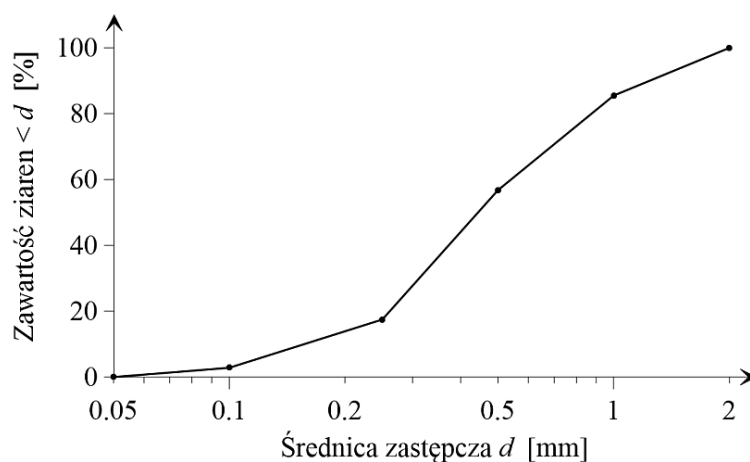
W dalszej części rozprawy podjęto próbę określenia funkcji ekwiwalentnej mikrostruktury (M^{eq}) dla rzeczywistego ośrodka porowatego, tj. piasku średniego (MSa), którego opis mikrostruktury zaprezentowano w rozdziale 6.3.1. Jak wspomniano już wcześniej, do sformułowania i rozwiązania zagadnienia odwrotnego niezbędna jest informacja na temat udziału frakcyjnego przestrzeni porowej ośrodka (porowatość gruntu) (ϕ_f), przewodności cieplnej szkieletu gruntowego (λ_s) oraz funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej (F^{mom}). Porowatość piasku średniego (MSa) oznaczono w badaniach laboratoryjnych. Z kolei oszacowanie wartości λ_s oraz określenie dyskretnych wartości funkcji F^{mom} opisano w rozdziałach, odpowiednio, 6.3.2 i 6.3.3.

6.3.1. Piasek średni (MSa) – miary mikrostruktury

Podstawowe parametry, określone w badaniach laboratoryjnych, zestawiono w tabeli 6.3. Krzywą uziarnienia, którą wyznaczono na podstawie analizy sitowej, zaprezentowano na rys. 6.42. Porowatość piasku wyznaczono na podstawie wzoru (6.4); parametry ρ_s i ρ_d określono, odpowiednio, metodą piknometryczną i metodą cylindra.

Tabela 6.3. Podstawowe parametry rozważanego ośrodka gruntowego

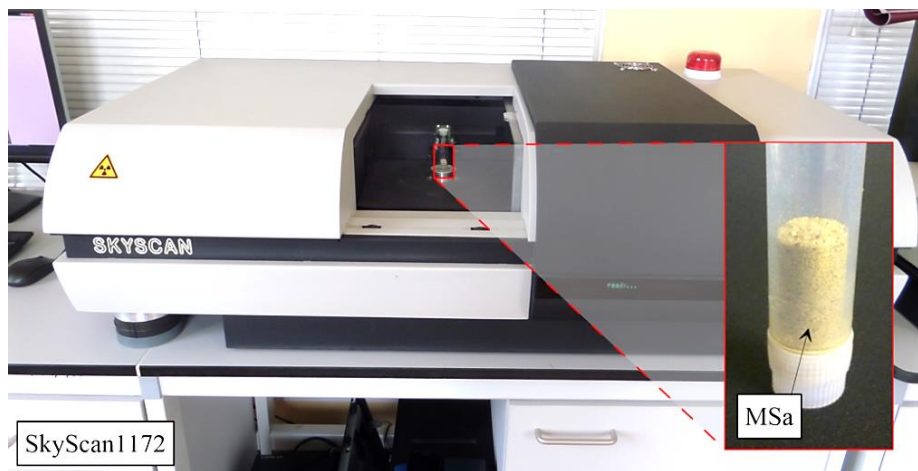
Nazwa gruntu	Symbol gruntu	Gęstość objętościowa ρ_d [g/cm ³]	Gęstość szkieletu gruntowego ρ_s [g/cm ³]	Porowatość ϕ_f [%]	Wilgotność naturalna w_n [%]
Piasek średni	MSa	1.80	2.64	31.8	0



Rys. 6.42. Krzywa uziarnienia rozważanego ośrodka gruntowego

Morfologia MSa – mikrotomografia komputerowa

W celu uzyskania trójwymiarowej rekonstrukcji mikrostruktury rozważanego ośrodka gruntowego, zobrazowano go metodą rentgenowskiej mikrotomografii komputerowej (mCT). Do badań wykorzystano mikrotomograf firmy Bruker SkyScan (Kontich, Belgia), model SkyScan1172, który charakteryzuje się polichromatyczną wiązką źródła promieniowania lampy rentgenowskiej o mocy 10 W i natężeniu od 20 do 100 [kV]. Można w nim uzyskać rozdzielczość od 0.5 do 27 [$\mu\text{m}/\text{px}$] (mikrometrów na jeden piksel) w zależności od rozmiaru skanowanego obiektu. Czas trwania badania uzależniony jest w dużej mierze od użytej rozdzielczości i czasu ekspozycji, i wynosić może od kilkunastu minut, dla rozdzielczości 27 $\mu\text{m}/\text{px}$, do nawet kilku dni, dla rozdzielczości 0.5 $\mu\text{m}/\text{px}$. Maksymalna wielkość skanowanego obiektu w użytym skanerze może mieć 80 mm wysokości i średnicę do 54 mm.

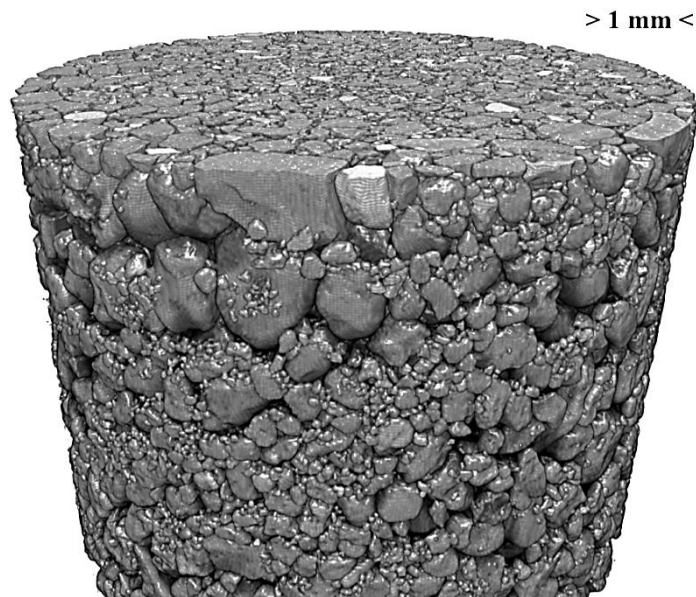


Rys. 6.43. Widok mikrotomografu SkyScan1172 wraz z wnętrzem komory i zamocowaną próbką

Dla badanej próbki piasku średniego umieszczonej w szczelnym statywie o średnicy wewnętrznej 20 mm (rys. 6.43) wykorzystano następujące parametry skanowania:

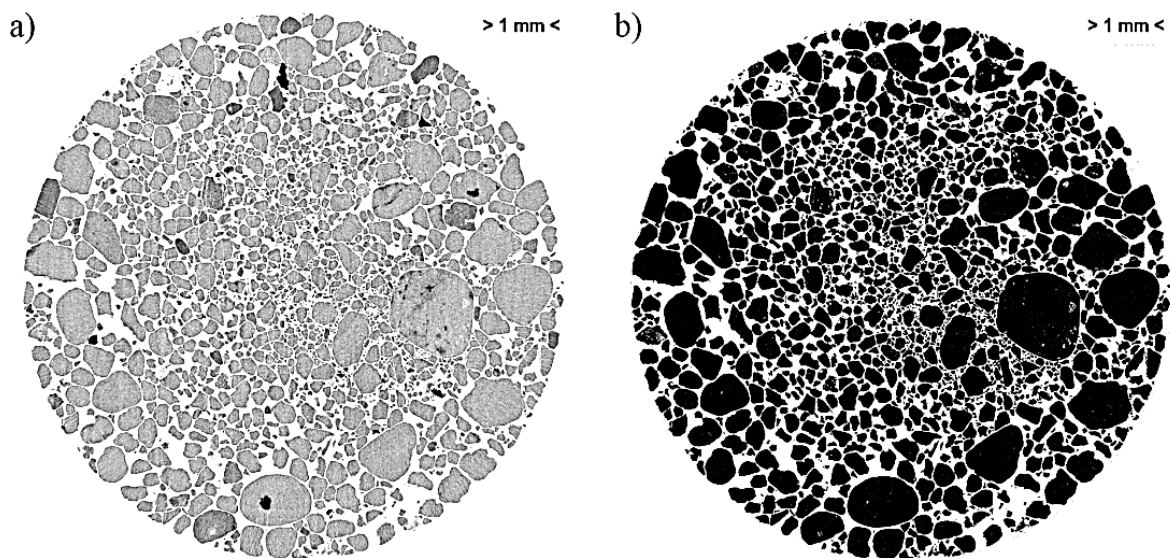
- natężenie lampy: 80 kV,
- filtr: Al 0.5 mm,
- rozdzielczość: 6.5 $\mu\text{m}/\text{px}$,
- czas ekspozycji: 1200 ms,
- kąt/skok obrotu próbki: 360°/0.15°,

co w konsekwencji skutkowało czasem badania równym 8 godz. W celu otrzymania serii przekrojów 2D otrzymany zestaw projekcji zrekonstruowano w programie NRecon, wykorzystującym algorytm rekonstrukcji Feldkampa (Feldkamp i in., 1984). Następnie, na podstawie otrzymanych przekrojów zbudowano model 3D próbki (rys. 6.44).



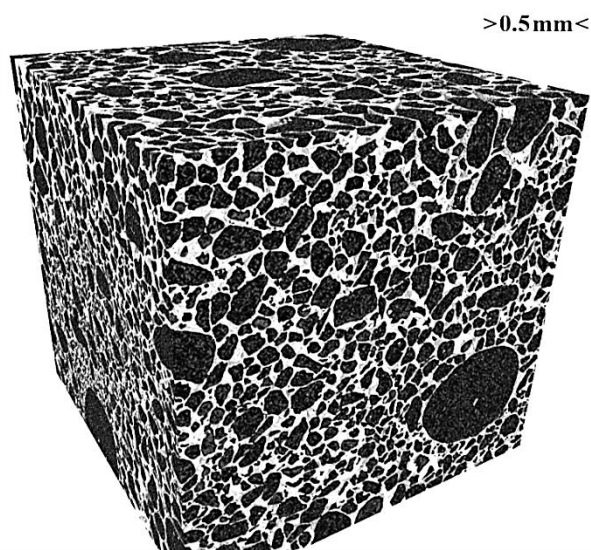
Rys. 6.44. Obraz 3D próbki MSa w skali szarości

W celu dokonania analizy ilościowej dla konkretnego składnika mikrostruktury należy go uprzednio wysegmentować, tj. „wydzielić” z całości dyskretnego modelu mikrostruktury. Segmentacja dla ośrodka dwu-składnikowego polega na zamianie obrazu w skali szarości (skala od 0 do 255) na obraz binarny (piksele o wartości 0 lub 1) według odpowiednio przyjętego kryterium. Celem takiej operacji jest przyporządkowanie odpowiedniej grupy pikseli w różnych odcieniach szarości do poszczególnych składników kompozytu. Niekiedy konieczne jest uprzednie wyeliminowanie „szumów” w obrazach uzyskanych w procesie rekonstrukcji materiału; dla badanej próbki MSa zastosowano filtr Kuwahara o promieniu 2 px. Następnie, na podstawie histogramu współczynnika pochłaniania określono wartość progową skali szarości stanowiącą wartość graniczną pomiędzy składnikami. Piksele jaśniejsze niż wartość progowa zostały przyporządkowane do przestrzeni porowej, podczas gdy piksele ciemniejsze – do szkieletu. Na rys. 6.45a przedstawiono przykładowy przekrój przez skanowaną próbkę w skali szarości (przed segmentacją) oraz na rys. 6.45b obraz binarny (po segmentacji), na którym kolor biały reprezentuje przestrzeń porową, a kolor czarny – szkielet gruntowy.

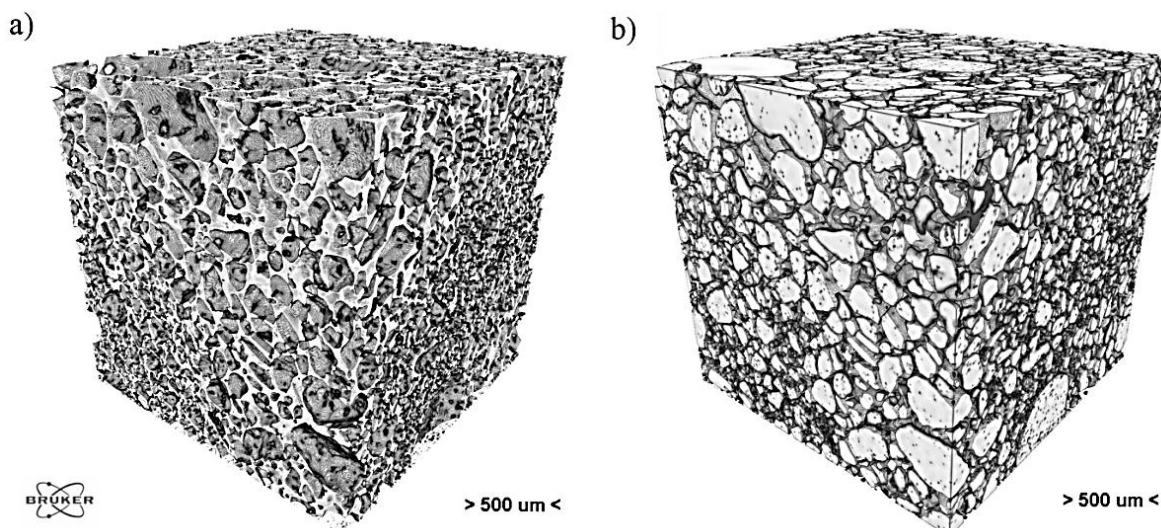


Rys. 6.45. Przykładowy obraz przekroju próbki MSa: a) w skali szarości (przed segmentacją) oraz b) binarny (po segmentacji)

W celu wyeliminowania efektu brzegu (rozumianego tu jako wpływ brzegu próbki na reprezentatywność mikrostruktury), do dalszej analizy wydzielono jedynie część zrekonstruowanego obrazu próbki, tzw. VOI (ang. *volume of interest*). W tym przypadku jest to sześcian o boku 10 mm, co zilustrowano na kolejnych rysunkach. Na rys. 6.46 przedstawiono binarny obraz 3D mikrostruktury ograniczony do VOI, widziany w perspektywie. Z kolei na rys. 6.47 przedstawiono wydzielone dwa składniki MSa – przestrzeń porową (rys. 6.47a) oraz szkielet gruntowy (rys. 6.47b). Widać, że mikrostruktura badanego ośrodka porowatego jest bardzo skomplikowana, ponieważ ziarna charakteryzują się dużą różnorodnością kształtów i wymiarów, a ich wzajemne ułożenie względem siebie, co oczywiste, nie jest regularne.



Rys. 6.46. Obraz binarny próbki MSa ograniczony do VOI



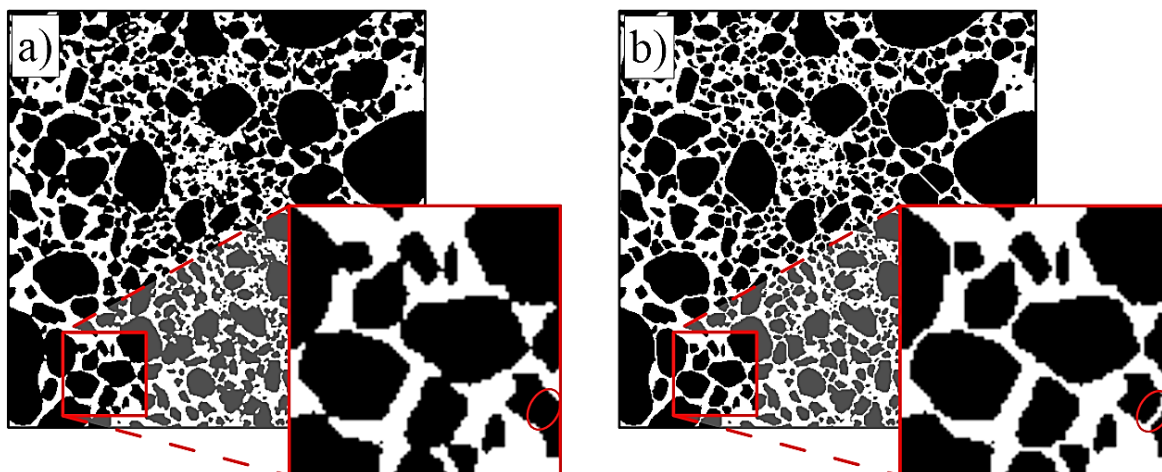
Rys. 6.47. Obrazy 3D mikrostruktury MSA dla: a) przestrzeni porowej i b) szkieletu gruntowego

Należy tu wyraźnie podkreślić, że otrzymywane z mikrotomografii obrazy nie stanowią rzeczywistego odzwierciedlenia mikrostruktury próbki, a są pewną jej rekonstrukcją, opartą na ograniczonej informacji zawartej w płaskich projekcjach. W konsekwencji należy mieć na uwadze, że efekt końcowy otrzymanej rekonstrukcji zależy od zastosowanych algorytmów oraz użytych parametrów, które zwykle są obarczone subiektywną oceną operatora urządzenia.

W szczególności, na uzyskiwanych obrazach bardzo często powstają różnego rodzaju zaburzenia w postaci tzw. artefaktów. Ponadto, krawędzie poszczególnych składników mikrostruktury mogą zostać zniekształcone w trakcie dyskretyzacji obrazu na poszczególne piksele/woksele. Stopień takiego zniekształcenia w dużej mierze zależy od użytej rozdzielczości skanowania. Konsekwencją złego doboru rozdzielczości może być niewystarczająco precyzyjne odzwierciedlenie kontaktu poszczególnych składników kompozytu. W przypadku materiału sypkiego, rzeczywista powierzchnia kontaktu poszczególnych ziaren/granulek w wielu miejscach jest „punktowa”, co bardzo trudno dokładnie odzwierciedlić na obrazie wokselowym. W konsekwencji, skutkuje to niedoszacowaniem bądź przeszacowaniem niektórych miar mikrostruktury, a także wartości parametrów mechanicznych ośrodka.

W zależności od rodzaju przeprowadzanych analiz, istnieją pewne techniki, które z przedstawionymi powyżej problemami, pozwalają sobie w pewnym stopniu poradzić. Jeżeli chcemy przeanalizować statystyczne miary dotyczące cząstek, np. ich wielkość oraz kształt, to koniecznym jest ich uprzednie rozdzielenie. W tym celu możliwe jest wykorzystanie filtra *watershed*, którego nazwa wywodzi się z geologii i odnosi do działu

wód (rozgraniczenia sąsiednich dorzeczy/wód powierzchniowych). Na rys. 6.48 przedstawiono przykładowy przekrój 2D rozważanej próbki MSA, przed i po zastosowaniu filtra *watershed*. Widać, że poszczególne ziarna na rys. 6.48b w porównaniu do rys. 6.48a nie łączą się ze sobą. Warto także zwrócić uwagę, że algorytm ten niekiedy generuje pewne artefakty, np. zdarza się, że podłużne ziarna dzieli na pół (rys. 6.48b).



Rys. 6.48. Binarny obraz mikrostruktury MSA: a) przed i b) po, zastosowaniu filtra *watershed*

Widać wyraźnie, że uzyskiwane obrazy cyfrowe, będące dyskretną reprezentacją morfologii mikrostruktury, zależą w dużym stopniu od zastosowanych filtrów. Ma to oczywiście swoje konsekwencje w dalszych analizach przeprowadzonych po ich użyciu. Zilustrowano to w dalszej części pracy, gdzie wybrane miary statystyczne, dla badanej próbki MSA, określone zostały dla mikrostruktur, przed i po zastosowaniu filtra *watershed*.

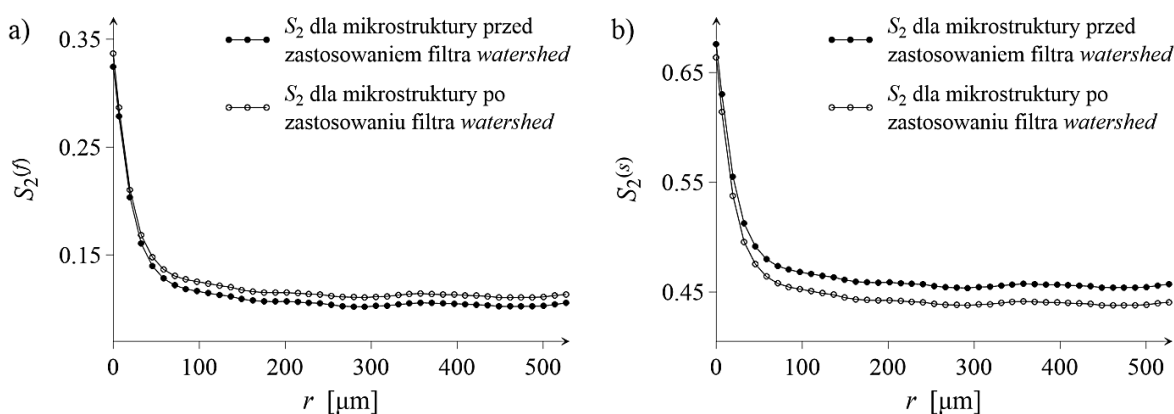
Prawdopodobieństwo 1-punktowe

Prawdopodobieństwo 1-punktowe dla obu składników mikrostruktury MSA wyznaczono na podstawie wzoru (6.3). Udział frakcyjny przestrzeni porowej (ϕ_f) oraz szkieletu gruntowego (ϕ_s) przed zastosowaniem filtra *watershed* wyniósł, odpowiednio, 0.324 i 0.676. Zastosowanie filtra *watershed* skutkuje w zwiększeniu porowatości materiału do $\phi_f=0.336$ i, co naturalne, zmniejszeniu udziału frakcyjnego szkieletu do $\phi_s=0.664$. Powyższe jest konsekwencją tego, iż część pikseli na kontakcie poszczególnych ziaren gruntu została zamieniona na piksele przynależące do przestrzeni porowej.

Różnica porowatości wyznaczonej na podstawie obrazów cyfrowych względem badań makroskopowych (patrz tabela 6.3), przed i po zastosowaniu filtra *watershed* wynosi, odpowiednio 1.9% i 5.7%. Uzyskany błąd może być skutkiem względnie małej wielkości skanowanej próbki oraz dokonanej operacji segmentacji.

Funkcja prawdopodobieństwa 2-punktowego

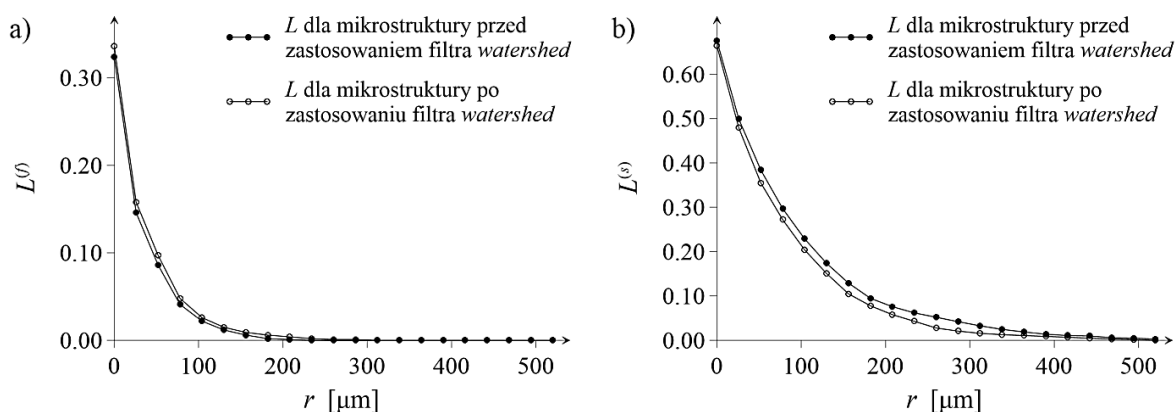
W kolejnym kroku wyznaczono funkcję prawdopodobieństwa 2-punktowego dla mikrostruktury MSa, ponownie, przed i po zastosowaniu filtra *watershed*. Obliczenia wykonano korzystając z symulacji Monte-Carlo. Otrzymane rezultaty zaprezentowano na rys. 6.49. Widać, że dla promienia $r \rightarrow 0$ wartości $S_2^{(f)}$ i $S_2^{(s)}$ zbiegają odpowiednio do udziałów frakcyjnych ϕ_f i ϕ_s . Z kolei dla promienia $r \rightarrow \infty$ prawdopodobieństwo 2-punktowe oscyluje wokół wartości ϕ_f^2 i ϕ_s^2 . Zastosowanie filtra *watershed* skutkuje w tym przypadku pewnym „przeskalowaniem” funkcji S_2 ze względu na różnicę udziałów frakcyjnych poszczególnych składników materiału. Ponadto, widać też zmianę nachylenia funkcji S_2 dla r długości 0 - 50 μm , co ma również związek ze zmianą powierzchni właściwej ziaren (patrz zależność (6.6)). Nie zauważa się natomiast zmiany w charakterze oscylacji funkcji S_2 dla obu składników ośrodka po zastosowaniu rozważanego filtra.



Rys. 6.49. Prawdopodobieństwo 2-punktowe (S_2) dla mikrostruktury MSa przed i po zastosowaniu filtra *watershed* dla: a) przestrzeni porowej i b) szkieletu gruntowego

Funkcja prawdopodobieństwa odcinkowego

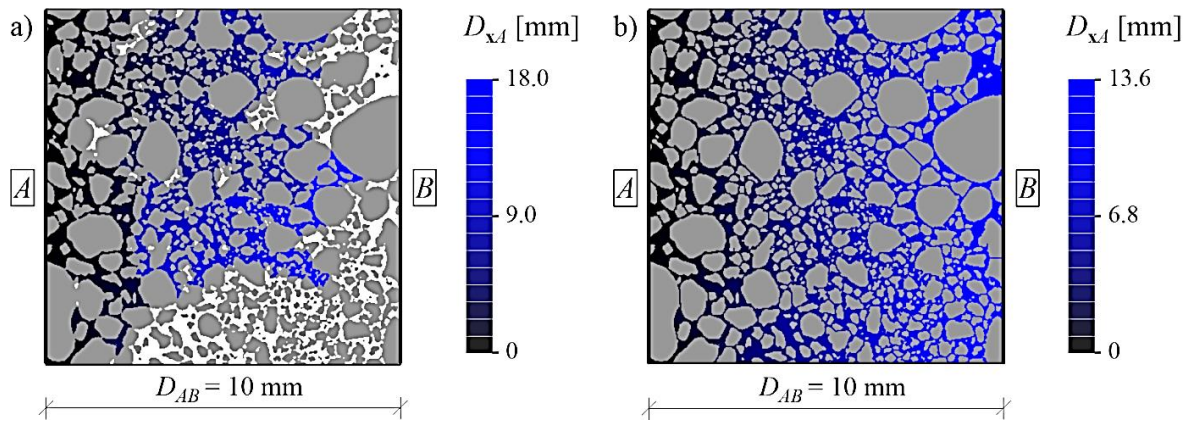
W analogiczny sposób określono funkcję prawdopodobieństwa odcinkowego. Ponownie wykorzystano w tym celu symulacje Monte-Carlo. Uzyskane rezultaty przedstawiono na rys. 6.50a, dla przestrzeni porowej – funkcja ($L^{(f)}$), oraz na rys. 6.50b, dla szkieletu gruntowego – funkcja ($L^{(s)}$). Dla $r \rightarrow 0$ funkcje $L^{(f)}$ i $L^{(s)}$ zbiegają, odpowiednio, do wartości ϕ_f i ϕ_s . Z kolei dla $r \rightarrow \infty$ wartości te zbiegają do zera. Na wykresach zauważyć można nieznaczne „przeskalowanie” funkcji L dla mikrostruktury MSa, przed i po zastosowaniu rozważanego filtra. Wobec czego, podobnie jak w przypadku funkcji S_2 , użycie filtra *watershed* nie wpływa znacząco na otrzymane wyniki.



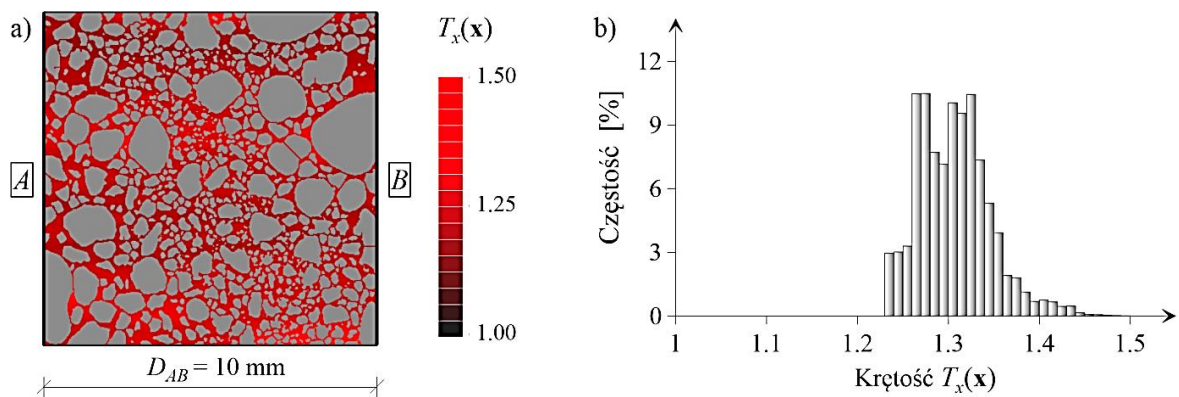
Rys. 6.50. Funkcja *linear-path* (L) dla mikrostruktury MSa, przed i po zastosowaniu filtra *watershed* dla: a) przestrzeni porowej i b) szkieletu gruntowego

Krętość

Fundamentalne znaczenie zastosowania filtra *watershed* można pokazać przy wyznaczaniu krętości dla dwu-wymiarowego przekroju rozważanego ośrodka gruntowego (MSa). Przykładowe mapy D_{xA} , dla przestrzeni porowej na kierunku x , przedstawione na rys. 6.51 obrazują, że bez zastosowania tego filtra, przestrzeń porowa nie jest drożna (kolor biały) i przepływ płynu, czy strumienia ciepła przez ten ośrodek nie byłby teoretycznie możliwy. W konsekwencji, nie byłoby możliwe wyznaczenie krętości w 2D dla przestrzeni porowej bez zastosowania filtra *watershed*. Mapę krętości oraz jej histogram przedstawiono zatem tylko dla przypadku, w którym zastosowano filtr *watershed* (rys. 6.52) – krętość w 2D, na kierunku x , dla poszczególnych pikseli przestrzeni porowej jest w przedziale od 1.23 do 1.48.



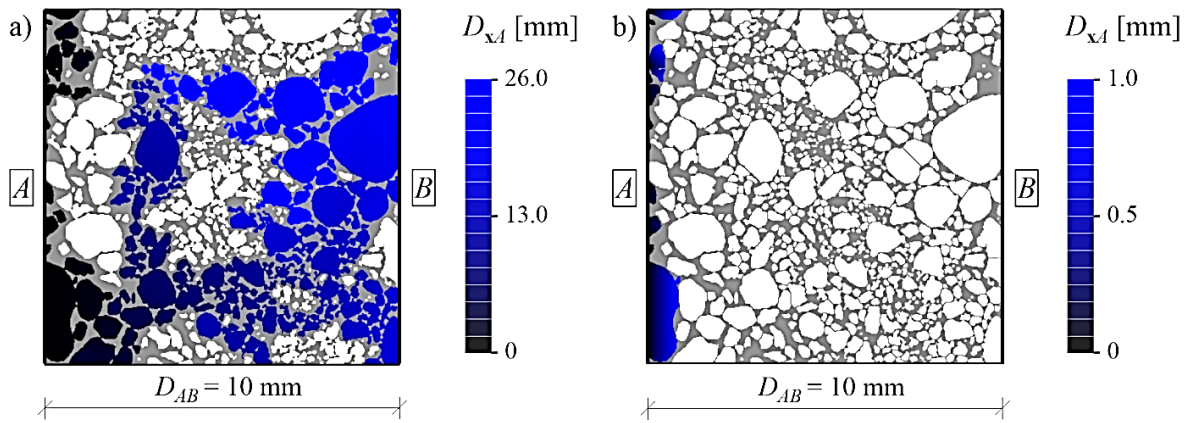
Rys. 6.51. Mapa D_{xA} w obrębie przestrzeni porowej na kierunku x dla mikrostruktury MSa: a) przed i b) po zastosowaniu filtra *watershed*



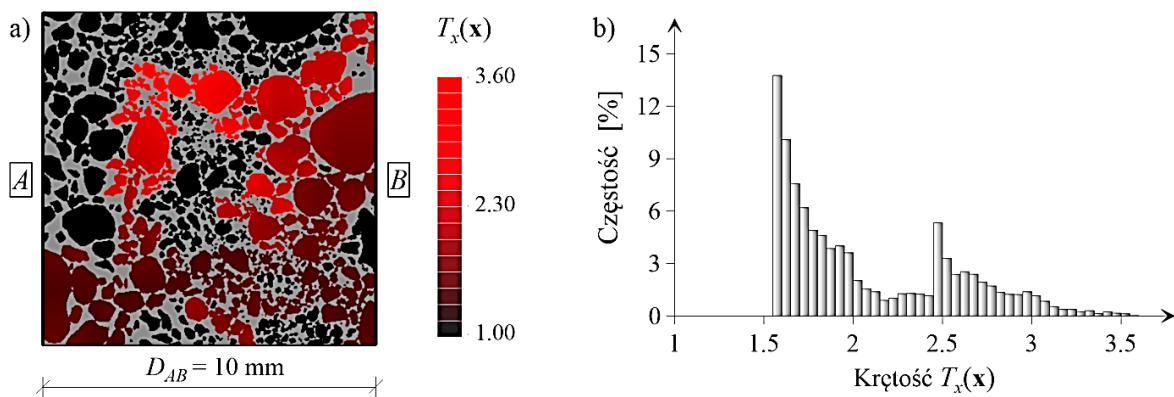
Rys. 6.52. a) Mapa oraz b) histogram, krętości w obrębie przestrzeni porowej na kierunku x dla mikrostruktury MSa po zastosowaniu filtra *watershed*

Zastosowanie filtra *watershed* do określenia krętości dla szkieletu gruntowego ma odwrotny wpływ, aniżeli w przypadku przestrzeni porowej. Mapy D_{xA} dla kierunku x przedstawiono na rys. 6.53. Widać, że tym razem po zastosowania tego filtra przepływ np. strumienia ciepła wyłącznie przez szkielet gruntowy nie byłby teoretycznie możliwy. Mapę krętości oraz jej histogram dla szkieletu gruntowego przedstawiono zatem tylko dla mikrostruktury bez stosowania filtra *watershed* (rys. 6.54). Dla tego przypadku krętość na kierunku x dla poszczególnych drożnych pikseli szkieletu gruntowego jest w przedziale od 1.55 do 3.60. Należy zwrócić uwagę, że nawet bez zastosowania filtra *watershed* nie wszystkie, a jedynie część ziaren się ze sobą łączy i tworzy spójną całość w poszczególnych przekrojach 2D.

Wobec powyższego krętość ośrodka gruntowego, a także innych ośrodków granulowanych należy określać dla modelu 3D, ponieważ analiza jedynie dwu-wymiarowych przekrojów prowadzi do niemiernodajnych rezultatów ze względu na brak możliwości odzwieriedlenia przestrzennego połączenia poszczególnych ziaren mikrostruktury.



Rys. 6.53. Mapa D_{xA} w obrębie szkieletu gruntowego na kierunku x dla mikrostruktury MSa: a) przed i b) po, zastosowaniu filtra *watershed*

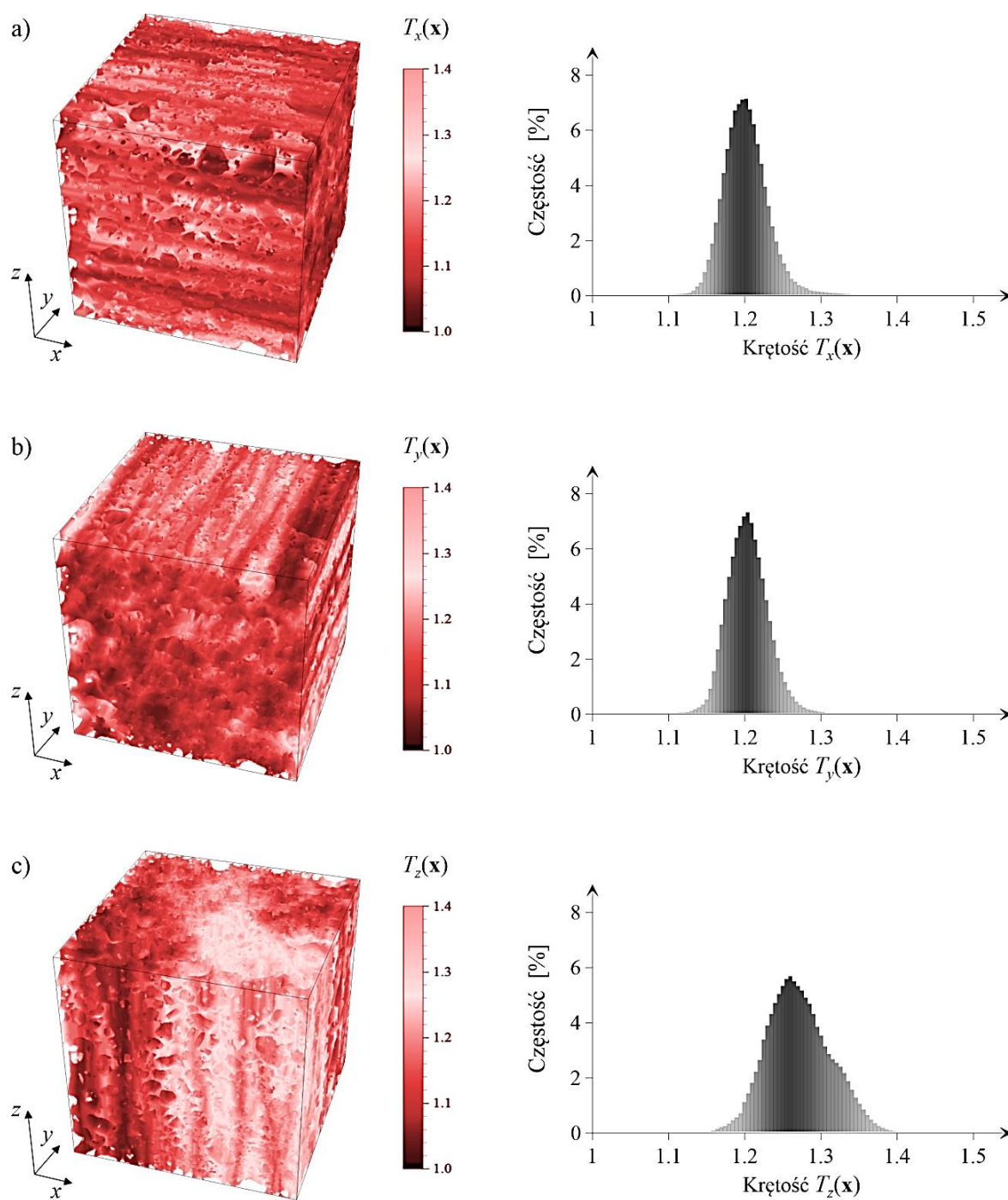


Rys. 6.54. a) Mapa oraz b) histogram, krętości w szkieletu gruntowego na kierunku x dla mikrostruktury MSa przed zastosowaniem filtra *watershed*

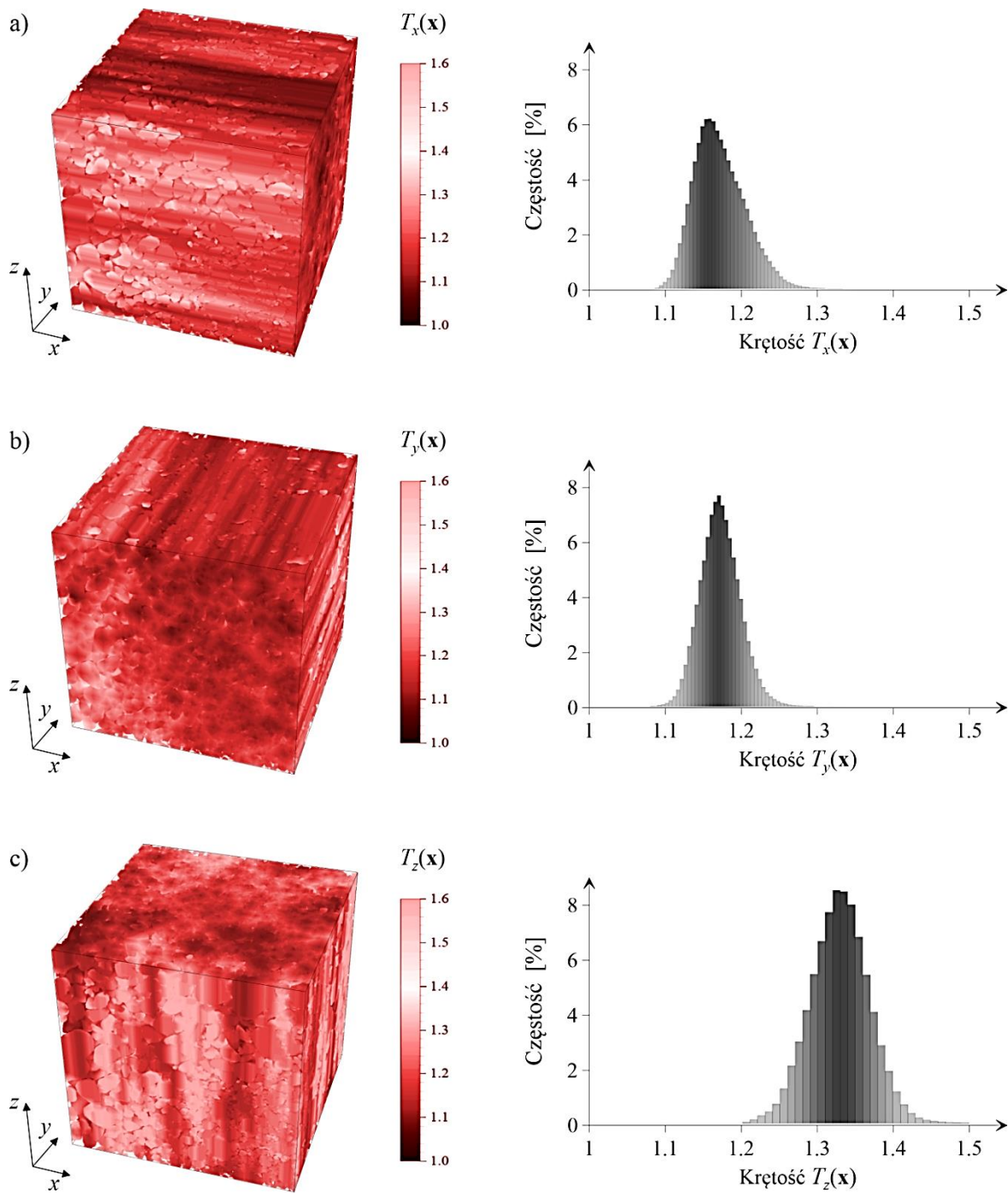
Do dalszych analiz posłużono się zatem trójwymiarową mikrostrukturą piasku średniego. Aby możliwe było uwzględnienie przepływu zarówno w przestrzeni porowej, jak i w szkielecie gruntowym, krętość określono tylko dla mikrostruktury przed zastosowaniem filtra *watershed*. Mapy krętości 3D oraz jej histogramy dla trzech różnych kierunków przedstawiono na rys. 6.55 dla przestrzeni porowej oraz na rys. 6.56 dla szkieletu gruntowego. W ogólności dla przestrzeni porowej uzyskano wyższe wartości krętości niż dla szkieletu gruntowego, np. średnia wartość $T_x(\mathbf{x})$ dla przestrzeni porowej wyniosła 1.212, podczas gdy dla szkieletu gruntowego – 1.163. Widać również, że wyniki krętości wyznaczone dla modelu 3D dla obu składników mikrostruktury są niższe niż dla przekroju 2D. Wynika to z faktu, że cząsteczka np. płynu ma większą swobodę ruchu w ośrodku trójwymiarowym niż w ośrodku dwuwymiarowym.

Analizując krętość dla modelu 3D dla poszczególnych kierunków widać, że ośrodek wykazuje właściwości materiału transwersalnie izotropowego, ponieważ histogramy krętości jak i średnie wartości dla kierunków x i y są do siebie bardzo zbliżone (np. dla

przestrzeni porowej $T_x(\mathbf{x})=1.212$ i $T_y(\mathbf{x})=1.214$), podczas gdy dla kierunku z krętość przyjmuje nieco większe wartości (dla przestrzeni porowej $T_z(\mathbf{x})=1.282$). Jest to spowodowane „wypłaszczeniem” ułożeniem ziaren w kierunku prostopadłym do działania siły grawitacji (kierunku z). W dalszej części pracy upraszcza się jednak rozważania traktując badany ośrodek gruntowy jako makroskopowo izotropowy.



Rys. 6.55. Mapa przestrzenna oraz histogram krętości w obrębie przestrzeni porowej MSa na kierunku: a) x , b) y i c) z



Rys. 6.56. Mapa przestrzenna oraz histogram krętości w obrębie szkieletu gruntowego MSa na kierunku: a) x , b) y i c) z

Należy mieć na uwadze, że określenie przedstawionych w niniejszym rozdziale miar mikrostruktury jest dość czasochłonne, w szczególności dla modeli trójwymiarowych. Tabela 6.4 prezentuje orientacyjne czasy obliczeń podstawowych miar mikrostruktury dla obrazów 2D (160 000 pikseli) jak i 3D (64 000 000 wokseli). Prezentowane czasy odpowiadają obliczeniom wykonanym na komputerze Intel Core i7 2.6 GHz, 32 GB RAM.

Oczywistym jest, że czasy te mogą znacząco się różnić w przypadku wykorzystania innych skryptów obliczeniowych bądź wykonując obliczenia równoległe na wielu procesorach jednocześnie.

Tabela 6.4. Orientacyjny czas obliczeń [min] podstawowych miar mikrostruktury

Model	S_2	L	Krętość
2D	10	220	0.3
3D	-	-	360

6.3.2. Przewodność cieplna szkieletu gruntowego

W praktyce, przewodności cieplnej szkieletu gruntowego nie da się określić w sposób bezpośredni na podstawie badań laboratoryjnych. W konsekwencji, w literaturze tematu zaproponowano kilka modeli empirycznych do szacowania wartości parametru λ_s . Jednym z nich jest np. model teoretyczny zaproponowany w pracy (Róžański & Stefaniuk, 2016), który pozwala szacować wartość przewodności cieplnej szkieletu gruntowego na podstawie zawartości frakcji piaskowej (Sa [%]) oraz części organicznych (OM [%]), tj.:

$$\lambda_s = \frac{3.67 - 0.074 \cdot OM}{1 - 0.006 \cdot Sa + 1.2 \cdot 10^{-5} \cdot Sa^2}. \quad (6.15)$$

Powyższą zależność (6.15) określono na podstawie założonego w pracy (Róžański & Stefaniuk, 2016) modelu geometrii szkieletu gruntowego w skali mikro, który uwzględnia „lokalną” zmienność przewodności cieplnej ze względu na skład mineralogiczny oraz zawartość części organicznej. Zmienność współczynnika przewodności cieplnej poszczególnych minerałów przypisana została do poszczególnych frakcji gruntowych poprzez zastosowanie odpowiednich funkcji gęstości prawdopodobieństwa. W analizie wykorzystano podejście obliczeniowej mikromechaniki, a wyniki dopasowano do cztero-parametrowej funkcji nieliniowej (6.15). Rezultaty zweryfikowane zostały na podstawie wyników pomiarów laboratoryjnych z literatury, jak i badań własnych autorów, dla łącznie kilkudziesięciu ośrodków gruntowych w pełni nasyconych wodą. Określona wg zależności (6.15) przewodność cieplna szkieletu gruntowego piasku średniego wynosi $7.06 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Przyjęto przy tym, że zawartość frakcji piaskowej wynosi $Sa = 100\%$ natomiast w gruncie brak jest części organicznej, tj. $OM = 0\%$.

6.3.3. Funkcja makroskopowej odpowiedzi materiałowej – identyfikacja laboratoryjna

Funkcja makroskopowej odpowiedzi materiałowej (F^{mom}) opisuje zależność pomiędzy współczynnikiem przewodności cieplnej płynu wypełniającego przestrzeń porową a efektywnym współczynnikiem cieplnym całego kompozytu. Jak wcześniej wspomniano funkcję F^{mom} można określić np. poprzez badania laboratoryjne, lub jeśli dana jest cyfrowa reprezentacja mikrostruktury ośrodka, poprzez obliczenia numeryczne. Funkcję makroskopowej odpowiedzi materiałowej dla rozważanego ośrodka gruntowego określono w badaniach laboratoryjnych poprzez sekwencyjne nasycanie ośrodka płynami o znanej (również badanej przez Autora) przewodności cieplnej i wyznaczenie odpowiadającej jej makroskopowej przewodności cieplnej gruntu.

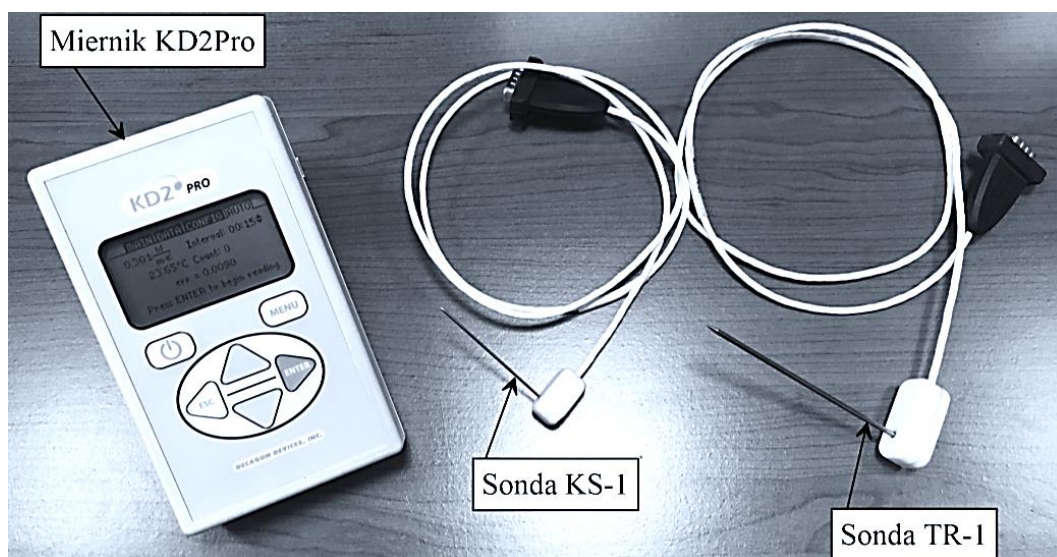
Współczynnik przewodności cieplnej gruntu wyznaczać można w badaniach laboratoryjnych metodami ustalonego lub nieustalonego przepływu ciepła. Metody ustalonego przepływu ciepła są bardzo dokładne, jednak czasochłonne, kosztowne i wykonywane na pobranych wcześniej próbkach. Stąd, w ostatnim czasie rozwinęły się liczne metody nieustalonego przepływu ciepła. Jedną z tych metod jest test sondą igłową (ang. *the needle probe test*). Jego zaletą jest krótki czas badania oraz możliwość badania in situ, co w przypadku ośrodków gruntowych jest szczególnie ważne, ponieważ naturalna struktura gruntu nie zostaje wówczas naruszona podczas jej pobierania.

W niniejszej pracy do badań parametrów cieplnych metodą nieustalonego przepływu ciepła wykorzystano miernik KD2Pro firmy Decagon Devices wraz z odpowiednimi czujnikami pomiarowymi. Miernik KD2Pro służy, w zależności od użytego czujnika (jedno- lub dwu-igłowego), do pomiaru przewodności cieplnej, oporności cieplnej oraz dyfuzyjności cieplnej.

Czujnik KS-1 (jedno-igłowy, długości 60 mm i średnicy 1.3 mm) dedykowany jest dla materiałów izolacyjnych oraz cieczy, ponieważ w trakcie pomiaru wydziela tylko niewielką ilość ciepła przez co zapobiega powstawaniu konwekcji swobodnej w cieczach. Jego zakres pomiarowy wynosi od 0.02 do 2.00 [$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$]. Jego dokładność to $\pm 5\%$ dla zakresu 0.20 - 2.00 [$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$] i $\pm 0.01 \text{ W m}^{-1} \text{K}^{-1}$ dla zakresu 0.02 - 0.20 [$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$]. Zgodnie z wytycznymi producenta zawartymi w instrukcji, czujnik ten nie powinien być stosowany do pomiarów materiałów granulowanych, m.in. gruntu, gdzie opór na kontakcie z próbką może być źródłem niedokładności wyników (KD2 Pro Manual, 2011). Czujnik

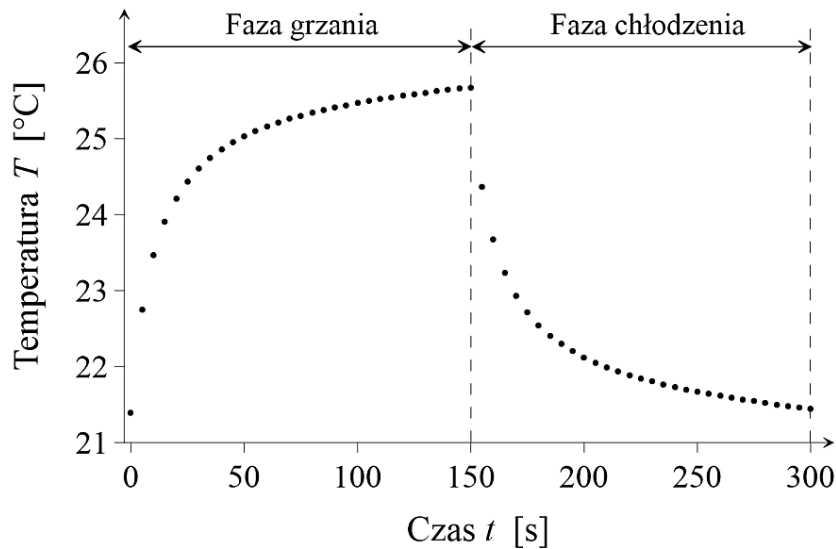
KS-1 wykorzystano zatem do pomiaru przewodności cieplnej sekwencji cieczy, którymi w dalszej kolejności nasycano grunt.

Do badań ośrodka gruntowego (MSa) nasyconego płynami o różnej przewodności cieplnej użyto czujnika TR-1 (jedno-igłowy, długości 100 mm i średnicy 2.4 mm). Czujnik ten służy do pomiarów w gruntach (wilgotnych oraz suchych), skałach, a także w materiałach o stałej strukturze jak np. beton (KD2 Pro Manual, 2011). Zakres badania współczynnika przewodności cieplnej dla sensora TR-1 wynosi od 0.10 do 4.00 $[\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}]$. Z kolei jego dokładność to $\pm 10\%$ w zakresie 0.20 - 4.00 $[\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}]$ i $\pm 0.02 \text{ W m}^{-1} \text{K}^{-1}$ w zakresie 0.10 - 0.20 $[\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}]$. Miernik wraz z czujnikami KS-1 oraz TR-1 przedstawiono na rys. 6.57.



Rys. 6.57. Widok miernika KD2Pro z czujnikami KS-1 oraz TR-1

Pomiaru przy użyciu miernika KD2Pro dokonuje się poprzez umieszczenie sondy igłowej w całości w odpowiednio przygotowanej próbce. Przed uruchomieniem miernika należy odczekać kilka minut, aby temperatura w czujniku ustabilizowała się i „przyjęła” temperaturę badanego materiału. Pomiar trwa od kilku do maksymalnie 10 minut. Przez połowę tego czasu (t_h), poprzez przepływ prądu o stałym natężeniu, sonda jest podgrzewana (faza grzania), natomiast w drugiej fazie badania źródło ciepła zostaje wyłączone (faza chłodzenia). W trakcie pomiaru miernik rejestruje 60 dyskretnych pomiarów temperatury w środku sondy igłowej przy użyciu czujnika termopary. Przykładowe wyniki zmiany temperatury w trakcie pojedynczego pomiaru przedstawiono na rys. 6.58.



Rys. 6.58. Przykładowe wyniki pomiaru (zmiany temperatury w czasie) dla fazy grzania oraz chłodzenia przy użyciu miernika KD2Pro z czujnikiem TR-1

Teoria badania sondą igłową bazuje na rozwiązaniu liniowego źródła ciepła umieszczonego w nieskończonym, izotropowym oraz jednorodnym ośrodku o stałej dyfuzyjności cieplnej D [m^2/s]. Dyfuzyjność cieplna definiowana jest jako:

$$D = \frac{\lambda}{c_V}, \quad (6.16)$$

gdzie c_V to objętościowa pojemność cieplna materiału [$\text{J m}^{-3} \text{K}^{-1}$].

Dla tak zdefiniowanego ośrodka strumień ciepła opisać można za pomocą prawa Fouriera. W przypadku współrzędnych cylindrycznych, których przyjęcie jest bardziej adekwatne z uwagi na kołowy kształt przekroju sondy, równane opisujące przepływ ciepła można przedstawić w następującej postaci (np. Różański & Sobótka, 2013):

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad (6.17)$$

gdzie T to temperatura [K], t czas [s], a r to odległość od liniowego źródła ciepła w kierunku promieniowym [m].

Zakładając, że ciepło dostarczane jest od chwili początkowej $t=0$, ze stałym przyrostem q [W/m] na jednostkę długości igły, to zmianę temperatury ośrodka otaczającego źródło ciepła, dla fazy grzania, wyrazić można w następującej postaci: (Carslaw & Jaeger, 1959):

$$\Delta T = -\frac{q}{4 \cdot \pi \cdot \lambda} \operatorname{Ei}\left(-\frac{r^2}{4 \cdot D \cdot t}\right). \quad (6.18)$$

Z kolei dla fazy chłodzenia zmianę temperatury opisać można zależnością:

$$\Delta T = \frac{q}{4\pi k} \left[-\operatorname{Ei}\left(-\frac{r^2}{4Dt}\right) + \operatorname{Ei}\left(-\frac{r^2}{4D(t-t_h)}\right) \right]. \quad (6.19)$$

W powyższych równaniach funkcja $\operatorname{Ei}(-\alpha)$ to tzw. funkcja całkowo-wykładnicza, definiowana w następujący sposób:

$$-\operatorname{Ei}(-\alpha) = \int_{\alpha}^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt, \quad (6.20)$$

która może być aproksymowana następującym szeregiem (Abramowitz & Stegun, 1972):

$$-\operatorname{Ei}(-\alpha) = -\gamma - \ln \alpha - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\alpha)^n}{nn!}, \quad (6.21)$$

gdzie γ to stała Eulera ($\gamma = 0.5772\dots$), a α wynosi:

$$\alpha = \frac{r^2}{4 \cdot D \cdot t}. \quad (6.22)$$

Dla małych wartości r i dużych wartości t oraz D , człony poza $\ln \alpha$ występujące w rozwinięciu (6.21) są pomijalnie małe, co pokazano np. w pracy (Łydźba i in., 2014). Wobec tego przyrost temperatury jest liniową funkcją $\ln t$ i równanie (6.18), dla fazy grzania, aproksymowane może być poprzez:

$$\Delta T \approx \frac{q}{4\pi k} \ln t + C, \quad 0 < t < t_h, \quad (6.23)$$

gdzie C jest pewną stałą.

Stosując analogiczne podejście dla fazy chłodzenia można pokazać, że dane pomiarowe mogą być dopasowane do następującego równania (KD2 Pro Manual, 2011):

$$T = m_0 + m_2 t + m_3 \ln t, \quad (6.24)$$

dla fazy grzania, oraz:

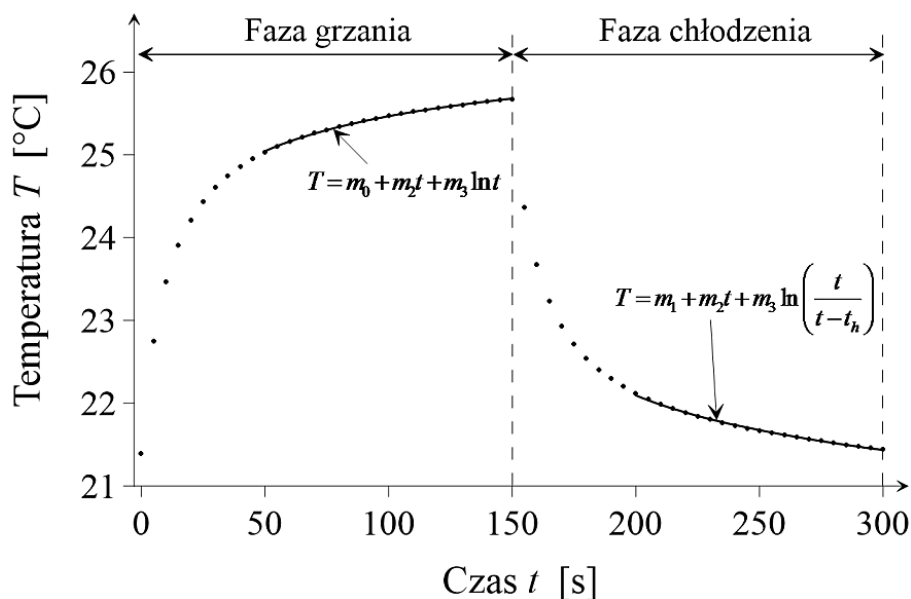
$$T = m_1 + m_2 t + m_3 \ln\left(\frac{t}{t - t_h}\right), \quad (6.25)$$

dla fazy chłodzenia. W powyższych równaniach m_0 traktować można jako temperaturę początkową (temperaturę otoczenia), m_2 odnosi się do zjawiska dryftu temperaturowego (określa zmianę napięcia referencyjnego pod wpływem zmiany temperatury), a m_3 to nachylenie krzywej, która odnosi przyrost temperatury do $\ln t$.

Po wyznaczeniu parametrów m_0 , m_1 , m_2 i m_3 z wykorzystaniem 2/3 danych pomiarowych z fazy grzania oraz chłodzenia, określić możemy współczynnik przewodności badanego materiału zgodnie z poniższą zależnością (KD2 Pro Manual, 2011):

$$\lambda = \frac{q}{4\pi m_3}. \quad (6.26)$$

Po zakończeniu badania wartość współczynnika przewodności cieplnej odczytuje się z wyświetlacza cyfrowego na urządzeniu KD2Pro. Istnieje również możliwość własnej interpretacji, tj. zaimportowania odczytów temperatury i przeprowadzenie analizy w oddzielnym oprogramowaniu. W pracy wykorzystano to drugie podejście. Daje ono możliwość oceny jakości i poprawności charakterystyki temperatury względem czasu, a w konsekwencji odrzucenia błędnie wykonanych pomiarów. Zgodnie z zaleceniami producenta (KD2 Pro Manual, 2011), przyjęto, że badanie należy powtórzyć jeśli jakość dopasowania w postaci błędu względnego pomiędzy danymi pomiarowymi a modelem teoretycznym przekracza wartość 0.01. Do analizy wykorzystano oprogramowanie Wolfram Mathematica oraz metodę najmniejszych kwadratów. Dla przykładowych wyników pomiarowych jak na rys. 6.58 wyznaczono parametry m_i dopasowując funkcję (6.24) dla wyników z fazy grzania oraz funkcję (6.25) dla wyników z fazy chłodzenia (rys. 6.59). Poszukiwane parametry wyniosły odpowiednio: $m_0 = 22.30$, $m_1 = 21.41$, $m_2 = -0.001602$ oraz $m_3 = 0.7225$. Następnie skorzystano z zależności (6.26) wyznaczając współczynnik przewodności materiału, który wyniósł $0.4241 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ (ilość dostarczanego ciepła podczas fazy grzania odczytano z urządzenia, $q = 3.85 \text{ W/m}$). Wartość przewodności otrzymana za pomocą własnej analiz jest zgodna z wynikiem podanym przez urządzenie pomiarowe, tj. $\lambda = 0.424 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$.



Rys. 6.59. Dopasowanie funkcji teoretycznych do przykładowych wyników pomiarowych uzyskanych przy użyciu miernika KD2Pro z czujnikiem TR-1

Badanie przewodności cieplnej płynów

Przed wypełnieniem przestrzeni porowej ośrodka gruntowego MSA sekwencją płynów, określono uprzednio ich współczynniki przewodności cieplnej ($\lambda_{f,i}$). Płyny dobrano w taki sposób, aby jak najbardziej różniły się od siebie wartościami przewodności cieplnej. Wybrano łącznie 8 płynów (w nawiasach podano skrócone oznaczenia płynów konsekwentnie stosowane w dalszej części pracy):

- $\lambda_{f,1}$ – powietrze (AIR),
- $\lambda_{f,2}$ – olej mineralny 5W30 (5W30),
- $\lambda_{f,3}$ – glikol monopropylenowy (MPG),
- $\lambda_{f,4}$ – glikol monoetylenowy (MEG),
- $\lambda_{f,5}$ – roztwór glikolu monoetylenowego (70%) i wody destylowanej (30%); (MEG^{70%}),
- $\lambda_{f,6}$ – roztwór glikolu monoetylenowego (40%) i wody destylowanej (60%); (MEG^{40%}),
- $\lambda_{f,7}$ – roztwór glikolu monoetylenowego (20%) i wody destylowanej (80%); (MEG^{20%}),
- $\lambda_{f,8}$ – wody destylowanej (H₂O).

Współczynnik przewodności cieplnej powietrza przyjęto na podstawie danych literaturowych. Przewodność cieplną cieczy wyznaczono natomiast korzystając z miernika KD2Pro z sondą KS-1. Badania przeprowadzono w temperaturze otoczenia równej $22^\circ\text{C} \pm 2^\circ\text{C}$ na próbkach cieczy umieszczonych w cylindrycznym naczyniu o średnicy

12 cm i wysokości 20 cm, z dala od urządzeń wywołujących drgania. Wyniki zaprezentowano w postaci wartości średniej (μ_λ), odchylenia standardowego (σ_λ) oraz współczynnika zmienności ($\sigma_\lambda/\mu_\lambda$) przewodności cieplnej poszczególnych płynów (tabela 6.5). W tabeli zestawiono również liczbę wykonanych pomiarów (n_p). Aby uznać wyniki za miarodajne należy zweryfikować czy liczba wykonanych pomiarów jest wystarczająca. W tym celu skorzystano z nierówności Chebyshev'a wyznaczając minimalną liczbę pomiarów (n_{\min}) dla poziomu ufności 3% i błędu względnego $\varepsilon = 3\%$ (por. np. Różański, 2010):

$$n_{\min} = \frac{100}{3} \left(\frac{\sigma_\lambda}{0.03 \cdot \mu_\lambda} \right)^2. \quad (6.27)$$

Tabela 6.5 uzupełniona została o wyniki obliczeń minimalnej liczby pomiarów, n_{\min} . Badania za każdym razem wykonywano do momentu, aż liczba wykonanych pomiarów była co najmniej równa wartości n_{\min} .

Tabela 6.5. Wartości średnie (μ_λ), odchylenia standardowe (σ_λ) oraz współczynniki zmienności ($\sigma_\lambda/\mu_\lambda$) przewodności cieplnej rozważanych płynów, a także liczba wykonanych pomiarów (n_p) i minimalna liczba pomiarów (n_{\min}) wg nierówności Chebyshev'a

Płyn	Współczynnik przewodności cieplnej i -tego płynu λ_{fi} [$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$]							
	AIR	5W30	MPG	MEG	MEG ^{70%}	MEG ^{40%}	MEG ^{20%}	H ₂ O
i	1	2	3	4	5	6	7	8
μ_λ	0.025	0.141	0.200	0.243	0.330	0.405	0.480	0.603
σ_λ	–	0.001	0.001	0.001	0.003	0.005	0.007	0.029
$\sigma_\lambda/\mu_\lambda$	–	0.4%	0.5%	0.5%	0.9%	1.3%	1.4%	4.8%
n_{\min}	–	1	1	1	3	6	8	12
n_p	–	5	5	5	5	10	10	20

Uzyskane wyniki mają dużą zgodność z wartościami uzyskanymi przez innych badaczy. Dla porównania zgodnie z (http://www.engineeringtoolbox.com/thermal-conductivity-liquids-d_1260.html), w temperaturze 26.8°C przewodność cieplna oleju silnikowego (nieużywanego), glikolu etylenowego i wody (świeżej) wynosi odpowiednio 0.147, 0.258 i 0.609 [$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$], podczas gdy wartości otrzymane z badań własnych wynoszą odpowiednio 0.141, 0.243 i 0.603 [$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$]. Otrzymane nieco niższe wartości mogą być skutkiem występującej niższej temperatury otoczenia w trakcie wykonywanych pomiarów.

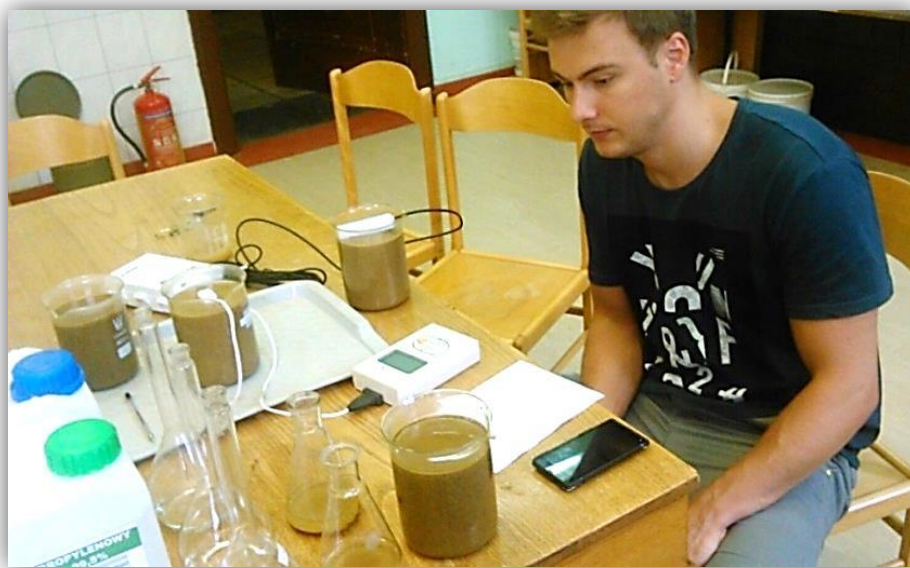
Należy podkreślić, że przed kolejnym pomiarem danego płynu zachowywano interwał czasowy równy 30 min, aby ciepło dostarczone do badanej próbki w trakcie poprzedniego pomiaru zostało odprowadzone do otoczenia i nie wpłynęło na wynik kolejnego badania.

Na podstawie uzyskanych wyników zauważyć można, że współczynnik zmienności (i tym samym minimalna ilość pomiarów) dla płynów o coraz większej przewodności cieplnej rośnie, i dla wody wynosi 4.8% (co implikuje wartość $n_{\min} = 12$). Powszechnie znanym jest fakt, iż wyznaczenie przewodności cieplnej wody za pomocą testu igłowego jest stosunkowo trudne. Wynika to z bardzo małej lepkości, która dla wody wynosi 0.98 cP w temperaturze $T = 20^{\circ}\text{C}$ (dla porównania, lepkość glikolu monoetylenowego i monopropylenowego wynosi odpowiednio 21.3 i 91.4 [cP]). Wyniki pomiarów są zaburzone ponieważ już niewielkie drgania powodują ruchy cząstek wody i przepływ ciepła związany z ruchem cząstek wywołanym czynnikami zewnętrznymi. W ramach analizy udało się jednak skonstruować stanowisko badawcze, które pozwoliło na satysfakcjonujące oszacowanie przewodności cieplnej wody.

Badanie przewodności cieplnej ośrodka gruntowego

Do badań makroskopowej przewodności cieplnej piasku średniego przygotowano siedem próbek umieszczonych w szklanych cylindrycznych naczyniach o średnicy 10 cm i wysokości 15 cm o stałej gęstości objętościowej (i tym samym stałej porowatości). Wszystkie próbki w stanie suchym przebadane zostały kilkakrotnie miernikiem KD2Pro z sondą TR-1. Porównywalna wartość przewodności cieplnej MSA w stanie suchym wszystkich siedmiu przygotowanych próbek potwierdziła ich jednorodność.

Na podstawie znanej porowatości i objętości próbek odmierzono potrzebną objętość cieczy niezbędnej do pełnego nasycenia przestrzeni porowej gruntu. Następnie, po nasyceniu próbek MSA poszczególnymi cieczami (przedstawionymi na początku niniejszego podrozdziału) przystąpiono do badań, tj. określania przewodności cieplnej gruntu w stanie pełnego nasycenia (rys. 6.60).



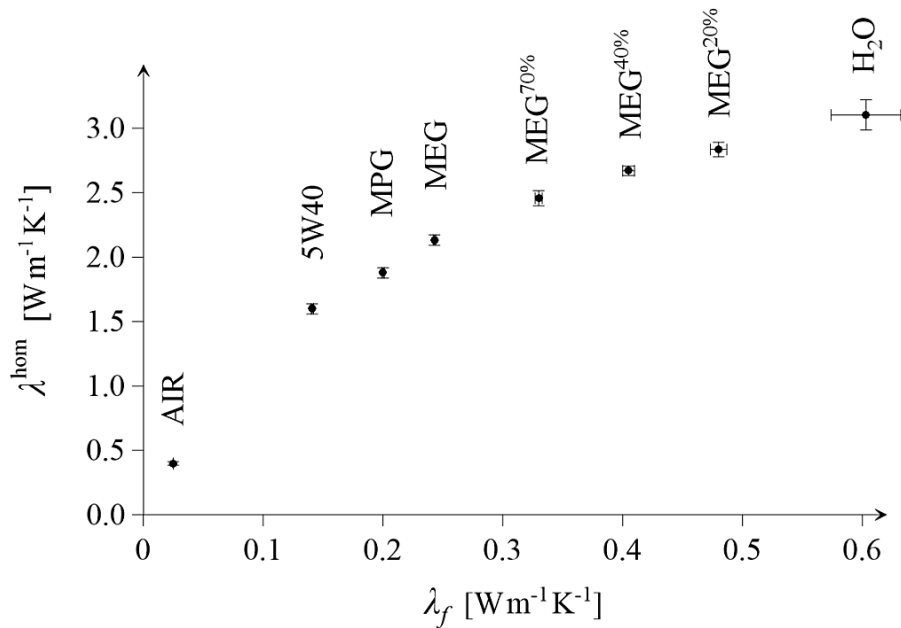
Rys. 6.60. Zdjęcie dokumentujące wykonanie pomiarów laboratoryjnych przewodności cieplnej ośrodka gruntowego

Wyniki przewodności cieplnej ośrodka gruntowego nasyconego poszczególnymi płynami (tabela 6.6) przedstawiono w sposób analogiczny do wyników przedstawionych dla przewodności cieplnej płynów (tabela 6.5). Badania, tak jak poprzednio, przeprowadzono w temperaturze otoczenia równej $22^{\circ}\text{C} \pm 2^{\circ}\text{C}$.

Na podstawie wyników przewodności cieplnej ośrodka gruntowego nasyconego sekwencją płynów o różnej (znanej) przewodności cieplnej wyznaczono dyskretną postać funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej (F^{mom}) (rys. 6.61).

Tabela 6.6. Wartości średnie (μ_{λ}), odchylenia standardowe (σ_{λ}) oraz współczynniki zmienności ($\sigma_{\lambda}/\mu_{\lambda}$) przewodności cieplnej próbki MSa nasyconej poszczególnymi płynami, a także liczba wykonanych pomiarów (n_p) i minimalna liczba pomiarów (n_{min}) wg nierówności Chebyshev'a

Płyn	Przewodność cieplna próbki MSa nasyconej <i>i</i> -tym płynem λ_i^{hom} [$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$]							
	AIR	5W30	MPG	MEG	MEG ^{70%}	MEG ^{40%}	MEG ^{20%}	H ₂ O
<i>i</i>	1	2	3	4	5	6	7	8
μ_{λ}	0.398	1.598	1.877	2.133	2.457	2.670	2.836	3.103
σ_{λ}	0.014	0.039	0.040	0.040	0.060	0.036	0.056	0.117
$\sigma_{\lambda}/\mu_{\lambda}$	3.6%	2.5%	2.1%	1.9%	2.4%	1.4%	2.0%	3.8%
n_{min}	15	7	5	4	7	2	5	17
n_p	35	20	20	20	20	20	20	20



Rys. 6.61. Dyskretna postać funkcji F^{mom} rozważanego ośrodka gruntowego (MSa)

6.3.4. Funkcja ekwiwalentnej mikrostruktury piasku średniego

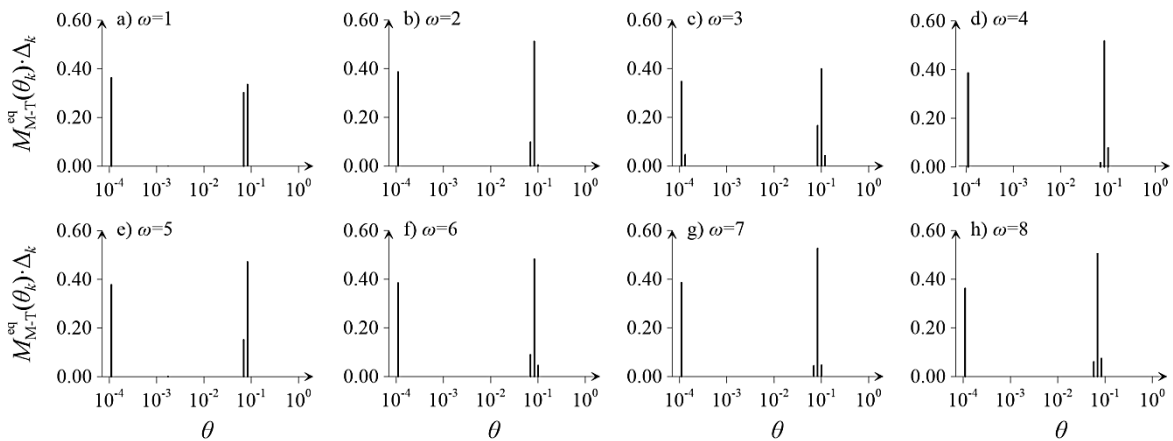
Funkcję ekwiwalentnej mikrostruktury (M^{eq}) dla rozważanego ośrodka gruntowego wyznaczono niezależnie dla dwóch schematów aproksymacyjnych, tj. Mori-Tanaki (M-T) oraz samouzgodnionego pola (S-C). Dane, niezbędne do rozwiązania zagadnienia, określono we wcześniejszej części pracy. Jednakże, poniżej dokonano ich ponownego zestawienia:

- porowatość gruntu: $\phi_f = 31.8\%$ (tabela 6.3),
- przewodność cieplna szkieletu gruntowego: $\lambda_s = 7.06 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ (rozdział 6.3.2),
- funkcja makroskopowej odpowiedzi materiałowej: F^{mom} (rys. 6.61).

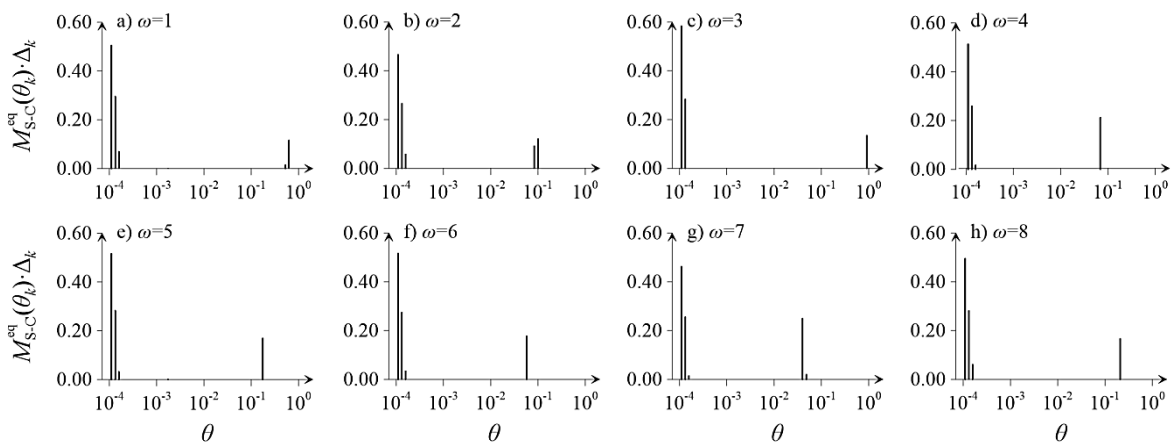
Jak pokazano w tabeli 6.6 dla każdego przypadku, tj. nasycenia przestrzeni porowej gruntu konkretnym płynem wykonano sekwencję n_p pomiarów. Celem uwzględnienia w analizie możliwego rozrzutu wyników badań rozwiązanie zagadnienia odwrotnego przeprowadzono dla 30 zestawów (oznaczanych symbolem ω , poprzez analogię do oznaczania losowych realizacji we wcześniejszej części pracy) punktów pomiarowych. Oczywiście jest, że każdy zestaw zawiera osiem losowo wybranych (odpowiadających poszczególnym płynem wypełniających przestrzeń porową) rezultatów z całego spektrum uzyskanych wyników.

W pierwszej kolejności zagadnienie odwrotne dla wszystkich rozważanych realizacji (zestawu wyników) rozwiązano bez użycia techniki regularyzacji ($\mu = 0$). Określone funkcje M^{eq} dla schematu M-T oraz schematu S-C, dla ośmiu przykładowych realizacji, zaprezentowano, odpowiednio, na rys. 6.62 oraz rys. 6.63. Widać, że otrzymane funkcje $M^{eq} \cdot \Delta_k$ zbiegają, w skali logarymicznej, do rozkładu bimodalnego, niezależnie od przyjętej metody aproksymacyjnej oraz danej realizacji ω .

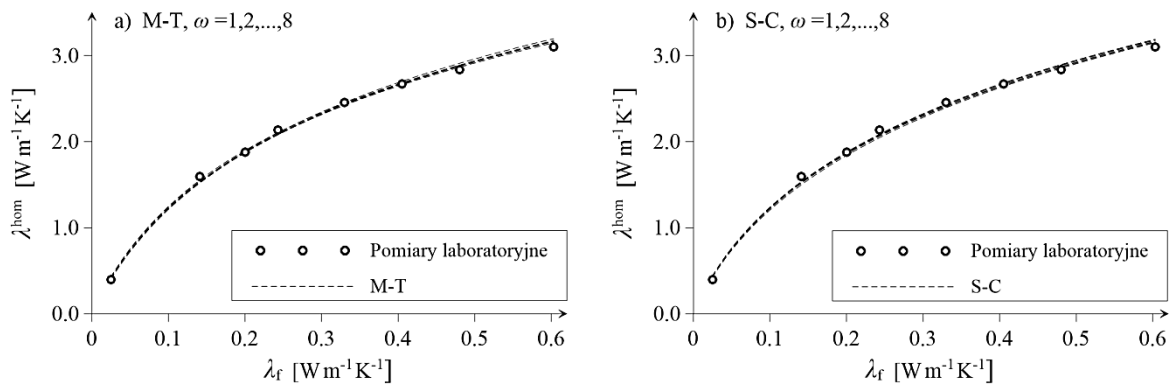
Uzyskane funkcje ekwiwalentnej mikrostruktury dla obu schematów (M-T i S-C) wykorzystane zostały następnie w sposób bezpośredni w celu zweryfikowania funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej. Jak pokazano na rys. 6.64, niezależnie od użytego schematu aproksymacyjnego, uzyskano wysoką zgodność pomiędzy badaniami laboratoryjnymi a predykcją otrzymaną z wykorzystaniem ekwiwalentnej mikrostruktury.



Rys. 6.62. Funkcja $M^{eq} \cdot \Delta$ dla schematu M-T dla przykładowych ośmiu realizacji ω



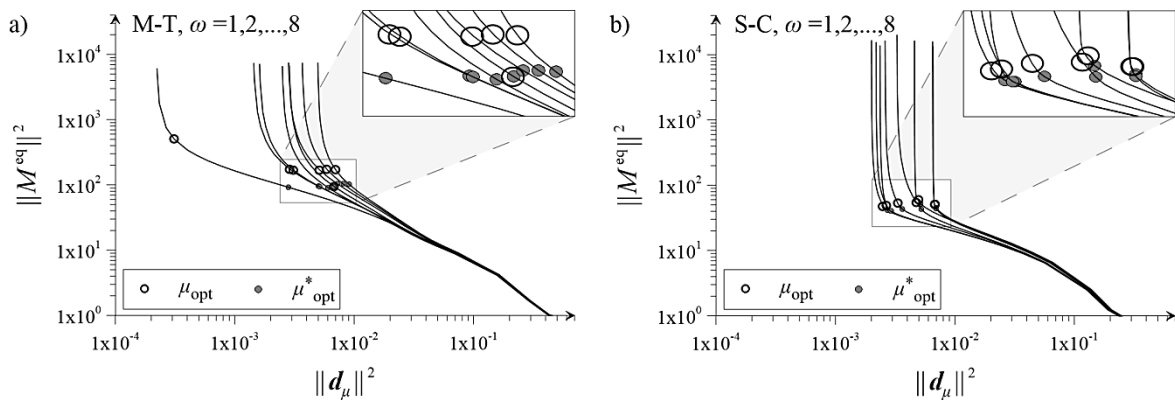
Rys. 6.63. Funkcja $M^{eq} \cdot \Delta$ dla schematu S-C dla przykładowych ośmiu realizacji ω



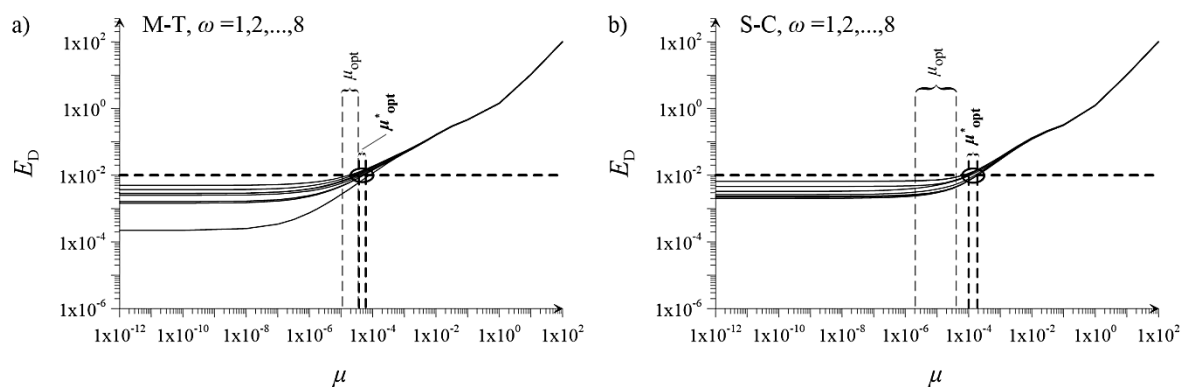
Rys. 6.64. F^{mom} dla przykładowych ośmiu realizacji ω dla schematu: a) M-T i b) S-C

Jak pokazano w rozdziale 5 rozwiązanie rozważanego w pracy zagadnienia odwrotnego jest, w ogólności, źle uwarunkowane i w konsekwencji niestabilne. Pewną niestabilność można zauważyć poprzez porównanie zidentyfikowanych funkcji M^{eq} dla $\omega = 3$ oraz $\omega = 7$ w schemacie S-C – są to rys. 6.63c oraz rys. 6.63g. Wobec czego w następnej kolejności skorzystano z omawianej wcześniej techniki regularyzacji Tichonowa. Ponownie, zagadnienie odwrotne rozwiązano dla 30 realizacji (zestawu pomiarów), przy czym dla każdej z nich obliczenia przeprowadzono dla różnych wartości współczynników regularyzacji; przyjęto łącznie 28 wartości współczynnika μ .

Optymalne wartości współczynników regularyzacji wyznaczono stosując dwie opisane wcześniej metody, tj. na podstawie: miejsca załamania krzywej L (μ_{opt}) oraz autorskiej metody (μ_{opt}^*) zaproponowanej w rozdziale 5.2.3. Wyniki dla obu stosowanych podejść zestawiono, w sposób analogiczny do wcześniej rozważanych zagadnień testowych, na rys. 6.65 oraz rys. 6.66. W szczególności, na rys. 6.65 przedstawiono krzywe L dla przykładowych ośmiu realizacji uzyskane w przypadku obu rozważanych schematów, tj. schematu M-T i S-C. Jednocześnie w prawym górnym narożniku dokonano graficznej prezentacji optymalnych wartości μ_{opt} i μ_{opt}^* . Rys. 6.66 przedstawia funkcję $E_D(\mu)$ dla tych samych ośmiu wybranych realizacji. Wykresy te, dla porównania wyników, uzupełniono o zakresy μ_{opt} oraz μ_{opt}^* . Wartości μ_{opt} oraz μ_{opt}^* zestawiono również w tabeli 6.7. Dla wszystkich analizowanych realizacji ω uzyskano niższe wartości μ_{opt} oraz większy ich rozrzut (10^{-5} - $10^{-4.5}$ dla schematu M-T oraz $10^{-5.75}$ - $10^{-4.5}$ dla schematu S-C) w porównaniu do wyników otrzymanych dla μ_{opt}^* ($10^{-4.5}$ - $10^{-4.25}$ dla schematu M-T oraz 10^{-4} - $10^{-3.75}$ dla schematu S-C). Podobną zależność uzyskano w trakcie rozwiązywania rozważanych wcześniej zagadnień testowych.



Rys. 6.65. Krzywa L , dla przykładowych ośmiu realizacji ω , dla schematu: a) M-T i b) S-C wraz z zaznaczonymi wartościami μ_{opt} oraz μ_{opt}^*



Rys. 6.66. Wartość E_D względem współczynnika regularyzacji μ dla przykładowych ośmiu realizacji ω dla schematu: a) M-T i b) S-C

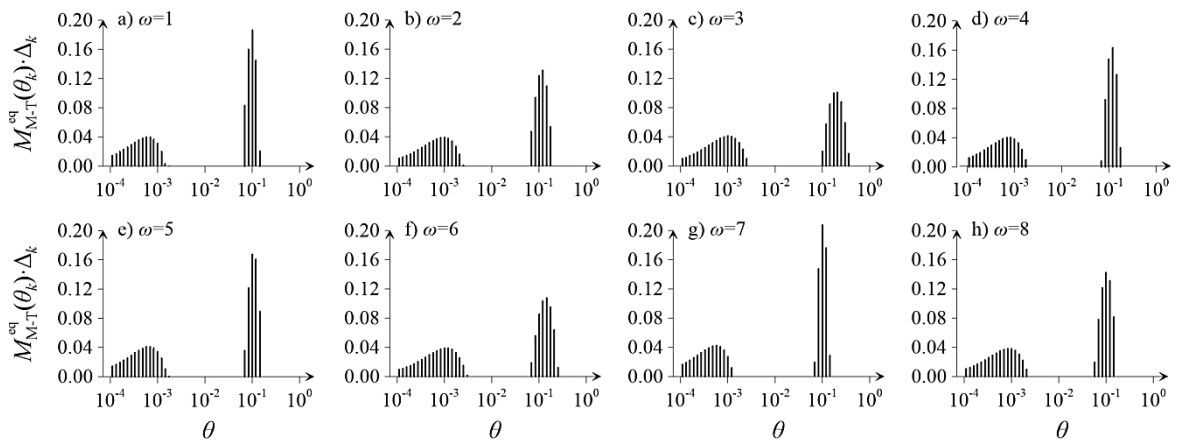
Tabela 6.7. Wartość współczynnika regularyzacji μ_{opt} w miejscu załamania krzywej L dla ośmiu przykładowych realizacji ω dla schematu M-T i S-C

ω	Schemat M-T		Schemat S-C	
	μ_{opt}	μ_{opt}^*	μ_{opt}	μ_{opt}^*
1	$10^{-5.00}$	$10^{-4.50}$	$10^{-4.75}$	$10^{-3.75}$
2	$10^{-4.50}$	$10^{-4.50}$	$10^{-5.00}$	$10^{-3.75}$
3	$10^{-4.75}$	$10^{-4.50}$	$10^{-4.50}$	$10^{-4.00}$
4	$10^{-4.75}$	$10^{-4.50}$	$10^{-5.50}$	$10^{-4.00}$
5	$10^{-5.00}$	$10^{-4.25}$	$10^{-4.75}$	$10^{-3.75}$
6	$10^{-4.50}$	$10^{-4.50}$	$10^{-5.75}$	$10^{-3.75}$
7	$10^{-5.00}$	$10^{-4.25}$	$10^{-5.75}$	$10^{-4.00}$
8	$10^{-4.75}$	$10^{-4.50}$	$10^{-4.75}$	$10^{-3.75}$

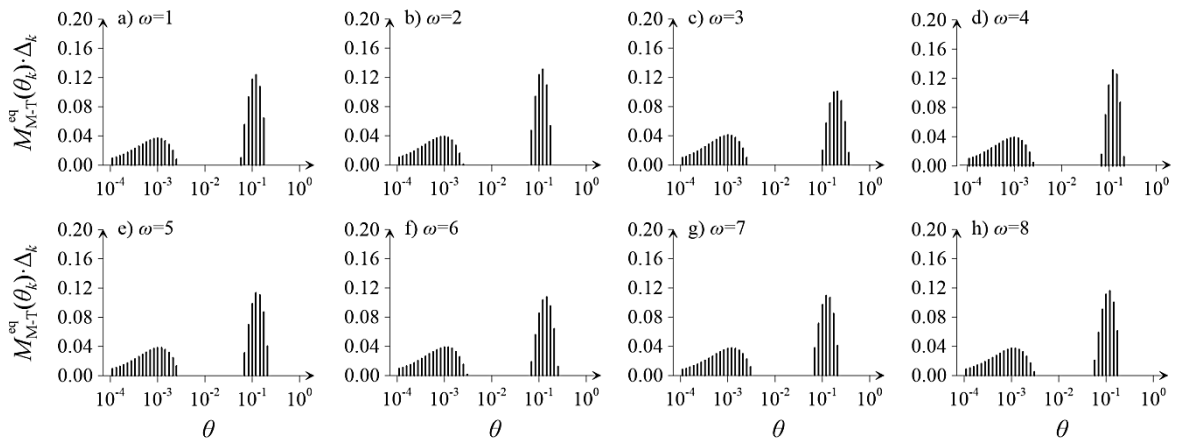
Zidentyfikowane funkcje $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla współczynnika regularyzacji (μ_{opt}) określonego na podstawie krzywej L przedstawiono na rys. 6.67 i rys. 6.69, odpowiednio, dla schematu

M-T i S-C. W analogiczny sposób przedstawiono rezultaty odpowiadające autorskiej metodzie określania optymalnej wartości współczynnika regularyzacji (μ^*_{opt}) na rys. 6.68 i rys. 6.70.

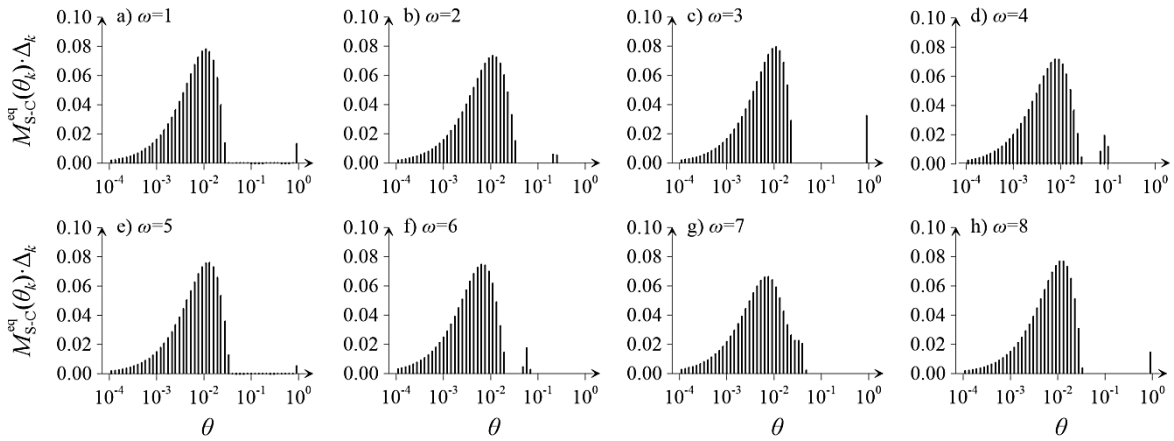
Porównując funkcje M^{eq} zidentyfikowane z wykorzystaniem dwóch podejść do określania optymalnej wartości współczynnika regularyzacji można zauważyć, że ekwiwalentne mikrostruktury odpowiadające współczynnikowi μ_{opt} wciąż charakteryzują się pewną niestabilnością. Objawia się ona poprzez losowo pojawiające się dyskretne rodziny wtrąceń, co szczególnie widać w przypadku wyników dla schematu S-C (porównaj np. rys. 6.69c, rys. 6.69d i rys. 6.69g). Takiego „zjawiska” nie obserwuje się w przypadku zastosowania autorskiej metody wyznaczania optymalnej wartości współczynnika regularyzacji μ^*_{opt} . W tym kontekście mikrostruktury ekwiwalentne odpowiadające μ^*_{opt} są stabilne. Niemniej jednak, niezależnie od tego którą z technik wykorzystamy do określenia optymalnej wartości parametru regularyzacji, wciąż otrzymujemy dobrą predykcję funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej co zobrazowano na rys. 6.71 i rys. 6.72.



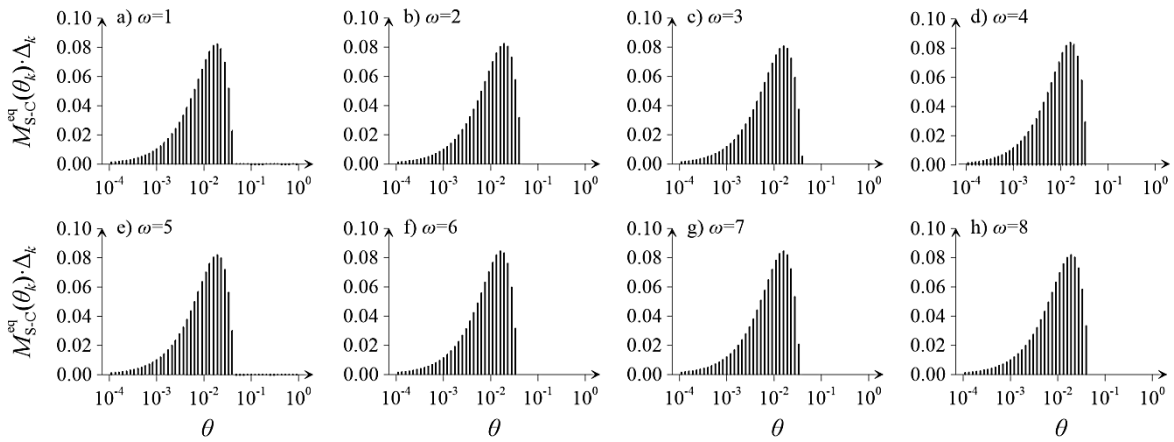
Rys. 6.67. Funkcja $M^{eq} \cdot \Delta$ dla schematu M-T dla przykładowych ośmiu realizacji błędów pomiarowych funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej dla μ_{opt}



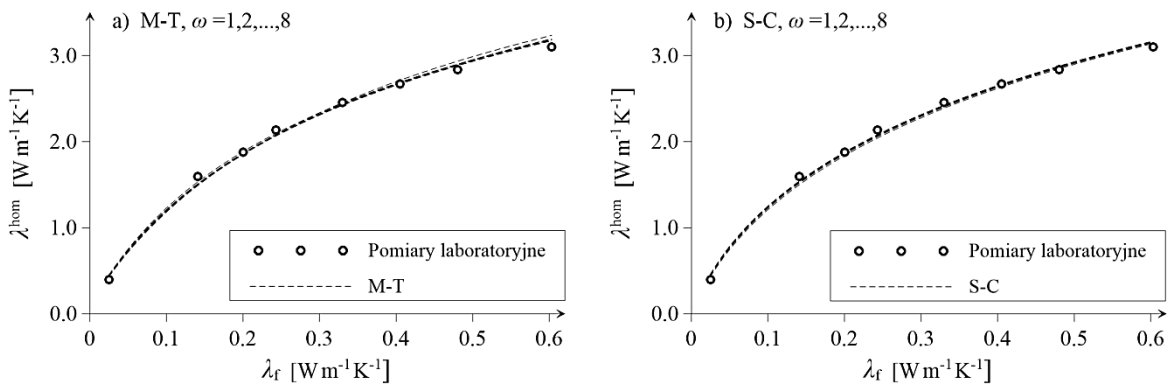
Rys. 6.68. Funkcja $M^{eq} \cdot \Delta$ dla schematu M-T dla przykładowych ośmiu realizacji błędów pomiarowych funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej dla μ^*_{opt}



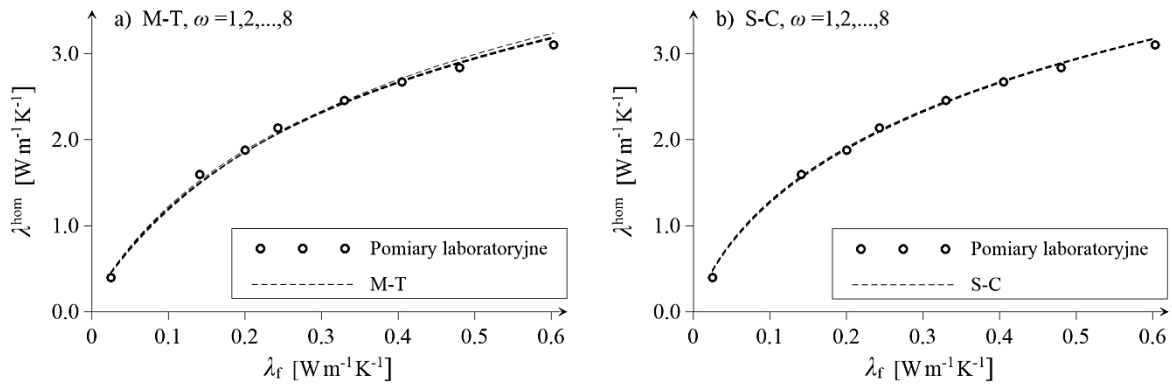
Rys. 6.69. Funkcja $M^{eq} \cdot \Delta$ dla schematu S-C dla przykładowych ośmiu realizacji błędów pomiarowych funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej dla μ_{opt}



Rys. 6.70. Funkcja $M^{eq} \cdot \Delta$ dla schematu S-C dla przykładowych ośmiu realizacji błędów pomiarowych funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej dla μ_{opt}^*



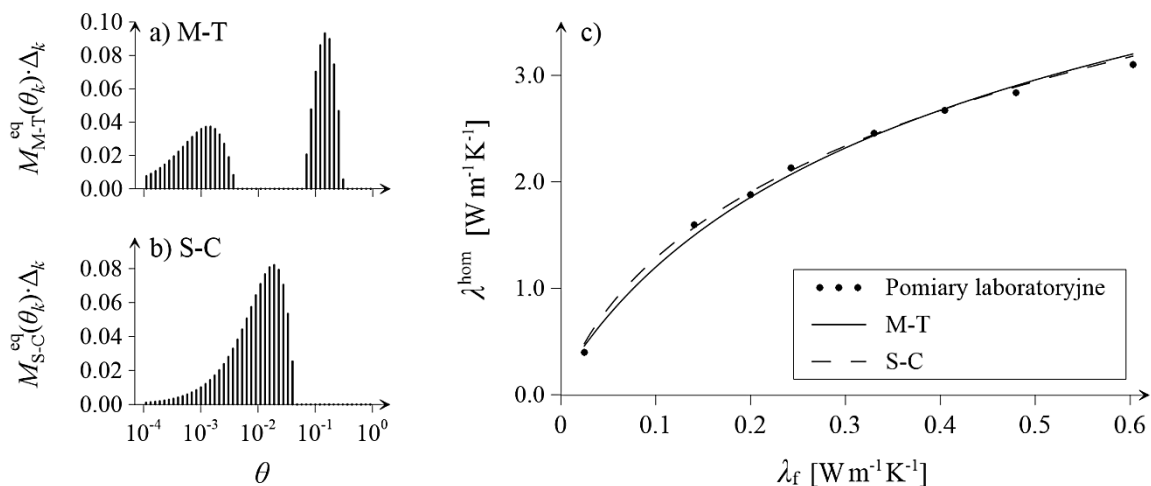
Rys. 6.71. Funkcja makroskopowej odpowiedzi materiałowej dla μ_{opt} i przykładowych ośmiu realizacji ω ; schemat: a) M-T i b) S-C



Rys. 6.72. Funkcja makroskopowej odpowiedzi materiałowej dla μ^*_{opt} i przykładowych ośmiu realizacji ω ; schemat: a) M-T i b) S-C

Należy mieć na uwadze, że w powyższych analizach rozwiązywano zagadnienie odwrotne dla 30 zestawów (realizacji ω) punktów pomiarowych. Niestety określenie funkcji M^{eq} nawet dla jednej realizacji ω wiąże się z długim czasem obliczeń. Wynika to z faktu, iż w metodzie stochastycznej optymalizacji SA obliczenia dokonywane są dla łącznie prawie 2 mln iteracji. Niemniej jednak, na podstawie uzyskanych rezultatów można stwierdzić, iż zastosowanie autorskiej metody określania optymalnej wartości współczynnika regularyzacji, w tym konkretnym przypadku (piasek średni, osiem punktów pomiarowych o zadanych rozrzutach pomiarowych), pozwala na zidentyfikowanie M^{eq} jedynie na podstawie jednego, dowolnie wybranego, zestawu wyników pomiarowych. W konsekwencji zaproponowane podejście jest efektywne z obliczeniowego punktu widzenia.

Jeśli tak satysfakcjonujące rezultaty uzyskuje się dla jednego losowego zestawu pomiarów, to można przypuszczać, że co najmniej tak dobre rozwiązanie uzyska się na podstawie wyników pomiarowych odpowiadających wartościom średnim. Celem zweryfikowania powyższego, w dalszej części rozdziału rozwiązano ponownie to samo zagadnienie odwrotne dla jednego zestawu utworzonego z wartości średnich $\lambda^{hom}(\lambda_{f,i})$ przedstawionych w tabeli 6.5. Analizy przeprowadzono z wykorzystaniem techniki regularyzacji w połączeniu z autorską metodą określania optymalnej wartości współczynnika regularyzacji; wyznaczone poszczególne wartości μ^*_{opt} wynoszą $10^{-4.25}$ i $10^{-3.75}$, odpowiednio, dla schematu M-T i S-C. Wyniki zestawiono na rys. 6.73. W szczególności przedstawiono zidentyfikowane ekwiwalentne mikrostruktury oraz predykcję makroskopowej przewodności cieplnej ośrodka gruntowego. Uzyskane wyniki pod względem jakościowym oraz ilościowym, zarówno w zakresie porównania ekwiwalentnych mikrostruktur oraz makroskopowej odpowiedzi ośrodka, są niemalże identyczne jak dla przypadku gdy rozpatrywano jeden wybrany zestaw wyników pomiarowych. W konsekwencji można stwierdzić, że oba podejścia są równoważne.



Rys. 6.73. Funkcja $M^{eq} \cdot \Delta$ dla schematu: a) M-T i b) S-C, oraz c) odpowiadające im funkcje makroskopowej odpowiedzi materiałowej

6.3.5. Autorska metoda oceny wartości współczynnika przewodności cieplnej szkieletu ośrodka porowatego

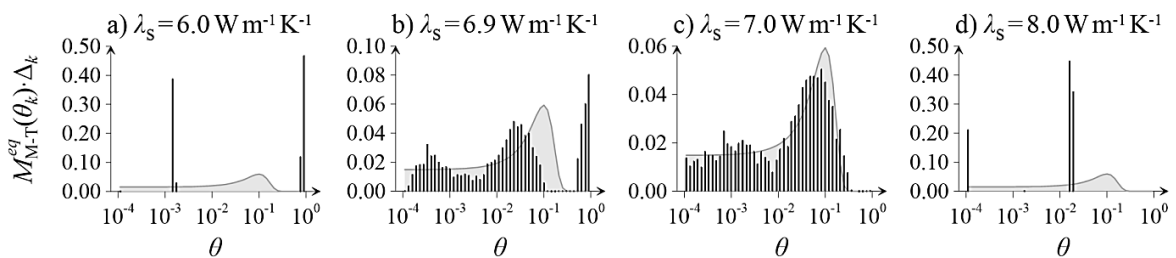
Sformułowane w niniejszej rozprawie zagadnienie odwrotne oraz uzyskane satysfakcjonujące wyniki (dla licznych przykładów obliczeniowych) skłoniły Autora do podjęcia próby stworzenia procedury określania wartości przewodności cieplnej szkieletu/matrycy. Jak wspomniano wcześniej, np. dla ośrodków gruntowych, poprawne oszacowanie wartości λ_s jest zadaniem nadal „otwartym”. Wobec tego jeśli udałoby się sformułować metodę, która zapewniałaby dobrą predykcję λ_s , to taka procedura miałaby istotne znaczenie z praktycznego punktu widzenia.

Proponuje się zatem następującą procedurę określania λ_s . W pierwszej kolejności należy założyć sekwencję różnych wartości przewodności cieplnych szkieletu gruntowego $\lambda_{s,i}$, gdzie $i = 1, 2, \dots, n_{\lambda_s}$. Następnie dla każdej wartości $\lambda_{s,i}$ rozwiązujemy zagadnienie odwrotne zgodnie z procedurą przedstawioną w rozdziale 4.2. W efekcie uzyskuje się sekwencję minimalnych wartości funkcji celu $E_D(\lambda_{s,i})$. Postuluje się, że optymalną wartością współczynnika przewodności cieplnej szkieletu/matrycy, oznaczanej w dalszej części jako $\lambda_{s,opt}$, jest ta, która zapewnia minimalną wartość funkcji celu spośród wszystkich wartości uzyskanych na podstawie rozwiązania sekwencji n_{λ_s} zagadnień odwrotnych, tj.:

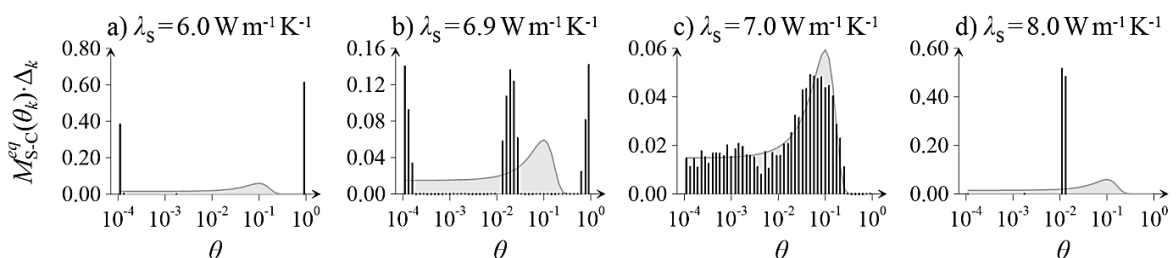
$$\lambda_{s,i} = \lambda_{s,opt} \Leftrightarrow E_D(\lambda_{s,i}) = \min \{ E_D(\lambda_{s,1}), E_D(\lambda_{s,2}), \dots, E_D(\lambda_{s,n_{\lambda_s}}) \}. \quad (6.28)$$

Aby zweryfikować poprawność zaproponowanej metody skorzystano z przykładowego zadania testowego przedstawionego w rozdziale 4.3.2. Dla ośrodka porowatego o porowatości $\phi_t = 0.2$ i przewodności cieplnej szkieletu gruntowego $\lambda_s = 7.0 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ założono funkcję $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ w postaci jak na rys. 4.8a. Następnie dla tego ośrodka określono funkcję F^{mom} rozwiązując zagadnienie bezpośrednie schematem M-T oraz, niezależnie, schematem S-C (rys. 4.8b). W kolejnym kroku wykonano sekwencję obliczeń zagadnień odwrotnych podobnie jak w rozdziale 4.3.2, jednak tym razem nie dla jednej a dla różnych wartości przewodności cieplnej matrycy/szkieletu λ_s zgodnie z procedurą zaproponowaną powyżej. W tym przykładzie funkcja makroskopowej odpowiedzi materiałowej wyznaczona została bez błędów pomiarowych zatem nie skorzystano z techniki regularyzacji (przyjęto $\mu = 0$).

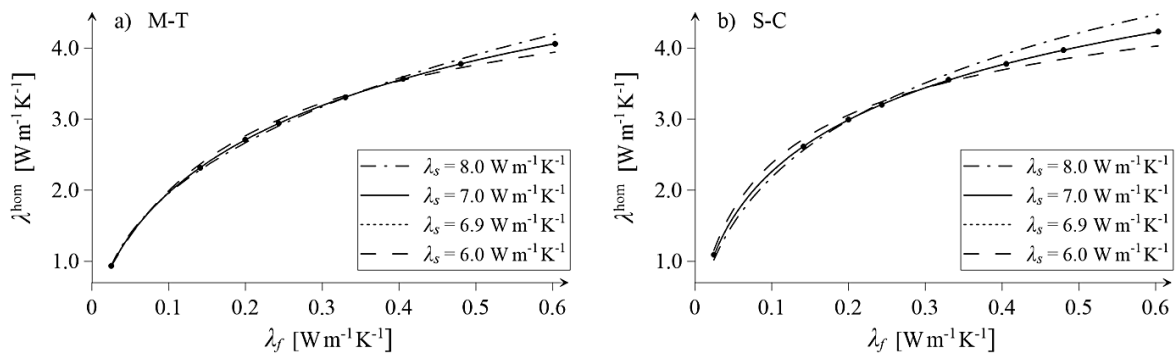
Otrzymane funkcje $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla przykładowych wartości $\lambda_{s,i}$ przedstawiono na rys. 6.74 dla schematu M-T oraz na rys. 6.75 dla schematu S-C. Widać, że założoną funkcję $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ zrekonstruowano poprawnie tylko dla wartości $\lambda_{s,i}$ takiej jak została pierwotnie założona, tj. $7.0 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Uzyskane ekwiwalentne mikrostruktury dla obu schematów wykorzystane zostały następnie w sposób bezpośredni w celu uzyskania makroskopowej wartości przewodności cieplnej dla różnych wartości λ_f (rys. 6.76).



Rys. 6.74. Funkcja $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla przykładowych czterech wartości λ_s dla schematu M-T; $\mu = 0$



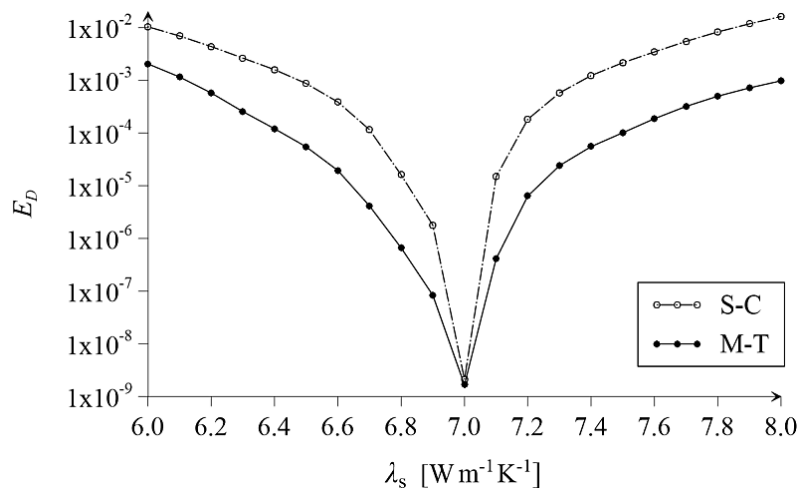
Rys. 6.75. Funkcja $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla przykładowych czterech wartości λ_s dla schematu S-C; $\mu = 0$



Rys. 6.76. Predykcja funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej dla przykładowych czterech wartości λ_s ; schemat: a) M-T i b) S-C

Widać, że przyjęta wartość przewodności cieplnej matrycy/szkieletu λ_s mocno wpływa na zidentyfikowaną postać funkcji $M^{eq} \cdot \Delta$, w konsekwencji „dotykając” również predykcji funkcji makroskopowej odpowiedzi. Należy mieć na uwadze, że przyjęta wartość λ_s implikuje pojawienie się dodatkowego „niejawnego” punktu dla makroskopowej odpowiedzi materiałowej. Należy interpretować to w taki sposób, że jeśli przestrzeń porową ośrodka zapełnimy medium o przewodności cieplnej równej przewodności cieplnej szkieletu ($\lambda_f = \lambda_s$), to wówczas uzyskamy jednorodny ośrodek, dla którego prawdziwe jest, że $\lambda^{hom} = \lambda_f = \lambda_s$. Wobec tego założenie wartości λ_s silnie wpływa na charakterystykę $\lambda^{hom} - \lambda_f$, poprzez tzw. „dalekie rzutowanie” funkcji F^{nom} dla $\lambda_f = \lambda_s$.

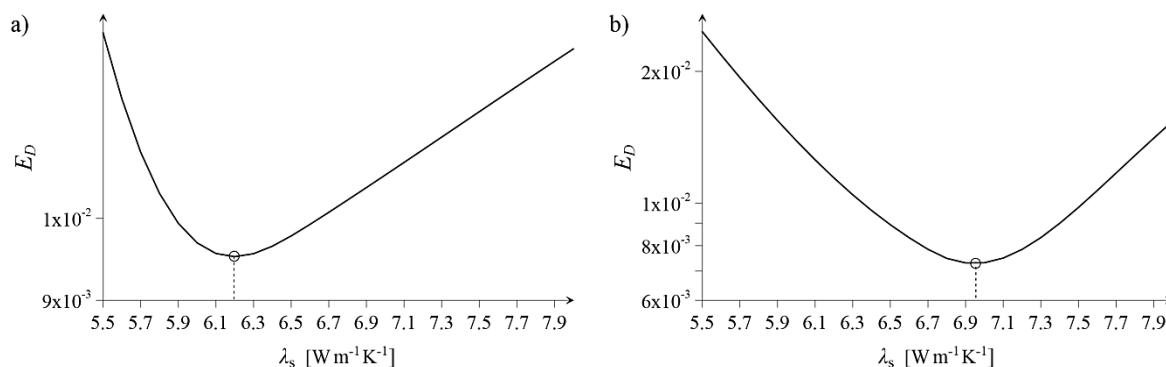
W celu określenia optymalnej wartości λ_s zastosowano procedurę opisaną na początku tego podrozdziału. Wyznaczono sekwencję wartości funkcji celu $E_D(\lambda_{s,i})$ dla różnych wartości λ_s . Wyniki obliczeń zestawiono na rys. 6.77. Widać, że dla obu schematów aproksymacyjnych funkcja ta osiąga swoje minimum dla λ_s takiego jak zostało pierwotnie założone, tj. $7.0 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Zatem zaproponowana procedura poprawnie zidentyfikowała wartość przewodności cieplnej szkieletu/matrycy.



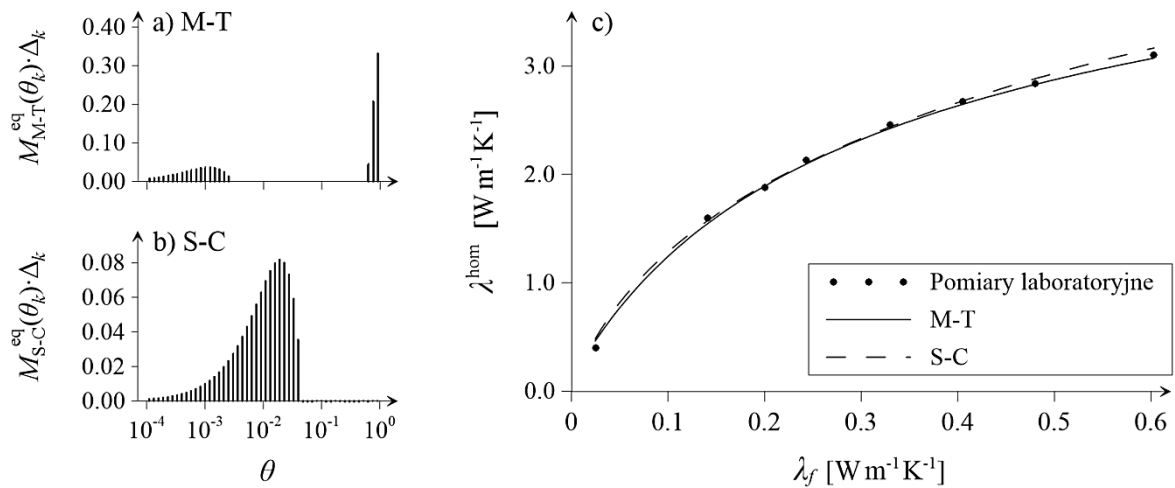
Rys. 6.77. Funkcja $E_D(\lambda_s)$ dla schematu aproksymacyjnego M-T oraz S-C

Jak pokazano na rys. 6.74 i rys. 6.75 w zależności od przyjętej wartości $\lambda_{s,i}$ wyznaczone funkcje prawdopodobieństwa $M(\theta)$ wyraźnie się od siebie różnią. Ponadto jedynie dla wartości $\lambda_s = 7.0 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, a więc takiej jak pierwotnie założono, udało się poprawnie zidentyfikować założoną ekwiwalentną mikrostrukturę. Oznacza to, że procedura wyznaczania optymalnej wartości przewodności cieplnej szkieletu $\lambda_{s,\text{opt}}$ powinna polegać na wyznaczeniu optymalnej pary „wartość $\lambda_{s,\text{opt}}$ – funkcja $M^{\text{eq}}(\theta, \{\lambda_{s,\text{opt}}\})$ ”, która spełnia zależność (6.28). Oczywiście jest, że w przypadku funkcji M , θ jest jej jawnym argumentem, natomiast $\lambda_{s,\text{opt}}$ jest zmienną „ukrytą”.

W dalszej części pracy zaproponowaną procedurę zaaplikowano do określenia optymalnej wartości λ_s dla rozważanego ośrodka gruntowego – piasku średniego. W tym celu rozwiązano sekwencję zagadnień, analogicznych do tych przedstawionych w poprzednim rozdziale, przyjmując kilkadziesiąt różnych wartości z przedziału [5.5, 8.0]. Obliczenia wykonano z zastosowaniem techniki regularyzacji przy czym optymalną wartość współczynnika μ określono wykorzystując autorską procedurę. Na rys. 6.78 przedstawiono zależność funkcji celu od przyjętej wartości λ_s . Dla schematu M-T funkcja $E_D(\lambda_s)$ osiąga swoje minimum dla $\lambda_{s,\text{opt}} = 6.20 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, z kolei dla schematu S-C dla wartości $\lambda_{s,\text{opt}} = 6.95 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Zauważmy, że zidentyfikowane jako optymalne wartości λ_s są nieznacznie niższe od tej, którą zakładano pierwotnie rozwiązując zagadnienie odwrotne w rozdziale 6.3.4. Przyjęto wówczas na podstawie zależności (6.2) $\lambda_s = 7.06 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Oznacza to, że zidentyfikowane na podstawie autorskiej procedury pary $\{\lambda_{s,\text{opt}}; M^{\text{eq}}(\theta, \{\lambda_{s,\text{opt}}\})\}$ dla obu schematów zapewniły niższe wartości minimum funkcji celu aniżeli w zagadnieniu rozważanym w rozdziale 6.3.4. Ponadto uzyskane wyniki wskazują, że $\lambda_{s,\text{opt}}$ należy traktować jako pewien parametr ekwiwalentny szkieletu ośrodka porowatego stowarzyszony z danym schematem aproksymacyjnym. Wyniki przeprowadzonych analiz w formie ekwiwalentnych mikrostruktur i predykcji makroskopowych odpowiedzi (dla optymalnych par $\{\lambda_{s,\text{opt}}; M^{\text{eq}}(\theta, \{\lambda_{s,\text{opt}}\})\}$ w ujęciu obu schematów aproksymacyjnych) zaprezentowano na rys. 6.79.



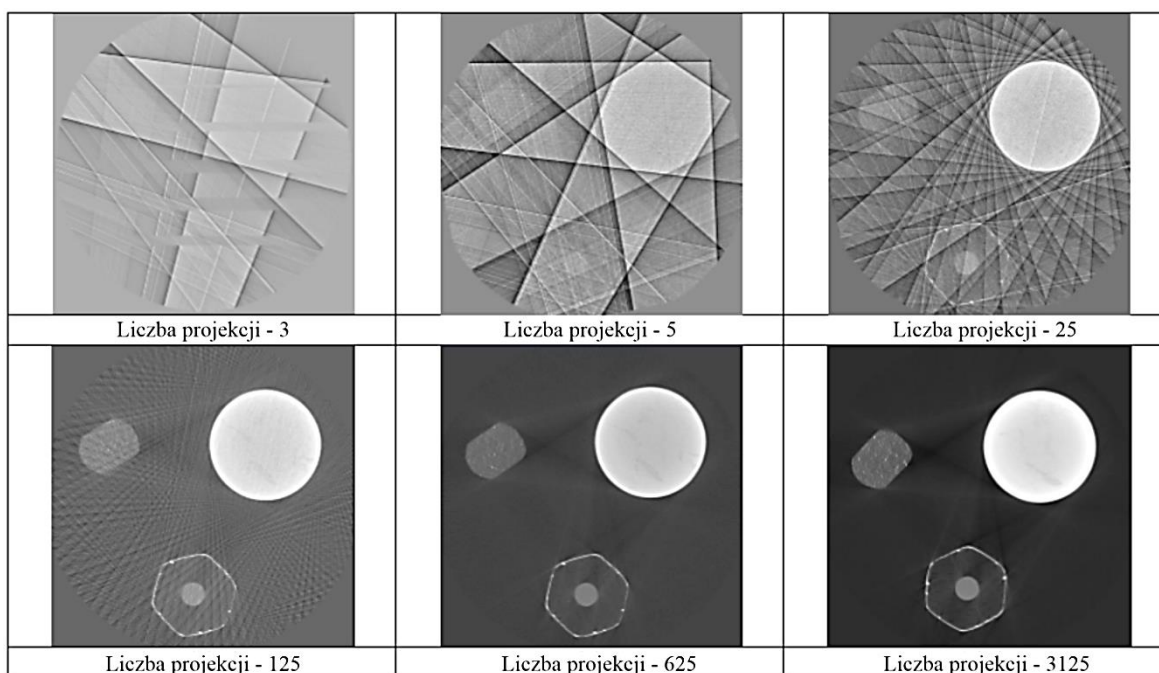
Rys. 6.78. Funkcja $E_D(\lambda_s)$ dla $\mu = 0$, $\mu = \mu_{\text{opt}}$ oraz $\mu = \mu_{\text{opt}}^*$ dla schematu: a) M-T i b) S-C



Rys. 6.79. Funkcja $M^{eq} \cdot \Delta$ dla schematu: a) M-T ($\lambda_s = 6.20 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $\mu_{opt}^* = 10^{-4.25}$) i b) S-C ($\lambda_s = 6.95 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $\mu_{opt}^* = 10^{-3.75}$), oraz c) odpowiadające im funkcje makroskopowej odpowiedzi

6.3.6. Wpływ ilości punktów pomiarowych na uzyskane rozwiązanie

Jak już wcześniej wspomniano, w zagadnieniu odwrotnym teorii homogenizacji można wskazać analogię do zagadnienia odwrotnego rentgenowskiej mikrotomografii komputerowej. Zauważmy, że wykorzystywane do rozwiązania zagadnienia odwrotnego teorii homogenizacji zbiór wartości parametrów płynów wypełniających przestrzeń porową ($\lambda_f = \{\lambda_{f,1}, \lambda_{f,2}, \dots, \lambda_{f,n}\}$) można myślowo traktować jako zbiór projekcji, które wykonuje się pod różnymi kątami obrotu w trakcie obrazowania mikrotomografii komputerowej. Oczywistym jest, że w microCT liczba projekcji silnie wpływa na jakość zrekonstruowanego obrazu. Można to przedstawić na przykładzie rozważanym w rozprawie doktorskiej Dohnalika (2014), gdzie autor zeskanował obiekt składający się z ołówka, polimeru i próbki skały. Na rys. 6.80, który pochodzi z pracy (Dohnalik, 2014), przedstawiono wpływ liczby projekcji (3, 5, 25, 125, 625, 3125), które wykorzystano do zrekonstruowania struktury obiektu, na jakość uzyskanego obrazu. Jak pisze Dohnalik praktycznie nie jest możliwe określenie kształtu dla rekonstrukcji wykonanej z 3 czy 5 projekcji. Łatwo zauważyć, że wraz ze wzrostem liczby projekcji następuje wyraźna poprawa jakości obrazowania (rys. 6.80).



Rys. 6.80. Przykład wpływu liczby projekcji na jakość zrekonstruowanego obrazu (Dohnalik, 2014)

Ponadto, w mikrotomografii komputerowej ważny jest również poprawny dobór kątów (w sensie kontrastu pomiędzy ich wartościami), dla których wykonywane są projekcje. Jest oczywistym, że w ogólnym przypadku np. dla trzech projekcji najlepsze rezultaty otrzymamy dla kątów 0° , 45° i 90° (kąt 0° odpowiada kątowi 180° itd.), a nie np. dla kątów 0° , 1° i 2° .

Wobec powyższego, w niniejszym podrozdziale przeprowadzono analizę wpływu dwóch czynników na jakość uzyskanego rozwiązania zagadnienia odwrotnego teorii homogenizacji. Czynniki, które poddano analizie są:

- liczba dyskretnych punktów pomiarowych makroskopowej przewodności cieplnej,
- kontrast pomiędzy parametrami płynów wypełniających przestrzeń porową.

Rozważono osiem przypadków (oznaczonych symbolami A, B, ..., H) różniących się wyborem punktów pomiarowych w zakresie ich ilości oraz kontrastu charakteryzowanego wzajemnym stosunkiem pomiędzy przewodnościami cieplnymi poszczególnych płynów użytych w analizie. Szczegółowego zestawienia wszystkich analizowanych przypadków dokonano w tabeli 6.8. Warto w tym miejscu nadmienić, że przypadek H odpowiada rozwiązaniu zagadnienia odwrotnego z poprzedniego podrozdziału (patrz rozdział 6.3.5).

Tabela 6.8. Zestawienie analizowanych przypadków

Przypadek	Liczba pomiarów (n_f)	Rodzaje płynów wypełniających przestrzeń porową
A	1	Powietrze ($\lambda_{f,1}$)
B	1	Roztwór MEG ^{70%} ($\lambda_{f,5}$)
C	1	Woda ($\lambda_{f,8}$)
D	2	Roztwór MEG ^{70%} i woda ($\lambda_{f,5}$; $\lambda_{f,8}$)
E	2	Powietrze i woda ($\lambda_{f,1}$; $\lambda_{f,8}$)
F	3	Powietrze, roztwór MEG ^{70%} i woda ($\lambda_{f,1}$; $\lambda_{f,5}$; $\lambda_{f,8}$)
G	5	Powietrze, glikol monopropylenowy, roztwór MEG ^{70%} , roztwór MEG ^{20%} oraz woda ($\lambda_{f,1}$; $\lambda_{f,3}$; $\lambda_{f,5}$; $\lambda_{f,7}$; $\lambda_{f,8}$)
H	8	Wszystkie płyny analizowane w rozdziale 6.3.3 ($\lambda_{f,1} - \lambda_{f,8}$)

Rozwiązań, dla wyżej przedstawionych przypadków, poszukiwano niezależnie dla dwóch schematów aproksymacyjnych – schematu Mori-Tanaki i schematu samouzgodnionego pola. Wartości współczynnika przewodności cieplnej szkieletu gruntowego przyjęto na podstawie analiz przeprowadzonych w poprzednim podrozdziale, tj. $\lambda_s = 6.20 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ dla schematu M-T oraz $\lambda_s = 6.95 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ dla schematu S-C. Dla każdego przypadku (A – H) funkcję M^{eq} wyznaczono z wykorzystaniem techniki regularyzacji i autorskiej metody określania optymalnej wartości współczynnika μ (μ^*_{opt}). Porównania uzyskanych wyników dokonano na podstawie zmodyfikowanych wartości E_D określonych dla każdego przypadku z osobna. Wprowadzona miara, określana dalej jako E_{D8} , niezależnie od liczby punktów wykorzystanych do rozwiązania zagadnienia odwrotnego zawsze odnosi się do wszystkich ośmiu punktów pomiarowych, tj.:

$$E_{D8} = \frac{1}{8} \sum_{l=1}^8 \left(\frac{\sum_{k=1}^{n_\theta} P_f(\lambda_{f,l}, \theta_k) M^{\text{eq}}(\theta_k) \Delta_k - g(\lambda_{f,l})}{g(\lambda_{f,l})} \right)^2 + \mu \cdot \sum_{k=1}^{n_\theta} (M^{\text{eq}}(\theta_k))^2 \Delta_k. \quad (6.29)$$

Tak zdefiniowana miara E_{D8} (dana zależnością (6.29)), dzięki wykorzystaniu za każdym razem wszystkich analizowanych punktów pomiarowych, zapewnia jej obiektywność. W tabeli 6.9 zestawiono uzyskane z analizy wartości E_{D8} . Tabelę uzupełniono również o optymalne wartości współczynników regularyzacji μ^*_{opt} . Jednocześnie na rys. 6.81 i rys. 6.82 przedstawiono zidentyfikowane funkcje $M^{\text{eq}} \cdot \Delta$ dla schematu, odpowiednio, M-T i S-C. Z kolei predykcje makroskopowej przewodności cieplnej odpowiadające poszczególnym przypadkom obrazuje rys. 6.83. Na rysunku tym znacznikami w postaci

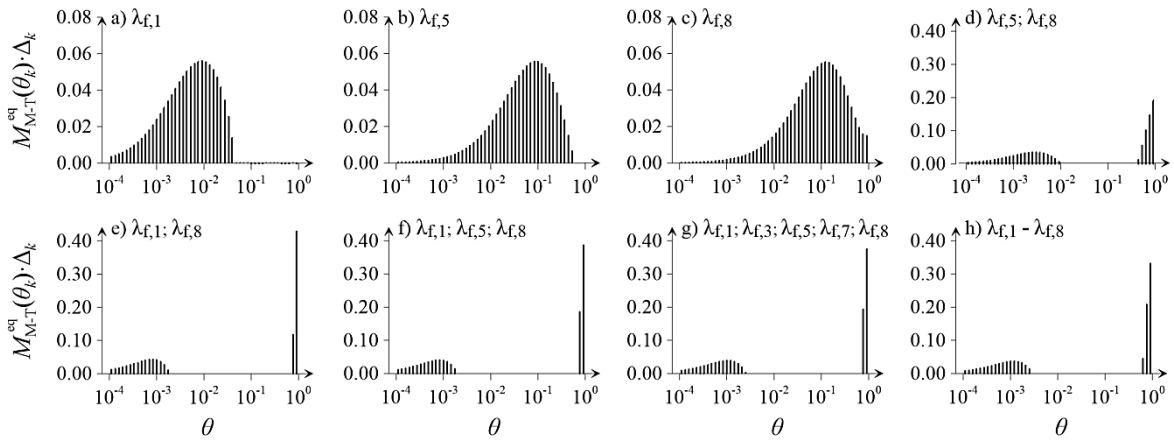
okręgów zaznaczono te punktu pomiarowe, które w danym przypadku były danymi, na podstawie których rozwiązywano zagadnienie odwrotne.

Analizując uzyskane rezultaty można stwierdzić, że:

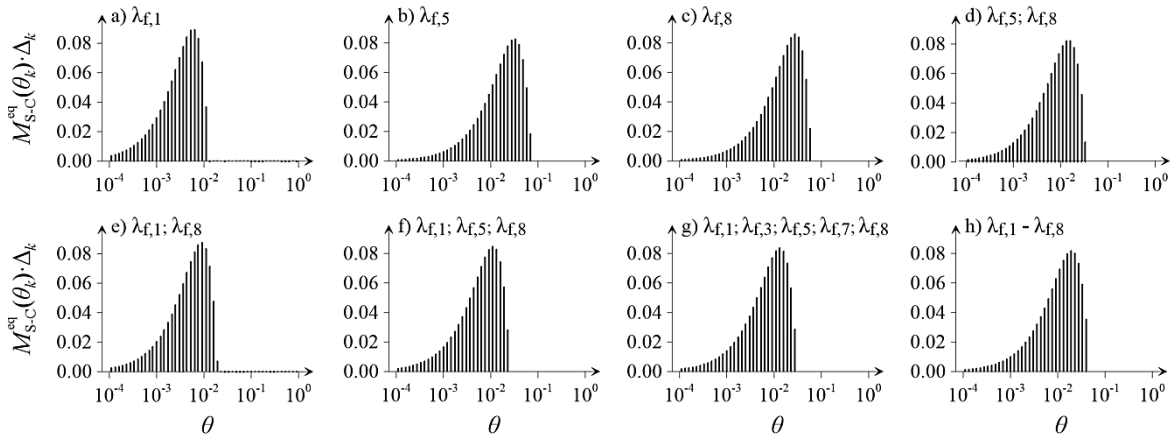
- istnieje wpływ przyjęcia liczby punktów pomiarowych oraz kontrastu pomiędzy przewodnościami cieplnymi płynów na jakość predykcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej (ten ostatni efekt wyraźnie widać porównując wartości E_{D8} dla przypadków gdzie przyjęto tę samą liczbę punktów pomiarowych ale o różnym kontraście, np. przypadek D oraz E).
- jednocześnie wpływ ten jest bardziej zauważalny w przypadku schematu M-T w porównaniu do analizy w ujęciu schematu S-C (we wszystkich przypadkach (A – H) funkcje E_{D8} dla schematu S-C są tego samego rzędu),
- im większa liczba punktów pomiarowych oraz większy kontrast pomiędzy wartościami λ_f tym lepsze rozwiązanie sformułowanego zagadnienia w sensie predykcji makroskopowej przewodności cieplnej,
- w przypadku schematu M-T dla badanego ośrodka gruntowego wykazano, że przyjęcie już nawet dwóch punktów pomiarowych, ale o możliwie największym kontraście λ_f (przypadek E), jest wystarczające do zidentyfikowania M^{eq} ; jednocześnie dla schematu S-C nawet jeden dowolnie wybrany punkt zapewnia satysfakcjonujące rozwiązanie.

Tabela 6.9. Uzyskane wartości E_{D8} oraz μ^*_{opt} dla wszystkich analizowanych przypadków w ujęciu analitycznego schematu aproksymacyjnego M-T i S-C

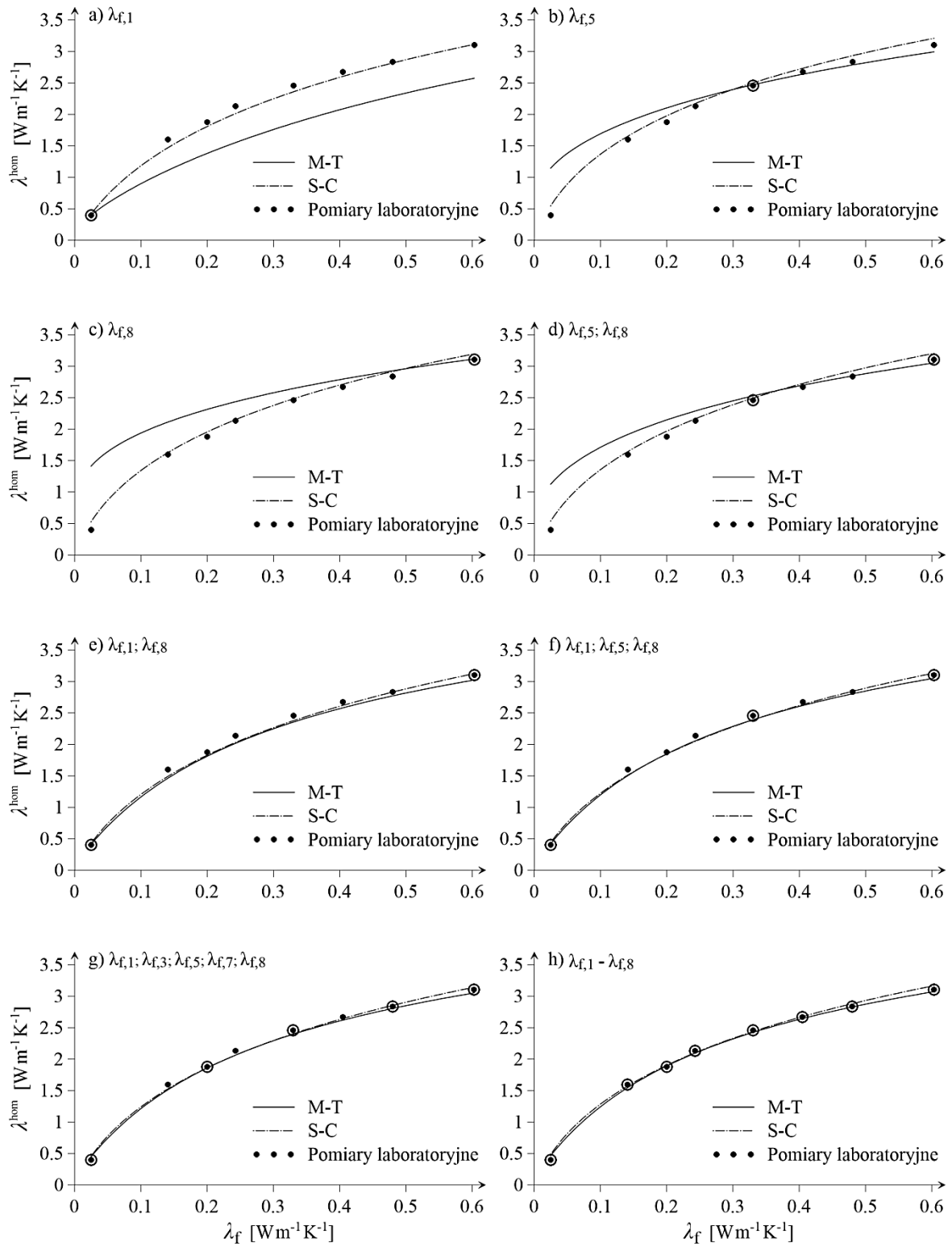
Przypadek	Schemat M-T		Schemat S-C	
	$\mu = \mu^*_{opt}$	E_{D8}	$\mu = \mu^*_{opt}$	E_{D8}
A	$10^{-4.00}$	$323.25 \cdot 10^{-3}$	$10^{-4.25}$	$15.62 \cdot 10^{-3}$
B	$10^{-3.00}$	$81.09 \cdot 10^{-3}$	$10^{-3.50}$	$14.55 \cdot 10^{-3}$
C	$10^{-3.00}$	$115.17 \cdot 10^{-3}$	$10^{-3.50}$	$12.21 \cdot 10^{-3}$
D	$10^{-3.00}$	$81.86 \cdot 10^{-3}$	$10^{-3.50}$	$13.54 \cdot 10^{-3}$
E	$10^{-4.50}$	$11.59 \cdot 10^{-3}$	$10^{-4.00}$	$14.78 \cdot 10^{-3}$
F	$10^{-4.50}$	$\sim 10 \cdot 10^{-3}$	$10^{-4.00}$	$\sim 10 \cdot 10^{-3}$
G	$10^{-4.25}$	$\sim 10 \cdot 10^{-3}$	$10^{-4.00}$	$\sim 10 \cdot 10^{-3}$
H	$10^{-4.25}$	$\sim 10 \cdot 10^{-3}$	$10^{-3.75}$	$\sim 10 \cdot 10^{-3}$



Rys. 6.81. Funkcja $M^{eq} \cdot \Delta$ dla schematu Mori-Tanaki dla przypadku: a) A, b) B, c) C, d) D, e) E, f) F, g) G oraz h) H; $\mu = \mu_{opt}^*$



Rys. 6.82. Funkcja $M^{eq} \cdot \Delta$ dla schematu samouzgodnionego pola dla przypadku: a) A, b) B, c) C, d) D, e) E, f) F, g) G oraz h) H; $\mu = \mu_{opt}^*$



Rys. 6.83. Funkcja makroskopowej odpowiedzi materiałowej w ujęciu schematu M-T i S-C dla przypadku: a) A, b) B, c) C, d) D, e) E, f) F, g) G oraz h) H

6.4. Podsumowanie

Podstawowe miary mikrostruktury, takie jak prawdopodobieństwo n-punktowe, funkcja prawdopodobieństwa odcinkowego czy krętość, dostarczają wielu informacji statystycznych o mikrostrukturze ośrodka. W sposób bezpośredni dostarczają informacji o udziale frakcyjnym poszczególnych składników mikrostruktury, ich wielkości, stopniu „połączenia”, czy drożności przestrzeni porowej. W sposób pośredni prowadzić mogą do wyznaczenia m.in. wielkości REO ośrodka, szacowania jego właściwości makroskopowych, czy rekonstrukcji jego mikrostruktury.

Korzystając z przedstawionych miar mikrostruktury pokazano jak skomplikowana jest mikrostruktura naturalnego ośrodka porowatego na przykładzie piasku średniego (MSa). Trójwymiarową morfologię MSa otrzymano na podstawie zobrażeń rentgenowskiej mikrotomografii komputerowej. Jednak tak jak pokazano w niniejszym rozdziale otrzymany w ten sposób „rzeczywisty” obraz mikrostruktury jest jego pewną rekonstrukcją, ponieważ jej efekt końcowy zależy od zastosowanych algorytmów, użytych parametrów skanowania oraz filtrów. Ponadto użycie odpowiednich filtrów nie jest uniwersalne i może być zasadne tylko dla danego typu zagadnień. Dla przykładu, użycie filtra watershed jest niezbędne przy określeniu wielkości czy kształtów poszczególnych ziaren ośrodków granulowanych. Z kolei filtr ten nie ma znaczącego wpływu przy określaniu funkcji prawdopodobieństwa dwu-punktowego oraz prawdopodobieństwa odcinkowego. Jego użycie natomiast jest wręcz niezasadne przy analizie przepływu np. strumienia ciepła, co pokazane zostało na przykładzie krętości.

W niniejszym rozdziale dokonano również weryfikacji sformułowanego zagadnienia odwrotnego (patrz rozdział 3) celem zidentyfikowania ekwiwalentnej mikrostruktury (M^{eq}) dla wybranych mikrostruktur ośrodków porowatych, w ujęciu dwóch analitycznych schematów aproksymacyjnych, tj. schematu M-T oraz S-C.

W rozdziale 6.2 zidentyfikowano funkcje M^{eq} dla cyfrowych reprezentacji wybranych mikrostruktur, dla których funkcje makroskopowych odpowiedzi materiałowych określono w ramach obliczeniowej mikromechaniki. Na podstawie wyników przeprowadzonych analiz można stwierdzić, że postać ekwiwalentnej mikrostruktury jest zależna od przyjętego schematu aproksymacyjnego; dla schematu M-T w większości przypadków uzyskuje się ciągły rozkład gęstości prawdopodobieństwa, podczas gdy schemat S-C identyfikuje dyskretne rodziny wtrąceń. W przypadku mikrostruktury zobrazonej w microCT oraz mikrostruktury losowej szachownicy oba

schematy zidentyfikowały ekwiwalentne mikrostruktury zapewniające niemal idealną predykcję funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej. Niemniej jednak, dla mikrostruktur wygenerowanych według modelu Debye oraz Isinga rozwiązanie zagadnienia odwrotnego tylko w ramach schematu M-T prowadzi do identyfikacji mikrostruktury ekwiwalentnej, ponieważ schemat S-C nie zapewnia satysfakcjonującej predykcji funkcji F^{mom} . Można zatem stwierdzić, że schemat M-T jest bardziej uniwersalny w porównaniu do schematu S-C. Należy to rozumieć w taki sposób, że schemat S-C nie dla każdej mikrostruktury jest w stanie zapewnić satysfakcjonującą predykcję funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej.

W rozdziale 6.3 zidentyfikowano ekwiwalentną mikrostrukturę dla rzeczywistego ośrodka gruntowego, tj. piasku średniego, dla którego funkcję makroskopowej odpowiedzi określono, tym razem, w badaniach laboratoryjnych. Pokazano, że dla obu użytych schematów aproksymacyjnych (M-T i S-C) uzyskano satysfakcjonującą predykcję funkcji F^{mom} . Ponadto, przy identyfikacji ekwiwalentnej mikrostruktury piasku średniego skorzystano z techniki regularyzacji. Pokazano, że autorska metoda wyznaczania wartości optymalnego współczynnika regularyzacji, podobnie jak w zadaniach testowych, daje lepsze rezultaty niż współczynnik regularyzacji określony w miejscu załamania krzywej L .

Poprawne oszacowanie wartości λ_s dla ośrodków gruntowych jest zadaniem niezwykle trudnym. Wobec tego w rozdziale 6.3.5 zaproponowano autorską metodę określania współczynnika przewodności cieplnej matrycy/szkieletu ośrodka porowatego. Zaproponowana metoda polega na wyznaczeniu optymalnej pary „wartość $\lambda_{s,\text{opt}}$ – funkcja $M^{\text{eq}}(\theta, \{\lambda_{s,\text{opt}}\})$ ”, która spełnia zależność (6.28). Przeprowadzone analizy wykazały, że $\lambda_{s,\text{opt}}$ należy traktować jako pewien parametr ekwiwalentny szkieletu ośrodka porowatego, który stowarzyszony jest z danym schematem aproksymacyjnym. Niemniej jednak, dzięki zaproponowanej metodzie możliwe jest rozwiązanie zagadnienia odwrotnego teorii homogenizacji na podstawie znajomości jedynie porowatości ośrodka oraz jego funkcji makroskopowej odpowiedzi. W konsekwencji nie jest konieczna znajomość przewodności cieplnej matrycy/szkieletu ośrodka porowatego do rozwiązania zagadnienia odwrotnego sformułowanego w pracy.

W rozdziale 6.3.6 przeprowadzono również analizę wpływu dwóch istotnych czynników na jakość uzyskanego rozwiązania zagadnienia odwrotnego. Analizie poddano wpływ liczby dyskretnych punktów pomiarowych makroskopowej przewodności cieplnej oraz wpływ kontrastu pomiędzy parametrami płynów wypełniających przestrzeń porową. Pokazano, że im większa liczba punktów pomiarowych oraz większy kontrast pomiędzy

wartościami λ_f tym lepsze rozwiązanie sformułowanego zagadnienia odwrotnego (w sensie predykcji makroskopowej przewodności cieplnej). Pokazano również, że w przypadku schematu M-T dla badanego ośrodka gruntowego przyjęcie nawet dwóch punktów pomiarowych, ale o możliwie największym kontraście λ_f , jest wystarczające do zidentyfikowania M^{eq} . Jednocześnie wykazano, że dla schematu S-C nawet jeden dowolnie wybrany punkt zapewnia satysfakcjonujące rozwiązanie. Należy wyraźnie podkreślić, że dwa ostatnie wnioski nie mają natury ogólnej, a zostały one sformułowane jedynie na podstawie rozważań dla jednego ośrodka porowatego, tj. piasku średniego, charakteryzującego się konkretną morfologią mikrostruktury. Inne materiały o odmiennej mikrostrukturze mogą wymagać zastosowania innej, większej, liczby punktów pomiarowych.

7. Tomograf cieplny

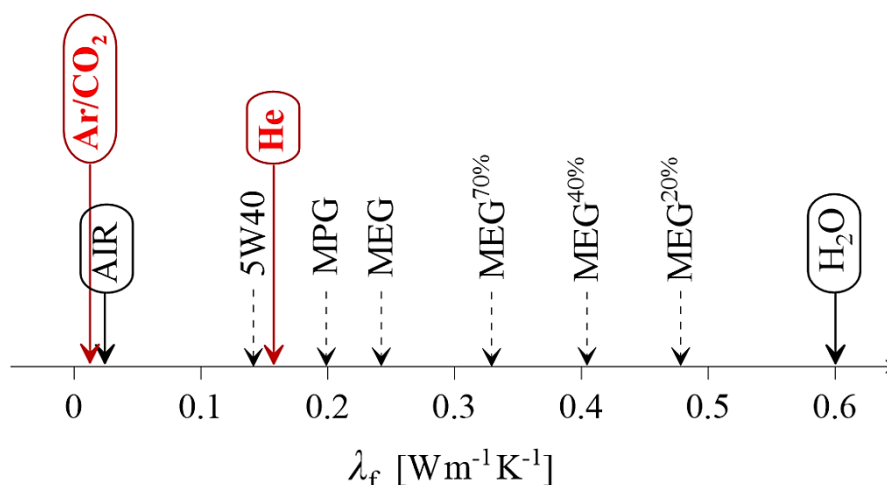
Rozwiązanie sformułowanego w niniejszej pracy zagadnienia odwrotnego teorii homogenizacji wymaga znajomości funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej. Wartości tej funkcji można uzyskać w badaniach laboratoryjnych poprzez sekwencyjne nasycanie ośrodka porowatego płynami o znanej przewodności i wyznaczenie odpowiadającej jej makroskopowej przewodności cieplnej. W szczególności, w rozdziale 6.3.3 przedstawiono laboratoryjną procedurę wyznaczania wspomnianej funkcji dla naturalnego ośrodka gruntowego, tj. piasku średniego. Zauważmy, że zaproponowana tam procedura jest odpowiednia tylko dla ośrodków porowatych o względnie „dużej” przestrzeni porowej. W przypadku innych materiałów takich jak np. grunty drobnoziarniste osiągnięcie stanu pełnej saturacji cieczami o lepkości większej niż woda (m.in. glikolem) jest zadaniem niezwykle trudnym, a możliwe, że wręcz niewykonalnym. W takiej sytuacji zdecydowanie bardziej praktyczne wydaje się nasycanie ośrodków porowatych gazami. Zastosowanie gazów jako medium nasycającego ośrodek porowaty pozwoliłoby na całkowite wypełnienie przestrzeni porowej ośrodka i tym samym efektywne wyznaczenie ich funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej (F^{mom}), która jak wspomniano już wcześniej, jest niezbędna do określenia ekwiwalentnej mikrostruktury (M^{eq}).

Jak pokazano w rozdziale 6.3.6, najlepiej, aby ośrodek porowaty nasycać płynami o możliwie dużym kontraście parametrów. Udowodniono również, że znajomość aż ośmiu dyskretnych punktów pomiarowych funkcji F^{mom} nie jest konieczna, aby z zadowalającym błędem zrekonstruować M^{eq} . Wobec tego autor pracy proponuje określenie funkcji F^{mom} na podstawie znajomości przewodności cieplnej ośrodka porowatego w pełni nasyconego argonem, powietrzem, helem oraz, jeżeli to możliwe, wodą. Argon można również zastąpić dwutlenkiem węgla, ze względu na zbliżoną wartość ich współczynników przewodności cieplnej. Orientacyjne wartości współczynników przewodności cieplnej wybranych cieczy oraz gazów dla ciśnienia atmosferycznego i temperatury 25°C zestawiono w tabeli 7.1 (cztery płyny proponowane do nasycania ośrodków porowatych w celu określenia F^{mom} oznaczono pogrubioną czcionką, gdzie dodatkowo kolorem czerwonym zaznaczono płyny niewykorzystane w poprzedniej części pracy). Z kolei koncepcję zmiany rodzaju płynów wykorzystywanych do laboratoryjnego określania funkcji makroskopowej odpowiedzi

przedstawiono na rys. 7.1. Niemniej jednak aby możliwe było nasycenie ośrodka porowatego gazem innym niż powietrze należałoby badać przewodność cieplną ośrodka porowatego w odpowiednio zaprojektowanej szczelnej komorze.

Tabela 7.1. Orientacyjne wartości współczynników przewodności cieplnej wybranych cieczy oraz gazów dla ciśnienia atmosferycznego i temperatury 25°C

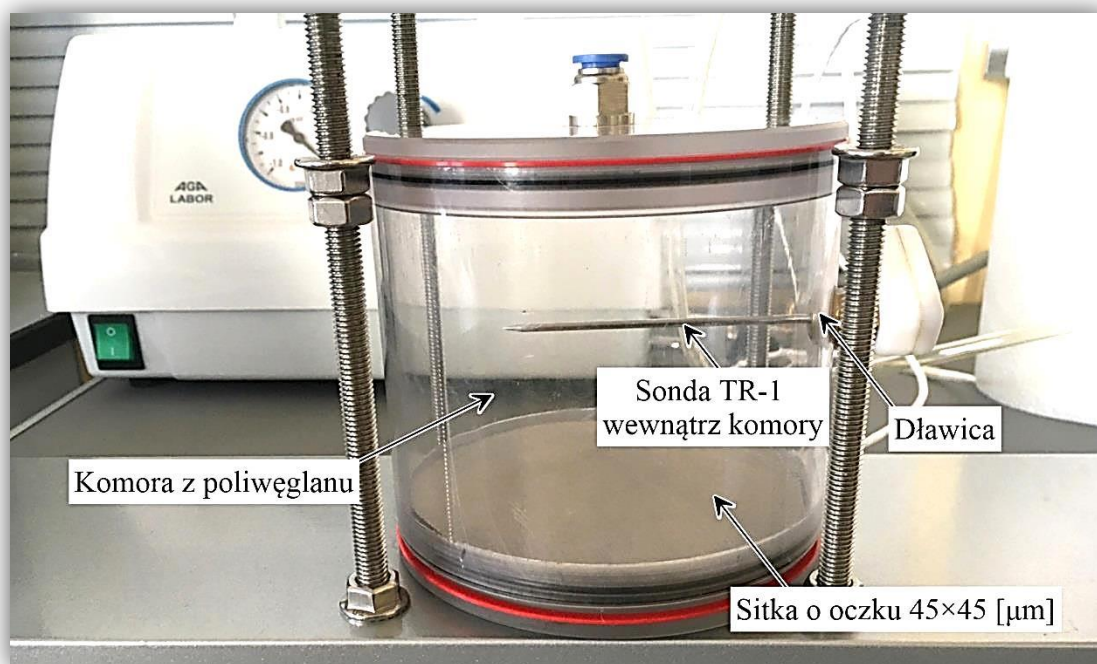
Lp.	Płyn	λ_f [$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$]
1	Argon (Ar) / Dwutlenek węgla (CO₂)	0.017 / 0.014
2	Powietrze (AIR)	0.025
3	Olej mineralny 5W30 (5W30)	0.141
4	Hel (He)	0.152
5	Glikol monopropylenowy (MPG)	0.200
6	Glikol monoetylenowy (MEG)	0.243
7	Roztwór glikolu monoetylenowego 70% (MEG ^{70%})	0.330
8	Roztwór glikolu monoetylenowego 40% (MEG ^{40%})	0.405
9	Roztwór glikolu monoetylenowego 20% (MEG ^{20%})	0.480
10	Woda destylowana (H₂O)	0.603



Rys. 7.1. Koncepcja zmiany rodzajów płynów wykorzystywanych do laboratoryjnego określania funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej

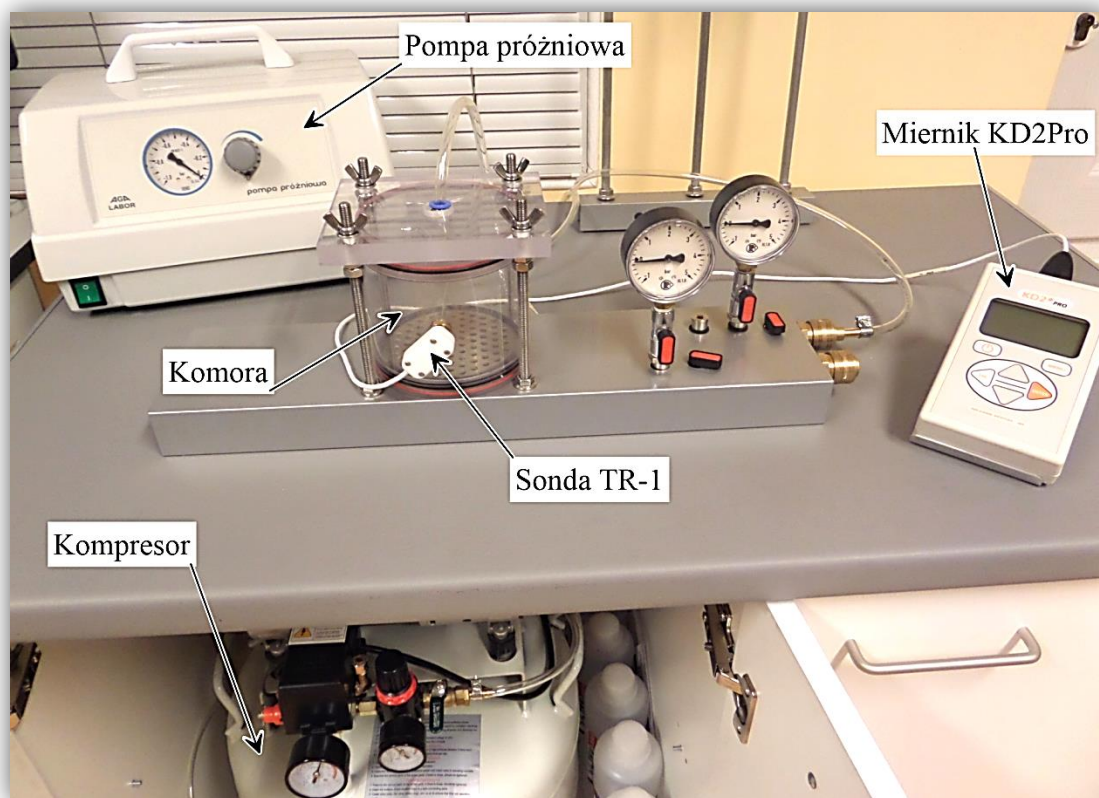
Powyższe wnioski wynikające bezpośrednio z rozważań zawartych w niniejszej pracy stały się motywacją do podjęcia próby stworzenia projektu oraz prototypu urządzenia służącego do laboratoryjnego wyznaczenia funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej ośrodków porowatych nasyconych zarówno cieczami jak i gazami. Jednym z ważniejszych elementów urządzenia jest szczelna komora w kształcie walca ograniczona

od dołu i od góry równoległymi pokrywami. Całość stanowi szczelną konstrukcję umożliwiającą zadawanie nadciśnienia bądź podciśnienia dla płynu (gazu bądź cieczy) wypełniającego przestrzeń porową materiału umieszczonego wewnątrz komory. W ścianie komory znajduje się szczelna dławica umożliwiająca zainstalowanie sondy pomiarowej TR-1 do badania przewodności cieplnej. Widok wykonanej komory wraz z zamocowaną sondą TR-1 przechodzącą przez dławicę przedstawiono na rys. 7.2. W każdej z podstaw wykonane są podłączenia, którymi podawane jest dowolne medium w fazie ciekłej bądź gazowej, dla określonego stanu ciśnienia bądź podciśnienia. Zamontowane przy nich manowakuometry umożliwiają sprawdzenie, kiedy badany ośrodek zostanie w pełni nasycony płynem o określonym ciśnieniu. Dno komory zostało zaprojektowane w taki sposób, aby w jej wnętrzu możliwe było umieszczenie wyciętej próbki, bądź wsypanie do niej ośrodka sypkiego o średnicy ziaren większej niż 45 μm (możliwe jest badanie ośrodków sypkich o mniejszej średnicy ziaren po uprzednim umieszczeniu na dnie komory odpowiednio dobranego kamienia porowego).



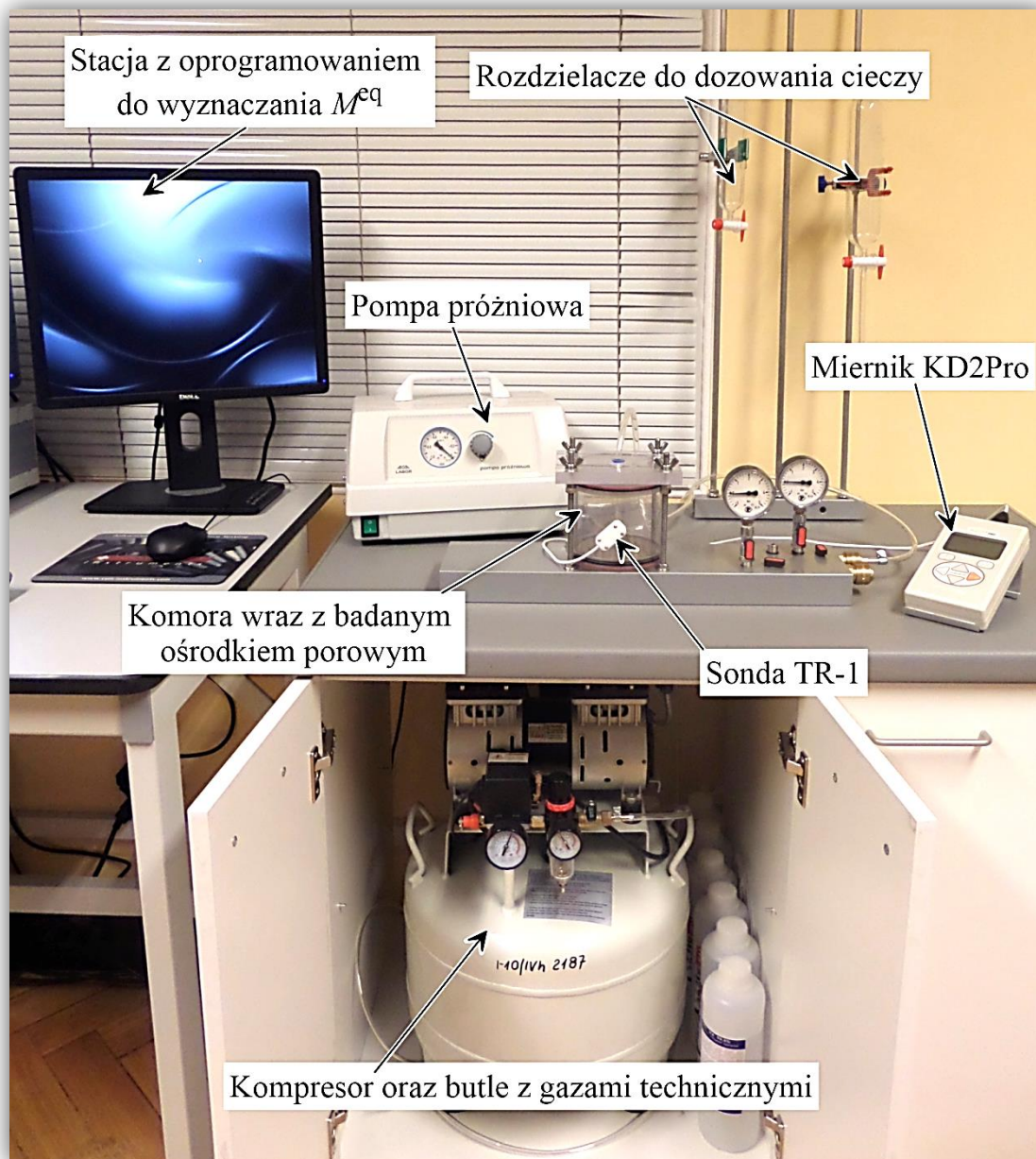
Rys. 7.2. Szczelna komora wraz z zamocowaną sondą TR-1 przechodzącą przez szczelną dławicę umieszczoną w ścianie komory

Opisana powyżej komora uzupełniona jest o dodatkowe komponenty, m.in. miernik KD2Pro, pompę próżniową oraz butle z gazami technicznymi. Całość tworzy stanowisko badawcze do określenia funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej ośrodka porowatego (patrz rys. 7.3).



Rys. 7.3. Stanowisko badawcze do badania przewodności cieplnej ośrodka porowatego w pełni nasyconego określonym płynem (cieczą lub gazem)

Wykorzystanie stanowiska badawczego w połączeniu z komputerem PC i oprogramowaniem bazującym na teorii zawartej w niniejszej rozprawie, finalnie, prowadzi do utworzenia urządzenia, które autor, poprzez analogię do mikrotomografii komputerowej, proponuje określać mianem „tomografu cieplnego” (rys. 7.4). W przypadku tomografii komputerowej dokonuje się rekonstrukcji rzeczywistej mikrostruktury materiału. Zaproponowane tutaj urządzenie, tzw. tomograf cieplny, prowadzi do identyfikacji ekwiwalentnej mikrostruktury dla rzeczywistych ośrodków porowatych w ujęciu analitycznych schematów aproksymacyjnych, tj. schematu Mori-Tanaki oraz samouzgodnionego pola.



Rys. 7.4. „Tomograf cieplny” – prototyp urządzenia do określania funkcji ekwiwalentnej mikrostruktury (M^{eq}) ośrodków porowatych

8. Podsumowanie

W zasadniczej części pracy szczegółowe wnioski wynikające z wnikliwych rozważań teoretycznych oraz analiz zaprezentowano na końcu każdego rozdziału (patrz rozdział 2.4, 3.3, 4.4, 5.3, oraz 6.4). Wobec tego, w niniejszym rozdziale prezentuje się już tylko najważniejsze rezultaty, osiągnięcia oraz wnioski płynące z rozważań i analiz zawartych w niniejszej pracy.

W pracy sformułowane zostało zagadnienie odwrotne teorii homogenizacji prowadzące do wyznaczenia ekwiwalentnej mikrostruktury (uproszczonej względem mikrostruktury rzeczywistej) ośrodka porowatego. Ekwiwalentna mikrostruktura rozumiana jest w taki sposób, że prowadzi do takiej odpowiedzi makroskopowej rozważanego ośrodka, w szczególności makroskopowej przewodności cieplnej, jak jego mikrostruktura rzeczywista i jest niezmiennicza względem przewodności cieplnej płynu wypełniającego przestrzeń porową tego ośrodka. Ekwiwalentną mikrostrukturę zapostulowano w postaci ciągłej matrycy i przestrzeni porowej modelowanej wtrąceniami sferoidalnymi, przy czym rozkład kształtu wtrąceń opisany jest przez funkcję gęstości prawdopodobieństwa nazwaną funkcją ekwiwalentnej mikrostruktury ($M^{eq}(\theta)$).

Wyznaczenia funkcji $M^{eq}(\theta)$ dokonano w ramach dwóch schematów analitycznych, tj. schematu aproksymacyjnego Mori-Tanaki oraz schematu samouzgodnionego pola. Wykazano, że w ujęciu obu schematów, zagadnienie odwrotne można sprowadzić do postaci liniowego równania Fredholma I-go rodzaju (3.11) z dodatkowymi ograniczeniami (3.12). W celu jego rozwiązania (znalezienia funkcji $M^{eq}(\theta)$) skorzystano z procedury stochastycznej optymalizacji symulowanego wyżarzania, której zmodyfikowany algorytm przedstawiono w rozdziale 4.2. Efektywność oraz poprawność zaproponowanej procedury zweryfikowano w rozdziale 4.3.

W rozdziale 5 pokazano, że zagadnienie odwrotne teorii homogenizacji jest niestabilne (źle uwarunkowane w sensie Hadamarda), ponieważ niewielkie błędy w danych wejściowych implikują duże zmiany w rozwiązaniu. Wobec tego w celu ustabilizowania rozwiązania skorzystano z techniki regularyzacji Tichonowa. Analiza licznych przykładów dowiodła, iż zastosowanie standardowej procedury określania optymalnej wartości współczynnika regularyzacji (μ_{opt}) w miejscu załamania krzywej L (Hansen & O'Leary, 1993) nie przynosi zadowalających rezultatów (patrz rozdział 5.2.2). Wobec tego, w rozdziale 5.2.3 przedstawiono autorską procedurę wyznaczenia najbardziej

optymalnej wartości współczynnika regularyzacji (μ^*_{opt}). Tak zdefiniowana, zmodyfikowana wartość współczynnika regularyzacji gwarantuje możliwie najbardziej stabilne rozwiązanie, M^{eq} , jednocześnie nie przekraczające założonego błędu dla predykcji makroskopowej przewodności cieplnej ośrodka.

Sformułowaną w pracy procedurę zaaplikowano do wyznaczenia funkcji $M^{\text{eq}}(\theta)$ cyfrowych reprezentacji wybranych mikrostruktur. Pokazano, że postać ekwiwalentnej mikrostruktury jest zależna od przyjętego schematu aproksymacyjnego. Ponadto, schemat M-T okazał się bardziej uniwersalny w porównaniu do schematu S-C, ponieważ schemat S-C nie dla każdej mikrostruktury jest w stanie zapewnić satysfakcjonującą predykcję funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej. Sformułowaną w niniejszej pracy procedurę zaimplementowano również do wyznaczenia ekwiwalentnej mikrostruktury rzeczywistego ośrodka porowatego – ośrodka gruntowego. Pokazano, że niezależnie od użytego schematu aproksymacyjnego (Mori-Tanaki bądź samouzgodnionego pola), wykorzystanie ekwiwalentnej mikrostruktury zapewnia satysfakcjonującą predykcję funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej.

Do rozwiązania zagadnienia odwrotnego teorii homogenizacji niezbędna jest informacja na temat funkcji makroskopowej odpowiedzi materiałowej, porowatości oraz współczynnika przewodności cieplnej matrycy/szkieletu (λ_s). Niemniej jednak poprawne oszacowanie wartości λ_s dla ośrodków gruntowych jest zadaniem niezwykle trudnym. Wobec tego w pracy sformułowano autorską metodę oceny wartości współczynnika przewodności cieplnej szkieletu ośrodka porowatego (patrz rozdział 6.3.5). W konsekwencji, do rozwiązania zagadnienia odwrotnego identyfikacji ekwiwalentnej mikrostruktury, nie jest konieczna znajomość przewodności cieplnej matrycy/szkieletu ośrodka porowatego.

Sformułowana w pracy funkcja ekwiwalentnej mikrostruktury identyfikowana jest na podstawie znajomości sekwencji/zbioru makroskopowych przewodności cieplnych, tj. $\lambda^{\text{hom}}(\lambda_f)$. Funkcja ta nazywana jest w pracy funkcją makroskopowej odpowiedzi materiałowej (F^{mom}). Jej wartości uzyskać można poprzez badania laboratoryjne lub na podstawie symulacji numerycznych bazując np. na morfologii mikrostruktury uzyskanej z mikrotomografu komputerowego (microCT). Laboratoryjną procedurę wyznaczania F^{mom} dla naturalnego ośrodka gruntowego, tj. piasku średniego przedstawiono w rozdziale 6.3.3. Na podstawie rozważań teoretycznych zawartych w pracy stworzono przyrząd służący do laboratoryjnego wyznaczania funkcji F^{mom} ośrodków porowatych poprzez nasycanie ich, w głównej mierze, gazami. Urządzenie, które stworzono w ramach realizacji pracy doktorskiej zaprezentowano w rozdziale 7.

Bazując na analizach przedstawionych w niniejszej pracy sformułować można następującą „instrukcję” prowadzącą do stworzenia prostego modelu do szacowania makroskopowej przewodności cieplnej ośrodków porowatych:

- poprzez badania laboratoryjne określ porowatość (ϕ_f) ośrodka (rozdział 6.1.1),
- korzystając z utworzonego stanowiska badawczego przedstawionego w rozdziale 7 wyznacz funkcję makroskopowej odpowiedzi materiałowej poprzez sekwencyjne nasycanie badanego ośrodka płynami, np. argonem, powietrzem, helem oraz, jeżeli to możliwe i konieczne, wodą,
- rozwiąż zagadnienie odwrotne teorii homogenizacji sformułowane w pracy (w ujęciu schematu Mori-Tanaki bądź samouzgodnionego pola) i wyznacz optymalną parę: współczynnik przewodności cieplnej szkieletu/matrycy ($\lambda_{s,opt}$) oraz funkcję ekwiwalentnej mikrostruktury $M^{eq}(\theta, \{\lambda_{s,opt}\})$, która spełnia zależność (6.28),
- skorzystaj z uzyskanej funkcji ekwiwalentnej mikrostruktury jako modelu do szacowania efektywnego współczynnika przewodności cieplnej dla dowolnej cieczy lub gazu wypełniającego przestrzeń porową ośrodka rozwiązując zagadnienie bezpośrednio teorii homogenizacji korzystając z prostego analitycznego schematu aproksymacyjnego (schemat Mori-Tanaki lub samouzgodnionego pola).

Spis literatury

- [1] Abramowitz M., & Stegun I.A.. (1972). *Handbook of mathematical functions*, Dover Publications, Inc., New York.
- [2] Berryman, J. G., & Blair, S. C. (1986). Use of digital image analysis to estimate fluid permeability of porous materials: Application of two-point correlation functions. *Journal of applied Physics*, 60(6), 1930-1938.
- [3] Berryman, J. G., & Milton, G. W. (1988). Microgeometry of random composites and porous media. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 21(1), 87.
- [4] Berryman, J. G., & Berge, P. A. (1996). Critique of two explicit schemes for estimating elastic properties of multiphase composites. *Mechanics of Materials*, 22(2), 149-164.
- [5] Bertero, M., & Boccacci, P. (1998). *Introduction to inverse problems in imaging*. CRC press.
- [6] Black, M. J., & Anandan, P. (1991). Robust dynamic motion estimation over time. In *Computer Vision and Pattern Recognition, 1991. Proceedings CVPR'91., IEEE Computer Society Conference on* (pp. 296-302). IEEE.
- [7] Brown Jr, W. F. (1955). Solid mixture permittivities. *The Journal of Chemical Physics*, 23(8), 1514-1517.
- [8] Bohr, H., & Brunak, S. (1989). A travelling salesman approach to protein conformation. *Complex Systems*, 3(9).
- [9] Cai, W., & Shao, X. (2002). A fast annealing evolutionary algorithm for global optimization. *Journal of computational chemistry*, 23(4), 427-435.
- [10] Calvetti, D., Morigi, S., Reichel, L., & Sgallari, F. (2000). Tikhonov regularization and the L-curve for large discrete ill-posed problems. *Journal of computational and applied mathematics*, 123(1), 423-446.
- [11] Carslaw H.S., & Jaeger J.C. (1959). *Conduction of heat in solids*, Second edition, Oxford, Clarendon Press.
- [12] Constantinides, G., & Ulm, F. J. (2004). The effect of two types of CSH on the elasticity of cement-based materials: Results from nanoindentation and micromechanical modeling. *Cement and concrete research*, 34(1), 67-80.
- [13] Dohnalik, M. (2014). Zwiększenie możliwości wyznaczania parametrów zbiornikowych skał z wykorzystaniem rentgenowskiej mikrotomografii komputerowej. *Prace Naukowe Instytutu Nafty i Gazu*, (193), 1-162.
- [14] Du, X., & Ostoja-Starzewski, M. (2006). On the size of representative volume element for Darcy law in random media. In *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 462(2074), 2949-2963.
- [15] Eshelby, J. D. (1957). The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. In: *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* (Vol. 241, No. 1226, pp. 376-396). The Royal Society.
- [16] Feldkamp, L. A., Davis, L.C., Kress, J. W. (1984). Practical cone-beam algorithm. *Journal of Optical Society of America*, 1(6), 612-619.

- [17] Feller, W. (1961), *An Introduction to Probability Theory and its Applications*, Vol. I, 2nd Edition, John Wiley and Sons, N.Y.
- [18] Geers, M. G., Kouznetsova, V. G., & Brekelmans, W. A. M. (2010). Multi-scale computational homogenization: Trends and challenges. *Journal of computational and applied mathematics*, 234(7), 2175-2182.
- [19] Gilbert F. (1990). Change of scale in multiphase media: the case of saturated soils, In: *Geomaterials: Constitutive equations and modelling*, F. Darve (Ed.), 329–347.
- [20] Giraud, A., & Sevostianov, I. (2013). Micromechanical modeling of the effective elastic properties of oolitic limestone. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 62, 23-27.
- [21] Giraud, A., Sevostianov, I., Chen, F., & Grgic, D. (2015). Effective thermal conductivity of oolitic rocks using the Maxwell homogenization method. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 80, 379-387.
- [22] Gitman, I. M., Askes, H., & Sluys, L. J. (2007). Representative volume: existence and size determination. *Engineering fracture mechanics*, 74(16), 2518-2534.
- [23] Goffe, W. L., Ferrier, G. D., & Rogers, J. (1994). Global optimization of statistical functions with simulated annealing. *Journal of econometrics*, 60(1-2), 65-99.
- [24] Gusev, A. A. (1997). Representative volume element size for elastic composites: a numerical study. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 45(9), 1449-1459.
- [25] Habib, P. (1990). An introduction to the rheology of geomaterials. *Geomaterials: Constitutive equations and modelling*, F. Darve (ed.), 1-5.
- [26] Hansen, P. C. (1998). *Rank-deficient and discrete ill-posed problems: numerical aspects of linear inversion*. Society for Industrial and Applied Mathematics.
- [27] Hansen, P. C., & O’Leary, D. P. (1993). The use of the L-curve in the regularization of discrete ill-posed problems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 14(6), 1487-1503.
- [28] Hashin, Z. & Shtrikman, S. (1963). A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 11, 127-140.
- [29] Hashin, Z. (1983). Analysis of composite materials. *Journal of Applied Mechanics*, 50(2), 481-505.
- [30] Hill, R. (1952). The elastic behaviour of a crystalline aggregate. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 65, 349-354.
- [31] Hill R. (1965). A self-consistent mechanics of composite materials, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 13, 213– 222.
- Jiang, L., Liu, Y., Teng, Y., Zhao, J., Zhang, Y., Yang, M., & Song, Y. (2016). Permeability estimation of porous media by using an improved capillary bundle model based on micro-CT derived pore geometries. *Heat and Mass Transfer*, 1(53), 49-58.
- [32] Jiang, Y. (2010). *Solving the inverse problem of electrocardiography in a realistic environment* (Vol. 9). KIT Scientific Publishing.
- [33] Johansen, O. (1975). *Thermal conductivity of soils*. Ph.D. diss. Norwegian University of Science and Technology, Trondheim (CRREL draft translation 637, 1977).

- [34] Ingber, L. (1993). Simulated annealing: Practice versus theory. *Mathematical and computer modelling*, 18(11), 29-57.
- [35] Kachanov, M., & Sevostianov, I. (2005). On quantitative characterization of microstructures and effective properties. *International Journal of Solids and Structures*, 42(2), 309-336.
- [36] Kanit T., Forest S., Galliet I., Mounoury V., Jeulin D. (2003). Determination of the size of the representative volume element for random composites: statistical and numerical approach, *International Journal of Solids and Structures*, 40, 3647-3679.
- [37] Kanit, T., N'Guyen, F., Forest, S., Jeulin, D., Reed, M., & Singleton, S. (2006). Apparent and effective physical properties of heterogeneous materials: representativity of samples of two materials from food industry. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195(33), 3960-3982.
- [38] Kazatchenko, E., Markov, M., & Mousatov, A. (2006). Simulation of acoustic velocities, electrical and thermal conductivities using unified pore-structure model of double-porosity carbonate rocks. *Journal of Applied Geophysics*, 59(1), 16-35.
- [39] KD2 Pro Thermal Properties Analyzer Operator's Manual, Version 10, Decagon Devices, Inc., 2011.
- [40] Kirkpatrick, S., Gelatt, C. D., & Vecchi, M. P. (1983). Optimization by simulated annealing. *Science*, 220(4598), 671-680.
- [41] Kress, R., Maz'ya, V., & Kozlov, V. (1989). *Linear integral equations* (Vol. 82). Berlin: Springer-Verlag.
- [42] Lantuéjoul, C. (1991). Ergodicity and integral range. *Journal of Microscopy*, 161(3), 387-403.
- [43] Lawson, C. L., & Hanson, R. J. (1995). *Solving least squares problems*. Society for Industrial and Applied Mathematics.
- [44] Li, M. (2015). Contribution à la modélisation multi-échelle du comportement mécanique des matériaux rocheux (Doctoral dissertation, Lille 1).
- [45] Li, S., & Wang, G. (2008). *Introduction to micromechanics and nanomechanics*. World Scientific Publishing Company.
- [46] Liu, G. R., & Han, X. (2003). *Computational inverse techniques in nondestructive evaluation*. CRC press.
- [47] Lu, B., & Torquato, S. (1992). Lineal-path function for random heterogeneous materials. *Physical Review A*, 45(2), 922.
- [48] Łydźba, D. (2002). *Zastosowania metody asymptotycznej homogenizacji w mechanice gruntów i skał*. Oficyna Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej.
- [49] Łydźba, D. (2011). *Effective Properties of Composites: Introduction to Micromechanics*. Wrocław University of Technology, PRINTPAP, Wrocław.
- [50] Łydźba, D., & Róžański, A. (2011). On the Minimum Size of Representative Volume Element: An N -Point Probability Approach. In 12th ISRM Congress. International Society for Rock Mechanics.
- [51] Łydźba, D. & Róžański, A. (2014). Microstructure measures and the minimum size of a representative volume element: 2D numerical study, *Acta Geophysica*, 62(5), 1060-1086.

- [52] Łydźba, D., Róžański, A., Rajczakowska, M., & Stefaniuk, D. (2014). Efficiency of the needle probe test for evaluation of thermal conductivity of composite materials: two-scale analysis. *Studia Geotechnica et Mechanica*, 36(1), 55-62.
- [53] Łydźba, D., Róžański, A., Rajczakowska, M., & Stefaniuk, D. (2017). Random checkerboard based homogenization for estimating effective thermal conductivity of fully saturated soils. *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*, 9(1), 18-28.
- [54] Łydźba, D., Róžański, A., & Stefaniuk, D. (2018). Equivalent microstructure problem: Mathematical formulation and numerical solution. *International Journal of Engineering Science*, 123, 20-35.
- [55] Marinari, E., & Parisi, G. (1992). Simulated tempering: a new Monte Carlo scheme. *EPL (Europhysics Letters)*, 19(6), 451.
- [56] Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Rosenbluth, M. N., Teller, A. H., & Teller, E. (1953). Equation of state calculations by fast computing machines. *The journal of chemical physics*, 21(6), 1087-1092.
- [57] Milton, G. W. (1981). Bounds on the transport and optical properties of a two-component composite material. *Journal of Applied Physics*, 52(8), 5294-5304.
- [58] Milton, G. W. (1985). The coherent potential approximation is a realizable effective medium scheme. *Communications in Mathematical Physics*, 99(4), 463-500.
- [59] Mori, T., & Tanaka, K. (1973). Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta metallurgica*, 21(5), 571-574.
- [60] Nguyen, V. P., Stroeve, M., & Sluys, L. J. (2011). Multiscale continuous and discontinuous modeling of heterogeneous materials: a review on recent developments. *Journal of Multiscale Modelling*, 3(04), 229-270.
- [61] Nigmatulin R.I. (1981). Three-Dimensional Averaging in the Mechanics of Heterogeneous Media, *Fluids Mechanics-Soviet Research*, 10(4), 72–105.
- [62] Ochsner T. E., Horton R., Ren T. (2003). Use of the dual-probe heat-pulse technique to monitor soil water content in the vadose zone. *Vadose Zone Journal*, 2(4), 572-579.
- [63] Pant, L. M., Mitra, S. K., & Secanell, M. (2014). Stochastic reconstruction using multiple correlation functions with different-phase-neighbor-based pixel selection. *Physical Review E*, 90(2), 023306.
- [64] Phillips, D. L. (1962). A technique for the numerical solution of certain integral equations of the first kind. *Journal of the ACM (JACM)*, 9(1), 84-97.
- [65] Quintanilla, J., & Torquato, S. (1996). Lineal measures of clustering in overlapping particle systems. *Physical Review E*, 54(4), 4027.
- [66] Rothman, D. H. (1985). Nonlinear inversion, statistical mechanics, and residual statics estimation. *Geophysics*, 50(12), 2784-2796.
- [67] Róžański, A. (2010). *Random composites: representativity, minimum RVE size, effective transport properties*, PhD dissertation, Université Lille, LML (UMR CNRS 8107), No. 40444.

- [68] Różański, A., & Sobótka, M. (2013). On the interpretation of the needle probe test results: thermal conductivity measurement of clayey soils. *Studia Geotechnica et Mechanica*, 35(1), 195-207.
- [69] Różański, A., & Stefaniuk, D. (2016). Prediction of soil solid thermal conductivity from soil separates and organic matter content: computational micromechanics approach. *European Journal of Soil Science*, 67(5), 551-563.
- [70] Różański, A. (2017). Temperature Changes in the Vicinity of Thermally Loaded Structure Embedded in the Soil: Effect of Sand Content and Saturation Degree. *Studia Geotechnica et Mechanica*, 39(2), 61-71.
- [71] Rubinstein J., Torquato S. (1989). Flow in random porous media: mathematical formulation, variational principles and rigorous bounds, *Journal of Fluid Mechanics*, 206, 25–46.
- [72] Rutenbar, R. A. (1989). Simulated annealing algorithms: An overview. *IEEE Circuits and Devices Magazine*, 5(1), 19-26.
- [73] Sanchez-Palencia E. (1980). *Non-homogeneous Media and Vibration Theory*, Lecture Notes in Physics, 127, Springer-Verlag, Berlin.
- [74] Sevostianov, I., & Kachanov, M. (2012). Is the concept of “average shape” legitimate, for a mixture of inclusions of diverse shapes?. *International Journal of Solids and Structures*, 49(23-24), 3242-3254.
- [75] Sevostianov, I., & Kachanov, M. (2015). On the possibility to represent effective properties of a material with inhomogeneities in terms of concentration parameters. *International Journal of Solids and Structures*, 52, 197-204.
- [76] Staniec, M., & Nowak, H. (2015). Analysis of energy consumption in earth-sheltered building with southern elevation exposed. *Technical Transactions, Civil Engineering*, 217-224.
- [77] Stroeven, M., Askes, H., & Sluys, L. J. (2004). Numerical determination of representative volumes for granular materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193(30), 3221-3238.
- [78] Strzelecki, T. (Ed.). (1996). *Mechanika ośrodków niejednorodnych: teoria homogenizacji*. Dolnośląskie Wydaw. Edukacyjne.
- [79] Suquet, P. M. (1987). Elastic perfectly plastic constituents. In *Homogenization techniques for composite media* (pp. 245-278). Springer, Berlin, Heidelberg.
- [80] Suquet, P. (1997). Effective properties of nonlinear composites. In P. Suquet (Ed.), *Continuum micromechanics* (pp. 197–264). Vienna: Springer-Verlag.
- [81] Szu, H., & Hartley, R. (1987). Fast simulated annealing. *Physics letters A*, 122(3-4), 157-162.
- [82] Terada, K., Hori, M., Kyoya, T., & Kikuchi, N. (2000). Simulation of the multi-scale convergence in computational homogenization approaches. *International Journal of Solids and Structures*, 37(16), 2285-2311.
- [83] Tichonow, A. (1963). Solution of incorrectly formulated problems and the regularization method. In *Soviet Math. Dokl.* (Vol. 5, pp. 1035-1038).

- [84] Thermal conductivities for some common liquids at temperature 300 K (http://www.engineeringtoolbox.com/thermal-conductivity-liquids-d_1260.html) (dostęp 11.07.2017).
- [85] Torquato, S. (2002). Statistical description of microstructures. *Annual review of materials research*, 32(1), 77-111.
- [86] Torquato, S. (2013). *Random heterogeneous materials: microstructure and macroscopic properties* (Vol. 16). Springer Science & Business Media.
- [87] Van der Sluis, O., Schreurs, P. J. G., Brekelmans, W. A. M., & Meijer, H. E. H. (2000). Overall behaviour of heterogeneous elastoviscoplastic materials: effect of microstructural modelling. *Mechanics of Materials*, 32(8), 449-462.
- [88] Van Mier, J. G. (1997). *Fracture process of concrete: Assessment of material parameters for fracture models*.
- [89] Willis, J. R. (1977). Bounds and self-consistent estimates for the overall properties of anisotropic composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 25(3), 185-202.
- [90] Wojtacki, K. T. (2015). *Couplage entre transporte, comportement mécanique et dégradation par dissolution de réservoirs de roche*.
- [91] Wunsch, C. (1996). *The ocean circulation inverse problem*. Cambridge University Press.
- [92] Yeong, C. L. Y., & Torquato, S. (1998). Reconstructing random media. *Physical Review E*, 57(1), 495.
- [93] Zeman, J., & Šejnoha, M. (2001). Numerical evaluation of effective elastic properties of graphite fiber tow impregnated by polymer matrix. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49(1), 69-90.
- [94] Zohdi, T. I., & Wriggers, P. (2008). *An introduction to computational micromechanics*. Springer Science & Business Media.