

Міністерство освіти і науки України
Національний університет "Львівська політехніка"

На правах рукопису

Яворський Назарій Борисович



УДК 004.942; 519.876.5

**МОДЕЛІ ТА МЕТОДИ ПРОЕКТУВАННЯ КОМПОЗИЦІЙНИХ
МАТЕРІАЛІВ З ВРАХУВАННЯМ ТЕПЛОФІЗИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК**

05.13.12 – системи автоматизації проектувальних робіт

Дисертація на здобуття наукового ступеня
кандидата технічних наук

Науковий керівник –
доктор фізико-математичних наук,
професор **Кособуцький П.С.**

Ідентичність усіх примірників дисертації

ЗАСВІДЧУЮ:

Вчений секретар спеціалізованого

вченої ради



/ Р. А. Бунь /

Львів – 2016

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ	4
ВСТУП	5
РОЗДІЛ 1 ПРОЕКТУВАННЯ КОМПОЗИЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ НА	
ОСНОВІ ЧИСЕЛЬНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ФІЗИЧНИХ ПРОЦЕСІВ	13
1.1 Знаходження ефективних характеристик композитів у їх проектуванні....	13
1.2 Вплив структури матеріалів на їх фізичні характеристики.....	16
1.3 Моделі та методи знаходження ефективних характеристик.....	18
1.4 Застосування чисельних методів моделювання фізичних процесів.....	23
1.5 Висновки до розділу 1	30
РОЗДІЛ 2 МЕТОДОЛОГІЯ ЗНАХОДЖЕННЯ ТЕПЛОФІЗИЧНИХ	
ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОЗИЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ	32
2.1 Методи моделювання мікроструктур композиційних матеріалів	32
2.2 Аналітичні моделі фізичних процесів в неперервних середовищах	38
2.3 Чисельні методи наближеного розв'язку фізико-математичних задач	50
2.4 Застосування методу аналогій та теорії подібності.....	69
2.5 Доменна декомпозиція та застосування паралельних обчислень.....	77
2.6 Висновки до розділу 2	83
РОЗДІЛ 3 ВДОСКОНАЛЕННЯ МОДЕЛЕЙ ТА МЕТОДІВ	
ЗНАХОДЖЕННЯ ЕФЕКТИВНИХ ТЕПЛОФІЗИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК	
КОМПОЗИЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ ПРИ ЇХ ПРОЕКТУВАННІ	85
3.1 Розроблення методів синтезу мікрорівневих структур композиційних матеріалів на основі регулярних коміркових моделей.....	85
3.2 Розроблення моделей аналізу теплофізичних процесів в мікрорівневих структурах композитів на основі методу скінченних елементів	94
3.3 Розроблення методів знаходження ефективних характеристик композиційних матеріалів на основі методу теплоелектричної аналогії.....	107
3.4 Висновки до розділу 3	117

РОЗДІЛ 4 РЕАЛІЗАЦІЯ ТА ВЕРИФІКАЦІЯ МОДЕЛЕЙ І МЕТОДІВ

ЗНАХОДЖЕННЯ ТЕПЛОФІЗИЧНИХХАРАКТЕРИСТИК КОМПОЗИТІВ ...	119
4.1 Реалізація декомпозиції обчислень з допомогою технології OpenCL	119
4.2 Перевірка збіжності модельних обчислень серіями експериментів.....	131
4.3 Порівняння результатів з натурними експериментами.....	139
4.4 Висновки до розділу 4	140
ВИСНОВКИ.....	142
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	144
Додаток А Акти про впровадження результатів роботи.....	159

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ

КМ	Композиційний матеріал, композит;
МСЕ	Метод скінченних елементів;
МЗН	Методи зважених нев'язок;
ДРЧП	Диференціальне рівняння з частинними похідними;
СЛАР	Система лінійних алгебраїчних рівнянь;
ТКЛР	Температурний коефіцієнт лінійного розширення;
SIMD	Single Instruction Multiple Data;
OpenCL	Open Computing Language;
CPU	Central Processing Unit;
GPGPU	General-Purpose Graphics Processing Unit.

ВСТУП

Актуальність теми дисертації. Технічний прогрес сучасного багатофункціонального приладобудування та його застосування у різноманітних технологічних умовах, таких як космічний простір, високоінтенсивні фізичні поля чи екстремальні температури, й надалі залишає актуальним питання створення ефективних конструкційних матеріалів, у монокристалічному чи композиційному станах, як на макро-, так і на мікрорівні. При цьому, на відміну від сумішей чи сплавів, перевагу віддають в основному композиційним матеріалам, оскільки характерною особливістю при їх створенні є можливість цілеспрямованої зміни теплофізичних характеристик зумовлена можливістю керування структурними параметрами композиції.

Задача оптимального проектування композиційних матеріалів з урахуванням їх теплофізичних характеристик є складовою актуальної задачі проектування конструкцій. Обсяги досліджень у цьому напрямку з кожним роком зростають, про що свідчить збільшення кількості публікованих наукових робіт.

Дослідження задачі оптимального проектування композиційних матеріалів дають змогу виділити як основне завдання, вивчення взаємозв'язку "склад – структура – характеристики". Знаходження ефективних, тобто певним чином усереднених характеристик є трудомісткою задачею, яку розв'язують або спираючись на небажані, складні та економічно-затратні натурні експерименти, або на чисельно-аналітичні методи, де обчислення проводять на основі обернених задач провідності. У певних випадках вдається вивести наближені емпіричні та напівемпіричні формули, а для тривіальних структур матеріалів вдаються до аналізу фізичних процесів у їх спрощених квазіоднорідних моделях. Основні ж труднощі виникають при спробах синтезу характеристик матеріалів складної структури, через значний вплив неоднорідності їх середовища на процеси, що моделюються. Широкий спектр найрізноманітніших структур композиційних матеріалів та складність моделювання фізичних явищ, наприклад явища утворення перколяційного порогу ефективних характеристик цих структур, вимагає високого рівня деталізації їх фізико-математичних моделей. Така

ситуація є особливо небажаною в процесах проектування, що передбачають ітераційні обчислення і, відповідно, ведуть до збільшення складності алгоритмів на порядок. Для розв'язування таких задач, доцільним є застосування технологій паралельних та розподілених обчислень до чисельних методів моделювання, зокрема до методу скінченних елементів.

Вагомий внесок у розвиток методів знаходження ефективних теплофізичних характеристик у задачах оптимального проектування композиційних матеріалів на основі чисельного моделювання відповідних фізичних процесів зробили українські та зарубіжні вчені Torquato S., Roberts A., Шевченко В., Barbero E., Зиновьев П., Смердов А., Vasiliev V., Ostoja-Starzewski M., Нарусберг В., Тетерс Г., Hashin Z., Lubin G., Christinsen R., Дульнев Г., Заричняк Ю., Фармага І., Майстренко А., Герега А., Вировий В., Рассоха А., Черкашина А., Клованич С., Szabó V., Babuška I., Zienkiewicz O.

Дослідження задачі привертає увагу на таке:

- Розроблення та дослідження моделей композиційних матеріалів є частинами актуальної задачі оптимального проектування конструкцій. Вони спрямовані, з однієї сторони, на покращення структурних, фізико-хімічних та механічних властивостей матеріалів у відповідності до області використання, з іншої – на підвищення технологічних, економічних та екологічних показників кінцевих конструкцій. Враховуючи можливості та необхідність створення нових матеріалів, ця задача не розв'язана до кінця;
- Наявні системи, що використовуються для автоматизованого проектування композитів, переважно є максимально узагальненими. Традиційно системи автоматизованого проектування чи моделювання служать для дослідження певних функціонально закінчених пристроїв чи об'єктів та їх вузлів, і як наслідок, не орієнтовані на концепцію автоматизації проектування таких гетерогенних фізичних середовищ, як композиційні матеріали.
- Невелика кількість спеціалізованих систем проектування композитів

базуються на вузькому колі фізико-математичних аналітичних моделей усереднення, що ґрунтуються на аксіоматичних припущеннях, які обмежують межі адекватності цих моделей. У результаті неможливо враховувати широкий спектр явищ, що моделюються. Наприклад, явище перколяції, яке можливо повністю дослідити тільки шляхом використання методів чисельного моделювання при достатньому рівні деталізації структур композиційних матеріалів.

- Поєднання деталізованих моделей структури композиційних матеріалів та методів чисельного моделювання фізичних процесів в цих структурах гальмується необхідністю проведення великої кількості обчислень. Така ситуація затрудняє проведення ітераційних процесів проектування, що збільшують складності алгоритмів та кількість операцій на порядок.

Саме тому, поєднання методів чисельного моделювання, які дають змогу найбільш адекватно описати максимально широке коло фізичних явищ у межах гетерогенних середовищ; деталізованих моделей структури композиційних матеріалів, що принципово допускають неоднорідності вихідних структурних елементів композиції, у наслідок чого, дають змогу найбільш адекватно описати реальні фізичні та просторові структури; методів декомпозиції модельних обчислень та їх реалізації в програмному забезпеченні, у рамках проектування композиційних матеріалів є актуальною задачею.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Тема дисертаційної роботи відповідає науковому напрямку кафедри "Системи автоматизованого проектування" НУ "Львівська політехніка" та пов'язана з планами наукових досліджень у рамках міжнародних наукових проектів:

1. "EduMEMS – Developing Multidomain MEMS Models for Educational Purposes", співвиконавцями якого є науковий колектив кафедри "Системи автоматизованого проектування", термін виконання проекту з 01.07.2011 р. по 30.06.2015 р. (FP7-PEOPLE-2010-IRSES № 269295). Науковий керівник: д.т.н., проф. Лобур М.В. Автором вдосконалено моделі аналізу теплофізичних процесів в гетерогенних композиційних матеріалах, які

використовуються на компонентному рівні проектування мікроелектромеханічних систем.

2. ТЕМПУС "MastMST – Curricula Development for New Specialization: Master of Engineering in Microsystems Design", співвиконавцями якого є науковий колектив кафедри "Системи автоматизованого проектування", термін виконання проекту з 15.10.2012 р. по 14.10.2015 р. (530785-TEMPUS-1-2012-1-PL-TEMPUS-JPCR). Науковий керівник: д.т.н., проф. Лобур М.В. Участь автора полягала в дослідженні методів та засобів декомпозиції обчислень при моделюванні теплофізичних процесів у гетерогенних структурах мікроелектромеханічних систем.

Мета і задачі дослідження. Метою роботи є вдосконалення та реалізація з допомогою технологій розподілених і паралельних обчислень мікрорівневих моделей та чисельних методів знаходження ефективних теплофізичних характеристик композиційних матеріалів складної структури у процесі їх автоматизованого проектування. Для досягнення мети необхідно вирішити задачі:

- провести аналіз стану розв'язування задачі знаходження ефективних характеристик композиційних матеріалів у процесі їх проектування на основі чисельного моделювання теплофізичних процесів;
- удосконалити та реалізувати з допомогою технологій паралельних і розподілених обчислень методи синтезу мікрорівневих моделей складних композиційних структур;
- удосконалити та реалізувати чисельні моделі аналізу теплофізичних процесів в мікрорівневих моделях композитів складної структури;
- розробити та реалізувати методи знаходження ефективних характеристик на основі чисельного моделювання теплофізичних процесів в мікрорівневих моделях композиційних матеріалів;
- підтвердити адекватність, збіжність та точність розроблених і реалізованих моделей та методів на основі проведення апостеріорних оцінок і серій чисельних експериментів та порівняти їх результати з відомими.

Об'єкт дослідження – процеси структурного та параметричного синтезу композиційних матеріалів при їх автоматизованому проектуванні.

Предмет дослідження – чисельні моделі та методи аналізу фізичних процесів в складних гетерогенних структурах та знаходження відповідних ефективних теплофізичних характеристик композиційних матеріалів у процесі їх автоматизованого проектування.

Методи дослідження. У процесі розв'язування поставлених задач використано: стохастичні методи синтезу мікрорівневих моделей структури композиційних матеріалів на основі регулярних коміркових моделей; метод скінченних елементів у формулюванні зважених нев'язок для чисельного моделювання теплофізичних процесів; метод теплоелектричних аналогій для формулювання виразів знаходження ефективних теплофізичних характеристик; методи доменної декомпозиції для розпаралелювання модельних обчислень у програмній реалізації.

Наукова новизна одержаних результатів:

1. Дістали подальшого розвитку методи моделювання складних композиційних структур, що базуються на коміркових моделях, які відрізняються від відомих можливістю одночасного використання комбінацій різних методів побудови структури та її використання для дискретизації, що дало змогу зменшити кількість необхідних обчислень та здійснити їх декомпозицію.
2. Розроблено метод моделювання випадкових перехідних шарів між фазами композиції, який базується на використанні випадкових скалярних полів та алгоритму маскування до моделювання гетерогенних композицій, як комбінації детермінованих елементів із стохастичними перехідними шарами між ними, що дозволило враховувати особливості неоднорідностей середовища.
3. Дістали подальшого розвитку моделі аналізу зв'язаних теплофізичних процесів у структурах композиційних матеріалів, що базуються на методі скінченних елементів, які відрізняються від відомих об'єднанням

формалізованого опису теплофізичних задач, що враховує комплексні крайові умови, і дає змогу досліджувати теплофізичні процеси в складних композиційних структурах та спростити обчислювальні процедури при використанні алгоритмічних мов високого рівня абстрактності.

4. Вдосконалено методи знаходження ефективних теплофізичних характеристик гетерогенних середовищ, в яких завдяки використанню теплоелектричних аналогій до скінченно-елементної моделі, забезпечено можливість знаходження ефективних характеристик складних композиційних структур без необхідності проведення натурних експериментів.

Практичне значення одержаних результатів:

1. Моделі та методи знаходження ефективних характеристик композиційних матеріалів реалізовано з допомогою технології паралельних та розподілених обчислень OpenCL, застосування якої дає змогу більш, ніж десятикратно пришвидшити модельні обчислення.
2. Збіжність та точність результатів модельних обчислень підтверджено порівнянням оцінок, отриманих за результатами проведених чисельних експериментів, з результатами аналогічної системи та натурними експериментами. Відносна похибка модельних обчислень не перевищує одного відсотка.
3. Вперше розроблено алгоритми та програмні коди реалізації декомпозиції модельних обчислень на прикладі використання технології OpenCL.
4. Результати дисертаційної роботи використовуються у лекційних курсах та лабораторних роботах з дисципліни "Технології розподілених систем та паралельних обчислень", спеціальності "Системне проектування", а також у навчальному курсі "Комп'ютерні методи в інженерії мікросистем" для студентів базового напрямку "Комп'ютерні науки".

Особистий внесок здобувача. Всі наукові результати теоретичних та практичних досліджень, викладені в дисертаційній роботі, одержані автором особисто. У друкованих працях опублікованих у співавторстві, здобувачу

належать: мікрорівневі моделі структури композиційних матеріалів [1, 5, 9]; розроблення методу знаходження ефективних теплофізичних характеристик з допомогою використання теплоелектричної аналогії [2]; вдосконалення моделей аналізу теплофізичних процесів в складних композиційних структурах з допомогою комбінації методу теплоелектричних аналогій та методу скінченних елементів [3]; алгоритми дискретизації моделей структури композиційних матеріалів в задачах аналізу теплофізичних процесів [6, 12]; модель дослідження термопружних характеристик композиційних матеріалів з сферичними вкрапленнями [7]; оцінки збіжності результатів моделювання теплофізичних процесів в композиційних матеріалах складної структури [8]; постановки задачі оптимального проектування композиційних матеріалів [10]; модель реалізації розподілених обчислень в гетерогенних обчислювальних середовищах при розв'язуванні задач оптимального проектування композиційних матеріалів [11].

Апробація результатів дисертації. Основні наукові, теоретичні положення та практичні результати дисертаційної роботи доповідалися і обговорювалися на:

1. XXII Ukrainian-Polish Conference "CAD in Machinery Design. Implementation and Educational Issues (CADMD'2014)", Lviv, Ukraine, 2014;
2. X International Conference "Perspective Technologies and Methods in MEMS Design (MEMSTECH'2014)", Lviv, Ukraine, 2014;
3. "Electrochemical Conference on Energy & the Environment (ECEE'2014)", Shanghai, China, 2014;
4. VIII International Scientific and Technical Conference "Computer Sciences and Information Technologies (CSIT'2013)", Lviv, Ukraine, 2013;
5. XII International Conference "The Experience of Designing and Application of CAD Systems in Microelectronics (CADSM'2013)", Polyana, Ukraine, 2013;
6. XI International Conference "Modern Problems of Radio Engineering, Telecommunications and Computer Science (TCSET'2012)", Lviv-Slavske, Ukraine, 2012;
7. наукових семінарах кафедри "Системи автоматизованого проектування" Національного університету "Львівська політехніка" (2013-2015 pp.).

Публікації. За результатами досліджень, які викладені в дисертації, опубліковано дванадцять наукових праць, з поміж яких шість статей опубліковано в фахових наукових виданнях [1-6], у тому числі три статті у зарубіжних періодичних виданнях, що входять до міжнародних наукометричних баз [4-6], шість публікацій в збірниках матеріалів та тез доповідей міжнародних конференцій [7-12].

Структура та обсяг роботи. Дисертаційна робота складається з вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел (166 найменувань) та додатку. Загальний обсяг роботи складає 162 сторінки, з них: 131 сторінка основного тексту; 29 рисунків; 4 таблиці.

РОЗДІЛ 1

ПРОЕКТУВАННЯ КОМПОЗИЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ ЧИСЕЛЬНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ФІЗИЧНИХ ПРОЦЕСІВ

1.1 Знаходження ефективних характеристик композитів у їх проектуванні

Композиційні (в деяких джерелах композитні [13, 14]) матеріали або композити (КМ) – матеріали, що складаються з двох чи більше компонент, та мають специфічні характеристики, які відрізняються від сумарних характеристик цих складових. На відміну від сумішей та сплавів, компоненти КМ не повинні розчинятися чи будь-яким іншим способом поглинати одна одну [15]. Компонента, що є неперервною по всьому об'єму, називається матрицею, а компоненти, що перериваються, розділені в об'ємі композиції, називаються арматурою або компонентами армування [16]. При моделюванні, КМ інтерпретують як гетерогенну фізичну систему [17-22], що складається з різних за фізичними характеристиками або хімічному складу частин (фаз) [23]. Звідки, компоненти армування КМ також називають дисперсною фазою, що є розподіленою в матриці КМ, яку відповідно називають дисперсійним середовищем.

При проектуванні нових інженерних об'єктів, як конструкційні, переважно використовують саме композиційні матеріали [20], завдяки можливості цілеспрямованої зміни їх фізичних характеристик при створенні, шляхом керування структурними параметрами композиції [14]. До останніх зазвичай відносять форму та розмір частинок дисперсної фази, відстань між ними, орієнтацію та розподіл дисперсної фази за обсягом дисперсійного середовища. Можливість зміни фізичних характеристик матеріалу реалізується постановкою та розв'язуванням оптимізаційних задач, де критеріями оптимальності є необхідні характеристики, а параметрами оптимізації є структурні параметри композиційної моделі. Описані задачі називають оптимальним проектуванням композиційних матеріалів [24-26].

При постановці та розв'язуванні задач проектування використовуються два основних підходи – континуальний і дискретний. При оптимізації структурних

параметрів КМ, застосовується, як правило, дискретний підхід [13]. Він передбачає визначення скінченної кількості окремих проектних параметрів, якими можна керувати з метою досягнення найкращих з можливих, в конкретних випадках, проектних характеристик КМ [24].

У загальному випадку, алгоритм проектування композиційного матеріалу складається з таких етапів:

1. Етап попереднього проектування [13]:

- вибрати параметри моделі КМ, що будуть змінюватися (наприклад, визначити склад майбутньої композиції матеріалу, технологічно допустимі варіанти формування структури);
- встановити діапазони зміни (наприклад, визначити максимально чи мінімально допустимі концентрації складових компонент, діапазони допустимих характеристик композиції);
- вибрати критерії оптимальності (тобто, вибрати набір характеристик композиції, що повинні бути оптимальними – мінімальними або максимальними, в залежності від конкретної задачі, при попередньо визначених обмеженнях);
- результат етапу – груба постановка задачі оптимізації характеристик композиційного матеріалу, без детальної формалізації цільових функцій.

2. Етап розв'язування оптимізаційної задачі:

- побудувати модель синтезу ефективних характеристик композиційного матеріалу у вигляді залежності від структурних параметрів композиції, тобто детально формалізувати цільові функції;
- розв'язати задачу одним з методів багатокритеріальної оптимізації;
- результат етапу – проектне рішення з оптимальними, для конкретної задачі, ефективними характеристиками.

У зв'язку з безпосереднім фізичним зв'язком між характеристиками КМ, при виборі цільових функцій, вимога до будь-якої з цих характеристик, фактично протиставляється вимогам до решти. Навіть у випадках, коли всі характеристики об'єднані єдиним інтегральним критерієм оптимальності, неможливо уникнути

суб'єктивної оцінки, що веде до виключення з розгляду деякого класу можливих рішень. Тому основною практичною метою оптимального проектування композиційних матеріалів є побудова області компромісів – множини Парето. Подальший вибір конкретного проекту в цій області проводиться людиною [13].

Визначення залежності характеристик КМ від їх структурних параметрів здійснюється шляхом багатоетапного процесу послідовної ідеалізації структурних елементів, від реальної фізичної та просторової структури КМ, до єдиного абстрактного конструкційного елементу, що описує матеріал необхідним скінченним набором характеристик [20]. Ця процедура еквівалентної заміни моделей з неоднорідними елементами, тобто гетерогенних систем, на моделі однорідних середовищ – гомогенних систем, називається гомогенізацією [27].

Гомогенізація базується на теорії ефективного модуля, що виражається принципом ефективної однорідності (еквівалентної гомогенності [21]), при якому вихідна модель неоднорідного композиту замінюється на аналогічну модель однорідного КМ з ефективними, тобто певним чином усередненими характеристиками [13, 14, 20, 21, 27, 28].

Гіпотезу про можливість гомогенізації з відповідним принципом ефективної однорідності, в рамках побудови моделей КМ, приймають як основну гіпотезу, і тому завжди логічною є постановка питання про її доведення, і особливо, практичну реалізацію [27]. Це зокрема підтверджується дослідженнями, де робиться висновок [13], що методи розв'язування задач оптимального проектування, тобто методи багатокритеріальної оптимізації, є достатньо розвинуті для забезпечення коректних розв'язків майже будь-яких практичних задач. Тому, саме постановка та детальна формалізація цих задач залишається ключовим завданням проектування композиційних матеріалів. Деякі дослідники [29] розглядають завдання вивчення взаємозв'язку "склад – структура – характеристики" як основне завдання проектування композиційних матеріалів.

Отже, ключовим етапом процесу розв'язування задач проектування композиційних матеріалів є етап побудови моделей знаходження ефективних характеристик КМ у вигляді залежності від структурних параметрів композиції.

1.2 Вплив структури матеріалів на їх фізичні характеристики

Етап побудови моделей гомогенізації композиційних матеріалів є складним в загальному випадку, оскільки визначення КМ охоплює велике коло різних природних та синтетичних фізичних структур [30]. Класифікація КМ дає можливість виділити їх характерні особливості та побудувати фізико-математичні моделі, необхідні для постановки та розв'язування задачі проектування [31].

Класифікація композитів є неоднозначною, достатньо умовною та зазвичай проводиться за видом компонентів армування, до яких відносять різні волокна, порошки, сфери, кристали та зв'язки з органічних матеріалів, неорганічних металевих матеріалів або кераміки. Розрізняють (Рис. 1.1) [15, 32, 33]:

- багат шарові КМ або ламінати – сюди також можуть відноситися композиції, складові компоненти яких самі є композиційними матеріалами;
- волокнисті КМ – компонентами армування служать волокнисті структури, що можуть бути орієнтовані в різних напрямках;
- наповнені КМ – компонентами армування є різнорідні частинки; їх також поділяють на:
 - насипні або гомогенні;
 - скелетні або коміркові – початкові структури, заповнені зв'язними;
- КМ з компонентами, що взаємно проникають – особливістю таких

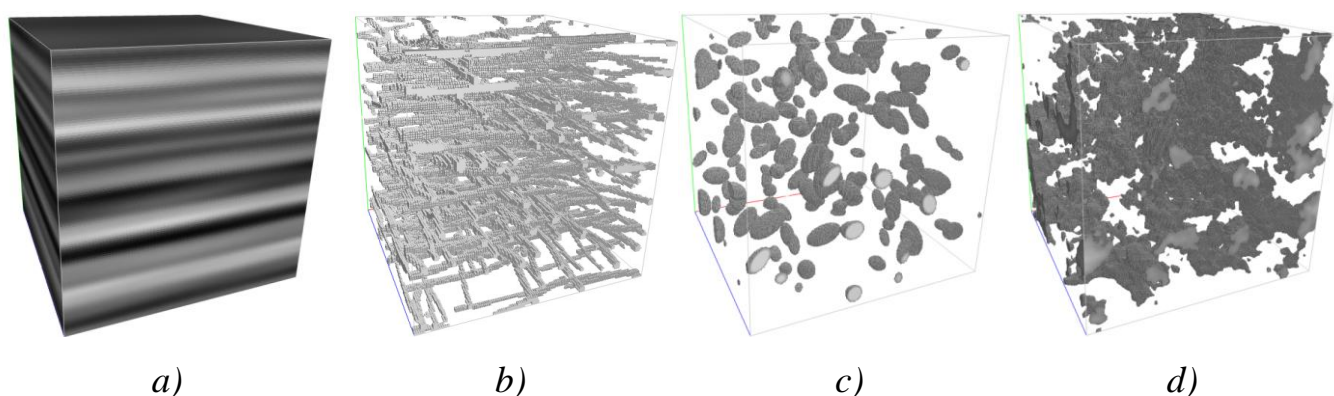


Рис. 1.1 Класифікація композиційних матеріалів за видом компонентів армування: а) Багат шарові КМ; б) Волокнисті КМ; в) Наповнені КМ; г) КМ з компонентами, що взаємно проникають

матеріалів є нерозривність всіх компонент, тобто неможливість розрізнення матриці від армування.

За характером розподілу компонент армування КМ можна розділити на періодичні системи, стохастичні суміші та структуровані композиції [17, 18]. В періодичних (регулярних) системах частинки наповнювача розташовуються у вузлах регулярної решітки (Рис. 1.2.a). У стохастичних системах компоненти розподілені хаотично і не утворюють регулярних структур (Рис. 1.2.b). До структурованих композитів відносять системи, в яких компоненти утворюють ланцюгові, плоскі або об'ємні, каркаси (Рис. 1.2.c, d). Також можливі комбінації описаних моделей.

У залежності від геометрії компонентів армування та їх взаємного розміщення, КМ бувають ізотропними (квазіізотропними), у яких характеристики є однаковими у всіх напрямках, та анізотропними, у яких характеристики відрізняються в залежності від орієнтації [16]. До квазіізотропних відносяться стохастично армовані КМ, елементами армування яких є короткі частинки видовженої форми, наприклад обрізки волокон або так звані "вуса", орієнтовані випадковим чином. При цьому КМ є анізотропними в мікрооб'ємах але ізотропними в об'ємі всієї конструкції, тобто квазіізотропними.

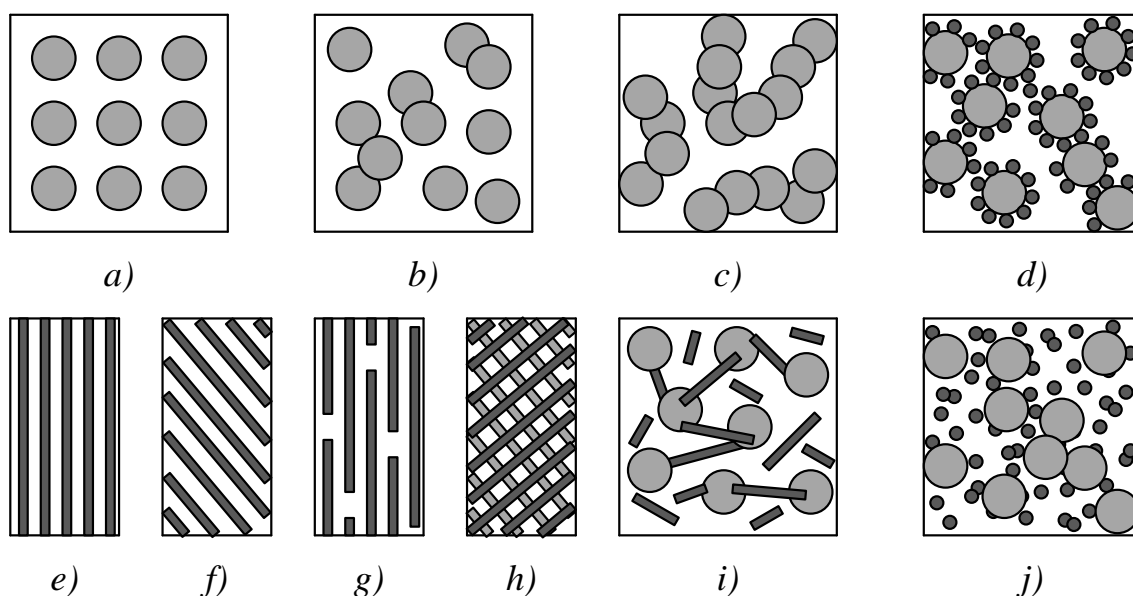


Рис. 1.2 Схематичне зображення різновидів розподілу компонент армування в матриці композиційного матеріалу

Дослідження структури композитів є відправною точкою їх аналізу. Так КМ на основі неперервних волокон чи тканин, що орієнтовані в одному напрямку, (Рис. 1.2.a, e-h) легко піддаються аналізу відносно простим аналітичним описом, на відміну від композитів з іншою структурою (Рис. 1.2.b-d, i, j). Типову залежність фізичних характеристик від структури КМ наведено в Таблиця 1.1 [17].

Отже, оскільки структура визначає фізичні характеристики композиційних матеріалів, її моделювання є відправною точкою аналізу та проектування КМ.

1.3 Моделі та методи знаходження ефективних характеристик

Побудова теоретичних математичних моделей КМ є трудомісткою задачею, якщо взяти до уваги складність прогнозування фізичних характеристик при оптимізації структурних параметрів КМ, які враховують: багатофазність композиції; зміну фізичних характеристик вихідних компонент у процесі створення КМ, зокрема залежність від технології виготовлення; стохастичний характер структурних параметрів КМ; стохастичний характер фізичних

Таблиця 1.1

Типова залежність фізичних характеристик КМ від їх структури

Структура	Характеристика направленості	Характеристика розмірності
Регулярні структури		
Паралельні шари	Сильна анізотропія	Двовимірна
Паралельні волокна	Сильна анізотропія	Одновимірна
Регулярні еліпсоїдні вкраплення	Слабка анізотропія	Тривимірна
Каркаси що взаємно проникають	Слабка анізотропія	Тривимірна
Нерегулярні структури		
Хаотично орієнтовані волокна	Ізотропія	Тривимірна
Переважно орієнтовані волокна	Анізотропія	Тривимірна
Випадкові еліпсоїдні вкраплення	Ізотропія	Тривимірна
Стохастична суміш ізомерних поліедрів	Ізотропія	Тривимірна

характеристик вихідних компонентів КМ. З іншої сторони, альтернативний експериментальний підхід, що на перший погляд здається більш простим та надійним, часто навіть в тривіальних випадках, з використанням однорідних ізотропних матеріалів, потребує застосування складних експериментальних методик чи значних організаційних затрат. Сюди також відносять труднощі з ототожненням отриманих експериментальних результатів на невеликому зразку КМ з усією конструкцією зумовлені технологічними та масштабними ефектами. Проведення серій натурних експериментів над зразками статистично достовірних розмірів потребує значних економічних затрат, тому завдання розроблення теоретичних математичних моделей КМ з максимально широкими межами адекватності залишається актуальною задачею [20].

Існують два основні підходи до побудови теоретичних моделей КМ. Перший підхід базується на розгляді матеріалу як системи взаємодіючих елементарних фізичних структурних компонент з зосередженими параметрами. Основою цього підходу є корпускулярний підхід Нав'є, що розвинувся в строгі кристалографічні теорії. Другий підхід базується на розгляді реального матеріалу, як деякого абстрактного неперервного середовища з розподіленими параметрами. Його також називають феноменологічним. Тут за основу взято континуальний підхід Коші [27, 32]. Комбінація обох підходів в моделі дає змогу виділити порядок (рівень ідеалізації) структурного елемента відносно всієї системи КМ. За цим порядком, будь-яка модель КМ може бути віднесена до таких класів як: емпіричні, структурні, мікрорівневі [20].

В емпіричних моделях характеристики матеріалу описуються на основі опрацювання емпіричних даних взятих з експериментальних досліджень, а проектування КМ з оптимальними характеристиками здійснюється перебором результатів експериментів чи відповідною інтерполяцією на їх основі. Ефективність таких моделей повністю залежить від кількості емпіричних даних.

До класу структурних моделей відносять як аналітичні, так і чисельні математичні моделі, де фізичні характеристики КМ визначаються в результаті знаходження відповідних характеристик макрооднорідних вихідних структурних

елементів, що задаються скінченним набором типів, які відрізняються один від одного хоча б за одним з кількісних чи якісних показників. Елементи одного типу в рамках моделі вважаються однаковими. Наприклад, для багатошарових КМ, такими структурними елементами можуть бути елементарні шари, елементарні пакети, макрооднорідні пакети, тощо. Всі вони можуть об'єднуватися в елементи вищого порядку. Вибір рівня ідеалізації здійснюється на основі можливостей обчислень і/або на основі наявності емпіричних даних про конкретні структурні елементи. Основний недолік – використання моделей усереднення, що базуються на ряді аксіоматичних припущень, які сильно обмежують рамки адекватності моделей, і тому їх не завжди вдається дотримуватися на практиці. Наприклад, в ряді структурних моделей [32] необхідно є дотримуватися принципів:

- "від хаосу – до порядку", – полягає в тому, що при збереженні адекватності властивостей всіх компонент та системи загалом, хаотичну структуру КМ приводять до регулярної структури.
- "від системи – до елементарної комірки", – полягає в тому, що вже приведена до регулярної структури система характеризується дальнім порядком, аналогічно аморфним твердим матеріалам [34], і тому ефективні характеристики всієї системи та її елементарної комірки є однаковими.

Елементарна комірка описує локальний взаємозв'язок матриці КМ та однієї з його компонент, наприклад сферичного чи кубічного вкраплення. Якщо композит є багатокомпонентним, то використовують рекурсію, при якій модель зводять до двокомпонентної (матриця і єдиний наповнювач). Подібний принцип також використовують в математичних методах побудови ефективних полів, коли розглядаються суперпозиції внеску кожного складового елемента КМ. Одним з основних припущень при використанні структурних моделей КМ є припущення щодо наявності між ідеалізованими структурними елементами нескінченно тонкого шару – адіабатного прошарку, що не проводить відповідний для характеристики фізичний потік, наприклад потік тепла. Це припущення доповнюють спрощенням, при якому фізичний потік в межах елемента

апроксимується завжди лінійно, незважаючи на вміст останнього (ізопотенціальні поверхні описуються рівняннями першого порядку). Таким чином система ідеалізованих елементів представляє КМ як сукупність примітивних ділянок з послідовним чи паралельним з'єднанням провідностей фізичних потоків.

Структурні моделі є історично першими теоретичними моделями композиційних матеріалів. Їх активний розвиток починається з роботи Максвелла 1892 року [35]. Тривалі дослідження об'єднують в цьому класі такі відомі моделі, як полідисперсна модель Хашина [36], моделі елементарних комірок [32, 37], моделі математичної гомогенізації та ефективного поля [38], моделі паралельного та послідовного з'єднання провідностей, та багато ін.. Аналіз і порівняльні характеристики цих моделей наведено в багатьох літературних джерелах, зокрема в [39].

У зв'язку з появою та бурхливим розвитком обчислювальної техніки в другій половині ХХ століття почали активно розвиватися мікрорівневі моделі композиційних матеріалів [40-52]. Цей клас охоплює моделі, що принципово допускають неоднорідності вихідних елементів, внаслідок чого, дають змогу найбільш адекватно описувати реальні фізичні та просторові структури композиту. Такими структурними елементами можуть бути окремі дисперсні частинки чи волокна, що розподілені в елементарному шарі-матриці. Недоліком використання подібних моделей є необхідність врахування стохастичних законів розподілу розміщення елементів, можливої анізотропії їх властивостей, границь розподілу між фазами, можливості зміни властивостей компонент у залежності від технології виготовлення КМ, тощо. Моделі цього класу в основному використовують чисельні методи розв'язування задач аналізу, такі як метод скінченних елементів [53-55]. Завдяки цьому, вони дають змогу охоплювати майже увесь спектр явищ, відомих сучасній науці, починаючи від повсякденного аналізу стійкості будівельних матеріалів, та завершуючи аналізом матеріалів утворених з наноструктур при високо-інтенсивних нелінійних фізичних процесах. Крім того, мікрорівневі моделі дають змогу вивчати ряд фізичних явищ, що складно піддаються опису іншими способами, зокрема явищ утворення

перколяційних порогів фізичних характеристик матеріалів при зміні їх структурних параметрів [17, 18, 56, 57]. Перколяційними є явища, при яких характеристики композиції змінюються нелінійно, стрибкоподібно, при відповідній лінійній зміні структурних параметрів композиції. Іншою перевагою над рештою моделей є можливість дослідження, так званих, перехідних шарів між фазами композиту. Вона активно використовується в таких відомих моделях як модель ефективного інтерфейсу [58, 59] та модель функціонально-градуєваних матеріалів (Functionally Graded Materials – FGM) [60, 61].

Внутрішня структура КМ, особливо природного походження, характеризується складною ієрархічною будовою. Наприклад, структура полідисперсних композиційних середовищ є складним стохастичним ансамблем макро- та мікроелементів, що відрізняються за своїми фізичними характеристиками, формою, розподілом за об'ємом та взаємодією між собою [62]. Для дослідження таких структур, в рамках мікрорівневих моделей композиційних матеріалів, використовують методи мультимасштабного моделювання [63, 64] та системи ітерованих функцій [65], що зокрема дають змогу моделювати фрактальні структури [66-68].

Завдання розроблення ефективних, в обчислювальному аспекті, мікрорівневих моделей КМ є далеким від свого вирішення, про що свідчить збільшення з кожним роком кількості публікованих наукових робіт. Основним чинником, що гальмує розвиток цих моделей є велика кількість машинних обчислень, які необхідні для досягнення максимальної адекватності. Така ситуація є небажаною в процесах проектування, що передбачають ітераційні обчислення, і відповідно, збільшення складності роботи алгоритмів на порядок. Для вирішення завдання, доцільним є використання технологій високопродуктивних паралельних та розподілених обчислень в гетерогенних обчислювальних середовищах, наприклад на графічних картах персональних комп'ютерів, що дає можливість уникнути значних затрат на використання спеціалізованих суперкомп'ютерів чи кластерних систем при практичному проектуванні композиційних матеріалів. Слід також зазначити, що розвиток

моделей в такому напрямку зумовлений вже відомими реалізаціями чисельних методів аналізу, зокрема методу скінченних елементів, на паралельних та розподілених архітектурах обчислювальних пристроїв, коли завдання моделювання мікроструктури КМ досі потребує досліджень.

Отже, найбільш перспективними, в плані досліджень, автоматизації, та подальшого практичного використання, є клас макрорівневих моделей структури композиційних матеріалів та його застосування для знаходження їх ефективних характеристик. Зокрема, актуальними є завдання розроблення моделей на основі використання таких чисельних методів аналізу як метод скінченних елементів та їх реалізація з допомогою технологій паралельних та розподілених обчислень. Це дасть можливість максимально адекватно розглядати широке коло фізичних явищ, наприклад, явища утворення перколяційних порогів характеристик матеріалів при зміні їх структурних параметрів та ефективно використовувати реалізовані моделі в ітераційних процесах проектування, уникаючи при цьому складних та ресурсно-витратних натурних експериментів.

1.4 Застосування чисельних методів моделювання фізичних процесів

Розрахунок ефективних характеристик КМ зазвичай проводиться з допомогою формул, побудованих на основі фізико-математичних теоретичних моделей або шляхом апроксимації емпіричних експериментальних даних. Уникнення використання експериментальних досліджень пов'язують з труднощами процесу виготовлення дослідних зразків композитів, тому такі дослідження проводять для уточнення теоретичних моделей, або коли розробка чи обчислення останніх є надто складними [32].

Як в структурних, так і в мікрорівневих моделях КМ розрахунок ефективних характеристик здійснюється шляхом розв'язування відповідних обернених задач математичної фізики [69-73], тобто специфічних задач, де шуканими змінними є коефіцієнти відповідних модельних рівнянь та області, де ці рівняння визначені. Такі задачі зручно формулювати у вигляді повних аналогів стандартизованих [74-78] експериментальних методів визначення ефективних

характеристик матеріалів, тобто у вигляді чисельних експериментів.

У найпростішому випадку методи знаходження ефективних коефіцієнтів полягають в моделюванні стаціонарного режиму, при якому фізичний потік, наприклад потік тепла, що проходить крізь плоский модельний зразок дослідного матеріалу деякої товщини і спрямований ортогонально до найбільших сторін зразка, та потенціали на цих сторонах, є незмінними з часом. При цьому визначається утворена різниця потенціалів, що є пропорційною до ефективного коефіцієнту рівняння балансу фізичного процесу всієї моделі – ефективної характеристики. Можлива нелінійність характеристик зазвичай досліджується серіями чисельних експериментів.

Використання мікрорівневих моделей КМ, на відміну від структурних, передбачає проведення аналізу фізичних процесів в, так званому, елементарному об'ємі (Representative Volume Element – RVE) композиційного матеріалу [20, 33, 79, 80, 81]. Елементарний об'єм КМ – зазвичай об'єм гетерогенного матеріалу, достатньо великий, щоб статистично його описувати, тобто описувати ефективну вибірку всіх мікроструктурних неоднорідностей, наявність яких можлива в композиті. Інше визначення, що не розглядає можливі статистичні флуктуації – найменший об'єм композиційного матеріалу, для якого макроскопічне представлення просторових характеристик є достатньо точною моделлю опису ефективного відгуку на відповідний зовнішній чинник [79, 82]. При цьому припускається, що сусідні частини матеріалу є такими ж елементарними об'ємами, і тому для аналізу та подальшого синтезу ефективних характеристик можна використовувати моделі необмежених чи напівобмежених тіл [83-87]. Визначення розмірів елементарного об'єму переважно здійснюється шляхом проведення ряду чисельних експериментів [79].

Формулювання модельних рівнянь балансу гетерогенної системи базується на використанні феноменологічного підходу та математичної теорії поля [88-94] і приводить до систем диференціальних рівнянь з частинними похідними (ДРЧП), що відповідно до феноменологічних законів, описують умови рівноваги. Фізичні (термодинамічні, механічні, електромагнітні, тощо) системи описуються в

термінах макроскопічних змінних стану (об'єм, тиск, температура, кількість молів хімічних компонент, тощо). Ці змінні поділяють на екстенсивні та інтенсивні [90]. Екстенсивні змінні означають певне різноманіття в самому собі, тобто це такі змінні, значення яких можна безпосередньо виміряти – в фізичних системах вони є пропорційними до розмірів системи. Інтенсивні змінні містять свою визначеність в чомусь іншому, їх значення можливо виміряти тільки завдяки функціональному зв'язку з екстенсивними змінними – в фізичних системах вони описують локальні властивості, що не залежать від розмірів системи. Інтенсивні змінні виражаються скалярними, векторними або тензорними польовими величинами – потенціалами. Можливість такого підходу дається на основі припущення про локальну рівновагу змінних стану системи в межах деякого мінімального об'єму, при чому значення цього об'єму є скінченною і достатньою для охоплення великої кількості частинок (число частинок, як правило, можна порівняти з числом Авогадро $\approx 10^{23}$).

Приймаючи за основу аксіоми математичної теорії поля [88, 89]: неперервність деформацій; перманентність матерії; неперервність в часі та рівноважність потенціалів, будь-який фізичний процес, що відбувається в системі, описується в термінах енергодинамічних [94] сил (градієнтів потенціалів, наприклад градієнт температури) та потоків (наприклад, потік тепла). У рамках лінійної теорії, взаємозв'язок між потоками та силами перебуває в умовах локальної рівноваги і тому описується лінійною залежністю, що включає, так звані, кінетичні коефіцієнти пропорційності, або коефіцієнти Онзагера. Ці коефіцієнти описують принцип найменшого розсіювання (дисипації) фізичної енергії та дають можливість одночасно формально описувати різні фізичні процеси єдиною системою диференціальних рівнянь, тобто розглядати зв'язані мультифізичні задачі. Таким чином виконується основне завдання математичної теорії поля – інваріантне математичне формулювання механіки, електродинаміки, термодинаміки та інших фізичних теорій неперервних середовищ у просторі-часі.

Явище утворення сил, пропорційних градієнтам потенціалів системи, завжди описується одним з відомих феноменологічних законів або ефектів,

наприклад, законом теплопровідності Фур'є, законом дифузії Фіка, законом електропровідності Ома, законом деформації Гука, ефектом теплового розширення, тощо. Коефіцієнти, що наявні в формулах цих законів чи ефектів (коефіцієнт теплопровідності, температурний коефіцієнт лінійного розширення, модуль Юнга, коефіцієнт Пуассона, тощо) є однією з форм коефіцієнтів Онзагера, а їх ефективні значення, стосовно системи, що досліджується, є ефективними характеристиками композиційного матеріалу.

Зміна потенціалів в системі, при наявності зовнішніх потоків, тобто деяких граничних умов, описується інтегро-диференціальним рівнянням Умова [88, 90, 95], що є рівнянням балансу в системі. Подальше застосування відомої теореми про дивергенцію, дає змогу записати це рівняння в диференціальній формі і таким чином, повністю сформулювати задачу аналізу фізичних процесів в мікрорівневій моделі композиційного матеріалу.

Оскільки мікрорівнева структура КМ має далеко не тривіальну форму, а диференціальні рівняння балансу, що розглядаються в цій структурі, можуть бути досить складними, особливо при розгляді мультифізичних процесів, використання аналітичних методів розв'язку є неможливим. Саме тому використовуються чисельні методи моделювання, такі як метод скінченних елементів.

Наближені методи розв'язку диференціальних рівнянь з частинними похідними можна умовно розділити на варіаційні, проєкційні, сіткові, проєкційно-сіткові та випадкові (методи Монте-Карло). Тривалий розвиток цих методів привів до найбільшого поширення проєкційно-сіткових методів [96], що передбачають побудову в області, в якій вирішується задача, розрахункової сітки, тобто розбивання області на дрібні фрагменти (елементи) певного виду – трикутники, тетраедри, призми, тощо. При цьому, до розмірів і форм елементів також висуваються певні вимоги, так як вони суттєво впливають на похибки апроксимації та збіжність методів. Більше того, математичне формулювання описаних класів наближених методів, крім методів Монте-Карло, дають змогу розглядати їх як окремі часткові випадки більш загальних методів зважених нев'язок (МЗН) [97-108].

Метод скінченних елементів (МСЕ) є чисельним проекційно-сітковим методом, що увібрав в себе переваги різних методів зважених нев'язок, такі як використання універсального варіаційного або проекційного підходу для наближеного розв'язку складних задач в комбінації з дискретизованих сіткою областями тривіальної форми за допомогою інтерполяції локальними поліноміальними функціям малого порядку. Широке коло використання МСЕ зумовлене його перевагами над іншими чисельними методами:

- властивості суміжних елементів не обов'язково мають бути однаковими, це дає змогу використовувати метод для дослідження гетерогенних систем;
- криволінійна область може бути апроксимована за допомогою прямолінійних елементів або описана точно за допомогою криволінійних елементів, отже метод можна використовувати не лише для областей з тривіальною формою границь;
- розміри елементів можуть бути змінними, це дає змогу змінювати густину дискретизації області, якщо в цьому є необхідність;
- при використанні методу скінченних елементів не виникає проблем при розгляді змішаних крайових умов та мультифізичних задач.

До недоліків методу можна віднести дуже громіздкі розрахунки, Навіть у випадках простих задач, є необхідність використовувати швидкодійне обчислювальне середовище з досить великим об'ємом оперативної пам'яті. Саме тому, доцільним є використання технологій паралельних та розподілених обчислень.

Загальноприйнятий [98, 107] алгоритм побудови проекційно-сіткової схеми наближеного розв'язку задач аналізу фізичних процесів в деякому об'єкті моделювання складається з таких етапів:

- узагальнена постановка задачі, дослідження основних властивостей диференціальних операторів, формулювання висновків про існування, єдиність та гладкість розв'язку, визначення головних та природних крайових умов;

- вибір алгоритму проекційного методу, інтерполяційних функцій з врахуваннями можливості включення головних крайових умов;
- дискретизація об'єкту моделювання, тобто ідеалізація системи, при якій вона розглядається як сукупність окремих елементів;
- приведення балансу елементів, тобто виведення залежностей, що описують рівняння балансу змінних стану об'єкту моделювання в межах окремих елементів;
- ансамблювання, тобто об'єднання певним чином всіх елементів, з метою отримання можливості описувати поведінку системи одночасним розв'язуванням множини всіх рівнянь балансу;
- обчислення відгуку моделі, тобто одночасне обчислення множини всіх рівнянь балансу та отримання значень змінних стану системи, як реакцію на зовнішні чинники – головні та природні крайові умови;
- дослідження збіжності побудованої схеми та оцінювання її швидкості;
- дослідження питань реалізації проекційно-сіткової схеми, зокрема щодо обчислювальної стійкості.

Вирішення завдання побудови мікрорівневих моделей аналізу фізичних процесів та подальшого знаходження ефективних характеристик композиційних матеріалів на основі використання чисельних проекційно-сіткових методів обов'язково повинне розглядати всі наведені етапи.

Враховуючи описані в даному підрозділі твердження, можна уточнити попередньо наведений алгоритм проектування композиційних матеріалів, відповідно до використання в ньому мікрорівневих моделей. Зокрема, етап розв'язування оптимізаційної задачі, в підпункті побудови моделі синтезу ефективних характеристик КМ у вигляді залежності від структурних параметрів композиції, що детально формалізує цільові функції:

- побудувати елементарний об'єм (модель структури КМ);
- проаналізувати модель з допомогою чисельного розв'язку фізико-математичних задач, що описують відповідний необхідній ефективній характеристиці процес;

- на основі отриманих даних, знайти набір ефективних характеристик моделі, тобто детально формалізувати цільові функції вихідної оптимізаційної задачі.

Враховуючи широке коло фізичних процесів, що піддаються моделюванню з допомогою методу скінченних елементів, набуває актуальності завдання вдосконалення існуючих методів з метою побудови формально єдиної моделі, тобто мікрорівневої моделі композиційних матеріалів, що дає можливість одночасно досліджувати необхідні характеристики матеріалу з допомогою розв'язку зв'язаних мультифізичних задач. Така формалізація є зручною при використанні в системах автоматизованого проектування чи моделювання, що мають програмний інтерфейс високого рівня абстрактності, наприклад пакетів FEMLab/COMSOL, FreeFem++, ANSYS, Abaqus чи більш спеціалізованих Digimat [109, 110] або Autodesk-Helius [111, 112]. Крім того, подібна формалізація дає можливість, відносно просто розширити модель з метою включення в розгляд інших фізичних процесів та відповідних ефективних характеристик КМ.

Отже, аналіз фізичних процесів в мікрорівневих моделях структури гетерогенних середовищ з метою подальшого знаходження відповідних ефективних характеристик при автоматизованому проектуванні композиційних матеріалів повинен здійснюватися у чисельному експерименті, який дає наближений розв'язок модельних диференціальних рівнянь балансу в межах елементарного об'єму КМ методом скінченних елементів. При цьому, актуальною є задача побудови формально єдиної мікрорівневої моделі, що дає можливість одночасно досліджувати зв'язані мультифізичні задачі та знаходити відповідні ефективні характеристики КМ. Процес розв'язування цієї задачі, поряд з проведенням чисельного експерименту, обов'язково повинен досліджувати властивості диференціальних рівнянь та їх розв'язків, способи побудови скінченно-елементної схеми, оцінки збіжності, обчислювальної стійкості та практичної реалізації з допомогою технологій паралельних і розподілених обчислень в гетерогенних обчислювальних середовищах.

1.5 Висновки до розділу 1

У даному розділі, з метою ознайомлення з предметною областю, виявлення досягнень, недоліків та прогалин в її відомих наукових та практичних результатах, що зумовлюють необхідність та обґрунтовують актуальність нових досліджень, проведено аналіз задачі знаходження ефективних характеристик композиційних матеріалів при їх проектуванні на основі чисельного моделювання фізичних процесів. Для цього досліджено:

1. місце задачі знаходження ефективних характеристик композиційних матеріалів при їх проектуванні та виявлено, що завдяки фундаментальній можливості змін характеристик матеріалів керуванням структурними параметрами композиції при її створенні, вивчення взаємозв'язку "склад – структура – характеристики", тобто побудова моделей синтезу ефективних характеристик КМ у вигляді залежності від структурних параметрів, є основним етапом процесу постановки та розв'язування задач проектування композитів;
2. вплив структури композиційних матеріалів на їх фізичні характеристики та виявлено, що при постановці та розв'язуванні задач оптимального проектування КМ, після етапу попереднього проектування, що фіксує склад майбутньої композиції, її структура залишається основним фактором, який визначає фізичні характеристики матеріалу, тому її моделювання є відправною точкою для подальшого розв'язку задач аналізу та проектування композитів;
3. переваги та недоліки основних моделей структур та методів знаходження ефективних характеристик КМ та виявлено, що актуальним є завдання розроблення мікрорівневих моделей на основі використання чисельних методів розв'язування задач аналізу фізичних процесів, та їх реалізації з допомогою технологій паралельних та розподілених обчислень, що дасть можливість максимально адекватно описувати широке коло складних композиційних структур і фізичних явищ, наприклад явищ утворення перколяційних порогів характеристик матеріалів при зміні їх структурних

параметрів, та ефективно використовувати реалізовані моделі в ітераційних процесах проектування, уникаючи при цьому складних та ресурсно-затратних натурних експериментів;

4. особливості застосування чисельних методів моделювання фізичних процесів для знаходження ефективних характеристик мікрорівневих моделей КМ, де виявлено, що актуальним є питання побудови на основі методу скінченних елементів формально єдиної мікрорівневої моделі, що дає можливість одночасно досліджувати зв'язані мультифізичні задачі та знаходити відповідні ефективні характеристики КМ шляхом постановки та розв'язку задач аналізу фізичних процесів в межах деякого елементарного об'єму КМ серіями чисельних експериментів, це підвищить універсальність та розширить можливості практичного використання моделі в прикладних системах проектування.

Отримані в цьому розділі результати дають змогу чітко сформулювати основну мету, задачі, об'єкт та предмет дослідження дисертаційної роботи, які описані у вступній частині.

Основні результати даного розділу опубліковані в роботах [4, 5, 10].

РОЗДІЛ 2

МЕТОДОЛОГІЯ ЗНАХОДЖЕННЯ ТЕПЛОФІЗИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОЗИЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ

2.1 Методи моделювання мікроструктур композиційних матеріалів

Задача моделювання структури композитів є тією відправною точкою, що передує задачам аналізу фізичних процесів в цих матеріалах. Класично, мікрорівневі модельні диференціальні рівняння балансу гетерогенної системи, які описують проходження деяких фізичних процесів, розглядають структуру композитів, як комбінацію складових характеристик матеріалу, що описується коефіцієнтами рівнянь, та топології матеріалу, яка описується областями інтегрування, де визначені ці рівняння.

Пара:

$$(\Omega, \mathbf{D}) = \bigcup_p (\Omega_p, \mathbf{D}_p), \quad (2.1)$$

де \mathbf{D}_p – набір характеристик p -ї складової компоненти, а Ω_p – відповідна геометрична область, тобто її топологія, повністю описує мікрорівневу модельну структуру композиційного матеріалу.

Враховуючи складність мікроструктур КМ, задача їх моделювання зазвичай вирішується на основі використання методів Монте-Карло [33, 43, 48-52], в частині побудови топологічних особливостей чи присвоєння складових характеристик відповідно до деякого стохастичного розподілу. При цьому, елементарні об'єми композиції представляють структури [33]:

- з випадково розміщеними, детермінованими елементами армування, що є геометричними примітивами (еліпсоїдами, циліндрами, призмами, тетраедрами, тощо) – такі структури зазвичай описують волокнисті чи наповнені насипні КМ;
- у вигляді комірок випадкової форми, розміру та належності до фази матеріалу, наприклад на основі побудови діаграми Вороного або триангуляції Делоне над множиною випадково розміщених, точок – такі структури притаманні клітинній біології, деревині, полікристалічним

сполукам, пінам;

- у вигляді регулярних комірок, наприклад кубічних чи тетраедральних, належність до фази матеріалу яких задається деякою спеціальною випадковою функцією.

Останні моделі є найбільш перспективними щодо можливостей моделювання складних мікрорівневих структур. Річ в тому, що при достатньо великій кількості регулярних комірок з'являється можливість відносно легко моделювати структури у вигляді випадкових скалярних полів, що описують КМ з компонентами, які взаємно проникають один в одного. Такі моделі здобули найбільшого використання при дослідженні мікроемульсій, ґрунтових порід, аморфних сплавів та аерогелів [33].

Задача моделювання випадкових скалярних полів описана у широкому колі робіт, зокрема в [33 та 63]. Вона складається з таких основних етапів:

1. побудова базового випадкового розподілу в елементарному об'ємі гетерогенного середовища, що представляє собою тривимірну матрицю, кожен елемент якої є випадковою скалярною інтенсивністю $i(x, y, z)$ умовно в діапазоні від 0 до 1;
2. огрублення (coarsening) базового випадкового розподілу $i(x, y, z)$ деяким, переважно лінійним, фільтром K , шляхом обчислення інтенсивності, як середнього значення сусідніх інтенсивностей, зважених деяким коефіцієнтом:

$$I(x, y, z) = \iiint_{\Omega} i(x, y, z) K(\Omega) d\Omega; \quad (2.2)$$

3. застосування перерізу отриманого огрубленого поля $I(x, y, z)$ на деякому рівні I_0 вибраного діапазону, або застосування одночасно кількох перерізів:

$$I_c(x, y, z) = H(I(x, y, z) - I_0(x, y, z)), \quad H(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ 1, & x \geq 0, \end{cases} \quad (2.3)$$

тут H – функція Хевісайда.

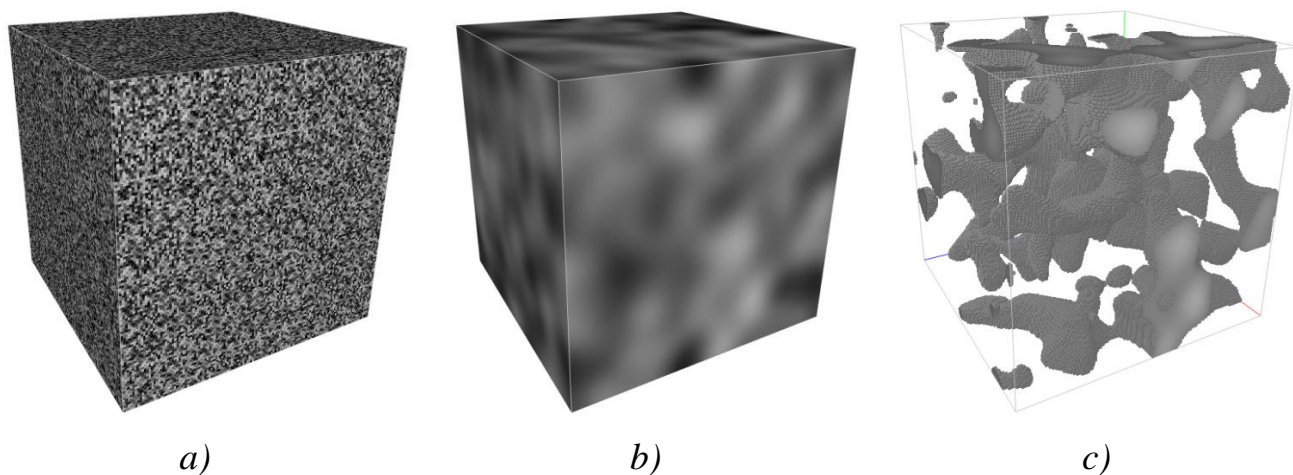


Рис. 2.1 Приклад моделювання структури гетерогенного середовища за допомогою випадкових скалярних полів. Елементарний об'єм є матрицею $128 \times 128 \times 128$ елементів: а) базовий рівномірний розподіл інтенсивностей; б) результат застосування Гаусового фільтру у формі сфери радіусом 20 елементів; в) результат застосування єдиного перерізу інтенсивностей $\geq 0,63$

У практичних реалізаціях, дотримуючись максимальної простоти, як генератор випадкових чисел переважно використовується той, що надається з алгоритмічною мовою програмування, на якій реалізується програма моделювання. У більшості випадків використовується рівномірний (Рис. 2.1.а), і рідше Гаусовий розподіли інтенсивностей [33].

Для огрублення побудованого поля використовується лінійний фільтр деякого необхідного, наперед визначеного розміру. Дуже часто, на цьому етапі використовується, добре відомий, Гаусовий фільтр:

$$K(r, x, y, z, a, b, c) = \exp\left(-\frac{(x/a)^2 + (y/b)^2 + (z/c)^2}{(r/2)^2}\right), \quad (2.4)$$

де: x, y, z – координати відносно центру фільтру; a, b, c – діаметрально протилежні точки осей еліпсоїда; r – радіус еліпсоїда, тобто розмір фільтру. Описаний фільтр враховує інтенсивності сусідніх точок експоненційно, від одиниці в центрі його координат, і приблизно нуля на еліпсоїді з заданим радіусом. Двовимірні варіанти таких еліпсоїдів зображено на Рис. 2.2. Їх використання дає змогу моделювати анізотропні поля, "видовжені" по більших головних осях.

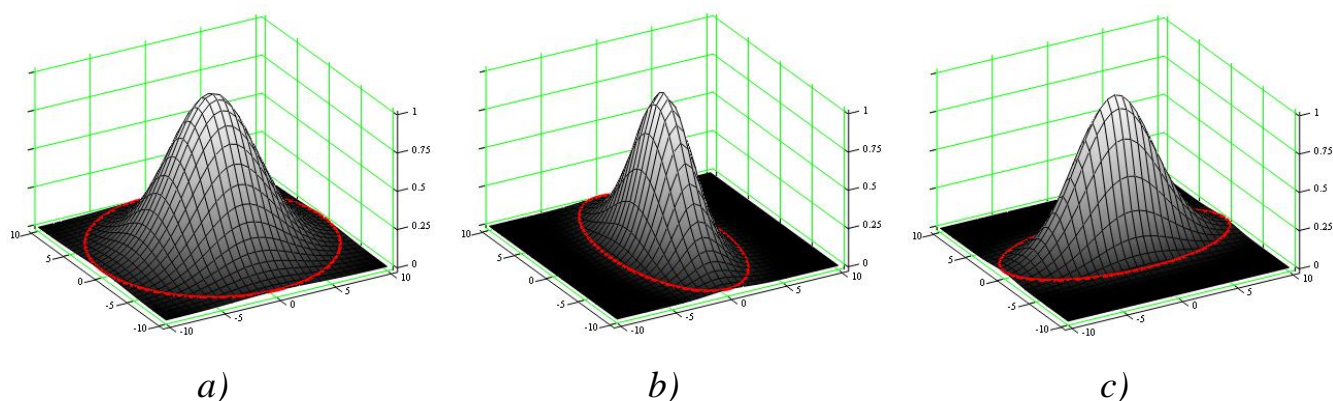


Рис. 2.2 Приклади двовимірних Гаусових фільтрів: а) у формі кола з радіусом 10 одиниць; б) у формі еліпса з головними осями 5 та 10 одиниць; с) у формі еліпса з головними осями 10 та 5 одиниць

Особливістю Гаусового фільтру є те, що його можна незалежно розділити окремо по кожній з осей координат, що в свою чергу на порядки зменшує складність обчислень. У даному випадку з $O(h_x h_y h_z r^3)$, де h_x, h_y, h_z – висота ширина та глибина матриці, до $O(h_x h_y h_z r)$. Слід також зазначити, що після застосування фільтру, отримані значення можуть бути досить великими, і не потрапляти в діапазон від 0 до 1. Щоб обійти цю проблему, достатньо здійснити нормалізацію. На *Рис. 2.1.б* зображено результат застосування Гаусового фільтру до базового випадкового розподілу інтенсивностей в елементарному об'ємі гетерогенного середовища.

Останнім етапом моделювання є застосування до огрублених фільтром випадкових полів одного чи кількох перерізів на необхідному рівні. Значення інтенсивностей, що не долають обраний рівень, просто відкидаються. Приклад застосування єдиного перерізу до огрубленого фільтром випадкового поля зображено на *Рис. 2.1.с*.

Функціональні можливості моделей випадкових скалярних полів не обмежуються описом композиційних матеріалів з компонентами, що взаємно проникають. Зокрема, при побудові моделей структури гетерогенних середовищ, в залежності від обраного рівня деталізації, перехідні шари між фазами композиції можуть описуватися як: окремі одиниці [21, 22, 36, 58, 59]; спрощені елементи регулярних структурних одиниць [32]; та як випадковий розподіл

концентрації складових по регулярних комірках [60, 61]. Використання моделей випадкових скалярних полів для останнього випадку дає змогу вдосконалити можливості моделювання перехідних шарів, в тому числі з допомогою ітераційних процедур мультимасштабного моделювання структур.

Градування, тобто моделювання деяких плавних випадкових функціонально заданих переходів між фазами гетерогенних середовищ, широко застосовується в моделях функціонально-градуєваних матеріалів. Для цього, у фільтр огрублення K , базового розподілу випадкових інтенсивностей, вводять спеціальну функцію інтенсивностей $\lambda(x, y, z)$, що описує бажану форму випадкових полів [63, 64]. У найпростішому випадку, функція $\lambda(x, y, z)$ описує лінійний спад, між фазами середовища, що умовно рівні 1 та 0 (Рис. 2.3.a). Після цього, повторюються попередньо описані кроки моделювання випадкових

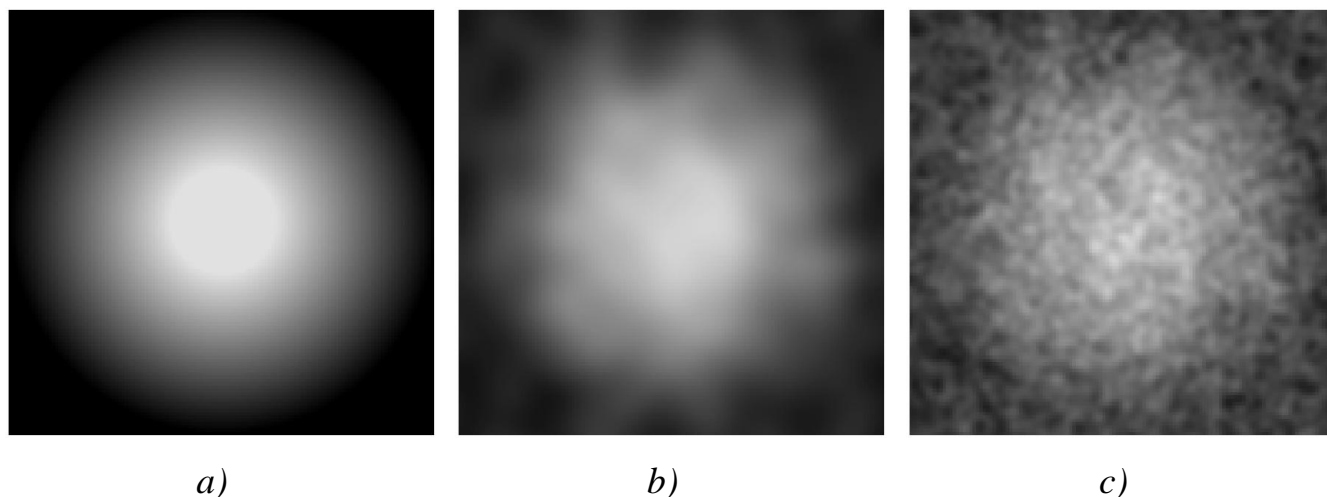


Рис. 2.3 Приклад моделювання випадкових градуєваних перехідних шарів. Елементарний об'єм є матрицею $128 \times 128 \times 128$ елементів. У центрі розміщено сферу радіусом 64 елементи. Перехідний шар становить $75\% = 48$ елементів. Зображено переріз по екватору: a) функція інтенсивності описує лінійний спад від 1 до 0; b) результат застосування Гаусового фільтру у формі сфери радіусом 16 елементи та з заданою функцією інтенсивності; c) результат повторного застосування Гаусового фільтру у формі сфери радіусом 4 елементи та з функцією інтенсивності з попереднього кроку, що відповідає збільшенню деталізації при мультимасштабному моделюванні

скалярних полів, з тією відмінністю, що при фільтруванні, до знайденого огрубленого значення поля слід додати значення $\lambda(x, y, z)$ (Рис. 2.3.b). Цей підхід можна використовувати ітераційно. При цьому, зменшуючи на кожній ітерації розміри фільтра, таким способом, можна моделювати гетерогенні структури з різними масштабами градування (Рис. 2.3.c).

Продовжуючи міркування, при великій кількості комірок, в межах одного методу з'являється можливість моделювати всі наведені у попередньому розділі структури КМ та відповідні особливості шляхом їх наближеного представлення достатньо великою тривимірною матрицею регулярних комірок-вокселів. Основною проблемою реалізації таких мікрорівневих моделей КМ є необхідність використання великої кількості пам'яті обчислювальної машини та виконання великої кількості обчислень, у порівнянні з простішими моделями КМ. З іншої сторони, алгоритми, що використовуються в моделях, легко піддаються доменній декомпозиції, і як наслідок, можуть бути ефективно реалізовані на обчислювальних пристроях з SIMD (Single Instruction Multiple Data) архітектурою наприклад, на графічних картах персональних комп'ютерів, завдяки використанню технологій високопродуктивних паралельних і розподілених обчислень, таких як OpenCL або CUDA. Прискорення обчислень, при цьому, буде пропорційним до кількості обчислювальних вузлів пристрою.

Отже, методи моделювання мікроструктур композиційних матеріалів розглядають їх як комбінацію складових характеристик матеріалу, що описується коефіцієнтами відповідних модельних рівнянь, та топології матеріалу, яка виражається областями інтегрування, де визначені ці рівняння. Задача моделювання мікроструктур вирішується на основі використання методів Монте-Карло щодо побудови топологічних особливостей чи присвоєння складових характеристик відповідно до деякого стохастичного розподілу. При цьому необхідне вдосконалення методів, що представляють структури в елементарних об'ємах композиції у вигляді достатньо великої кількості регулярних комірок. Це дасть можливість, в межах єдиного методу, моделювати наведені у попередньому розділі складні структури КМ та їх особливості наближеним представленням

достатньо великою тривимірною матрицею регулярних комірок-вокселів. Основною проблемою реалізації таких мікрорівневих моделей КМ є необхідність використання великої кількості пам'яті обчислювальної машини та виконання великої кількості обчислень, у порівнянні з простішими моделями КМ. Тому, доцільною є декомпозиція обчислень та їх реалізація з допомогою технологій паралельних та розподілених обчислень.

2.2 Аналітичні моделі фізичних процесів в неперервних середовищах

У даному підрозділі будуть розглянуті підходи до аналізу фізичних процесів в неперервних середовищах. У зв'язку з надзвичайно великою кількістю таких процесів розгляд обмежений стаціонарними задачами лінійних теорій тепломасообміну та теорії пружності, проте форма викладення є достатньо абстрактною для дослідження, при необхідності, інших фізичних явищ.

В попередньому розділі було зазначено, що розрахунок змінних стану систем з розподіленими параметрами, тобто деяких матеріальних середовищ, здійснюється за допомогою математичного апарату теорії поля. При цьому системи розглядаються як неперервні, а змінні стану – як польові величини (потенціали), тобто такі скалярні, векторні чи тензорні величини, що є неперервними функціями від координат і часу [23]. Тут і в подальшому абстрактна скалярна польова величина позначається символом u , або функцією $u(x, y, z, \tau) = u(\mathbf{r}, \tau)$, де \mathbf{r} – радіус-вектор точки з координатами x, y, z . Векторні та тензорні польові величини відповідно позначаються потовщеним шрифтом як \mathbf{u} .

Для спрощення, в рамках лінійних теорій, будь-який фізичний процес описують відповідними лінійними функціональними залежностями, тому такі моделі є адекватними тільки для відносно невеликих змін польових величин, результати емпіричних спостережень за якими, можна лінеаризувати з відповідним збереженням точності. Спрощення, крім іншого, відкидає з розгляду ефекти спеціальної та загальної теорії відносності (див. наприклад [113]). Обмежимося також розглядом систем з достатньою кількістю фізичних елементарних частинок, щоб здійснювалися умови локальної рівноваги змінних

стану в межах мінімальних об'ємів, тобто умови неперервності середовищ [90]. На практиці, до таких систем відносяться фізичні системи, починаючи від мікроскопічних розмірів. Будь-яка фізична теорія, що розглядає процеси в абстрактно неперервних середовищах, не намагається їх пояснити, а тільки прогнозувати (Ньютонівський підхід). При цьому, процес розглядається як феномен, що описується відповідним феноменологічним, тобто таким, що завжди емпірично спостерігається, законом і тому не потребує пояснень. Для цього, за необхідності, використовуються відповідні статистичні фізичні теорії.

Допустимо, що простір-час, де розглядається задача, є неперервним дійсним лінійним тривимірним метричним (Евклідовим) простором $(x, y, z): \mathbb{R}^4 \mapsto \mathbb{R}^3$, з незалежною віссю часу $\tau: \mathbb{R}^4 \mapsto \mathbb{R}$, де \mathbb{R} – це множина дійсних чисел [114-117]. В рамках класичної механіки така постановка відповідає системі Галілеєвих перетворень [118, 119]. Базис простору утворений одиничними ортогональними векторами $\hat{\mathbf{i}}, \hat{\mathbf{j}}, \hat{\mathbf{k}}$, тому положення будь-яких двох точок в цій системі визначається радіус-векторами:

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= X\hat{\mathbf{i}} + Y\hat{\mathbf{j}} + Z\hat{\mathbf{k}}, \\ \mathbf{r} &= x\hat{\mathbf{i}} + y\hat{\mathbf{j}} + z\hat{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Нехай $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ та $\Omega^* \subset \mathbb{R}^3$ – дві області простору, що містять деяку кількість розподіленої неперервно матерії. Розглянемо деформацію, що переводить речовину з Ω в Ω^* . Позначимо $\mathbf{R} \equiv (X, Y, Z)$, як радіус-вектор, що відповідає деякій точці. При деформації радіус-вектор \mathbf{R} переходить у радіус-вектор $\mathbf{r} \equiv (x, y, z)$, що відповідає новій точці. Така деформація описується перетвореннями $r: \Omega \mapsto \Omega^*$ та $R: \Omega^* \mapsto \Omega$:

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= r(\mathbf{R}) = \mathbf{R} - \mathbf{u}, \\ \mathbf{R} &= R(\mathbf{r}) = \mathbf{r} + \mathbf{u}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

де: \mathbf{u} – вектор переміщення точки. Визначимо базові аксіоми:

Аксіома неперервності [89] – будь-яка деформація може бути описана лише однозначними перетвореннями, що мають неперервні похідні необхідного порядку. Математично, такі перетворення описуються взаємно-однозначним

неперервним відображенням $\mathbf{F}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^*$ (бієкцією), яке можна побудувати на основі розкладу в ряд Тейлора, використовуючи найкраще лінійне наближення:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \mathbf{F}(\mathbf{R}) + \mathbf{Jac}_r(\mathbf{R})(\mathbf{r} - \mathbf{R}) + o(\|\mathbf{r} - \mathbf{R}\|_{\mathcal{H}^p(\Omega)}), \quad (2.7)$$

де: $\mathbf{Jac}_r(\mathbf{R})$ – це матриця Якобі:

$$[\mathbf{Jac}_r \mathbf{R}] = \begin{bmatrix} \frac{\partial X}{\partial x} & \frac{\partial X}{\partial y} & \frac{\partial X}{\partial z} \\ \frac{\partial Y}{\partial x} & \frac{\partial Y}{\partial y} & \frac{\partial Y}{\partial z} \\ \frac{\partial Z}{\partial x} & \frac{\partial Z}{\partial y} & \frac{\partial Z}{\partial z} \end{bmatrix} = \frac{\partial(X, Y, Z)}{\partial(x, y, z)}, \quad (2.8)$$

$\|\cdot\|_{\mathcal{H}^p(\Omega)}$ – метрична норма (відстань) що визначена у неповному Гільбертовому просторі [100-104, 107], тобто функціональному просторі який містить функції, неперервно диференційовані хоча би p разів ($C^p(\Omega)$ -гладкі, простір буде повним при $p \rightarrow \infty$):

$$\|u\|_{W_k^p(\Omega)} \equiv \left(\sum_{|\alpha| \leq p} \|D^{|\alpha|} u\|_{L_k(\Omega)}^k \right)^{\frac{1}{k}} = \left(\sum_{|\alpha| \leq p} \int_{\Omega} \left| \frac{\partial^{|\alpha|} u_{\alpha}(x_1, x_2, \dots, x_N)}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_N^{\alpha_N}} \right|^k d\Omega \right)^{\frac{1}{k}}, \quad (2.9)$$

де: $W_k^p(\Omega)$ – норма Соболева, що при $k = 2$ рівна нормі в Гільбертовому просторі $W_2^p(\Omega) = \mathcal{H}^p(\Omega)$, а при $p = 0$ нормі в Евклідовому просторі $\mathcal{H}^0(\Omega) = L_2(\Omega)$:

$$\|u\|_{L_2(\Omega)} \equiv \sqrt{\int_{\Omega} |u|^2 d\Omega}. \quad (2.10)$$

Аксиома виражає нескінченну подільність простору-часу та виключає будь-яку нереальну з фізичної точки зору деформацію.

Аксиома перманентності матерії [89] – матерію, що знаходиться в скінченному (додатному, тобто позитивно визначеному) об'ємі, неможливо деформацією перевести в нульовий або нескінченний об'єм. Річ в тому, що визначник матриці Якобі, який називають функціональним визначником або Якобіаном, має безпосередній фізичний зміст – він визначає відношення елементарних об'ємів при деформації (відображенні) [120]:

$$0 < |\mathbf{Jac}| < \infty \Leftrightarrow d\Omega^* = |\mathbf{Jac}| d\Omega. \quad (2.11)$$

Якщо тіло описується деякою функцією $f(X, Y, Z)$, і після деформації функцією від нових координат $f\{X(x, y, z), Y(x, y, z), Z(x, y, z)\}$, то об'єм можна визначити як:

$$\begin{aligned} & \iiint_{\Omega \subset \mathbb{R}^3} f(X, Y, Z) dXdYdZ = \\ & = \iiint_{\Omega^* \subset \mathbb{R}^3} f\{X(x, y, z), Y(x, y, z), Z(x, y, z)\} |\mathbf{Jac}_{\mathbf{r}, \mathbf{R}}| dx dy dz, \end{aligned} \quad (2.12)$$

або в загальному випадку:

$$\int_{\Omega} f(\mathbf{R}) d\Omega = \int_{\Omega^*} f^*(\mathbf{r}) |\mathbf{Jac}_{\mathbf{r}, \mathbf{R}}| d\Omega^*. \quad (2.13)$$

Розглянемо поняття диференціального оператора. У функціональному аналізі оператор є розширенням поняття відображення, і не вдаючись в деталі, означає відображення, що ставить у відповідність певній функції іншу функцію [103]. Наприклад лінійне диференціальне рівняння еліптичного типу, тобто те, що описує стаціонарні процеси [121], в операторній формі записується як:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = 0, \quad \mathcal{L}(\cdot) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad \mathcal{L}(u(\mathbf{r})) = \mathcal{L}u = 0, \quad (2.14)$$

де: $\mathcal{L}(\cdot)$ – лінійний диференціальний оператор еліптичного типу. Цей оператор часто зустрічається у векторному та тензорному численні під назвою оператора Лапласа, або лапласіана і позначається як $\Delta(\cdot)$ (дельта) або $\nabla^2(\cdot)$, де останній вираз означає дивергенцію від градієнта скалярного поля. Оператор $\nabla(\cdot)$ (набла) називається оператором Гамільтона або гамільтоніаном і позначає градієнт скалярного поля [122]:

$$\nabla = \hat{\mathbf{i}} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{\mathbf{j}} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial z}, \quad \text{grad}(u) = \nabla u = \frac{\partial u}{\partial \mathbf{r}} = \hat{\mathbf{i}} \frac{\partial u}{\partial x} + \hat{\mathbf{j}} \frac{\partial u}{\partial y} + \hat{\mathbf{k}} \frac{\partial u}{\partial z}, \quad (2.15)$$

або в матричному вигляді:

$$\nabla = \left[\frac{\partial}{\partial x} \quad \frac{\partial}{\partial y} \quad \frac{\partial}{\partial z} \right]^T, \quad \text{grad}(u) = \nabla u = \left[\frac{\partial}{\partial x} \quad \frac{\partial}{\partial y} \quad \frac{\partial}{\partial z} \right]^T [u] = \left[\frac{\partial u}{\partial x} \quad \frac{\partial u}{\partial y} \quad \frac{\partial u}{\partial z} \right]^T. \quad (2.16)$$

Застосувавши оператор Гамільтона до деякого векторного поля \mathbf{J} ,

отримаємо вираз дивергенції [122]:

$$\operatorname{div}(\mathbf{J}) = \nabla \cdot \mathbf{J} = \frac{\partial \mathbf{J}_x}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{J}_y}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{J}_z}{\partial z}, \quad (2.17)$$

або в матричному вигляді (скалярний добуток):

$$\operatorname{div}(\mathbf{J}) = \nabla \cdot \mathbf{J} = \langle \nabla, \mathbf{J} \rangle = \nabla^T \mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{J}_x \\ \mathbf{J}_y \\ \mathbf{J}_z \end{Bmatrix} = \frac{\partial \mathbf{J}_x}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{J}_y}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{J}_z}{\partial z}. \quad (2.18)$$

Відповідно, оператор Лапласа виражається як:

$$\operatorname{div}(\operatorname{grad}(u)) = \nabla^2 u = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}. \quad (2.19)$$

Рівняння (2.14) називають рівнянням Лапласа. Якщо лінійне диференціальне рівняння еліптичного типу є неоднорідним, тобто права частина (2.14) не дорівнює нулеві, чи довільній константі, а деякому виразу від незалежних змінних $Q(\mathbf{r})$, тоді рівняння називають рівнянням Пуассона [103].

Рух можна описати як сімейство деформацій, де параметром є час τ :

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= r(\mathbf{R}, \tau), \\ \mathbf{R} &= R(\mathbf{r}, \tau). \end{aligned} \quad (2.20)$$

Аксиома неперервності в часі [89] – будь-яке перетворення, що описує рух, має неперервні частинні похідні за часом будь-якого необхідного високого порядку (фактично, не вище другого порядку, що визначається другим законом Ньютона). Ця аксіома дає змогу описувати нестационарні задачі, для яких диференціальне рівняння в загальному випадку можна абстрактно записати як:

$$c + \mathcal{L}u + a \frac{du}{d\tau} - b \frac{d^2 u}{d\tau^2} = 0, \quad (2.21)$$

де: \mathcal{L} – еліптичний оператор; a, b, c – функції координат і часу. Зокрема [99]:

- під дане формулювання підпадають такі гіперболічні (описують коливальні системи і хвильові процеси) рівняння, як рівняння опису поперечних коливань натягнутої струни з густиною ρ та натягом T :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\rho}{T} \frac{d^2 u}{d\tau^2} = 0, \quad (2.22)$$

це рівняння збігається з (2.21) при $a = c = 0$, $b = \rho/T$ і $\mathcal{L}u = \partial^2 u / \partial x^2$,

- а також, такі параболічні (описують процеси нестационарної провідності) рівняння, як рівняння опису лінійних нестационарних процесів переносу тепла в матеріалі з густиною ρ , питомою теплоємністю c , коефіцієнтом теплопровідності λ і внутрішнім джерелом тепла Q :

$$\lambda \nabla^2 T + Q - \rho c \frac{\partial T}{\partial \tau} = 0, \quad (2.23)$$

це рівняння співпадає з (2.21) при $a = \rho c$, $b = 0$, $c = Q$ і $\mathcal{L}u = \nabla^2 T$.

Аксиома рівноваги потенціалів [88] – у стані фізичної (енергодинамічної [94]) рівноваги потенціали системи є однаковими. Якщо під впливом деяких зовнішніх чи внутрішніх чинників це не так, то перенесення відповідного виду енергії, згідно феноменологічних законів збереження (енергії, маси, імпульсу, тощо), відбувається шляхом незворотних процесів у напрямку від більшого потенціалу до меншого. Градієнт потенціалу називають енергодинамічною силою \mathbf{F} , наприклад градієнт електричного потенціалу рівний напруженню електричного поля. У присутності сил \mathbf{F}_i в системі виникають енергодинамічні потоки \mathbf{J}_i , наприклад, згідно з законом Фур'є градієнт температур спричинює незворотній потік тепла. Взаємозв'язок між потоками та силами знаходиться в умовах локальної рівноваги і тому описується лінійною залежністю (використовується тільки перший член розкладу в ряд Тейлора) [90]:

$$\mathbf{J}_k = \sum_j L_{k,j} \mathbf{F}_j, \quad L_{j,k} = L_{k,j}, \quad (2.24)$$

де: L – є константами, що називаються феноменологічними коефіцієнтами або кінетичними коефіцієнтами Онзагера. Співвідношення взаємні та базуються на феноменологічних законах, що в загальному випадку описуються як:

$$\mathbf{J} = -\alpha \nabla u(\mathbf{r}), \quad (2.25)$$

де: α – коефіцієнт пропорційності. Наприклад:

- Закон теплопровідності Фур'є:

$$\mathbf{J}_q = -\lambda \nabla T(\mathbf{r}), \quad \lambda = -L_{q,q} T^{-2}; \quad (2.26)$$

- Закон дифузії Фіка:

$$\mathbf{J}_k = -D \nabla n(\mathbf{r}), \quad D = -L_{k,k} T^{-1}; \quad (2.27)$$

- Закон електропровідності Ома:

$$\mathbf{J}_e = \sigma E = -\sigma \nabla U(\mathbf{r}), \quad \sigma = -L_{e,e} T^{-1}; \quad (2.28)$$

де: λ – коефіцієнт теплопровідності; ∇T – градієнт температури; D – коефіцієнт дифузії; ∇n – градієнт концентрації речовини; σ – коефіцієнт електропровідності; E – напруженість електричного поля, що рівна градієнту електричного потенціалу $-\nabla U$.

Коефіцієнти пропорційності α з рівняння (2.25) та їх часткові випадки λ , D , σ , відображають здатність середовища проводити відповідний фізичний потік. Їх ефективні значення є шуканими ефективними характеристиками гетерогенних середовищ, для знаходження яких необхідно записати феноменологічні закони у формі крайових задач.

Розглянемо деяку інтенсивну змінну фізичної системи U , що в рамках елементарного об'єму $\Delta\Omega$ має питому густину $u(\mathbf{r}, \tau)$. Зміна u в об'ємі $\Delta\Omega$, згідно з законами збереження, дорівнює чистому приросту u в об'єм $\Delta\Omega$, за умови відсутності будь-яких внутрішніх джерел. Позначимо густину потоку u як \mathbf{J}_u , густина рівна потоку, що проходить через одиничну площу границі $\Delta\Gamma$ по нормалі \mathbf{n} за одиницю часу τ . У такому випадку рівняння балансу для u є рівнянням Умова [88, 90, 95]:

$$\int_{\Delta\Omega} \left(\frac{\partial u}{\partial \tau} \right) d\Omega = -\oint_{\Delta\Gamma} (\mathbf{J}_u)_n d\Gamma. \quad (2.29)$$

Згідно теореми про дивергенцію, для будь-якого векторного поля \mathbf{J} , справедливо:

$$\oint_{\Delta\Gamma} (\mathbf{J}_u)_n d\Gamma = \int_{\Delta\Omega} \nabla \cdot \mathbf{J}_u d\Omega. \quad (2.30)$$

На основі цих виразів, отримуємо диференціальне рівняння провідності для u :

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_u. \quad (2.31)$$

У залежності від змісту інтенсивної змінної U , густина потоку \mathbf{J}_u описується відповідним феноменологічним законом провідності, звідки, в загальному випадку рівняння балансу скалярних потенціалів записується як:

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = \alpha \nabla^2 u + Q = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + Q. \quad (2.32)$$

де: Q – деяке внутрішнє джерело. При описі стаціонарних процесів, зміна з часом локальної густини інтенсивної змінної стану системи $\partial u / \partial \tau$ дорівнює нулеві.

Розглянемо рівняння балансу для векторних потенціалів. Для цього звернемося до *принципу напружень Коші* [84, 85, 89]: на будь-який елемент поверхні Γ з зовнішньою нормаллю \mathbf{n} , що прилягає до кожної точки \mathbf{r} неперервного середовища, яке деформується, діє напруження, що залежить в будь-який момент від положення та орієнтації елемента поверхні Γ , тобто від одиничної нормалі \mathbf{n} . Розподіл напружень описується вектором напружень:

$$\mathbf{t} = t(\mathbf{r}, \tau) = \lim_{\Delta \Gamma \rightarrow 0} \frac{\Delta \mathbf{F}}{\Delta \Gamma} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \Gamma}, \quad (2.33)$$

де: $\Delta \mathbf{F}$ – поверхнева механічна сила, що діє на $\Delta \Gamma$.

За умови відсутності сторонніх масових (внутрішніх) механічних сил, результуючу зовнішню силу, що діє на всю систему можна визначити як:

$$\partial \mathbf{F}^* = \oint_{\Gamma} \mathbf{t} d\Gamma. \quad (2.34)$$

Враховуючи другий закон Ньютона $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$, можна записати інтегральне рівняння руху неперервного середовища:

$$\int_{\Omega} \rho \mathbf{a} d\Omega = \oint_{\Gamma} \mathbf{t} d\Gamma, \quad (2.35)$$

де густина ρ є польовою величиною, що представляє собою густину маси m неперервного середовища в точці \mathbf{r} в момент τ :

$$\rho = \rho(\mathbf{r}, \tau) = \frac{dm}{d\Omega} = \lim_{\Delta \Omega \rightarrow 0} \frac{\Delta m}{\Delta \Omega}, \quad m(\tau) = \int_{\Omega} \rho(\mathbf{r}, \tau) d\Omega. \quad (2.36)$$

При деформації маса не змінюється (закон збереження маси неперервного середовища):

$$m(\tau_0) = \int_{\Omega} \rho_0(\mathbf{r}, \tau_0) d\Omega = \int_{\Omega^*} \rho(\mathbf{r}, \tau_*) d\Omega^* = m(\tau_*) = \text{const} \quad (2.37)$$

Вектор напружень \mathbf{t} є однорідною лінійною векторною функцією одиничної нормалі \mathbf{n} , тобто в будь-якій точці неперервної системи:

$$\mathbf{t}(\mathbf{r}, \tau) = l_{\alpha} \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \tau), \quad \alpha, \beta = x, y, z, \quad \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}, \tau) \equiv [\boldsymbol{\sigma}] = \begin{bmatrix} \sigma_x & t_{xy} & t_{xz} \\ t_{xy} & \sigma_y & t_{yz} \\ t_{xz} & t_{yz} & \sigma_z \end{bmatrix}, \quad (2.38)$$

де: l_x, l_y, l_z – напрямні косинуси нормалі \mathbf{n} ; $[\boldsymbol{\sigma}]$ – тензор напружень.

Застосувавши відому теорему про дивергенцію отримаємо диференціальне рівняння руху Коші:

$$\int_{\Omega} \rho \mathbf{a} d\Omega = \int_{\Omega} \nabla \cdot [\boldsymbol{\sigma}] d\Omega, \quad \frac{\rho d\mathbf{v}}{d\tau} = \nabla \cdot [\boldsymbol{\sigma}]. \quad (2.39)$$

Знайдемо лінійний тензор деформації. Розглянемо дві нескінченно близькі точки, що однозначно задаються радіус-векторами:

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= X\hat{\mathbf{i}} + Y\hat{\mathbf{j}} + Z\hat{\mathbf{k}}, \\ \mathbf{R} + d\mathbf{R} &= (X + dX)\hat{\mathbf{i}} + (Y + dY)\hat{\mathbf{j}} + (Z + dZ)\hat{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

При деформації, точки переходять в нові положення, що однозначно задаються радіус-векторами:

$$\begin{aligned} \mathbf{r} = \mathbf{R} + \mathbf{u} &= (X + u_x)\hat{\mathbf{i}} + (Y + u_y)\hat{\mathbf{j}} + (Z + u_z)\hat{\mathbf{k}}, \\ \mathbf{r} + d\mathbf{r} &= \mathbf{R} + d\mathbf{R} + \mathbf{u} + d\mathbf{u}, \end{aligned} \quad (2.41)$$

де:

$$d\mathbf{u} = \frac{d\mathbf{u}}{d\mathbf{r}} \cdot d\mathbf{r} = d\mathbf{r} \cdot \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (2.42)$$

вектор відносних переміщень двох нескінченно близьких точок.

Тензор $d\mathbf{u}/d\mathbf{r}$ можна представити у вигляді суми його симетричної та косиметричної частини:

$$\frac{d\mathbf{u}}{d\mathbf{r}} = \frac{1}{2} \left(\frac{d\mathbf{u}}{d\mathbf{r}} + \nabla \cdot \mathbf{u} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{d\mathbf{u}}{d\mathbf{r}} - \nabla \cdot \mathbf{u} \right) = [\boldsymbol{\varepsilon}] + [\boldsymbol{\omega}]. \quad (2.43)$$

Симетрична частина визначає лінійний тензор деформації:

$$[\boldsymbol{\varepsilon}] = \begin{bmatrix} \varepsilon_x & \gamma_{xy} & \gamma_{xz} \\ \gamma_{xy} & \varepsilon_y & \gamma_{yz} \\ \gamma_{xz} & \gamma_{yz} & \varepsilon_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_x}{\partial x} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) & \frac{\partial u_y}{\partial y} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right) & \frac{\partial u_z}{\partial z} \end{bmatrix}. \quad (2.44)$$

Кососиметрична частина $[\boldsymbol{\omega}]$ описує деформації кручення та коливні процеси. Розглядаючи відносно невеликі деформації, згідно з обмеженнями, що описані на початку підрозділу, ця частина не вносить значного вкладу в прогнозування результатів деформації, і тому нею можна знехтувати [84, 85].

Феноменологічним законом, що об'єднує компоненти тензору напружень та тензору деформацій є закон Гука (пружності). Відповідні коефіцієнти пропорційності відомі в літературі як коефіцієнти Ламе [84, 85]. Однією з їх форм є модуль пружності матеріалу E , також відомий як модуль Юнга, тобто величина, що описує здатність матеріалу чинити опір розтягуванню чи стискуванню при пружній деформації та коефіцієнт Пуассона μ , тобто коефіцієнт, що показує міру зміни поперечних розмірів тіла при розтягуванні.

$$\begin{aligned} \varepsilon_x &= \{\sigma_x - \mu(\sigma_y + \sigma_z)\}/E, & \gamma_{xy} &= t_{xy}/\mu, \\ \varepsilon_y &= \{\sigma_y - \mu(\sigma_x + \sigma_z)\}/E, & \gamma_{yz} &= t_{yz}/\mu, \\ \varepsilon_z &= \{\sigma_z - \mu(\sigma_x + \sigma_y)\}/E, & \gamma_{xz} &= t_{xz}/\mu. \end{aligned} \quad (2.45)$$

Останні співвідношення коротко можна записати як:

$$[\boldsymbol{\sigma}] = [\mathbf{D}][\mathcal{L}][\boldsymbol{\varepsilon}], \quad (2.46)$$

де: $[\mathbf{D}]$ – матриця характеристик середовища, що містить коефіцієнти Ламе; $[\mathcal{L}]$ – диференціальний оператор в матричній формі, що містить компоненти градієнту.

Баланс векторних потенціалів (напружень) в стаціонарному режимі записується як система диференціальних рівнянь з частинними похідними з аналогічним до попереднього випадку лінійним еліптичним оператором:

$$\begin{cases} \partial \sigma_x / \partial x + \partial t_{xy} / \partial y + \partial t_{xz} / \partial z + X = 0, \\ \partial t_{xy} / \partial x + \partial \sigma_y / \partial y + \partial t_{yz} / \partial z + Y = 0, \\ \partial t_{xz} / \partial x + \partial t_{yz} / \partial y + \partial \sigma_z / \partial z + Z = 0, \end{cases} \quad (2.47)$$

де: X, Y, Z – деякі можливі внутрішні джерела напружень.

Модуль Юнга та коефіцієнт Пуассона є ефективними пружними (механічними) характеристиками середовища, однак без їх дослідження неможливо знайти таку теплофізичну характеристику, як температурний коефіцієнт лінійного розширення матеріалу.

Для однозначного розв'язку задачі, що описується диференціальним рівнянням, необхідно вказати початкові та крайові умови, тобто поставити, так звану, крайову задачу. Початкові умови задачі визначають значення потенціалу і його похідних у деякій початковий момент часу τ_0 . Крайові умови, аналогічно до початкових, визначають значення потенціалу і його похідних на деяких границях Γ області моделювання Ω . Існують три основні типи крайових умов [103, 123]:

- крайові умови першого роду, або крайові умови Діріхле, що задають значення потенціалу на границі та в загальному випадку мають вигляд:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, \tau)|_{\Gamma} = \mathbf{f}(\mathbf{r}, \tau), \quad (2.48)$$

де: $\mathbf{u}(\mathbf{r}, \tau)|_{\Gamma}$ – польова величина на границі Γ , $\mathbf{f}(\mathbf{r}, \tau)$ – деяка функція.

- крайові умови другого роду, або крайові умови Неймана, що задають, так звану, густину потоку на границі, тобто першу похідну, та в загальному випадку мають вигляд:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, \tau)|_{\Gamma} = \frac{\partial \mathbf{u}(\mathbf{r}, \tau)}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\Gamma} = \mathbf{f}(\mathbf{r}, \tau), \quad (2.49)$$

де: $\mathbf{J}(\mathbf{r}, \tau)|_{\Gamma}$ – густина потоку на границі Γ , \mathbf{n} – одинична нормаль до Γ .

- крайові умови третього роду, або крайові умови Робіна (задача Робіна розглядається в механіці, натомість у задачах теплопровідності їх називають умовами Ньютона-Ріхмана [99]), що задають, так званий, потенціальний напір, тобто змішані крайові умови, які в загальному випадку мають вигляд:

$$\left(\mathbf{J}(\mathbf{r}, \tau) + \alpha (\mathbf{u}(\mathbf{r}, \tau) - \mathbf{u}_{\infty}) \right) \Big|_{\Gamma} = \left(\frac{\partial \mathbf{u}(\mathbf{r}, \tau)}{\partial \mathbf{n}} + \alpha (\mathbf{u}(\mathbf{r}, \tau) - u_{\infty}) \right) \Big|_{\Gamma} = \mathbf{f}(\mathbf{r}, \tau), \quad (2.50)$$

де: α – коефіцієнт пропорційності (в задачах теплопровідності це

коефіцієнт тепловіддачі [83]), \mathbf{u}_∞ – потенціал навколишнього середовища.

Додатково до описаних, у задачах, що розглядаються в гетерогенних середовищах, визначають, так звані, крайові умови четвертого роду або ідеальний контакт [83]. Згідно з прийнятою аксіомою неперервності, будь-який потенціал не може містити розривів при переході між компонентами гетерогенного середовища, тобто між областями об'єкту моделювання, де коефіцієнти визначальних рівнянь балансу змінюються відносно координат. Такі умови відповідають емпіричному досвіду, який стверджує, що досліджувані фізичні поля, наприклад температурне або електричне поле, не можуть мати просторових розривів. Тому, в найпростішому випадку, крайові умови четвертого роду визначаються як:

$$\mathbf{u}_i|_{\Gamma_{i,j}} = \mathbf{u}_j|_{\Gamma_{i,j}}, \quad (2.51)$$

де: $\Gamma_{i,j}$ – границя між i та j компонентами середовища. Слід зазначити, що в ряді задач, наприклад в задачах на знаходження власних значень коливних процесів пружних тіл, чи задачах про кручення або згин цих тіл, вимагається не тільки неперервність потенціального поля (в такому випадку поля переміщень), але і його похідних.

Вплив на потенціальні поля, крім крайових умов, може проявлятися також всередині об'єкту моделювання у вигляді внутрішніх джерел, наприклад масових сил з задач теорії пружності, що зумовлені гравітацією. Фізична природа цих джерел зазвичай проявляється при розгляді мультифізичних задач, коли один фізичний процес впливає на інший. При цьому, співвідношення знову будуть описуватися через певний феноменологічний закон чи ефект, наприклад ефект теплового розширення матеріалу. Відповідним коефіцієнтом пропорційності, в даному випадку, буде температурний коефіцієнт лінійного розширення, що також є однією з форм коефіцієнтів Онзагера. Формально, внутрішні джерела визначаються з допомогою відповідних неоднорідних доданків в рівняннях балансу (2.32), (2.47).

Отже, аналітичні фізико-математичні моделі проходження теплофізичних процесів в неперервних середовищах базуються на математичному апараті теорії поля, основними аксіомами якого є: аксіома неперервності, що визначає неперервність середовища та однозначність його можливих деформацій; аксіома перманентності матерії, що фактично описує позитивну визначеність та обмеженість диференціальних операторів, які визначають теплофізичні процеси; аксіома неперервності в часі, що дає можливість розглядати динамічні процеси, а також можливість виводу визначальних диференціальних рівнянь балансу системи; аксіома рівноваги потенціалів, що дає можливість описати фізичні процеси на основі феноменологічних законів. Завдяки такому підходу можливо описати будь-який макроскопічний фізичний процес, що відбувається в неперервному середовищі, через: 1) визначення польової величини (потенціалу), що досліджується; 2) визначення залежності потоку цієї величини на основі лінійного феноменологічного закону чи ефекту; 3) визначення можливих змін потоку цієї величини всередині об'єкту моделювання та запису визначального диференціального рівняння з допомогою використання залежності між об'ємним та поверхневим інтегруванням (теорема про дивергенцію). Для подальших досліджень необхідно поставити крайову задачу визначенням крайових умов. При цьому, у випадку розгляду гетерогенних середовищ, якими є композиційні матеріали, особливу увагу слід приділити визначенню крайових умов четвертого роду, а для дослідження мультифізичних процесів – визначенню внутрішніх джерел зміни густини потенціалу.

2.3 Чисельні методи наближеного розв'язку фізико-математичних задач

Математичні моделі на мікро- (компонентному) рівні проектування для більшості фізичних процесів описуються диференціальними рівняннями з частинними похідними. Розв'язки рівнянь шукаються наближено, з використанням дискретних моделей. Для їх побудови, найбільшого поширення набули чисельні проекційно-сіткові методи. Вони передбачають побудову в області, де вирішується задача, розрахункової сітки, тобто дискретизацію області

на дрібні фрагменти – елементи певної простої форми.

Метод скінченних різниць є історично першим сітковим чисельним методом розв'язку ДРЧП. Він базується на заміні похідних диференціальних рівнянь різницевиими схемами на основі їх наближеного розкладу в ряд Тейлора. Для цього використовується розбиття області сіткою. Метод придатний для розв'язування задач з тілами простої форми, диференціальне рівняння яких описуються лінійними, обмеженими, позитивно визначеними, симетричними диференціальними операторами. Для більш складних задач використання методу є значно ускладненим, або взагалі неможливим.

Для розв'язку останніх було об'єднано універсальні варіаційні принципи з сітковими чисельними методами наближеного розв'язку ДРЧП [108]. Це породило клас проекційно-сіткових методів, що отримали загальну назву методи зважених нев'язок (МЗН) [99, 102, 107]. Основна ідея проекційних методів полягає в побудові апроксимації, як проекції точного розв'язку в функціональний простір, утворений деякими базисними, переважно поліноміальними функціями.

Формально, деякий лінійний оператор \mathcal{P} , що відображає весь Гільбертовий простір \mathcal{H} на підпростір $S \subset \mathcal{H}$, називається проекцією, якщо він відображає елементи S самі в себе, тобто [101, 108, 115]:

$$\forall v \in S: \mathcal{P}(v) = v. \quad (2.52)$$

Проекція \mathcal{P} називається ортогональною, якщо:

$$(\forall u \in \mathcal{H}) \wedge (\forall v \in S): \langle u - \mathcal{P}(u), v \rangle = 0, \quad (2.53)$$

де оператор \langle , \rangle є визначеною в просторі \mathcal{H} операцією скалярного добутку, що зазвичай записується як:

$$\langle u(\mathbf{r}), v(\mathbf{r}) \rangle \equiv \int_{\Omega} u(\mathbf{r})v(\mathbf{r})d\Omega. \quad (2.54)$$

У будь-якому проекційному методі наближеного розв'язку ДРЧП, кожному розв'язку $u \in \mathcal{H}$ ставиться у відповідність єдиний елемент проекції $\tilde{u} \in S \subset \mathcal{H}$. Апроксимація є найкращою, якщо наближений розв'язок \tilde{u} є таким, що похибка $\|u - \tilde{u}\|_{\mathcal{H}}$ буде мінімальною. Доведено [101], що ортогональна проекція

Гільбертового простору \mathcal{H} на підпростір S є єдиною, а будь-яка відповідна норма $\|u - \mathcal{P}(u)\|_{\mathcal{H}}$ є мінімальною відстанню від u до проєкції \tilde{u} .

Визначаючи системи базисних функцій кусково, тобто локально, в межах елемента простої форми, з'являється можливість будувати інтерполяцію точних розв'язків з використанням простих, переважно лінійних базисних функцій. Звідки, дотримуючись максимальної простоти сіткових методів, з'являється можливість розв'язувати складні задачі, для розв'язку яких необхідно застосовувати варіаційні принципи, чи навіть задачі, де формулювання варіаційних принципів є неможливим [99, 102, 104], наприклад, коли оператор рівняння є несиметричним чи недодатно визначеним [108, 114, 124, 125].

Формально, методи зважених нев'язок можна описати наступним чином: нехай в деякій області Ω , з границями Γ , задано диференціальне рівняння:

$$\mathcal{L}(u(\mathbf{r}, \tau)) = 0, \quad (2.55)$$

яке необхідно розв'язати при початкових умовах $\mathcal{T}(u(\mathbf{r}, \tau))\big|_{\tau=\tau_0} = 0$ і крайових умовах $\mathcal{I}(u(\mathbf{r}, \tau))\big|_{\Gamma} = 0$. Припускають, що невідома функція може бути достатньо точно апроксимована з допомогою наближеного розв'язку виду:

$$u(\mathbf{r}, \tau) \approx \tilde{u}(\mathbf{r}, \tau) = u_0(\mathbf{r}, \tau) + \sum_{j=1}^M a_j(\tau) \varphi_j(\mathbf{r}), \quad (2.56)$$

де: $\varphi_j(\mathbf{r})$ – відомі аналітичні, лінійно незалежні, базисні функції, що прийнято називати пробними, $a_j(\tau)$ – коефіцієнти, що необхідно знайти. Не вдаючись в деталі, нев'язкою R (residual) називають різницю правих частин, що утворюється між апроксимаційним та оригінальним рівняннями. Якщо підставити в операторний вираз замість точного розв'язку його апроксимацію, то в загальному випадку, отримаємо відмінні від нуля нев'язки:

$$\mathcal{L}(\tilde{u}(\mathbf{r}, \tau)) = R^{\Omega}(\mathbf{r}, \tau), \quad \mathcal{T}(\tilde{u}(\mathbf{r}, \tau))\big|_{\tau=\tau_0} = R^{\mathcal{T}}(\mathbf{r}, \tau), \quad \mathcal{I}(\tilde{u}(\mathbf{r}, \tau))\big|_{\Gamma} = R^{\Gamma}(\mathbf{r}, \tau). \quad (2.57)$$

Основна відмінність методів зважених нев'язок, від інших проєкційних методів, полягає у введенні, так званих, вагових функцій $\omega_i(\mathbf{r})$, що прийнято називати повірочними, за допомогою яких, при збільшенні кількості пробних

функцій, прямує до нуля нев'язка між точним і апроксимованим розв'язком задачі. Щоб знайти значення коефіцієнтів $a_j(\tau)$, потрібно поставити умову ортогональності нев'язок до обраного базису, тобто розв'язати систему рівнянь:

$$\langle R^\Omega(\mathbf{r}), \omega_i^\Omega(\mathbf{r}) \rangle + \langle R^\Gamma(\mathbf{r}), \omega_i^\Gamma(\mathbf{r}) \rangle + \langle R^T(\mathbf{r}), \omega_i^T(\mathbf{r}) \rangle = 0, \quad i=1, 2, \dots, M. \quad (2.58)$$

Існує три варіанти побудови наближеного розв'язку $\tilde{u}(\mathbf{r}, \tau)$:

- диференціальне рівняння задовольняється точно, тобто $R^\Omega(\mathbf{r}, \tau) = 0$ – такі методи відносяться до підкласу граничних методів, що є основою методу граничних елементів [99, 102], основним недоліком якого є необхідність використання функцій, що відповідають розв'язку вихідного рівняння, а його побудова можливо далеко не для всіх випадків.
- крайові умови задовольняються точно, тобто $R^\Gamma(\mathbf{r}, \tau) = 0$ – такі методи відносяться до підкласу внутрішніх методів, що зазвичай застосовуються тільки в тривіальних випадках.
- ні диференціальне рівняння, ні крайові умови не задовольняються точно – такі методи відносяться до підкласу змішаних методів, на основі яких виводяться слабкі форми рівнянь та метод скінченних елементів.

Розглянемо стаціонарні задачі, для яких нев'язка за початковими умовами дорівнює нулеві. У такому випадку систему рівнянь (2.58) можна звести до матричної форми:

$$[\mathbf{K}]\{\mathbf{a}\} = \{\mathbf{f}\}, \quad (2.59)$$

де: вектор $\{\mathbf{a}\}$ містить невідомі коефіцієнти a_j . Історично, починаючи від задач теорії пружності, матрицю $[\mathbf{K}]$ прийнято називати матрицею жорсткості, а вектор $\{\mathbf{f}\}$ – вектором навантажень, хоча назва та позначення не принципові і можуть відрізнятися в кожній окремій задачі, залежно від фізичного змісту, що в них закладається. Якщо оператори \mathcal{L} та \mathcal{I} є неоднорідними, тобто додатково описують деякі внутрішні джерела Q та густину потоку q , тоді при використанні змішаних методів елементи матричної системи записуються як:

$$\int_{\Omega} R^{\Omega}(\mathbf{r})\omega_i^{\Omega}(\mathbf{r})d\Omega = \int_{\Omega} \omega_i^{\Omega}(\mathbf{r}) \left[\sum_{j=1}^M a_j \mathcal{L}(\varphi_j(\mathbf{r})) - Q \right] d\Omega, \quad (2.60)$$

$$\int_{\Gamma} R^{\Gamma}(\mathbf{r})\omega_i^{\Gamma}(\mathbf{r})d\Gamma = \int_{\Gamma} \omega_i^{\Gamma}(\mathbf{r}) \left[\sum_{j=1}^M a_j \mathcal{L}(\varphi_j(\mathbf{r})) - q \right] d\Gamma,$$

звідки:

$$[\mathbf{K}]_{i,j} = \int_{\Omega} \omega_i^{\Omega}(\mathbf{r})\mathcal{L}(\varphi_j(\mathbf{r}))d\Omega + \int_{\Gamma} \omega_i^{\Gamma}(\mathbf{r})\mathcal{L}(\varphi_j(\mathbf{r}))d\Gamma, \quad 1 \leq i, j \leq M, \quad (2.61)$$

$$[\mathbf{f}]_i = \int_{\Omega} \omega_i^{\Omega}(\mathbf{r})Qd\Omega + \int_{\Gamma} \omega_i^{\Gamma}(\mathbf{r})qd\Gamma, \quad 1 \leq i \leq M.$$

Процес апроксимації в змішаних методах зважених нев'язок, зазвичай є практично набагато складнішим, ніж у внутрішніх методах. Основною проблемою є необхідність обчислення інтегралів по границях області, які можуть мати складні криволінійні форми, чи інші ускладнюючі фактори. Для уникнення цієї проблеми використовується, так звана, слабка форма рівняння [103, 123], при якій вихідний диференціальний оператор розбивається на кілька операторів з меншим порядком диференціювання. Наприклад скалярний добуток нев'язки по області, зазвичай можна записати у вигляді:

$$\begin{aligned} \langle R(\mathbf{r}), \omega_i(\mathbf{r}) \rangle &= \int_{\Omega} \omega_i(\mathbf{r})\mathcal{L}(\varphi_j(\mathbf{r}))d\Omega = \\ &= \int_{\Omega} \mathcal{E}(\omega_i(\mathbf{r}))\mathcal{D}(\varphi_j(\mathbf{r}))d\Omega + \int_{\Gamma} \omega_i(\mathbf{r})\mathcal{Q}(\varphi_j(\mathbf{r}))d\Gamma, \end{aligned} \quad (2.62)$$

де: \mathcal{E} , \mathcal{D} та \mathcal{Q} – диференціальні оператори більш низького порядку, ніж вихідний диференціальний оператор \mathcal{L} . Після такого перетворення, при належним чином вибраних вагових функціях ω_i^{Ω} та ω_i^{Γ} , можна досягти виключення інтегралу, який містить пробну функцію чи її похідні вздовж границі області. Така процедура припустима тільки для крайових умов, що називають природними для даного рівняння (решту крайових умов називають головними) [102, 103]. Зазвичай такими є умови Неймана (2.49).

Існує кілька способів отримати рівняння з більш низьким порядком диференціювання і фактично перенести його частину з відповідного оператора на повірочну функцію. Наприклад з допомогою правила інтегрування за частинами

[120]:

$$\int_a^b u dv = uv \Big|_a^b - \int_a^b v du, \quad (2.63)$$

з подальшим застосуванням теореми Стокса чи її часткових випадків на відповідну кількість вимірів (тобто, теореми про дивергенцію) [99].

Описаний підхід розвинувся у найбільш поширений проекційно-сітковий чисельний метод – метод скінченних елементів (МСЕ). Алгоритм методу:

- в області вибирається скінченна кількість вузлів, значення неперервної величини в кожному з цих вузлів – це змінна, яку потрібно знайти;
- між вузлами вибираються підобласті (елементи), їх сукупність апроксимує форму області;
- неперервна величина інтерполюється на кожному елементі завдяки вузловим значенням.

У такому формулюванні, коефіцієнти пробного розв'язку (2.56) матимуть безпосередній фізичний зміст – вузлове значення шуканого потенціалу:

$$u(\mathbf{r}) \approx \tilde{u}(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^M u_j N_j(\mathbf{r}), \quad (2.64)$$

де: u_j – вузлове значення $u(\mathbf{r})$. Пробні функції $N_j(\mathbf{r})$, що також називають функціями форми, матимуть обов'язкову інтерполяційну природу та відповідну інтерполяційну похибку. Це означає, що кожна базисна функція $N_j(\mathbf{r})$ буде рівна одиниці у вузлі під номером j , та рівна нулеві в інших вузлах, але не між ними, тобто:

$$N_j(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{r} = \mathbf{r}_j, \\ 0, & \mathbf{r} = \mathbf{r}_i, \quad i \neq j. \end{cases} \quad (2.65)$$

Для кожного з елементів:

$$\sum_{j=1}^M N_j(\mathbf{r}) = 1, \quad \mathbf{r} \in \Omega_i. \quad (2.66)$$

Пробні функції є кусково-визначеними і відмінними від нуля тільки в деякій невеликій підобласті всієї області визначення задачі. Роль повірочних функцій

$\omega(\mathbf{r})$ виконують ці ж інтерполяційні функції $N(\mathbf{r})$. Головні крайові умови задачі задовольняються точно, через безпосереднє вказання значень відповідних граничних вузлів, тому доданок $u_0(\mathbf{r})$ з (2.56) рівний нулю.

Розіб'ємо Ω на P підобластей, що не перетинаються: $\Omega = \bigcup_{i=1}^P \Omega_i$. Межі кожної з підобластей позначимо як $\Gamma_{i,i'}$. Вхідній задачі поставимо у відповідність сукупність допоміжних крайових задач в підобластях, якщо такі необхідні:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(u_i(\mathbf{r})) = Q, \quad \mathbf{r} \in \Omega_i, \quad \mathcal{L}_{i,i'}(u_i(\mathbf{r}))\big|_{\Gamma_{i,i'}} = q \equiv \mathcal{L}_{i',i}(u_{i'}(\mathbf{r}))\big|_{\Gamma_{i',i}}, \\ i' \in \psi_i, \quad i = 1, 2, \dots, P, \end{aligned} \quad (2.67)$$

де: ψ_i – сукупність номерів підобластей $\Omega_{i'}$. На зовнішній границі Γ_i визначаються задані крайові умови вхідної задачі. Вважаємо що розв'язки вихідної задачі та (2.67) існують, єдині та співпадають. Топологічно у ролі кожної з підобластей Ω_i можна вибрати:

- симплекс елементи, у яких кількість вузлів на одиницю більша за розмірність задачі, що розв'язується і відповідні інтерполяційні функції є лінійними [116];
- комплекс і мультиплекс скінченні елементи, у яких кількість вузлів більша за одиницю від розмірності задачі і відповідні функції інтерполяції можуть бути поліномами вищих порядків [99];
- криволінійні скінченні елементи [99, 102].

За кількістю відповідних базисних функцій розрізняють [99, 104, 106]:

- субпараметричні елементи – кількість вузлів є меншою за кількість інтерполяційних функцій, сюди входять ієрархічні поліноми на симплекс елементах;
- ізопараметричні елементи – кількість вузлів співпадає з кількістю інтерполяційних функцій, сюди входять симплекс та комплекс елементи;
- суперпараметричні елементи – кількість вузлів є більшою за кількість інтерполяційних функцій.

Від вибору типу елементів залежить похибка інтерполяції шуканої величини в межах елемента, і як наслідок, в межах всієї області, тобто порядок збіжності скінченно-елементної моделі. Вибір поліномів високого порядку призводить до збільшення кількості та складності обчислень при інтегруванні. Тому, за основу розглядатимемо симплекс- і частково комплекс-елементи. Їх перевага полягає, по-перше, в простій і досконалій математичній базі для задач будь-якої розмірності, і як наслідок, по-друге, в наявності ефективних методів автоматичної побудови скінченно-елементних сіток для тіл практично будь-якої складності. Окремим пунктом сюди також можна приписати зв'язок математичної бази, та відповідні алгоритми, з методами геометричного моделювання, які відіграють не останню роль в системах моделювання та проектування.

Симплекс-елементи є частковим випадком комплекс-елементів. Наприклад, для одновимірного випадку, апроксимація \tilde{y} на елементі з $p+1$ вузлами, що не обов'язково розміщені рівномірно, буде зводитися до поліному степеня p . Вираз для кожної з базисних функцій такого елемента можна записати як:

$$N(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 x^2 + \alpha_3 x^3 + \dots + \alpha_p x^p. \quad (2.68)$$

Оскільки кожна з функцій форми повинна відповідати інтерполяційним умовам (2.65), (2.66), невідомі коефіцієнти α є розв'язками системи рівнянь:

$$\begin{aligned} x = X_1, \quad N_{i,j}(x) &= \alpha_0 + \alpha_1 X_1 + \alpha_2 X_1^2 + \alpha_3 X_1^3 + \dots + \alpha_p X_1^p = 0, \\ x = X_2, \quad N_{i,j}(x) &= \alpha_0 + \alpha_1 X_2 + \alpha_2 X_2^2 + \alpha_3 X_2^3 + \dots + \alpha_p X_2^p = 0, \\ &\dots \\ x = X_j, \quad N_{i,j}(x) &= \alpha_0 + \alpha_1 X_j + \alpha_2 X_j^2 + \alpha_3 X_j^3 + \dots + \alpha_p X_j^p = 1, \\ &\dots \\ x = X_{p+1}, \quad N_{i,j}(x) &= \alpha_0 + \alpha_1 X_{p+1} + \alpha_2 X_{p+1}^2 + \alpha_3 X_{p+1}^3 + \dots + \alpha_p X_{p+1}^p = 0. \end{aligned} \quad (2.69)$$

Враховуючи (2.64) та те, що:

$$\begin{aligned} \tilde{y}(x) &= \alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 x^2 + \alpha_3 x^3 + \dots + \alpha_p x^p = \\ &= [1 \quad x \quad x^2 \quad \dots \quad x^p] \{ \alpha_0 \quad \alpha_1 \quad \alpha_2 \quad \dots \quad \alpha_p \}^T, \end{aligned} \quad (2.70)$$

отримаємо вираз у матричній формі:

$$\begin{aligned}
[\mathbf{N}] &= [\mathbf{P}][\mathbf{C}]^{-1}, \\
[\mathbf{P}] &= [1 \quad x \quad x^2 \quad \dots \quad x^p], \\
[\mathbf{C}] &= \begin{bmatrix} 1 & X_1 & X_1^2 & \dots & X_1^p \\ 1 & X_2 & X_2^2 & \dots & X_2^p \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & X_{p+1} & X_{p+1}^2 & \dots & X_{p+1}^p \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.71}$$

Розв'язок цієї системи приведе до виразу:

$$\begin{aligned}
N_{i,j}(x) &= \Lambda_j^p(x) = \prod_{k=1, k \neq j}^{p+1} \frac{x - X_k}{X_j - X_k} = \\
&= \frac{(x - X_1)(x - X_2) \dots (x - X_{j-1})(x - X_{j+1}) \dots (x - X_{p+1})}{(X_j - X_1)(X_j - X_2) \dots (X_j - X_{j-1})(X_j - X_{j+1}) \dots (X_j - X_{p+1})},
\end{aligned} \tag{2.72}$$

що також відомий як фундаментальний поліном Лагранжа степеня p , тому такі елементи називають Лагранжевими елементами [99, 106].

Нехай симплекс $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ заданий вузлами з радіус-векторами \mathbf{r}_i , $i=1,2,\dots,M$, $M=N+1$. Барицентричними координатами деякої точки, що задана радіус-вектором \mathbf{r} є набір коефіцієнтів L_1, L_2, \dots, L_M , таких що [116]:

$$L_1 + L_2 + \dots + L_M = 1, \quad \mathbf{r} = L_1 \mathbf{r}_1 + L_2 \mathbf{r}_2 + \dots + L_M \mathbf{r}_M, \tag{2.73}$$

або у матричній формі:

$$\begin{Bmatrix} 1 \\ x \\ y \\ \vdots \\ z \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ X_1 & X_2 & \dots & X_M \\ Y_1 & Y_2 & \dots & Y_M \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Z_1 & Z_2 & \dots & Z_M \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} L_1 \\ L_2 \\ \vdots \\ L_N \\ L_M \end{Bmatrix}. \tag{2.74}$$

Підставивши в останній вираз (2.71) отримаємо [124]:

$$\begin{aligned}
[\mathbf{P}]^T &= [\mathbf{C}]^T [\mathbf{L}]^T, \quad [\mathbf{L}]^T = ([\mathbf{C}]^T)^{-1} [\mathbf{P}]^T, \\
[\mathbf{L}]^T &= ([\mathbf{C}]^{-1})^T [\mathbf{P}]^T, \quad [\mathbf{L}] = [\mathbf{P}][\mathbf{C}]^{-1} = [\mathbf{N}].
\end{aligned} \tag{2.75}$$

Тобто, при використанні симплекс-елементів функції їх форми є їх барицентричними координатами.

У загальному випадку, для Лагранжевого комплекс елемента довільного порядку, наприклад у двовимірному випадку, вираз записується як:

$$N_j(x, y) = N_{abc}(L_1, L_2, L_3) = \Lambda_a^p(L_1) \Lambda_b^p(L_2) \Lambda_c^p(L_3), \tag{2.76}$$

де: a, b, c – локальні індекси вершин відносно кожної барицентричної координати. Зазначимо, що $0 \leq a, b, c \leq p$ та в кожному вузлі $a + b + c = p$. Через використання барицентричних координат кожен з Лагранжевих поліномів записується як:

$$\Lambda_j^p(L_i) \begin{cases} = \prod_{k=1}^j \frac{pL_i - k + 1}{k}, & j \geq 1, \\ = 1, & j = 0. \end{cases} \quad (2.77)$$

Графічно, функції форми комплекс-елементів дуже зручно зображати за допомогою трикутника Паскаля, звідки одразу можна побудувати загальні матричні вирази для функцій форм (Рис. 2.4). З рисунку видно іншу перевагу комплекс-елементів, що побудовані на симплексах – для інтерполяції використовуються повні поліноми необхідного порядку без надлишкових членів.

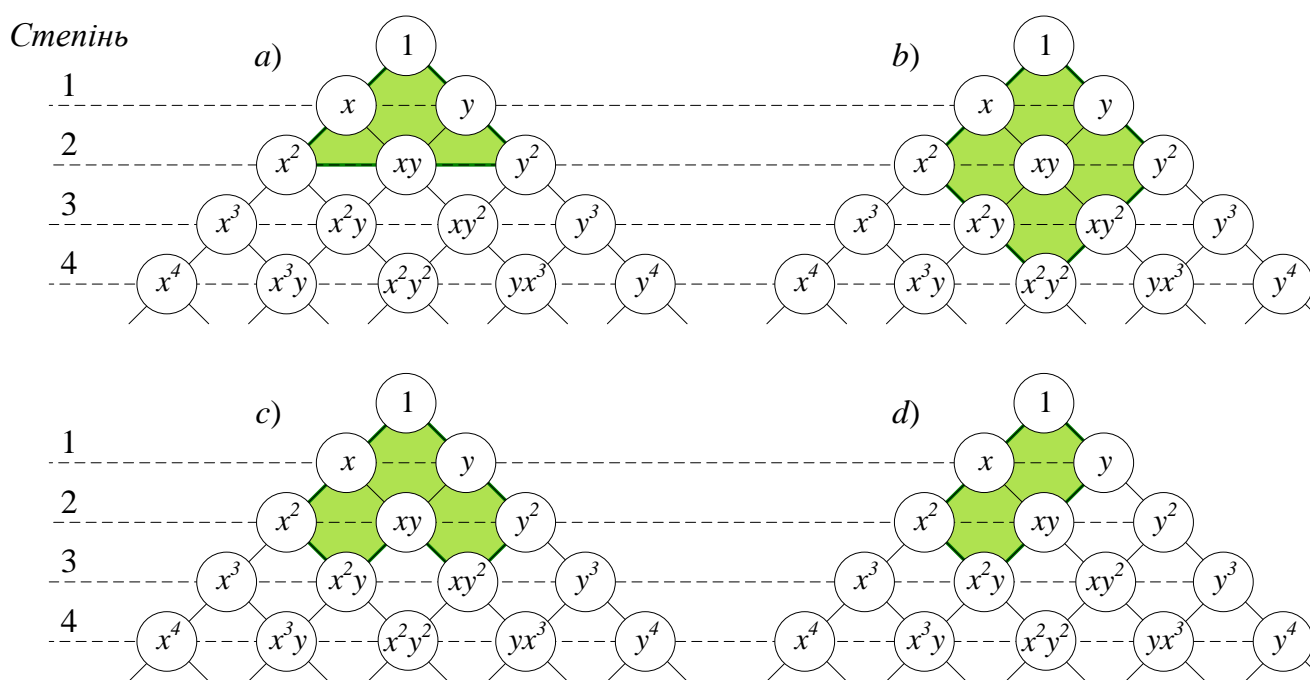


Рис. 2.4 Трикутники Паскаля, де зафарбовані елементи утворюють:

- (a) повний квадратичний поліном,
- (b) квадратичний Лагранжевий поліном,
- (c) квадратичний серендиповий поліном,
- (d) непропорційний поліном – лінійний по y та квадратичний по x

Знайдемо перші похідні $\partial\tilde{u}/\partial x$ та $\partial\tilde{u}/\partial y$ наближеного розкладу. Для цього використаємо матрицю Якобі при $L_3 = 1 - L_1 - L_2$:

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial N_{abc}}{\partial L_1} \\ \frac{\partial N_{abc}}{\partial L_2} \end{Bmatrix} = [\mathbf{Jac}_{\mathbf{L}\mathbf{r}}] \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_{abc}}{\partial x} \\ \frac{\partial N_{abc}}{\partial y} \end{Bmatrix}, \quad \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_{abc}}{\partial x} \\ \frac{\partial N_{abc}}{\partial y} \end{Bmatrix} = [\mathbf{Jac}_{\mathbf{L}\mathbf{r}}]^{-1} \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_{abc}}{\partial L_1} \\ \frac{\partial N_{abc}}{\partial L_2} \end{Bmatrix}, \quad (2.78)$$

яка рівна:

$$[\mathbf{Jac}_{\mathbf{L}\mathbf{r}}] = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial L_1} & \frac{\partial y}{\partial L_1} \\ \frac{\partial x}{\partial L_2} & \frac{\partial y}{\partial L_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_1 - X_3 & Y_1 - Y_3 \\ X_2 - X_3 & Y_2 - Y_3 \end{bmatrix}. \quad (2.79)$$

Зауваживши, що:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_{abc}(L_1, L_2)}{\partial L_1} &= \frac{\partial N_{abc}(L_1, L_2, L_3)}{\partial L_1} \frac{\partial L_1}{\partial L_1} + \frac{\partial N_{abc}(L_1, L_2, L_3)}{\partial L_2} \frac{\partial L_2}{\partial L_1} + \frac{\partial N_{abc}(L_1, L_2, L_3)}{\partial L_3} \frac{\partial L_3}{\partial L_1}, \\ \frac{\partial L_1}{\partial L_1} &= 1, \quad \frac{\partial L_2}{\partial L_1} = 0, \quad \frac{\partial L_3}{\partial L_1} = \frac{\partial(1 - L_1 - L_2)}{\partial L_1} = -1, \end{aligned} \quad (2.80)$$

отримаємо:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_{abc}(L_1, L_2)}{\partial L_1} &= \frac{\partial N_{abc}(L_1, L_2, L_3)}{\partial L_1} - \frac{\partial N_{abc}(L_1, L_2, L_3)}{\partial L_3}, \\ \frac{\partial N_{abc}(L_1, L_2)}{\partial L_2} &= \frac{\partial N_{abc}(L_1, L_2, L_3)}{\partial L_2} - \frac{\partial N_{abc}(L_1, L_2, L_3)}{\partial L_3}. \end{aligned} \quad (2.81)$$

Для симплекс-елементів перші похідні, мають безпосередній геометричний зміст – вони є проєкціями сторін елемента на координатні осі (Рис. 2.5) і обчислюються як матриця $[\mathbf{C}]^{-1}$ без першого рядка.

Метод скінченних елементів, як і всі методи зважених нев'язок, може бути ефективно застосований для розв'язку систем диференціальних рівнянь, що виникають, наприклад при розгляді задач механіки чи задач, що описують мультифізичні процеси. У постановці таких задач, шукана польова величина виступає в ролі не скалярного, а векторного (чи тензорного) потенціалу. Невідомий вектор $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ в деякій області Ω з границею Γ задовольняє диференціальним рівнянням та крайовим умовам:

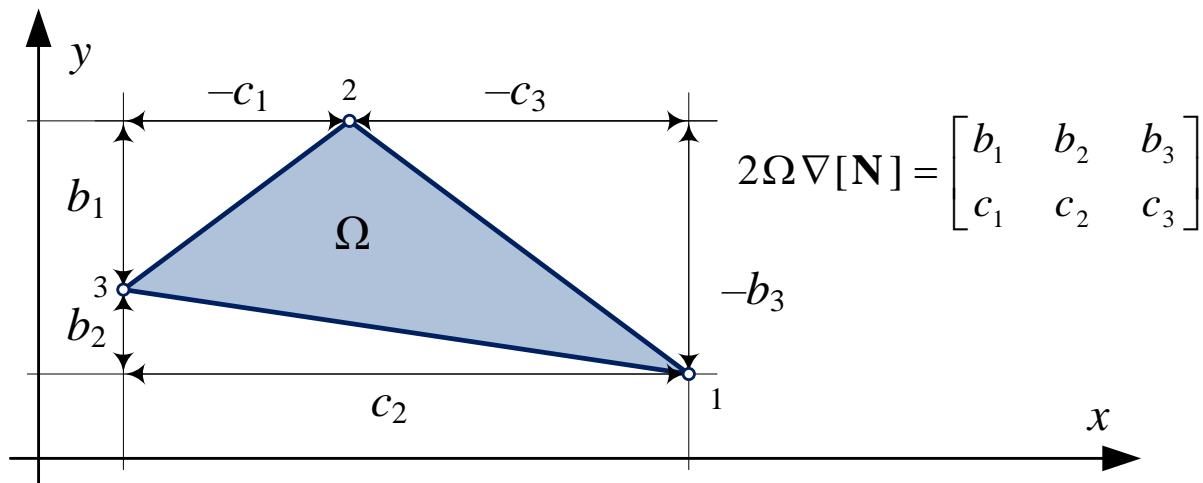


Рис. 2.5 Геометричний зміст матриці градієнтів $[\mathcal{L}][\mathbf{N}]$ для двовимірного симплекс-елементу

$$\mathbf{A}(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \mathcal{A}_1(\mathbf{u}(\mathbf{r})) \\ \mathcal{A}_2(\mathbf{u}(\mathbf{r})) \\ \vdots \\ \mathcal{A}_D(\mathbf{u}(\mathbf{r})) \end{bmatrix}_{\Omega} = 0, \quad \mathbf{B}(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \mathcal{B}_1(\mathbf{u}(\mathbf{r})) \\ \mathcal{B}_2(\mathbf{u}(\mathbf{r})) \\ \vdots \\ \mathcal{B}_D(\mathbf{u}(\mathbf{r})) \end{bmatrix}_{\Gamma} = 0. \quad (2.82)$$

Для кожної компоненти шуканого векторного потенціалу $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ використовується розклад по базисним функціям:

$$\begin{aligned} u_{i,1}(\mathbf{r}) &\approx \tilde{u}_{i,1}(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^M u_{i,j,1} N_{i,j}(\mathbf{r}), \\ u_{i,2}(\mathbf{r}) &\approx \tilde{u}_{i,2}(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^M u_{i,j,2} N_{i,j}(\mathbf{r}), \\ &\dots \\ u_{i,D}(\mathbf{r}) &\approx \tilde{u}_{i,D}(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^M u_{i,j,D} N_{i,j}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.83)$$

Щоб отримати вираз у матричній формі, розглянемо двовимірний симплекс-елемент, що апроксимує векторне поле, кожна точка якого містить дві шукані змінні, наприклад переміщення по горизонтальній і вертикальній осях:

$$\begin{aligned} u_{i,x}(\mathbf{r}) &\approx \tilde{u}_{i,x}(\mathbf{r}) = u_{i,1,x} N_{i,1}(\mathbf{r}) + u_{i,2,x} N_{i,2}(\mathbf{r}) + u_{i,3,x} N_{i,3}(\mathbf{r}), \\ u_{i,y}(\mathbf{r}) &\approx \tilde{u}_{i,y}(\mathbf{r}) = u_{i,1,y} N_{i,1}(\mathbf{r}) + u_{i,2,y} N_{i,2}(\mathbf{r}) + u_{i,3,y} N_{i,3}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.84)$$

Об'єднаємо їх як:

$$\tilde{\mathbf{u}}_i(\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} u_{i,1,x}N_{i,1}(\mathbf{r}) + u_{i,1,y}0 + u_{i,2,x}N_{i,2}(\mathbf{r}) + u_{i,2,y}0 + u_{i,3,x}N_{i,3}(\mathbf{r}) + u_{i,3,y}0 \\ u_{i,1,x}0 + u_{i,1,y}N_{i,1}(\mathbf{r}) + u_{i,2,x}0 + u_{i,2,y}N_{i,2}(\mathbf{r}) + u_{i,3,x}0 + u_{i,3,y}N_{i,3}(\mathbf{r}) \end{bmatrix}, \quad (2.85)$$

або:

$$\tilde{\mathbf{u}}_i(\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} N_{i,1}(\mathbf{r}) & 0 & N_{i,2}(\mathbf{r}) & 0 & N_{i,3}(\mathbf{r}) & 0 \\ 0 & N_{i,1}(\mathbf{r}) & 0 & N_{i,2}(\mathbf{r}) & 0 & N_{i,3}(\mathbf{r}) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_{i,1,x} \\ u_{i,1,y} \\ u_{i,2,x} \\ u_{i,2,y} \\ u_{i,3,x} \\ u_{i,3,y} \end{Bmatrix}. \quad (2.86)$$

Застосовуючи такий підхід для елементів довільної розмірності та довільної кількості вузлів, отримаємо загальну матричну форму:

$$\mathbf{u}_i(\mathbf{r}) \approx \tilde{\mathbf{u}}_i(\mathbf{r}) = [[\mathbf{N}_{i,1}(\mathbf{r}) \quad \mathbf{N}_{i,2}(\mathbf{r}) \quad \dots \quad \mathbf{N}_{i,D}(\mathbf{r})]] \{\mathbf{u}\}_i = [\mathbf{N}]_i \{\mathbf{u}\}_i,$$

$$[\mathbf{N}_{i,k}(\mathbf{r})] = \begin{bmatrix} N_{i,k}(\mathbf{r}) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & N_{i,k}(\mathbf{r}) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & N_{i,k}(\mathbf{r}) \end{bmatrix}, \{\mathbf{u}\}_i = \begin{Bmatrix} [u_{i,1,x}, u_{i,1,y}, \dots, u_{i,1,D}] \\ [u_{i,2,x}, u_{i,2,y}, \dots, u_{i,2,D}] \\ \dots \\ [u_{i,M,x}, u_{i,M,y}, \dots, u_{i,M,D}] \end{Bmatrix}. \quad (2.87)$$

Спираючись на те, що $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{r}) = [\mathbf{P}][\mathbf{C}]^{-1}\{\mathbf{u}\}$, для симплекс елементів можна побудувати вираз для функцій форми $N(\mathbf{r})$, де матриця координат симплексу $[\mathbf{C}]$ та матриця поліному $[\mathbf{P}]$ тепер розширюються, зокрема:

$$[\mathbf{P}] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & x & 0 & \dots & 0 & y & 0 & \dots & 0 & \dots & z & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & x & \dots & 0 & 0 & y & \dots & 0 & \dots & 0 & z & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 & \dots & x & 0 & 0 & \dots & y & \dots & 0 & 0 & \dots & z \end{bmatrix}. \quad (2.88)$$

Будуючи проекцію, отримаємо нову систему:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} N_{i,1}^{\Omega}(\mathbf{r}) \mathcal{A}_1(\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{r})) d\Omega + \int_{\Gamma} N_{i,1}^{\Gamma}(\mathbf{r}) \mathcal{B}_1(\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{r})) d\Gamma &= 0, \\ \int_{\Omega} N_{i,2}^{\Omega}(\mathbf{r}) \mathcal{A}_2(\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{r})) d\Omega + \int_{\Gamma} N_{i,2}^{\Gamma}(\mathbf{r}) \mathcal{B}_2(\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{r})) d\Gamma &= 0, \\ &\dots \\ \int_{\Omega} N_{i,D}^{\Omega}(\mathbf{r}) \mathcal{A}_D(\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{r})) d\Omega + \int_{\Gamma} N_{i,D}^{\Gamma}(\mathbf{r}) \mathcal{B}_D(\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{r})) d\Gamma &= 0. \end{aligned} \quad (2.89)$$

Якщо ввести діагональні матриці вагових функцій $[\mathbf{N}_i^{\Omega}(\mathbf{r})]$ та $[\mathbf{N}_i^{\Gamma}(\mathbf{r})]$, де:

$$[\mathbf{N}]_i^\Omega = \begin{bmatrix} N_{i,1}^\Omega(\mathbf{r}) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & N_{i,2}^\Omega(\mathbf{r}) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & N_{i,D}^\Omega(\mathbf{r}) \end{bmatrix}, [\mathbf{N}]_i^\Gamma = \begin{bmatrix} N_{i,1}^\Gamma(\mathbf{r}) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & N_{i,2}^\Gamma(\mathbf{r}) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & N_{i,D}^\Gamma(\mathbf{r}) \end{bmatrix}, \quad (2.90)$$

то систему (2.89) можна записати в компактній формі:

$$\int_{\Omega} [\mathbf{N}]_i^\Omega \mathbf{A}(\tilde{\mathbf{u}}) d\Omega + \int_{\Gamma} [\mathbf{N}]_i^\Gamma \mathbf{B}(\tilde{\mathbf{u}}) d\Gamma = 0, \quad (2.91)$$

розв'язавши яку, отримаємо апроксимацію шуканого векторного потенціалу $\mathbf{u}(\mathbf{r})$.

Якщо для задачі можна вивести рівняння в слабкій формі, а для системи рівнянь записати загальний оператор в матричній формі $[\mathcal{L}]$, то локальну матрицю жорсткості та локальний вектор навантаження можна записати у вже звичній формі як $([\mathbf{N}]_i^\Omega = -[\mathbf{N}]_i^\Gamma)$:

$$[\mathbf{K}]_i = \int_{\Omega_i} ([\mathcal{L}][\mathbf{N}]_i)^\top [\mathbf{D}]_i ([\mathcal{L}][\mathbf{N}]_i) d\Omega + \int_{\Omega_i} [\mathbf{N}]_i^\top Q_i d\Omega \quad \{\mathbf{f}\}_i = \int_{\Gamma_i} [\mathbf{N}]_i^\top q_i d\Gamma. \quad (2.92)$$

Не знаючи точного розв'язку крайової задачі, неможливо в загальному випадку обчислити точність отриманого апроксимованого розв'язку [106]. Тому побудуємо апостеріорну оцінку точності скінченно-елементної моделі на основі аналізу характеристик її збіжності.

Припустимо, необхідно розв'язати операторне рівняння:

$$\mathcal{L}(u) = f, \quad (2.93)$$

де: оператор \mathcal{L} – є симетричним, тобто для довільних елементів одного і того ж простору u та v :

$$\langle \mathcal{L}(u), v \rangle = \langle u, \mathcal{L}(v) \rangle = \langle u, v \rangle_{\mathcal{L}}; \quad (2.94)$$

позитивно визначений та обмежений, тобто для довільного елемента:

$$0 < \langle u, u \rangle_{\mathcal{L}} < \infty. \quad (2.95)$$

Можна показати [103, 123], що рівняння (2.93) має єдиний розв'язок (теорема про існування та єдиність розв'язку за Адамаром). Задача пошуку розв'язку цього рівняння може бути замінена задачею знаходження функції, що мінімізує функціонал, який є квадратичною формою [108, 114, 124, 125]:

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}(u) &= \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} u \mathcal{L}(u) + fu \right) d\Omega - \int_{\Gamma} u \ell(u) d\Gamma \rightarrow \text{extr} = \\
&= \frac{1}{2} \langle \mathcal{L}(u), u \rangle^{\Omega} + \langle u, Q \rangle^{\Omega} - \langle u, q \rangle^{\Gamma} = \\
&= \frac{1}{2} \{\mathbf{u}\}^T [\mathbf{K}] \{\mathbf{u}\} - \{\mathbf{u}\}^T \{\mathbf{f}\}, \\
\frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{u})}{\partial \{\mathbf{u}\}^T} &= [\mathbf{K}] \{\mathbf{u}\} - \{\mathbf{f}\} = 0.
\end{aligned} \tag{2.96}$$

Очевидно, коли оператор \mathcal{L} , і як наслідок, також матриця жорсткості $[\mathbf{K}]$, є симетричними і позитивно визначеними, функціонал мінімізується розв'язком (2.61) – див. спрощений випадок, зображений на *Рис. 2.6*. Іншими словами, апроксимація є ортогональною проекцією точного розв'язку на апроксимуючий підпростір, і таким чином, є найкращою апроксимацією:

$$\begin{aligned}
\langle u - \tilde{u}, u - \tilde{u} \rangle_{\mathcal{L}} &= \min_{v \in S} \langle u - v, u - v \rangle_{\mathcal{L}}, \\
\forall v \in S: \langle u - \tilde{u}, v \rangle_{\mathcal{L}} &= 0, \quad \langle \tilde{u}, v \rangle_{\mathcal{L}} = \langle f, v \rangle.
\end{aligned} \tag{2.97}$$

На основі нерівності Шварца (нерівності Коші-Буняковського-Шварца), що зв'язує норму та скалярний добуток:

$$|\langle u, v \rangle_{\mathcal{L}}| \leq \|u\|_{\mathcal{L}} \|v\|_{\mathcal{L}}, \tag{2.98}$$

можна показати [100, 101, 103, 104], що для будь-якого $v \in S$:

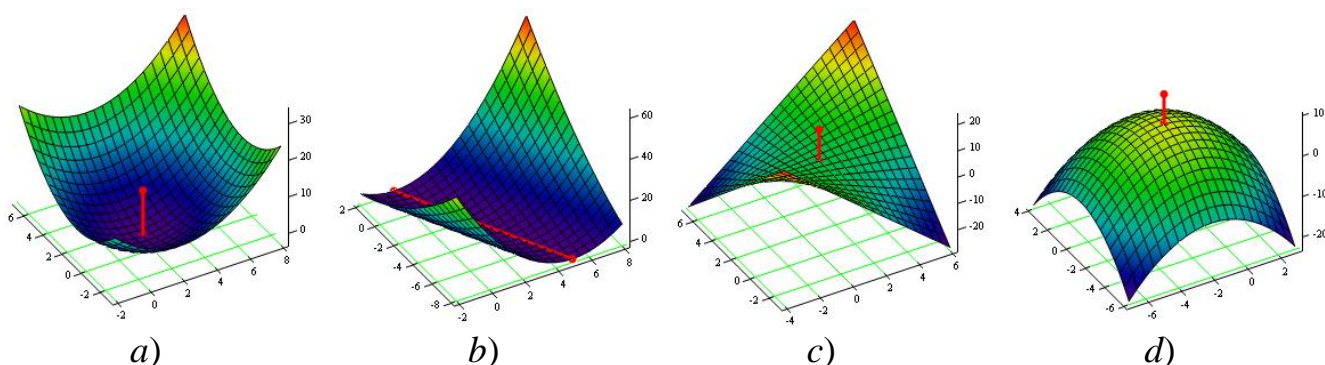


Рис. 2.6 Приклад квадратичних форм для яких матриця (оператор) є симетрична та: а) позитивно визначена – існує точка глобального мінімуму; б) напіввизначена – безліч екстремумів формують "жолоб";
 в) невизначена – утворюється сідельна точка;
 г) негативно визначена – існує точка глобального максимуму

$$\begin{aligned}
\|u - \tilde{u}\|_{\mathcal{L}}^2 &= \langle u - \tilde{u}, u - \tilde{u} \rangle_{\mathcal{L}} = \\
&= \langle u - \tilde{u}, u - v \rangle_{\mathcal{L}} + \langle u - \tilde{u}, u - \tilde{u} \rangle_{\mathcal{L}} = \\
&= \langle u - \tilde{u}, u - v \rangle_{\mathcal{L}}, \\
&\leq \|u - \tilde{u}\|_{\mathcal{L}} \|u - v\|_{\mathcal{L}}.
\end{aligned} \tag{2.99}$$

Якщо вираз $\|u - \tilde{u}\|_{\mathcal{L}} \neq 0$, на нього можна поділити і отримати:

$$\|u - \tilde{u}\|_{\mathcal{L}} \leq \|u - v\|_{\mathcal{L}} \Leftrightarrow \|u - \tilde{u}\|_{\mathcal{L}} = \inf_{v \in S} \|u - v\|_{\mathcal{L}}, \tag{2.100}$$

де, $\inf(\cdot)$ – найбільша нижня границя. При збільшенні кількості базисних функцій апроксимуючий підпростір розширюється і в границі прямує до повного Гільбертового простору. Для будь-якого проекційного методу, що буде апроксимацію в M - повному підпросторі, починаючи з деякого допустимого M , за умови, що для всіх елементів функціонального простору їх Соболева норма менша або рівна Соболевій нормі їх проекцій (тобто, проектуємо у підпростір, а не з нього), справедливо [103, 107]:

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \|\mathcal{L}(\tilde{u}) - f\|_{\mathcal{H}(\Omega)} \rightarrow \varepsilon, \tag{2.101}$$

де: ε – довільно вибрана мала додатня стала. Якщо оператор \mathcal{L} є обмежений, то як наслідок, також справедливо:

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \|u - \tilde{u}\|_{\mathcal{H}(\Omega)} \rightarrow \varepsilon, \tag{2.102}$$

звідки, основними вимогами до базисних функцій, що використовуються для побудови апроксимації є:

- їх послідовність повинна бути повною;
- всі функції повинні бути лінійно незалежними.

За допомогою відомої теореми Стоуна-Вейерштрасса [98, 99, 102, 106] можна довести, що поліноміальні ряди є повними. У загальному випадку такий ряд може дати точний розв'язок тільки тоді, коли він має безмежну степінь. На практиці можливо використовувати тільки скінченну кількість доданків, тому розв'язок завжди буде наближеним. Нехай диференціальний оператор \mathcal{L} має порядок $2p$, тобто шуканими значеннями є потенціал u та всі його похідні до $\partial^{2p}u/\partial\mathbf{r}^{2p}$ включно. Щоб апроксимувати цей розв'язок, необхідно використовувати поліном,

як мінімум порядку $2p$, якщо похідна порядку $2p$ відмінна від нуля, наприклад:

$$\begin{aligned} \tilde{u}(x) &= a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + \dots + a_{2p}x^{2p}, \\ \frac{d\tilde{u}(x)}{dx} &= a_1 + 2a_2x + 3a_3x^2 + \dots + 2pa_{2p}x^{2p-1}, \\ \frac{d^2\tilde{u}(x)}{dx^2} &= 2a_2x + 6a_3x^2 + \dots + 2p(2p-1)a_{2p}x^{2p-2}, \\ &\dots \\ \frac{d^{2p-1}\tilde{u}(x)}{dx^{2p-1}} &= (2p-1)!pa_{2p-1} + (2p)!a_{2p}x, \\ \frac{d^{2p}\tilde{u}(x)}{dx^{2p}} &= (2p)!a_{2p}. \end{aligned} \tag{2.103}$$

З останнього відношення видно, що обираючи для апроксимації поліноми степеня не нижчого $2p$, кожна з похідних починає прямувати до свого точного значення. При збільшенні степеня поліному, слід очікувати зменшення похибки апроксимованого розв'язку та збіжності його до точного розв'язку, навіть при наявності обчислювальної похибки [104]. Для задач, де визначені природні крайові умови, можна перенести половину порядку похідних з пробних функцій на повірочні. Тобто, для апроксимації задач, що визначаються диференціальними рівняннями в слабкій формі є допустимим використання поліномів порядку не нижчого від p , де $2p$ – порядок вихідного рівняння.

Розширимо наведені судження на проекційно-сіткові апроксимації, тобто покажемо збіжність апроксимацій, побудованих на основі кусково-визначених функцій. Для цього, необхідно виконати умову конформності множини цих функцій, тобто умову узгодженості скінченних елементів [99, 106]. Якщо p – порядок старших похідних диференціального рівняння у слабкій формі, то узгодженими будуть такі скінченні елементи, при переході через спільні границі яких є неперервними функції форми та їх частинні похідні до порядку $(p-1)$ включно. Це еквівалентно належності множини всіх функцій форми до $C^{p-1}(\Omega)$ класу гладкості, а також умова обмеженості норми Соболева (2.9) при $k=2$ та належності множини всіх функцій форми до апроксимуючого Гільбертового простору $S = \mathcal{H}^p(\Omega) \subset \mathcal{H}$.

Оскільки наближений розв'язок \tilde{u} тепер будується з допомогою множини кусково-визначених функцій, він обов'язково має інтерполяційну природу та відповідну інтерполяційну похибку $\|u - \tilde{u}\|_{\mathcal{H}}$. Інтерполяція полягає в тому, що наближений розв'язок повинен збігатися з точним у вузлах дискретизації, та апроксимуватися між вузлами. Можна показати [100], що для заданого набору вузлових значень $u_1, u_2, \dots, u_{M_\Omega}$ всієї області Ω , задача інтерполяції має єдиний розв'язок. Тобто, у підпросторі $S \subset \mathcal{H}$, тепер вже кусково-визначених функцій, існує єдиний інтерполянт \tilde{u}_I :

$$\tilde{u}_I(\mathbf{r}_i) = u(\mathbf{r}_i) = u_i, \quad i = 1, 2, \dots, M_\Omega. \quad (2.104)$$

Іншими словами, похибка інтерполяції в межах елемента залежить від його розміру та кількості, тобто порядку, функцій форми. У випадку поліноміальної інтерполяції, елемент деякого порядку k може точно та єдиним чином інтерполювати довільний поліном цього ж порядку. Узгодженість елементів дає змогу об'єднати такі інтерполяції по всій області Ω , та побудувати глобальний інтерполянт, також точний та єдиний для довільного поліному порядку k в цій області. Якщо на даних елементах необхідно побудувати інтерполяцію поліномів вищої степені, чи будь-якої іншої неперервно диференційованої функції, інтерполянт відрізнятиметься від точного розв'язку на величину залишкового члена, що локально залежить від розміру кожного з елементів помноженого на значення похідної порядку $(k + 1)$ точного розв'язку.

Враховуючи те, що дискретизація може бути нерегулярною за розмірами та розміщенням елементів, а також, може містити елементи різних типів, введемо деякий характерний розмір елементів h , який також часто називають діаметром елементів. Можна показати (оцінки Ніцше і Шульца) [98, 100, 104, 107], що для будь-якої $u \in \mathcal{H}^p(\Omega)$, похибка інтерполяції такими елементами виражається як:

$$\begin{aligned} \|u - \tilde{u}_I\|_{\mathcal{H}^s(\Omega)} &\leq Ch^{k+1-s} \|u\|_{\mathcal{H}^{k+1}(\Omega)}, \quad s \geq 2p - (k + 1), \\ \|u - \tilde{u}_I\|_{\mathcal{H}^s(\Omega)} &\leq Ch^{2(k+1-p)} \|u\|_{\mathcal{H}^{k+1}(\Omega)}, \quad s \leq 2p - (k + 1), \end{aligned} \quad (2.105)$$

де: k – порядок функцій форми елементів, s – порядок похідної, що

розглядається, тобто $s=0,1,\dots,k$. Константа C залежить від самого об'єкту моделювання і не залежить від характерних розмірів елементів. Порядок збіжності ніколи не перевищує $2(k+1-p)$ і майже в усіх реальних випадках рівний $k+1-s$.

У більш загальному випадку, де диференціальний оператор не обов'язково позитивно визначений та симетричний, можна показати [100, 101, 107], що апроксимація є "майже найкращою" у деякій нормі Соболева:

$$\|u - \tilde{u}\|_{\mathcal{H}^p(\Omega)} = C \inf_{v \in S} \|u - v\|_{\mathcal{H}^p(\Omega)}, \quad (2.106)$$

де: C – додатня константа. Основою для виразу (2.106) є теорема Лакса-Мільграма [100, 101], що доводить існування єдиного розв'язку для коректно поставленої задачі, навіть за умови, що оператор задачі хоча й обмежений, але не є обов'язково позитивно визначений і симетричний:

$$(\forall u, v \in \mathcal{H}) \wedge (f \in \mathcal{H}'): \langle u, v \rangle_{\mathcal{L}} = \langle f, v \rangle. \quad (2.107)$$

Якщо розв'язок шукається наближено, як ортогональна проекція у скінченновимірний апроксимуючий підпростір (а така проекція є єдиною), то справджується друга частина (2.97):

$$\forall v \in S: \langle u - \tilde{u}, v \rangle_{\mathcal{L}} = 0, \quad \langle \tilde{u}, v \rangle_{\mathcal{L}} = \langle f, v \rangle. \quad (2.108)$$

Розв'язок є стаціонарною точкою – мінімумом, максимумом або сідельною точкою. Оскільки функції належать Гільбертовому простору, знову, на основі нерівності Шварца (2.98) можна вивести вираз (2.106), де замість \mathcal{L}_2 -норм, фігурують норми Соболева (2.9).

Отже, для аналізу теплофізичних процесів, що відбуваються в композиційних матеріалах, використовуються чисельні методи наближеного розв'язку ДРЧП, які описують ці процеси. Найбільш розвиненим є метод скінченних елементів, що увібрав в себе всі переваги проекційних та сіткових чисельних методів. Алгоритм методу складається з таких етапів: в області вибирається скінченна кількість вузлів, значення неперервної величини в кожному з цих вузлів – це змінна яку потрібно знайти; між вузлами вибираються підобласті (елементи), їх сукупність апроксимує форму області; неперервна

величина інтерполюється на кожному елементі завдяки вузловим значенням. Для забезпечення збіжності модельних обчислень, що базуються на скінченних елементах, необхідно виконати умови лінійної незалежності, повноти, допустимості та узгодженості обраних в методі кускових інтерполяційних функцій. Це дасть змогу побудувати апостеріорні оцінки точності обчислень та підтвердити їх адекватність проведенням ряду чисельних експериментів.

2.4 Застосування методу аналогій та теорії подібності

Наближений розв'язок фізико-математичних задач в елементарних об'ємах композиційних матеріалів складної структури дає змогу знаходити їх ефективні теплофізичні характеристики, тобто провести процес гомогенізації з допомогою чисельного моделювання. При цьому, актуальною залишається задача побудови формально єдиної мікрорівневої моделі, що дає змогу одночасно досліджувати мультифізичні процеси. Таку задачу зручно вирішувати на основі методу теплоелектричних аналогій та теорії подібності [126-130].

Формальну фізико-математичну теорію, що має за мету, з погляду системного аналізу, об'єднати єдиним чином аналогічні явища та уможливити їх однотипне дослідження, не вникаючи при цьому у фундаментальні дослідження самих явищ, почали розвивати на основі термодинаміки на початку ХХ століття. Значний поштовх було зроблено в 1930-их, коли в термодинаміці вперше було запропоновано принцип найменшого розсіювання (дисипації) енергії, та об'єднано різні лінійні фізичні процеси, за допомогою, так званих, кінетичних коефіцієнтів, або коефіцієнтів Онзагера [89, 90]. Пізніше в 1960-1970-их з'явилися роботи, що на основі математичної теорії поля [89], та методу аналогій [128, 130], формально описували всю лінійну термодинаміку та відповідні похідні фізичні процеси. Логічним продовженням розвитку такої теорії вже на початку ХХІ століття стали роботи з енергодинаміки [94], що максимально абстрактно, але все ще безвідривно від фізичної суті, описують предметні явища переносу або перетворення енергії, незалежно від тієї чи іншої області науки.

Теоретично, метод аналогій базується на теорії подібності [126, 127], перші строги формулювання якої з'явилися завдяки Ньютону, ще в 1687 році. Подібність аналогічних явищ полягає в однаковому характері проходження всіх процесів. Математично аналогічні явища описуються формально однаковими диференціальними рівняннями та умовами однозначності. Однак фізичний зміст і розмірність вхідних величин різні. Більш строго, подібність – це взаємно-однозначна відповідність між двома об'єктами, коли відомі функції переходу від параметрів одного об'єкта до параметрів іншого, а математичні описи цих об'єктів можуть бути тотожними.

Теорія подібності формулює властивості аналогічних систем, стверджуючи, що подібні явища мають однакові критерії подібності. Тобто, безрозмірні набори величин, що характеризують середню міру відношення інтенсивності фізичних явищ, важливих для досліджуваного процесу. Ці критерії встановлюються з умов тотожності рівнянь для фізичних процесів, або на основі аналізу формальних розмірностей, що використовуються в моделях.

Для подібності властиві деякі загальні закономірності, які прийнято називати першою та другою теоремами подібності, а також додатковими положеннями до них. Ці додаткові положення необхідні при дослідженні подібності явищ в складних нелінійних, в тому чи іншому сенсі неоднорідних чи стохастичних системах. Обидві теореми встановлюють співвідношення між параметрами подібних явищ, при цьому не звертаючи уваги на реалізацію подібності при побудові моделей. Для останнього застосовується третя теорема подібності (обернена теорема), що визначає необхідні і достатні умови для того, щоб явища виявилися подібними. Теорема вимагає подібності умов однозначності та такого підбору параметрів моделі, при якому критерії подібності, що містять крайові умови, стають однаковими.

Виміряти деяку фізичну величину Θ означає порівняти її з іншою величиною θ тієї самої фізичної природи, тобто визначити, у скільки разів Θ більше або менше θ . Щоб уникнути непорозумінь, для Θ та θ прийнято певний зміст, чи більш конкретно, семантику, відповідно до тієї фізичної природи, де

вони розглядаються. Цей умовний зміст називається одиницею вимірювання. При дослідженні різних явищ природи розвиваються формальні теорії, що можуть оперувати новими одиницями вимірювання. В залежності від явищ, ці одиниці бувають незалежними від інших одиниць, або ж утворюються на їх основі. Формула, за якою визначається залежність між похідними та основними одиницями, називається розмірністю величини. У загальному випадку ця формула виражається як добуток степенів базових одиниць вимірювання. Слід зазначити, що залежності між одиницями вимірювання є справедливими на будь-яких (великих чи малих) масштабах. Тому, якщо відповідні формули містять інтегральні, диференціальні, трансцендентні або інші вирази, то, оскільки вони не мають розмірності, при виведенні похідних одиниць, а також встановлення умов подібності, їх можна опустити [126].

Нехай деяка задача розглядає множину розмірних параметрів P_1, P_2, \dots, P_N . З цих параметрів обрано $\Theta_1, \Theta_2, \dots, \Theta_S$ незалежних, кожен з яких є функцією деяких початкових розмірних параметрів:

$$\Theta_i = f_i(P_1, P_2, \dots, P_N). \quad (2.109)$$

Сукупність цих функцій однозначно описує задачу, що розглядається, або говорячи абстрактно, однозначно визначає положення системи в деякому функціональному просторі. Кожне з таких рівнянь утворює, узагальнену координату в побудованому функціональному просторі. P_1, P_2, \dots, P_K початкових параметрів утворюють базову систему одиниць вимірювання для цієї задачі, а $(N - K)$ з них є похідними.

Нехай задача розглядає деяку залежність між параметрами, для спрощення приймемо, що вона описується рівнянням:

$$\Theta_1 + \Theta_2 + \dots + \Theta_N = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^N \Theta_i = 0. \quad (2.110)$$

Зведемо рівняння до безрозмірного виду, поділивши параметри на один з довільно вибраних, нехай це буде останній:

$$\frac{\Theta_1}{\Theta_S} + \frac{\Theta_2}{\Theta_S} + \dots + \frac{\Theta_{S-1}}{\Theta_S} + 1 = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^{S-1} \frac{\Theta_i}{\Theta_S} + 1 = 0. \quad (2.111)$$

Розглянемо іншу задачу, що оперує множиною незалежних розмірних параметрів $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_s$, кожен з яких є функцією початкових параметрів:

$$\Psi_i = \Psi_i(R_1, R_2, \dots, R_N). \quad (2.112)$$

Прийmemo, що задачі є подібними. При цьому формально вважаємо, що дві задачі (або більш загально системи) є подібними, якщо їх відповідні узагальнені координати є пропорційними відносно деякого масштабного множника. Першу задачу назвемо оригіналом або натурою, а другу задачу – моделлю. Для моделі відповідно отримаємо:

$$\frac{\Psi_1}{\Psi_s} + \frac{\Psi_2}{\Psi_s} + \dots + \frac{\Psi_{s-1}}{\Psi_s} + 1 = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^{s-1} \frac{\Psi_i}{\Psi_s} + 1 = 0. \quad (2.113)$$

Оскільки модель є подібна оригіналу за визначенням, їх параметри описуються деяким лінійним масштабним відношенням:

$$P_1 = m_1 R_1, P_2 = m_2 R_2, \dots, P_N = m_N R_N, \quad (2.114)$$

тобто:

$$\Theta_i = \Theta_i(P_1, \dots, P_N) = \Theta_i(m_1 R_1, \dots, m_N R_N) = M_i \Psi_i(R_1, \dots, R_N) = M_i \Psi_i, \quad (2.115)$$

де: M_i – деякі загальні масштабні множники. Оскільки задачі подібні, усі з масштабні множники повинні бути однаковими, тобто:

$$M_1 = M_2 = \dots = M_s, \quad (2.116)$$

$$\frac{M_1}{M_s} = \frac{M_2}{M_s} = \dots = \frac{M_{s-1}}{M_s} = \frac{M_s}{M_s} = 1.$$

Тепер можна записати відношення параметрів оригіналу і моделі як:

$$\frac{\Theta_1}{\Theta_s} = \frac{\Psi_1}{\Psi_s}, \quad \frac{\Theta_2}{\Theta_s} = \frac{\Psi_2}{\Psi_s}, \quad \dots, \quad \frac{\Theta_{s-1}}{\Theta_s} = \frac{\Psi_{s-1}}{\Psi_s}. \quad (2.117)$$

Кожне з таких відношень є безрозмірною величиною, що називається критерієм подібності, та зазвичай позначається в літературі символом π . Якщо розглядається одразу декілька подібних систем, то можна записати:

$$\pi_i^{(1)} = \frac{\Theta_i^{(1)}}{\Theta_s^{(1)}} = \pi_i^{(2)} = \frac{\Theta_i^{(2)}}{\Theta_s^{(2)}} = \dots = \pi_i^{(s)} = \frac{\Theta_i^{(G)}}{\Theta_s^{(G)}} = \text{idem}, \quad (2.118)$$

що в конкретному використанні означає "відповідно однаково для всіх".

Сформулюємо *першу теорему подібності* – у всіх подібних явищ критерії

подібності однакові, або коротко: $\pi = \text{idem}$. Це достатні умови подібності.

Друга теорема подібності, також відома як π -теорема, стверджує, що будь-яке повне рівняння (узагальнена координата) фізичного процесу чи деякої системи, що записане у визначеній системі одиниць вимірювання, може бути записано у вигляді залежності між критеріями подібності, тобто рівнянням, що зв'язує безрозмірні величини, отримані на основі параметрів процесу. Іншими словами, завжди можна перетворити вираз типу (2.109) у вираз типу:

$$f(1, 1, \dots, 1, \pi_1, \dots, \pi_{N-K}) = 0. \quad (2.119)$$

Оскільки кожна узагальнена координата є комбінацією базових та похідних параметрів, то будь-який критерій подібності можна виразити як комбінацію базових параметрів:

$$\begin{aligned} \pi_i &= \frac{\Theta_i(P_1, P_2, \dots, P_N)}{\Theta_S(P_1, P_2, \dots, P_N)} = P_1^{z_1} P_2^{z_2} \dots P_N^{z_N} = c \cdot [P_1]^{z_1} [P_2]^{z_2} \dots [P_N]^{z_N} = \\ &= c \cdot ([P_1]^{\alpha_1} \dots [P_K]^{\omega_1})^{z_1} ([P_1]^{\alpha_2} \dots [P_K]^{\omega_2})^{z_2} \dots ([P_1]^{\alpha_N} \dots [P_K]^{\omega_N})^{z_N} = \\ &= c \cdot [P_1]^{\alpha_1 z_1 + \alpha_2 z_2 + \dots + \alpha_N z_N} [P_2]^{\beta_1 z_1 + \beta_2 z_2 + \dots + \beta_N z_N} \dots [P_K]^{\omega_1 z_1 + \omega_2 z_2 + \dots + \omega_N z_N}, \end{aligned} \quad (2.120)$$

де квадратні дужки означають отримання одиниці вимірювання величини. Такий метод відомий як метод визначальних рівнянь для визначення критеріїв подібності. Критерії є безрозмірними, тому:

$$\begin{aligned} \alpha_1 z_1 + \alpha_2 z_2 + \dots + \alpha_N z_N &= 0, \\ \beta_1 z_1 + \beta_2 z_2 + \dots + \beta_N z_N &= 0, \\ &\dots \\ \omega_1 z_1 + \omega_2 z_2 + \dots + \omega_N z_N &= 0. \end{aligned} \quad (2.121)$$

Система рівнянь має N невідомих та K лінійно незалежних рівнянь, тобто існує тільки $(N - K)$ лінійно незалежних розв'язків, і, відповідно, тільки $(N - K)$ фундаментальних критеріїв подібності.

Третя теорема подібності встановлює необхідні і достатні умови для практичної реалізації подібності: щоб дві системи були подібними повинні бути відповідно однаковими базові критерії подібності та умови однозначності. При чому, під базовими критеріями розуміються ті критерії, що побудовані на базових, в конкретному випадку, параметрах. Умови однозначності визначають

індивідуальні особливості процесу, виділяючи з множини всіх процесів даного класу конкретний. До них відносяться фактори і умови, що не залежать від механізму самого явища:

- геометричні властивості системи, де відбувається процес;
- фізичні параметри середовища і тіл, що утворюють систему;
- початковий стан системи;
- крайові умови;
- взаємодія з зовнішнім середовищем.

У кожному конкретному випадку умови однозначності можуть бути різними, в залежності від роду задачі чи виду рівняння, яке її описує.

Розглянемо інший приклад – задачу нестационарної теплопровідності, що описується параболічним рівнянням:

$$c\rho\frac{\partial T}{\partial \tau} = \lambda\nabla^2 T. \quad (2.122)$$

Тут параметрами задачі виступають: питома теплоємність c [Дж/кг°C], де [Дж = кг м² / с²]; густина ρ [кг/м³]; коефіцієнт теплопровідності λ [Вт/м°C], де [Вт = кг м²/с³]; час τ [с]; відстань x, y, z , або, відкинувши диференціальні оператори, деяка характеристична відстань l [м]; температура T [°C]. Знайдемо критерій подібності, звівши рівняння до безрозмірного:

$$\pi_1 = \frac{\lambda T / l^2}{c\rho T / \tau} = c^{-1} \rho^{-1} \lambda \tau l^{-2} T^0 = \frac{\lambda \tau}{c\rho l^2}, \quad (2.123)$$

$$[\pi_1] = (\text{кг}^{-1}\text{м}^{-2}\text{с}^2\text{кг}^1\text{C}^1)(\text{кг}^{-1}\text{м}^3)(\text{кг}^1\text{м}^2\text{с}^{-3}\text{м}^{-1}\text{C}^{-1})(\text{с}^1\text{м}^{-2}) = \text{кг}^0\text{м}^0\text{с}^0\text{C}^0 = 1.$$

Отриманий критерій відомий під назвою критерію Фур'є. Критерій встановлює відповідність між швидкістю розвитку різних ефектів, що впливають на хід досліджуваного процесу. Такі критерії характерні для будь-яких нестационарних процесів. Їх називають критеріями гомохронності, тобто часової однорідності.

Аналізуючи рівняння (2.122), можна побачити, що шість параметрів системи є комбінацією чотирьох базових: маси [кг], відстані [м], часу [с] та температури [°C]. Тобто, будуючи систему рівнянь (2.121), будуть отримані $N=6$ невідомих та $K=4$ лінійно незалежних рівнянь, а відповідна кількість

лінійно незалежних розв'язків, і значить – критеріїв подібності, рівна $(N - K) = 2$. Отже, критерій Фур'є є обов'язковим, але не єдиним для визначення подібності даної системи до інших. Для того, щоб система була повною, необхідно вказати крайові умови. Початкові умови задачі, а також умови Діріхле не дадуть можливості визначення наступного критерію подібності, тому, розглядаючи загальний випадок, використовуються крайові умови Робіна (Ньютона-Ріхмана), тобто температурний напір:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\Gamma} = \alpha \Delta T \Big|_{\Gamma}, \quad (2.124)$$

де: α – коефіцієнт тепловіддачі $[\text{Вт}/\text{м}^2\text{C}]$. Зведемо рівняння до безрозмірного:

$$\pi_2 = \frac{\alpha T}{\lambda T/l} = \alpha \lambda^{-1} l = \frac{\alpha l}{\lambda}, \quad (2.125)$$

$$[\pi_2] = (\text{кг}^1 \text{м}^2 \text{с}^{-3} \text{м}^{-2} \text{C}^{-1})(\text{кг}^{-1} \text{м}^{-2} \text{с}^3 \text{м}^1 \text{C}^1)(\text{м}^1) = \text{кг}^0 \text{м}^0 \text{с}^0 \text{C}^0 = 1.$$

Отриманий критерій відомий під назвою критерію Біо. Він є приблизною мірою відношення температурного перепаду в об'єкті до температурного напору між зовнішнім середовищем та об'єктом. Якщо значення критерію набагато більше одиниці, то температурним напором можна знехтувати, і крайові умови Робіна перетворюються в крайові умови Діріхле. Якщо навпаки, критерій набагато менший одиниці, можна розглядати тільки температурний напір, і крайові умови Робіна перетворюються в крайові умови Неймана [127].

Розглянемо задачу електропровідності, що описує комутацію в деякому пристрої. Вона також визначається параболічним рівнянням [86, 87, 130]:

$$c \frac{\partial U}{\partial \tau} = \sigma \nabla^2 U, \quad (2.126)$$

де: σ – питома електропровідність середовища $[\text{м}^{-3} \text{кг}^{-1} \text{с}^3 \text{A}^2]$; c – електрична ємність на одиницю об'єму $[\text{Ф}/\text{м}^3 = \text{A}^2 \text{с}^4 \text{кг}^{-1} \text{м}^{-5}]$; U – електричний потенціал $[\text{м}^2 \text{кг}^1 \text{с}^{-3} \text{A}^{-1}]$. Відповідними критеріями подібності для цього рівняння будуть:

$$\pi_1 = \frac{\sigma U/l^2}{c U/\tau} = c^{-1} \sigma \tau l^{-2} U^0 = \frac{\sigma \tau}{c l^2}, \quad \pi_2 = \frac{\beta U}{\sigma U/l} = \beta \sigma^{-1} l = \frac{\beta l}{\sigma}, \quad (2.127)$$


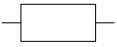




де: β – коефіцієнт пропорційності, аналогічний до коефіцієнт тепловіддачі.

При підборі таких параметрів моделі (2.126), при яких її критерії подібності будуть відповідно однаковими для всіх критеріїв подібності оригіналу (2.122), задачі будуть подібними та аналогічними.

Використання неперервної моделі, що описує задачу електропровідності, є незручним на практиці. Набагато зручніше, використовувати дискретну систему, тобто систему з зосередженими параметрами. Продовжуючи розвивати аналогії, можна показати [127-129], що для задачі теплопровідності, так само, як і для задачі електропровідності, можна побудувати схему заміщення, тобто, так зване, теплове коло при відповідній теплоелектричній аналогії (Таблиця 2.1).

Таблиця 2.1

Елементи аналогій теплового та електричного кіл

Елемент теплової схеми		Електрична аналогія		Символ
Ізотермічна поверхня	$T = \text{const}$	Провідник	$U = \text{const}$	
Ідеальний тепловий зв'язок	$R_T = \frac{\Delta T}{q} = \frac{h}{\lambda}$	Резистор	$R_U = \frac{\Delta U}{i} = \frac{h}{\sigma}$	
Зосереджений тепловий опір	$T = 0$	Заземлення	$U = 0$	
Джерело температурного напору (умови Робіна)	$\lambda \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \Big _{\Gamma} = \alpha \Delta T \Big _{\Gamma}$	Джерело напруги (електрорушійної сили)	$\sigma \frac{\partial U}{\partial \mathbf{n}} \Big _{\Gamma} = \beta \Delta U \Big _{\Gamma}$	
Джерело теплового потоку (умови Неймана)	$\lambda \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \Big _{\Gamma} = q$	Джерело струму (поток носіїв заряду)	$\sigma \frac{\partial U}{\partial \mathbf{n}} \Big _{\Gamma} = i$	
Теплова ємність	$c_T \rho = \frac{\Delta Q_T}{\Omega \Delta T}$	Конденсатор	$c_U = \frac{\Delta Q_U}{\Delta U} [\Phi]$	

Очевидно, що методику можна застосовувати для довільних аналогічних явищ. Так на основі електричних кіл, можна також моделювати поведінку гідродинамічних, акустичних, механічних і навіть квантових систем [131].

Отже, для побудови формально єдиної мікрорівневої моделі знаходження ефективних теплофізичних характеристик композиційних матеріалів доцільно використовувати методи аналогій та теорію подібності. Для забезпечення подібності моделей фізичних процесів необхідно виконати умови трьох теорем подібності, тобто забезпечити однаковість відповідних критеріїв подібності та умови однозначності, що виділяють індивідуальні особливості процесів – геометричні властивості, крайові умови, структурні параметри, тощо. Подібність моделей дає змогу побудувати систему аналогій, зокрема систему аналогічних елементів з зосередженими фізичними параметрами. Завдяки цьому можна формально єдиним чином синтезувати ефективні характеристики композиційних матеріалів шляхом проведення ряду чисельних експериментів.

2.5 Доменна декомпозиція та застосування паралельних обчислень

Математичне, і як наслідок, програмне забезпечення систем проектування та моделювання композиційних матеріалів будується на основі чисельних методів. Використання цих методів є трудомісткою задачею, для розв'язку якої доцільно використовувати паралельні розподілені обчислення [132]. У галузі комп'ютерних наук дві події називаються одночасними, коли вони відбуваються протягом одного і того ж часового інтервалу [133]. Якщо кілька задач виконуються протягом одного і того ж часового інтервалу, то говорять, що вони виконуються паралельно. Розрізняють фізично одночасне та конкурентне паралельне виконання задач [134]. У другому випадку, програми виконуються одночасно протягом одного і того ж часового інтервалу (паралельно), але послідовно в межах цього інтервалу. Мета будь-яких комп'ютерних технологій паралелізму – забезпечити умови, що дають змогу обчислювальним пристроям здійснювати великі об'єми роботи за одні і ті ж часові інтервали. Розрізняють дві основні комп'ютерні технології паралелізму (парадигми) – методи паралельного

програмування, що забезпечують паралельне виконання задач в межах фізично чи віртуально єдиного обчислювального пристрою; та методи розподіленого програмування, що забезпечують паралельне виконання задач з допомогою кількох фізично чи віртуально розподілених обчислювальних пристроїв [133]. На практиці обидві технології використовуються взаємно.

З позиції технічного забезпечення, у загальному випадку, можна виділити два основні напрямки паралельних обчислень: високопродуктивні обчислення з використанням суперкомп'ютерів (High Performance Computations – HPC) та розподілені обчислення, в тому числі з використанням кластерів (Distributed Computing) [132]. Перевагою використання розподілених обчислювальних систем над суперкомп'ютерами є їх дешевизна за рахунок використання гетерогенних (з неоднорідною архітектурою та системним програмним забезпеченням) обчислювальних пристроїв, і можливість необмеженого нарощування продуктивності за рахунок масштабування; недоліком – низька пропускна здатність каналів зв'язку.

При розв'язуванні складних трудомістких обчислювальних задач, використовують два основні підходи до їх спрощення та подальшого паралельного розв'язку – паралелізм даних та паралелізм задач (чи підзадач) [135]. У першому випадку основна ідея полягає в тому, що одні і ті ж обчислювальні операції паралельно застосовуються до різних, відносно незалежних частин вхідних даних; у другому – початкова задача розбивається на кілька умовно незалежних підзадач, які виконуються паралельно. Загальний алгоритм розпаралелювання, що може бути застосований з використанням обох описаних підходів, відображений в методології Фостера [135, 136], і передбачає послідовне виконання таких кроків як: декомпозиція (partitioning), планування комунікацій (communication), укрупнення (agglomeration) та планування обчислень (mapping). На основі цієї методології створено ряд парадигм паралельного програмування [137] (розділяй і володарюй (Divide-and-Conquer), конвеєрування (Pipelining and Systolic), редукція, довільні комунікації, тощо), на яких базується набір спеціальних шаблонів [138], що дають змогу здійснювати розпаралелювання.

Наприклад, для генерації скінченно-елементної сітки застосовується парадигма "розділяй і володарюй", а для розв'язку СЛАР – "конвеєрування". Розділяють два типи декомпозиції обчислень в задачах – функціональну та доменну (декомпозицію даних). Такий поділ відображає підходи паралелізму задач та паралелізму даних, відповідно. В залежності від конкретної задачі, можна використовувати одразу кілька видів декомпозиції.

Не кожна задача може піддаватися ефективній декомпозиції, тобто бути розбитою на відносно незалежні підзадачі чи дані [135]. Прискорення S , що отримується при використанні паралельного алгоритму, у порівнянні з послідовним варіантом виконання обчислень, визначається як відношення часу, витраченого на розв'язування задач одним обчислювальним пристроєм, до часу, затраченого на виконання цієї ж задачі деякою заданою кількістю пристроїв [139]. Формально, отримане прискорення описується як:

$$S_K(n) = \frac{\tau_1(n)}{\tau_K(n)}, \quad (2.128)$$

де: K – кількість процесорів; τ – тривалість виконання; n – деякий параметр обчислювальної складності задачі, наприклад величина вхідних даних.

Тривалість виконання алгоритму $\tau_K(n)$ можна розділити на тривалість виконання операцій, що можуть бути виконані паралельно $\tau_P(n)$, та тривалість операцій, що можуть бути виконані тільки послідовно $\tau_S(n)$. Останній вираз можна переписати як:

$$S_K(n) = \frac{\tau_S(n) + \tau_P(n)}{\tau_S(n) + \frac{\tau_P(n)}{K}}. \quad (2.129)$$

Ефективність використання паралельним алгоритмом пристроїв при розв'язуванні задачі визначається відношенням:

$$E_K(n) = \frac{\tau_1(n)}{K \cdot \tau_K(n)} = \frac{S_K(n)}{K}. \quad (2.130)$$

Значення ефективності показує середній період тривалості виконання алгоритму, протягом якого пристрої реально використовуються, тобто не простоюють.

Оцінки максимально досяжних значень прискорення та ефективності паралельних алгоритмів розв'язку конкретних задач даються законом Амдала [140], що подає залежність прискорення до кількості обчислювальних пристроїв і формально записується як (2.129). Практично закон Амдала дає оцінку можливості ефективного нарощування кількості пристроїв.

Технологія OpenCL (Open Computing Language) від Khronos Group є однією з технологій високопродуктивних паралельних та розподілених обчислень [141, 142]. Вона дає змогу реалізовувати концепцію паралелізму даних з допомогою широкого кола обчислювальних пристроїв, зокрема на центральних процесорах (Central Processing Unit – CPU), на графічних картах, що підтримують інтерфейси загального використання (General-Purpose Graphics Processing Unit – GPGPU), на програмованих користувачем вентилях матриць (Field-Programmable Gate Array – FPGA) та на процесорах цифрового опрацювання сигналів (Digital Signal Processor – DSP). Ці класи обчислювальних пристроїв мають SIMD (Single Instruction Multiple Data) архітектуру і дають змогу максимально ефективно виконувати запрограмовані алгоритми, що використовують декомпозицію даних великих задач. На відміну від аналогічних технологій (основні: NVIDIA CUDA, Microsoft DirectCompute, AMD FireStream), OpenCL підтримується максимально широким колом виробників обчислювальних пристроїв [143].

Основними особливостями роботи з SIMD пристроями та графічними картами зокрема, є те, що вони мають високу латентність використання пам'яті, особливо при пересиланні даних "від" чи "на" пристрій. Тому, максимально ефективного результату можна досягнути при локальній обробці досить великих порцій даних. Більшість таких пристроїв не здійснюють кешування даних, зазвичай не підтримується динамічне виділення пам'яті. Графічні карти містять велику кількість (у порівнянні з центральними процесорами), так званих, робочих вузлів, що одночасно виконують однакові інструкції. Якщо в інструкціях наявні програмні розгалуження чи умовні оператори, в залежності від результатів виконання, деякі робочі вузли можуть простоювати, і таким чином знижувати максимальне ефективне навантаження на пристрій. Докладніше з цими

особливостями можна ознайомитися у специфікації OpenCL [141] або в [142].

Розробники обчислювальних пристроїв, що підтримують технологію OpenCL, надають власний відповідний набір засобів розробки, утиліти і документацію програмних продуктів (Software Development Kit – SDK). Кожен такий набір включає прикладні програмні інтерфейси (Application Programming Interface – API) для роботи з пристроєм, API для взаємодії CPU і пристрою, компілятор та компонувальник (Linker) алгоритмічної мови OpenCL. Разом ці елементи утворюють, так звану, OpenCL платформу. Алгоритмічна мова технології OpenCL є C-подібною мовою програмування. OpenCL програма запускається на виконання операційною системою, яка виступає у ролі, так званого координатора (хост, host). Для цього необхідно здійснити такі типові етапи:

- визначити наявні в системі OpenCL платформи – зазвичай кожен виробник обчислювальних пристроїв має свою власну платформу, що забезпечується наявним в операційній системі драйвером, деякі пристрої можуть мати кілька драйверів і відповідно належати кільком платформам, наприклад Intel + AMD CPU;
- визначити наявні пристрої на платформах – CPU, GPU, FPGA, DSP;
- створити OpenCL контексти для кожного необхідного пристрою платформи – спеціальні програмні об'єкти, що забезпечують взаємодію операційної системи і пристрою;
- скомпілювати під створені контексти написані C-подібні OpenCL коди програм – отримані програмні об'єкти є аналогічні до динамічно компонованих бібліотек, що будуть розміщуватися на пристрої;
- створити ядра виконання (kernel-об'єкти) – спеціальні програмні об'єкти, що є точками початку виконання інструкцій, які виконуються робочими вузлами пристрою (ядра є аналогами main-функцій звичних програмних кодів);
- створити чергу команд для кожного обчислювального пристрою, для якого створений OpenCL контекст;

- створити необхідні буфери пам'яті, що використовуються для пересилання даних задач між координатором і пристроєм;
- запустити в черзі команд на виконання необхідну кількість ядер;
- після завершення обчислень, скопіювати з пристрою отриману необхідну інформацію в буфери пам'яті операційної системи;
- знищити всі створені OpenCL об'єкти.

Одним з ключових питань використання SIMD пристроїв, зокрема графічних карт персональних комп'ютерів, для чисельного розв'язку задач математичної фізики є особливості реалізації обчислень з, так званою, "плаваючою комою" – формою представлення дійсних чисел, в якій число зберігається у формі мантиси і показника степеня [144]. Питання є визначальним при оцінках стійкості обчислень.

Більшість наявних на даний момент обчислювальних систем є стандартизованими. Згідно специфікації OpenCL [142], кожен пристрій, що підтримує технологію, повинен здійснювати обчислення з плаваючою комою відповідно до IEEE-754-2008 [145, 146] – широко розповсюдженого стандарту формату представлення чисел та здійснення операцій над ними, що підтримується переважною більшістю наявних програмних і апаратних систем. Тому, результати обчислень на OpenCL пристроях не можуть відрізнитися від результатів, отриманих звичним способом. Нюанс полягає у здійсненні обчислень з, так званою, подвійною точністю, чи з використанням ще більшої кількості машинної пам'яті для представлення числа. Річ у тому, що відповідно до основної мети декомпозиції обчислень – отримання їх прискорення, операції над числами повинні реалізовуватися апаратно, за мінімально можливий інтервал часу. Якщо OpenCL пристрій не спеціалізований, наприклад, пересічна графічна карта персонального комп'ютера, можливість апаратних обчислень з подвійною (і вище) точністю є неможливою. Тому, для підтримки максимальної портативності програмних OpenCL кодів між пристроями необхідно йти на компроміси і використовувати менш точні представлення чисел, що негативно впливає на характеристики стійкості обчислень реалізацій моделей.

Ще однією особливістю роботи з технологією OpenCL є те, що кількість запусків на виконання програмних ядер, повинна бути кратною кількості груп робочих вузлів, наявних у пристрої. Річ у тому, що переважно, окремі робочі вузли є програмно приховані від користувача, а доступ до них здійснюється апаратно та не підлягає контролю. Для останнього їх об'єднують в групи, що утворюють, так звані, окремі обчислювальні вузли, які підлягають програмному контролю через черги команд. Кількість груп зазвичай рівна деякому степеневі двійки, що зумовлює необхідність відповідної декомпозиції даних задач.

Отже, мікрорівневі моделі чисельного розв'язку задач аналізу теплофізичних процесів в композиційних матеріалах та подальшого знаходження їх ефективних характеристик доцільно реалізовувати з допомогою технологій паралельних та розподілених обчислень на основі доменної декомпозиції. При цьому, враховуючи досить велику кількість обчислень, необхідних для реалізації чисельних методів наближеного розв'язування модельних обчислень, для отримання максимального прискорення їх необхідно проводити на пристроях з SIMD архітектурою, наприклад на графічних картах персональних комп'ютерів з допомогою технології OpenCL. Це дасть можливість ефективно використовувати реалізовані моделі в ітераційних процесах проектування композиційних матеріалів, при цьому уникаючи значних затрат на використання спеціалізованих суперкомп'ютерів чи кластерних систем.

2.6 Висновки до розділу 2

У даному розділі, описано методологічні основи задачі знаходження ефективних характеристик композиційних матеріалів зі складною структурою при їх проектуванні з допомогою чисельного моделювання теплофізичних процесів. З метою розв'язку:

1. задачі вдосконалення та реалізації мікрорівневих методів синтезу складних структур композиційних матеріалів, досліджено методи моделювання мікроструктур КМ та виявлено, що для розв'язку задачі необхідно брати за основу коміркові моделі;

2. задачі вдосконалення та реалізації чисельних моделей аналізу теплофізичних процесів в мікрорівневих моделях матеріалів складної структури, досліджено аналітичні фізико-математичні моделі фізичних процесів в неперервних середовищах та виведено загальний алгоритм опису макроскопічних процесів переносу густини інтенсивних змінних стану, що відбуваються в неперервному середовищі;
3. цієї ж задачі, досліджено способи використання чисельних методів наближеного розв'язку фізико-математичних задач, що дає змогу обрати за основу метод скінченних елементів, який увібрав в себе переваги проєкційних та сіткових чисельних методів та дає можливість формально однотипно моделювати мультифізичні процеси;
4. задачі розроблення та реалізації методів знаходження ефективних теплофізичних характеристик композитів на основі чисельного моделювання відповідних процесів в мікрорівневих моделях матеріалів складної структури, досліджено способи використання методів аналогій та теорії подібності в моделюванні фізичних процесів, що дає змогу взяти за основу метод теплоелектричних аналогій;
5. задач ефективної реалізації розроблених моделей в прикладному програмному забезпеченні досліджено методи доменної декомпозиції та застосування технологій паралельних і розподілених обчислень, що дає змогу взяти за основу технологію OpenCL.

Основні результати даного розділу опубліковані в роботах [2-5, 11].

РОЗДІЛ 3

ВДОСКОНАЛЕННЯ МОДЕЛЕЙ ТА МЕТОДІВ ЗНАХОДЖЕННЯ ЕФЕКТИВНИХ ТЕПЛОФІЗИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОЗИЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ ПРИ ЇХ ПРОЕКТУВАННІ

3.1 Розроблення методів синтезу мікрорівневих структур композиційних матеріалів на основі регулярних коміркових моделей

У попередньому розділі було показано, що задачу моделювання мікроструктур доцільно вирішувати на основі використання методів Монте-Карло для побудови топологічних особливостей чи присвоєння складових характеристик відповідно до деякого стохастичного розподілу всередині елементарних об'ємів композиційних матеріалів у вигляді достатньо великої кількості регулярних комірок. Це дає можливість однотипно моделювати багатошарові, волокнисті, наповнені та взаємопроникні структури КМ і їх особливості через наближене представлення тривимірною матрицею регулярних комірок-вокселів. Цей підхід також дає можливість усунути основну проблему реалізації, що полягає в необхідності використання значної пам'яті обчислювальної машини та виконання великої кількості обчислень, завдяки досить простій доменній декомпозиції, що може бути ефективно реалізована з допомогою технологій паралельних та розподілених обчислень.

Відповідно до класифікації композиційних матеріалів за різновидами компонентів армування, тут пропонуються наступні методи побудови мікрорівневих моделей структури:

1) *Генерування випадкових еліпсоїдних включень (Рис. 3.1)*. Для кожної комірки перевіряється умова входження в еліпсоїд:

$$\frac{(x - x_0)^2}{a^2} + \frac{(y - y_0)^2}{b^2} + \frac{(z - z_0)^2}{c^2} \leq r^2, \quad (3.1)$$

де: x, y, z – індекси, або дискретні координати комірки; x_0, y_0, z_0 – координати центру еліпсоїда; a, b, c – діаметрально протилежні точки осей еліпсоїда; r – радіус еліпсоїда. Підтримуються просторові обертання включень, через попереднє застосування матриць обертання:

$$\begin{cases} x \\ y \\ z \end{cases} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\alpha) & -\sin(\alpha) \\ 0 & \sin(\alpha) & \cos(\alpha) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \cos(\beta) & 0 & \sin(\beta) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\beta) & 0 & \cos(\beta) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \cos(\gamma) & -\sin(\gamma) & 0 \\ \sin(\gamma) & \cos(\gamma) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{cases} X \\ Y \\ Z \end{cases}, \quad (3.2)$$

де: α, β, γ – кути обертання довкола осей OX, OY та OZ відповідно. Підтримується можливість моделювання перехідних шарів, введенням додаткової перевірки умови входження в ядро примітиву – еліпсоїду меншого радіусу r_T . Якщо умова виконується, комірці присвоюється наперед вказане значення інтенсивності ядра $I_{x,y,z}$ в діапазоні від 0 до 1. Якщо ж комірка потрапляє в перехідний шар, їй присвоюється значення інтенсивності, пропорційне відстані від ядра (Рис. 2.1.с). Складність алгоритму рівна $O(N \cdot E/C)$, де N – кількість комірок, E – кількість включень, C – кількість обчислювальних вузлів пристрою. Алгоритм методу не містить дій, що не піддаються декомпозиції, тому, згідно закону Амдала [140], прискорення при розпаралелюванні буде максимальним.

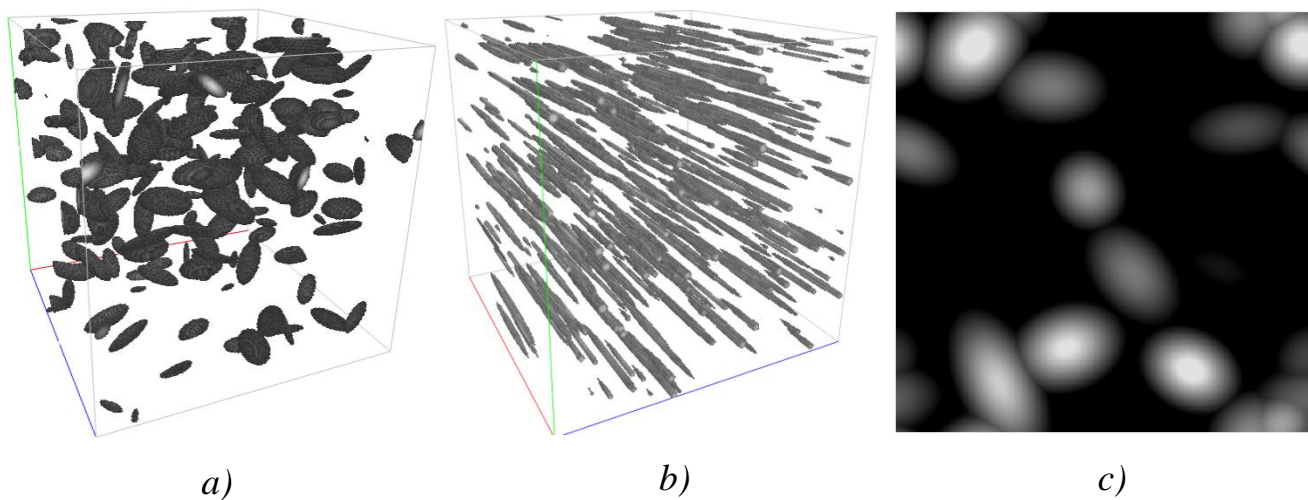


Рис. 3.1 Приклад моделювання структури КМ за допомогою еліпсоїдних включень: а) випадково орієнтовані включення; б) сильно видовжені включення орієнтовані в одному напрямку; с) моделювання перехідних шарів (переріз), максимальна інтенсивність – ядро включення, мінімальна інтенсивність – матриця КМ, перепад інтенсивності – перехідний шар

2) Генерування випадкових волокнистих включень на основі кривих Без'є (Рис. 3.2). Кожна з кривих будується на основі випадково зміщених відносно спільної осі базисних точок $B_i = \{x_i, y_i, z_i\}^T$, $0 \leq i \leq n$:

$$B(t) = \sum_{i=0}^n B_i \cdot \frac{n!}{i!(n-i)!} \cdot t^i (1-t)^{n-i}. \quad (3.3)$$

Крива апроксимується наперед заданою кількістю сегментів між вузлами t_j , $0 \leq j \leq p$. Для кожної комірки знаходяться два найближчі вузли t_a та t_b , а інтенсивність встановлюється пропорційно відстані до ними утвореної прямої:

$$\frac{(x-x_a)^2 + (y-y_a)^2 + (z-z_a)^2 - \frac{((x-x_a) \cdot (x_b-x_a) + (y-y_a) \cdot (y_b-y_a) + (z-z_a) \cdot (z_b-z_a))^2}{(x_b-x_a)^2 + (y_b-y_a)^2 + (z_b-z_a)^2}}{(x_b-x_a)^2 + (y_b-y_a)^2 + (z_b-z_a)^2} \leq r^2. \quad (3.4)$$

Якщо комірка знаходиться за межами волокна, тобто, якщо найближчими є кінцеві вузли, а проекція комірки на пряму не потрапляє в кінцевий сегмент:

$$\frac{((x-x_a) \cdot (x_b-x_a) + (y-y_a) \cdot (y_b-y_a) + (z-z_a) \cdot (z_b-z_a))^2}{(x_b-x_a)^2 + (y_b-y_a)^2 + (z_b-z_a)^2} < 0, \quad (3.5)$$

інтенсивність встановлюється пропорційно відстані до кінцевого вузла.

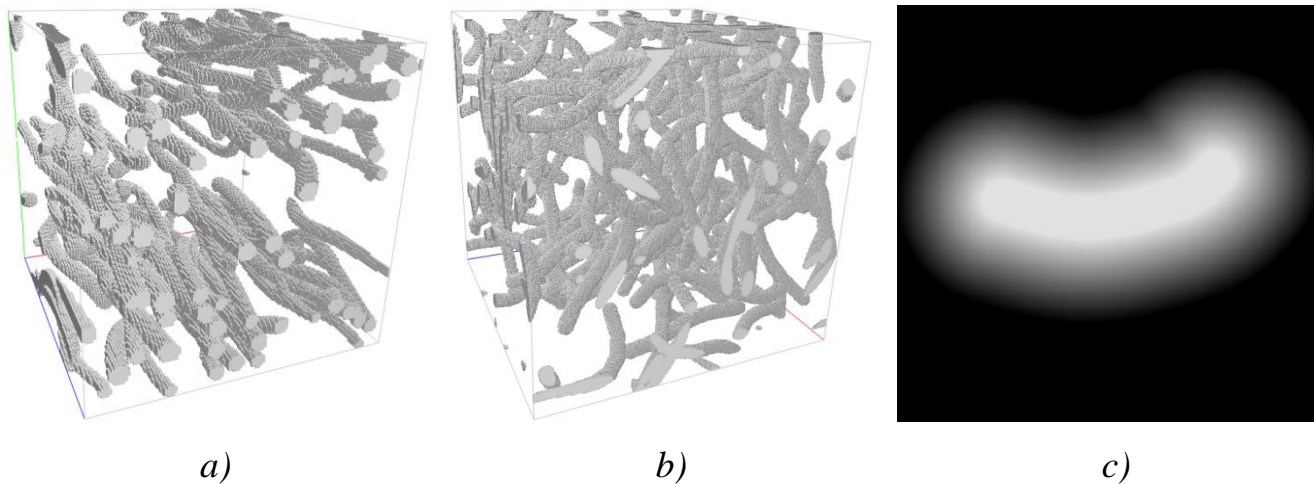


Рис. 3.2 Приклад моделювання структури КМ за допомогою волокнистих включень на основі кривих Без'є: а) включення орієнтовані в одному напрямку; б) включення орієнтовані в довільному напрямку; с) моделювання перехідних шарів (переріз), максимальна інтенсивність – ядро включення, мінімальна інтенсивність – матриця КМ, перепад інтенсивності – перехідний шар

Аналогічно до генерування еліпсоїдних включень, підтримується можливість обертання волокон та можливість моделювання перехідних шарів. Складність алгоритму рівна $O(N \cdot F \cdot S/C)$, де F – кількість волокон, S – кількість сегментів. Алгоритм методу не містить дій, що не піддаються декомпозиції, тому, прискорення при розпаралелюванні буде максимальним.

3) *Генерування випадкових коміркових моделей на основі діаграм Вороного (Рис. 3.3).* Для кожної комірки знаходяться відстані до двох найближчих, випадково розміщених, вузлів діаграми Вороного. Інтенсивність комірки встановлюється рівною різниці цих відстаней. Після знаходження всіх інтенсивностей, вони можуть не потрапляти в діапазон від 0 до 1, тому здійснюється нормалізація. Складність алгоритму рівна $O(N \cdot V/C)$, де V – кількість вузлів діаграми Вороного. Алгоритм методу не містить дій, що не піддаються декомпозиції, тому, прискорення буде максимальним.

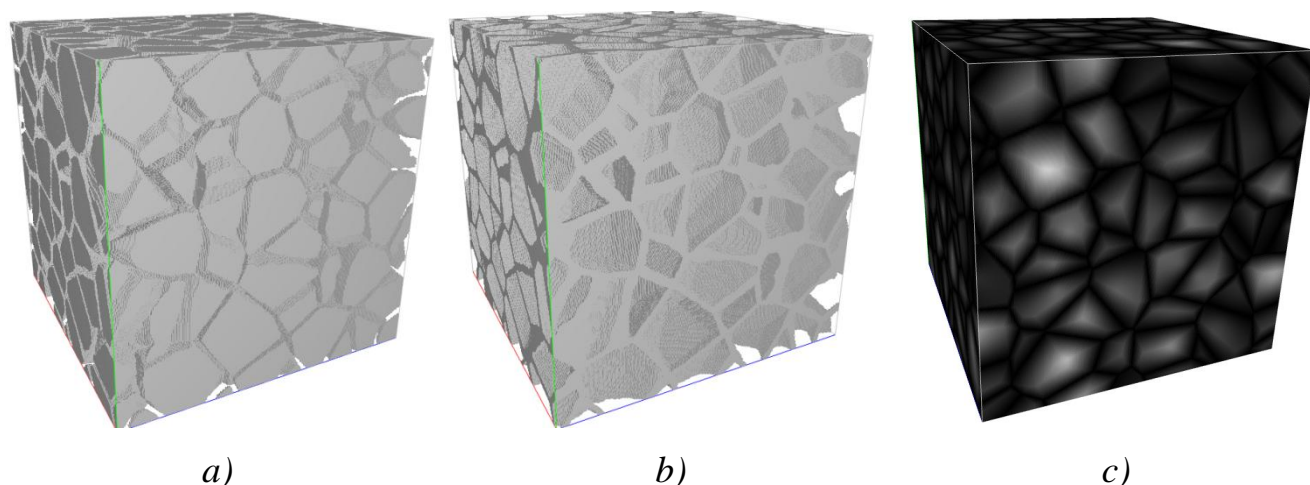


Рис. 3.3 Приклад моделювання структури КМ за допомогою комірок на основі діаграм Вороного: а) показано інтенсивності вище деякого порогу; б) показано інтенсивності нижче деякого порогу; с) показано всі інтенсивності

4) *Генерування випадкових скалярних полів* – метод описано в попередньому розділі. Алгоритм методу не містить дій, що не піддаються декомпозиції, тому, прискорення при розпаралелюванні буде максимальним.

5) *Генерування функціонально-градуїзованих перехідних шарів між фазами компонентів армування КМ.* Взятий за основу в попередньому розділі метод побудови має ряд недоліків. Зокрема, він деформує базові примітиви (сфери,

циліндри, тетраедри, еліпсоїди, тощо). Цей недолік можна усунути використанням деякого маскуванню ділянок елементарного об'єму. Іншим недоліком використання методу є те, що на великих масштабах, тобто при великому розмірі фільтра, початкова функція інтенсивностей сильно деформує випадкове поле, нівелюючи його присутність. Через це, застосовуючи перерізи, неможливо побудувати окремі великорозмірні кластери, які б простягалися через весь перехідний шар. Якщо відкинути початкову функцію інтенсивностей, і безпосередньо використовувати випадкове поле, отримані гетерогенні структури будуть мати велику кількість розривів між кластерами та базовими фазами середовища. Для уникнення такої ситуації, при додаванні до знайденого огрубленого поля значення функції інтенсивності, достатньо помножити останнє на деякий коефіцієнт. Враховуючи досить велику кількість елементів матриці елементарного об'єму, високу латентність доступу до пам'яті на SIMD архітектурах, для побудови випадкових градуїованих перехідних шарів, пропонується наступна процедура:

1. Застосувати до початкової функції інтенсивностей $\lambda(x, y, z)$, збереженої у матриці елементарного об'єму F , подвійний переріз на рівнях $F_0 = 0 + \varepsilon$ та $F_1 = 1 - \varepsilon$, де $0 \leq \varepsilon \leq 1$. Прийняти значення, що не потрапляють в переріз як замасковані – присвоїти їм протилежні по знаку значення, зменшені на деяку сталу C :

$$F(x, y, z) = \begin{cases} -F - C, & F < F_0, \\ -F - C, & F > F_1, \\ F, & F_0 \leq F \leq F_1, \end{cases} \quad (3.6)$$

при цьому вважаємо інтенсивність однієї фази середовища рівну нулеві, а іншої – рівну одиниці. Константа C необхідна для випадків, коли потрібно розглядати інтенсивності, рівні нулеві чи одиниці. Для уникнення помилок заокруглення в числах з плаваючою комою, рекомендується приймати $1 < C \leq 2$. Немає необхідності створювати окрему матрицю маскування.

2. Створити нову матрицю G такого ж розміру та побудувати в ній поле із застосуванням необхідного фільтра, за допомогою описаного методу

побудови випадкових скалярних полів.

3. Помножити незамасковані значення функції інтенсивності, збереженої в F , на деякий необхідний, наперед визначений коефіцієнт α та додати до них значення побудованого випадкового скалярного поля G .
4. Нормалізувати незамасковані значення F .
5. Зняти маску з елементів матриці F :

$$F(x, y, z) = \begin{cases} -F - C, & F < 0, \\ F, & F \geq 0. \end{cases} \quad (3.7)$$

Приклад роботи описаної процедури наведено на *Рис. 3.4*. Мультимасштабне моделювання структури композиційних матеріалів можна здійснити на основі ітераційного застосування процедури маскування та побудови випадкових скалярних полів. Запропонований метод побудови випадкових мікрорівневих

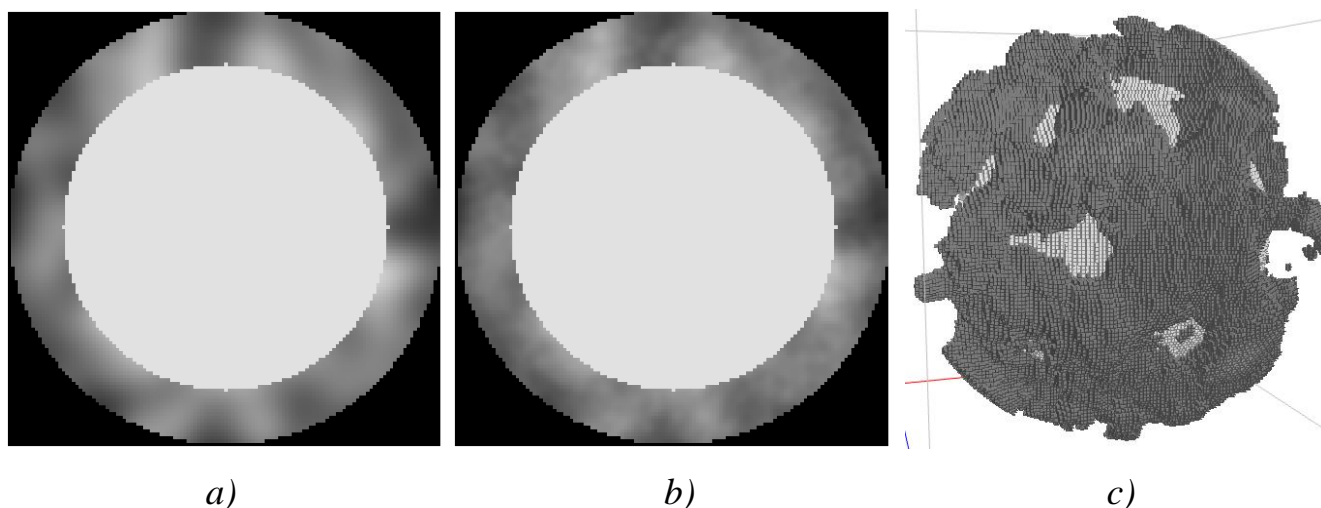


Рис. 3.4 Приклад моделювання випадкових градуйованих перехідних шарів з маскуванням. Елементарний об'єм є матрицею $128 \times 128 \times 128$ елементів. У центрі розміщено сферу радіусом 64 елементи. Перехідний шар становить $25\% = 16$ елементів. Зображено переріз по екватору: а) результат застосування Гаусового фільтру у формі сфери радіусом 16 елементів та з заданою функцією інтенсивності, помноженою на 0,25; б) результат повторного застосування Гаусового фільтру у формі сфери радіусом 4 елементи та з функцією інтенсивності з попереднього кроку помноженою на 5,0; в) результат застосування єдиного перерізу, показано інтенсивності $\geq 0,55$

перехідних шарів дає змогу моделювати рекурентно при різних масштабах структури гетерогенних середовищ, як комбінацію детермінованих елементів з заданими стохастичним перехідними шарами між ними.

Використання у ролі елементарного об'єму матриці інтенсивностей, дає змогу одночасно використовувати в моделях усі описані методи генерування мікроструктури КМ та їх комбінації. Визначення складових характеристик моделі, здійснюється простим вибором необхідного діапазону інтенсивностей, тобто застосуванням перерізів на необхідному рівні інтенсивностей.

Розглянемо можливість використання запропонованих мікрорівневих моделей структури КМ у задачах чисельного моделювання теплофізичних процесів методом скінченних елементів. Згідно наведеного у попередніх розділах алгоритму побудови проекційно-сіткової схеми, ключовим етапом є дискретизація об'єкту моделювання [96]. У залежності від вибору порядку та форми локальних інтерполяційних функцій, задача дискретизації фактично визначатиме характеристики збіжності обчислень та адекватність моделі загалом [147]. Контроль густини дискретизації у місцях, де очікуються великі градієнти шуканих величин, дає змогу значно, зменшити кількість модельних обчислень. Для мінімізації похибок апроксимації, скінченний елемент повинен бути рівностороннім. Елемент дає найкращу апроксимацію шуканої величини, коли значення у його вузлах не відрізняються.

У попередньому розділі обґрунтовано вибір скінченних симплекс елементів для дискретизації моделей структури КМ. Зокрема, зазначено наявність ефективних методів автоматичної побудови скінченно-елементних сіток на симплекс-елементах (тріангуляцій) для тіл практично будь-якої складності. Існують два основні класи методів побудови таких сіток – прямі та ітераційні [96, 148-150]. У прямих методах сітка будується за один етап, причому її топологія (інакше кажучи, граф зв'язків між вузлами) і координати всіх вузлів наперед визначені. В ітераційних методах сітка будується послідовно – на кожному кроці додається один або кілька елементів, до того ж, спочатку не відомі ні координати вузлів, ні топологія сітки. Крім того, координати вузлів і топологія можуть

змінюватися протягом процесу побудови. Зауважимо, що термін "триангуляція" застосовується для дискретизацій симплексами в довільних розмірностях.

Ітераційні методи на основі критерію Делоне [150, 151] є найбільш розвиненими методами триангуляції для методу скінченних елементів, які дають змогу повністю автоматизувати процес побудови скінченно-елементної сітки [151]. Триангуляція задовольняє умові Делоне, якщо всередину кола, описаного навколо будь-якого побудованого трикутника, не потрапляє жодна із заданих точок триангуляції. Відомо [150], що триангуляція Делоне на заданій множині точок, має максимальну суму мінімальних кутів елементів, тобто в даному сенсі є оптимальною за формою утворених симплексів.

Результатом роботи ітераційних методів триангуляції на основі критерію Делоне є нерегулярні скінченно-елементні сітки, що контролюють густину дискретизації в областях очікуваних великих градієнтів. Недоліком цих алгоритмів є їх складність і підвищені вимоги до арифметичних операцій з плаваючою комою [151, 152], що негативно впливає на характеристики стійкості. Алгоритми важко піддаються доменній декомпозиції, особливо на SIMD архітектурах обчислювальних пристроїв.

При виконанні даної роботи було досліджено вплив використання класів регулярних скінченно-елементних сіток та нерегулярних адаптивних скінченно-елементних сіток, що відповідають критерію Делоне на результати чисельного моделювання методами скінченних елементів задачі теплопровідності. Встановлено, що побудова регулярних сіток є на порядки простішою і швидшою, ніж побудова нерегулярних. Така триангуляція особливо ефективна при розв'язанні задачі оптимального проектування КМ, що передбачає проведення значного обсягу чисельних експериментів. Для досягнення точніших результатів моделювання, що відповідають використанню нерегулярних триангуляцій, достатньо згустити регулярну дискретизацію. Зокрема, отримані результати чисельних експериментів засвідчують, що реалізація типової задачі моделювання процесу теплопровідності в композиційному матеріалі з сферичними вкрапленнями на основі ітераційного алгоритму побудови нерегулярних

адаптивних скінченно-елементних сіток на основі критерію Делоне складає такі часові затрати: генераування моделі структури КМ (топология + склад) $\leq 1\%$; генерування скінченно-елементної сітки (дискретизація) $\approx 23-30\%$; побудова, розв'язування системи лінійних алгебраїчних рівнянь та знаходження ефективних характеристик $\approx 69-76\%$. Наприклад, генерування 65 сферичних вкраплень що займають 25% об'єму композиту на ЕОМ пересічної комплектації триває 0,086 с.; генерація сітки з 80219 елементів для цієї топології триває 126,173 с.; формування і розв'язування СЛАР з шириною стрічки матриці 1570 триває 383,723 с.. Ітераційний процес оптимального проектування займатиме набагато більше машинного часу та ресурсів.

Спираючись на отримані результати, тут пропонується використовувати побудовані коміркові мікрорівневі моделі структури КМ безпосередньо як регулярні сітки скінченних елементів. Для цього застосовується прямий шаблонний метод [149] тріангуляції, в якому кожні вісім сусідніх комірок, розглядаються як вершини куба, що розбивається на шість тетраєдрів. Такий підхід, на відміну від класичного (структура-дискретизація-побудова та розв'язування СЛАР), виключає етап дискретизації та значно зменшує кількість обчислень. Переваги підходу полягають в:

- простоті та відносно невеликій кількості машинних обчислень при дискретизації – не потрібно зберігати інформацію про сітку, оскільки вона є регулярною;
- можливості безпосереднього застосування методів доменної декомпозиції обчислень та відповідній ефективній реалізації на пристроях з великою кількістю обчислювальних вузлів;
- універсальності, що дає змогу, однотипно будувати такі складні моделі структури композиційних матеріалів, як модель випадкових скалярних полів, випадкові коміркові моделі та моделі з детермінованими геометричними включеннями, а також комбінацію цих моделей з можливістю побудови функціональних перехідних шарів;
- можливості безпосередньої реалізації методів візуалізації результатів

модельовання (так званий, об'ємний рендеринг – англ. volume rendering), наприклад відображаючи кожен регулярну комірку у вузол тривимірної текстури;

- відповідності сітки, утвореної даним шаблонним методом, критерію Делоне, тобто її оптимальність по формі елементів;
- спрощенні апостеріорних оцінок точності та відповідній можливості перевірки реалізації моделей завдяки регулярності сітки – елементи безпосередньо відповідають теоретичному характерному розміру, що фігурує у формулюванні теоретичних основ методу скінченних елементів.

Недолік, що виражається неможливістю локального контролювання густини дискретизації можна усунути глобальною зміною густини. При цьому, зайва тривалість обчислень нівелюється декомпозицією та виконанням на SIMD обчислювальних пристроях.

Можливі подальші напрямки розвитку описаних в даному підрозділі моделей застосуванням детальніших методів дискретизації регулярних топологічних структур, що зокрема застосовуються в технологіях об'ємного рендерингу, наприклад алгоритм "маршуючих кубів" [153-155].

3.2 Розроблення моделей аналізу теплофізичних процесів в мікрорівневих структурах композитів на основі методу скінченних елементів

Враховуючи досить широке коло теплофізичних явищ, у даному підрозділі розгляд обмежено лінійними стаціонарними задачами теплопровідності та пружності, на основі яких виводиться формулювання зв'язаної задачі термопружності.

Лінійна стаціонарна задача теплопровідності

Чисельне модельовання задачі стаціонарної теплопровідності в елементарних об'ємах КМ є базовим та дає змогу знайти ефективний коефіцієнт теплопровідності λ_{eff} . За основу береться стандартизований [74, 75] метод

знаходження λ_{eff} деякого зразка матеріалу товщиною d :

$$\lambda_{eff} = \frac{d \cdot q}{\Gamma_q \Delta T} = \frac{d \cdot q}{\Gamma_q (T_{\Gamma_q} - T_{\infty})}, \quad (3.8)$$

коли тепловий потік $\partial T / \partial \mathbf{n} = q$, тобто крайова умова Неймана на одній з сторін елементарного об'єму $\Gamma_q \subset \mathbb{R}^2$, та температура навколишнього середовища T_{∞} , тобто крайова умова Діріхле на протилежній стороні $\Gamma_{T_{\infty}} \subset \mathbb{R}^2$, є відомими. На решті сторін крайові умови фактично не вказуються – це, так звані, "плаваючі" сторони ($\partial T / \partial \mathbf{n} = 0$):

$$\begin{cases} \mathcal{L}(T(\mathbf{r})) = 0 \Rightarrow \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0, & \mathbf{r} = \{x, y, z\} \in \Omega, \\ \mathcal{L}_q(T(\mathbf{r}))|_{\Gamma_q} = q \Rightarrow \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}}|_{\Gamma_q} = q, \quad \mathbf{n} \perp \Gamma_q, \quad \mathcal{L}_{T_{\infty}}(T(\mathbf{r}))|_{\Gamma_{T_{\infty}}} = T_{\infty} \Rightarrow T|_{\Gamma_{T_{\infty}}} = T_{\infty}. \end{cases} \quad (3.9)$$

Слід зауважити, що температурне поле повинно бути неперервним при переході між фазами композиту, тобто необхідно вказати, крайову умову четвертого роду, що також називають ідеальним контактом. Але, при подальшому чисельному розв'язуванні задачі методом скінченних елементів, ця умова автоматично задовольняється вимогою узгодженості скінченно-елементного базису [99], тому явно не вказується.

Наближений пробний розв'язок шукається у вигляді:

$$T(\mathbf{r}) \approx \tilde{T}(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^M T_j \varphi_j(\mathbf{r}), \quad (3.10)$$

де: T_j – невідома температура у комірках елементарного об'єму, яку необхідно визначити; φ_j – деяка проста поліноміальна базисна функція. Підставивши пробний розв'язок в крайову задачу отримаємо відмінні від нуля нев'язки:

$$\mathcal{L}(\tilde{T}(\mathbf{r})) = R^{\Omega}(\mathbf{r}) \neq 0, \quad \mathcal{L}_q(\tilde{T}(\mathbf{r}))|_{\Gamma_q} = R^{\Gamma_q}(\mathbf{r}) \neq q, \quad \mathcal{L}_{T_{\infty}}(\tilde{T}(\mathbf{r}))|_{\Gamma_{T_{\infty}}} = R^{\Gamma_{T_{\infty}}}(\mathbf{r}) = T_{\infty}. \quad (3.11)$$

Зауважимо, що $R^{\Gamma_{T_{\infty}}}$ задовольняється точно.

Найкращою апроксимацією точного розв'язку $T(\mathbf{r}) \in \mathcal{H}^{\infty}(\Omega)$ завжди є

ортогональна проекція $\tilde{T}(\mathbf{r})$ в підпростір $C^1 \subset \mathcal{H}^\infty(\Omega)$ що визначається базисними функціями φ :

$$\langle R^\Omega(\mathbf{r}), \varphi_i^\Omega(\mathbf{r}) \rangle + \langle R^{\Gamma_q}(\mathbf{r}), \varphi_i^{\Gamma_q}(\mathbf{r}) \rangle = 0, \quad i=1,2,\dots,M, \quad \varphi_i^\Omega = -\varphi_i^{\Gamma_q}, \quad (3.12)$$

або:

$$\begin{aligned} & \iiint_{\Omega} \varphi_i^\Omega(\mathbf{r}) \left[\sum_{j=1}^M T_j \mathcal{L}(\varphi_j(\mathbf{r})) \right] d\Omega + \\ & + \iint_{\Gamma_q} \varphi_i^{\Gamma_q}(\mathbf{r}) \left[\sum_{j=1}^M T_j \mathcal{L}(\varphi_j(\mathbf{r})) - q \right] d\Gamma = 0, \quad 1 \leq i, j \leq M. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Гладкість C^1 пробного розв'язку є мінімально допустимою, оскільки в початковому рівнянні наявні похідні щонайвище другого порядку. Отриманий вираз можна переписати в слабкій формі, і таким чином послабити вимоги до гладкості базисних функцій ($\varphi \in C^1 \Rightarrow \varphi \in C^0$). Наприклад, використовуючи правило інтегрування за частинами та теорему про дивергенцію, в останній вираз можна включити крайові умови Неймана, що є для нього природними. Скалярний добуток повірочних функцій і нев'язки по області можна розписати як:

$$T_j \iiint_{\Omega} \varphi_i^\Omega \left[\frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial z^2} \right] dx dy dz. \quad (3.14)$$

Приймаючи $u = \varphi_i^\Omega$, $v = d\varphi_j = \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} + \frac{\partial \varphi_j}{\partial z}$, $du = \frac{\partial \varphi_i^\Omega}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_i^\Omega}{\partial y} + \frac{\partial \varphi_i^\Omega}{\partial z}$,

$dv = \frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial z^2}$, відповідно до правила інтегрування за частинами та

застосувавши теорему про дивергенцію, останній вираз можна розписати як:

$$\begin{aligned} & \iiint_{\Omega} \varphi_i^\Omega \left[\frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial z^2} \right] dx dy dz = \int_{\Gamma} \varphi_i^\Omega \left[l_x \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} + l_y \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} + l_z \frac{\partial \varphi_j}{\partial z} \right] d\Gamma - \\ & - \iiint_{\Omega} \left[\frac{\partial \varphi_i^\Omega}{\partial x} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_i^\Omega}{\partial y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} + \frac{\partial \varphi_i^\Omega}{\partial z} \frac{\partial \varphi_j}{\partial z} \right] dx dy dz, \end{aligned} \quad (3.15)$$

де, l_x, l_y, l_z – напрямні косинуси нормалі до границі Γ . Враховуючи, що:

$$\int_{\Gamma} \omega_i^{\Omega} \left[l_x \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} + l_y \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} + l_z \frac{\partial \varphi_j}{\partial z} \right] d\Gamma = \int_{\Gamma} \omega_i^{\Omega} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \mathbf{n}} d\Gamma, \quad (3.16)$$

отримаємо:

$$\begin{aligned} \iiint_{\Omega} \varphi_i^{\Omega} \left[\frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial z^2} \right] dx dy dz &= \int_{\Gamma} \varphi_i^{\Omega} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \mathbf{n}} d\Gamma - \\ &- \iiint_{\Omega} \left[\frac{\partial \varphi_i^{\Omega}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_i^{\Omega}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} + \frac{\partial \varphi_i^{\Omega}}{\partial z} \frac{\partial \varphi_j}{\partial z} \right] dx dy dz. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Для описаного рівняння природними крайовими умовами є умови Неймана, для яких, розписавши скалярний добуток вагових функцій і нев'язки по границі, отримаємо:

$$\int_{\Gamma} \varphi_i^{\Gamma} \left[T_j \frac{\partial \varphi_j}{\partial \mathbf{n}} - q \right] d\Gamma = T_j \int_{\Gamma} \varphi_i^{\Gamma} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \mathbf{n}} d\Gamma - \int_{\Gamma} q \varphi_i^{\Gamma} d\Gamma. \quad (3.18)$$

Приймаючи вагові функції для нев'язок по області і по границі як $\varphi_i^{\Omega} = -\varphi_i^{\Gamma} = \varphi_j$ (див. (3.12)), суму скалярних добутків по всіх нев'язках можна записати як:

$$\begin{aligned} T_j \iiint_{\Omega} \varphi_i^{\Omega} \left[\frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial z^2} \right] dx dy dz + T_j \int_{\Gamma} \varphi_i^{\Gamma} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \mathbf{n}} d\Gamma - \int_{\Gamma} q \varphi_i^{\Gamma} d\Gamma &= 0 \\ T_j \int_{\Gamma} \varphi_i^{\Omega} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \mathbf{n}} d\Gamma - T_j \iiint_{\Omega} \left[\frac{\partial \varphi_i^{\Omega}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_i^{\Omega}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} + \frac{\partial \varphi_i^{\Omega}}{\partial z} \frac{\partial \varphi_j}{\partial z} \right] dx dy dz + \\ &+ T_j \int_{\Gamma} \varphi_i^{\Gamma} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \mathbf{n}} d\Gamma - \int_{\Gamma} q \varphi_i^{\Gamma} d\Gamma = 0, \\ T_j \int_{\Gamma} \varphi_i^{\Omega} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \mathbf{n}} d\Gamma - T_j \iiint_{\Omega} \left[\frac{\partial \varphi_i^{\Omega}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_i^{\Omega}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} + \frac{\partial \varphi_i^{\Omega}}{\partial z} \frac{\partial \varphi_j}{\partial z} \right] dx dy dz - \\ &- T_j \int_{\Gamma} \varphi_i^{\Omega} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \mathbf{n}} d\Gamma + \int_{\Gamma} q \varphi_i^{\Omega} d\Gamma = 0, \\ \left[\iiint_{\Omega} \left[\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} + \frac{\partial \varphi_i}{\partial z} \frac{\partial \varphi_j}{\partial z} \right] dx dy dz \right] T_j &= q \iint_{\Gamma_q} \varphi_i d\Gamma. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Змінимо позначення на більш звичні: матрицю жорсткості та вектор навантажень $[\mathbf{K}]\{\mathbf{u}\} = \{\mathbf{f}\}$. Розіб'ємо елементарний об'єм $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ на симплекс-елементи (тетраедри) $\Omega_i \subset \Omega \subset \mathbb{R}^3$, $i = 1, 2, \dots, P$. Використання симплекс-

елементів є допустимим, оскільки такий базис є C^0 гладким та легко узгоджується з сусідніми (температура буде неперервна при переході між елементами). Для цього використовуємо простий шаблонний метод, при якому кожні вісім сусідніх комірок елементарного об'єму утворюють куб, що розбивається на шість тетраедрів. Задача зводиться до знаходження всіх "локальних" матриць жорсткості $[\mathbf{K}]_i$ та векторів $\{\mathbf{f}\}_i$. Для лінійного симплексу елементу базисні функції є його барицентричними координатами:

$$\lambda_i \sum_{j=1}^4 T_{i,j} N_{i,j}(\mathbf{r}) = \lambda_i \begin{bmatrix} N_{i,1}(\mathbf{r}) & N_{i,2}(\mathbf{r}) & N_{i,3}(\mathbf{r}) & N_{i,4}(\mathbf{r}) \end{bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} T_{i,1} & T_{i,2} & T_{i,3} & T_{i,4} \end{Bmatrix}^T = [\mathbf{N}]_i \{\mathbf{u}\}_i, \quad (3.20)$$

де:

$$[\mathbf{N}] = [\mathbf{P}][\mathbf{C}]^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & x & y & z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & x_1 & y_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & y_3 & z_3 \\ 1 & x_4 & y_4 & z_4 \end{bmatrix}^{-1}. \quad (3.21)$$

Оскільки кожна з сторін тетраедра є трикутником – 2D симплексом, можна визначити локальні вектори навантажень. Наприклад, для перших трьох вузлів тетраедра:

$$\{\mathbf{f}\}_i = \iint_{\Gamma_q} [\mathbf{N}]^T q d\Gamma = q \int_{\Gamma_q} \begin{Bmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \\ 0 \end{Bmatrix} d\Gamma = q \int_0^1 \int_0^{1-N_1} \int_0^{1-N_1-N_2} \begin{Bmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \\ 0 \end{Bmatrix} |[\mathbf{Jac}_{\mathbf{N}\mathbf{x}}]^{\Gamma_q}| dN_3 dN_2 dN_1 = q \frac{(\Gamma_q)_i}{3}. \quad (3.22)$$

Для решти вузлів достатньо змінити нумерування. Якщо скінченний елемент не лежить на границі, де визначені крайові умови, його вектор навантаження залишиться рівним нулеві – локальна крайова задача є некоректно поставленою (плаваючою) і не може бути розв'язана без розгляду сусідніх. Для врахування

крайової умови Діріхле достатньо модифікувати локальну систему рівнянь, приймаючи граничну вузлову температуру рівну заданій T_∞ , тобто точно задовольнити нев'язку $R^{\Gamma_{T_\infty}}$.

Записавши слабку форму задачі, можна виразити матричну слабку форму її оператора:

$$[\mathcal{L}] = \nabla(\cdot) = \left\{ \begin{array}{c} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{array} \right\}, \quad (3.23)$$

при цьому кожна локальна задача, може бути записана як:

$$\left[\iiint_{\Omega_i} ([\mathcal{L}][\mathbf{N}]_i)^T [\mathbf{D}]_i ([\mathcal{L}][\mathbf{N}]_i) dx dy dz \right] \{\mathbf{u}\}_i = \{\mathbf{f}\}_i, \quad [\mathbf{D}]_i = \begin{bmatrix} \lambda_i & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_i & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_i \end{bmatrix}. \quad (3.24)$$

Значення матриць $[\mathbf{D}]_i$ залежать від того, в якій модельній фазі Ω_p композиту розміщено скінченний елемент. Вираз $([\mathcal{L}][\mathbf{N}]_i)$ дає 3x4 матрицю, що містить тільки константи:

$$\nabla([\mathbf{P}][\mathbf{C}]^{-1}) = \left\{ \begin{array}{c} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{array} \right\} \cdot \begin{bmatrix} 1 \cdot a_1 & 1 \cdot a_2 & 1 \cdot a_3 & 1 \cdot a_4 \\ + & + & + & + \\ x \cdot b_1 & x \cdot b_2 & x \cdot b_3 & x \cdot b_4 \\ + & + & + & + \\ y \cdot c_1 & y \cdot c_2 & y \cdot c_3 & y \cdot c_4 \\ + & + & + & + \\ z \cdot d_1 & z \cdot d_2 & z \cdot d_3 & z \cdot d_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & b_3 & b_4 \\ c_1 & c_2 & c_3 & c_4 \\ d_1 & d_2 & d_3 & d_4 \end{bmatrix}, \quad (3.25)$$

$$[\mathbf{C}]^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & y_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & y_3 & z_3 \\ 1 & x_4 & y_4 & z_4 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 & a_4 \\ b_1 & b_2 & b_3 & b_4 \\ c_1 & c_2 & c_3 & c_4 \\ d_1 & d_2 & d_3 & d_4 \end{bmatrix}.$$

звідки:

$$[\mathbf{K}]_i \{\mathbf{u}\}_i = \{\mathbf{f}\}_i, \quad [\mathbf{K}]_i = ([\mathcal{L}][\mathbf{N}]_i)^T [\mathbf{D}]_i ([\mathcal{L}][\mathbf{N}]_i) \Omega_i. \quad (3.26)$$

Після знаходження всіх локальних матриць жорсткості та векторів навантаження, за допомогою процедури ансамблювання, їх необхідно зібрати в глобальну СЛАР, розв'язок якої є наближеним розв'язком вихідної крайової задачі (3.9). Розв'язок зручно шукати наближено з допомогою стабілізованого (стійкого до обчислювальних помилок) методу спряжених градієнтів.

Відомо [83, 99, 103], що при симетричній матриці характеристик середовища $[\mathbf{D}]$ (для ізотропних чи ортотропних тіл) розв'язок існує, оператор, і відповідно матриця СЛАР, даної задачі є симетричними обмеженими та додатно визначеними, що разом з лінійною незалежністю барицентричних координат, їх узгодженістю та допустимістю для C^0 гладких розв'язків, є достатньою умовою збіжності побудованої скінченно-елементної моделі.

Лінійна стаціонарна задача пружності

Чисельне моделювання задачі пружності в елементарних об'ємах КМ дає змогу знайти ефективні модуль Юнга E_{eff} та коефіцієнт Пуассона μ_{eff} . Крім того, разом з попередньою, дана задача є основою для зв'язаної задачі термопружності. Модуль Юнга можна визначити як:

$$E_{eff} = \frac{d \cdot f_x}{\Gamma_f \Delta u_x} = \frac{d \cdot f_x}{\Gamma_f (u_{xf} - u_{x\infty})}, \quad f_y, f_z = 0, \quad (3.27)$$

де $u_x, u_y, u_z = \mathbf{u}$ – механічні переміщення вздовж координатних осей x, y, z , відповідно; $f_x, f_y, f_z = \mathbf{f}$ – компоненти поверхневого навантаження, тобто крайова умова Неймана на одній з сторін елементарного об'єму $\Gamma_f \subset \mathbb{R}^2$; $u_{x\infty}$ – відоме початкове переміщення по обраній осі, тобто крайова умова Діріхле на протилежній стороні $\Gamma_{u_\infty} \subset \mathbb{R}^2$. Зауважимо, що компоненти $u_{y\infty}$ та $u_{z\infty}$ фактично не задаються.

Коефіцієнт Пуассона описує поперечну зміну розмірів об'єкта при попередньо вказаних умовах:

$$\mu_{eff} = \frac{\Delta u_y}{\Delta u_x} = \frac{\Delta u_z}{\Delta u_x}. \quad (3.28)$$

Згідно класичної лінійної теорії пружності [84, 85], існує зв'язок між

переміщеннями та деформаціями – тензор деформацій:

$$[\boldsymbol{\varepsilon}] = \begin{bmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \varepsilon_z \\ \gamma_{xy} \\ \gamma_{xz} \\ \gamma_{yz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \partial u_x / \partial x \\ \partial u_y / \partial y \\ \partial u_z / \partial z \\ \partial u_x / \partial y + \partial u_y / \partial x \\ \partial u_x / \partial z + \partial u_z / \partial x \\ \partial u_y / \partial z + \partial u_z / \partial y \end{bmatrix} = [\mathcal{L}]\{\mathbf{u}\}, [\mathcal{L}] = \begin{bmatrix} \partial / \partial x & 0 & 0 \\ 0 & \partial / \partial y & 0 \\ 0 & 0 & \partial / \partial z \\ \partial / \partial y & \partial / \partial x & 0 \\ \partial / \partial z & 0 & \partial / \partial x \\ 0 & \partial / \partial z & \partial / \partial y \end{bmatrix}, \{\mathbf{u}\} = \begin{Bmatrix} u_x \\ u_y \\ u_z \end{Bmatrix}. \quad (3.29)$$

Згідно закону Гука, зв'язок між тензором деформацій та тензором напружень виражається через матрицю характеристик середовища:

$$[\boldsymbol{\sigma}] = \{\sigma_x \quad \sigma_y \quad \sigma_z \quad \tau_{xy} \quad \tau_{xz} \quad \tau_{yz}\}^T = [\mathbf{D}][\boldsymbol{\varepsilon}] = [\mathbf{D}][\mathcal{L}]\{\mathbf{u}\}, \quad (3.30)$$

де:

$$[\mathbf{D}] = \frac{E}{(1+\mu)(1-2\mu)} \cdot \begin{bmatrix} 1-\mu & \mu & \mu & 0 & 0 & 0 \\ \mu & 1-\mu & \mu & 0 & 0 & 0 \\ \mu & \mu & 1-\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\mu}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\mu}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\mu}{2} \end{bmatrix}. \quad (3.31)$$

Запишемо крайову задачу:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{u}(\mathbf{r}) = \{u_x(\mathbf{r}) \quad u_y(\mathbf{r}) \quad u_z(\mathbf{r})\}, \quad \mathbf{r} = \{x, y, z\} \in \Omega, \\ \mathcal{L}(\mathbf{u}(\mathbf{r})) = 0 \Rightarrow \begin{cases} \partial \sigma_x / \partial x + \partial \tau_{xy} / \partial y + \partial \tau_{xz} / \partial z = 0, \\ \partial \tau_{xy} / \partial x + \partial \sigma_y / \partial y + \partial \tau_{yz} / \partial z = 0, \\ \partial \tau_{xz} / \partial x + \partial \tau_{yz} / \partial y + \partial \sigma_z / \partial z = 0, \end{cases} \\ \mathcal{L}_f(\mathbf{u}(\mathbf{r}))|_{\Gamma_f} = \mathbf{f} \Rightarrow \begin{cases} \sigma_x l_x + \tau_{xy} l_y + \tau_{xz} l_z \Big|_{\Gamma_f} = f_x, \\ \tau_{xy} l_x + \sigma_y l_y + \tau_{yz} l_z \Big|_{\Gamma_f} = 0, \\ \tau_{xz} l_x + \tau_{yz} l_y + \sigma_z l_z \Big|_{\Gamma_f} = 0, \end{cases} \\ \mathcal{L}_{\mathbf{u}_\infty}(\mathbf{u}(\mathbf{r}))|_{\Gamma_{\mathbf{u}_\infty}} = \mathbf{u}_\infty \Rightarrow u_x|_{\Gamma_{\mathbf{u}_\infty}} = u_{x\infty}. \end{array} \right. \quad (3.32)$$

Як і в попередньому випадку, крайова умова четвертого роду, тобто ідеальний контакт між фазами композиту, автоматично задовольняється вимогою

узгодженості скінченно-елементного базису, тому явно не вказується.

В матричній формі основне рівняння можна записати як:

$$\mathcal{L}(\mathbf{u}(\mathbf{r})) = 0 \Rightarrow [\mathcal{L}]^T [\mathbf{D}] [\mathcal{L}] \{\mathbf{u}\} = 0. \quad (3.33)$$

Побудуємо апроксимацію методом скінченних елементів, аналогічно до попередньої задачі теплопровідності. Отримаємо рівняння зважених нев'язок:

$$\iiint_{\Omega_i} [\mathbf{N}]_i^T ([\mathcal{L}]^T [\mathbf{D}]_i [\mathcal{L}] \{\tilde{\mathbf{u}}\}_i) d\Omega - \iint_{\Gamma_{fi}} [\mathbf{N}]_i^T \frac{\partial \{\tilde{\mathbf{u}}\}_i}{\partial \mathbf{n}} d\Gamma + \iint_{\Gamma_{fi}} \mathbf{f}_i [\mathbf{N}]_i^T d\Gamma = 0. \quad (3.34)$$

Його також можна звести до слабкої форми, включивши в рівняння крайові умови Неймана:

$$\left(\iiint_{\Omega_i} ([\mathcal{L}] [\mathbf{N}]_i)^T [\mathbf{D}]_i ([\mathcal{L}] [\mathbf{N}]_i) d\Omega \right) \{\mathbf{u}\}_i = \iint_{\Gamma_{fi}} \mathbf{f}_i [\mathbf{N}]_i^T d\Gamma. \quad (3.35)$$

На відміну від попередньої задачі, матриця базисних функцій є розрідженою. Для симплекс-елементів вона записується як:

$$[\mathbf{N}] = \begin{bmatrix} N_1 & 0 & 0 & N_2 & 0 & 0 & N_3 & 0 & 0 & N_4 & 0 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & 0 & N_2 & 0 & 0 & N_3 & 0 & 0 & N_4 & 0 \\ 0 & 0 & N_1 & 0 & 0 & N_2 & 0 & 0 & N_3 & 0 & 0 & N_4 \end{bmatrix}, \quad (3.36)$$

звідки вираз $[\mathcal{L}][\mathbf{N}]$ для всіх елементів записується як (див. (3.25)):

$$[\mathcal{L}][\mathbf{N}] = \begin{bmatrix} b_1 & 0 & 0 & b_2 & 0 & 0 & b_3 & 0 & 0 & b_4 & 0 & 0 \\ 0 & c_1 & 0 & 0 & c_2 & 0 & 0 & c_3 & 0 & 0 & c_4 & 0 \\ 0 & 0 & d_1 & 0 & 0 & d_2 & 0 & 0 & d_3 & 0 & 0 & d_4 \\ c_1 & b_1 & 0 & c_2 & b_2 & 0 & c_3 & b_3 & 0 & c_4 & b_4 & 0 \\ d_1 & 0 & b_1 & d_2 & 0 & b_2 & d_3 & 0 & b_3 & d_4 & 0 & b_4 \\ 0 & d_1 & c_1 & 0 & d_2 & c_2 & 0 & d_3 & c_3 & 0 & d_4 & c_4 \end{bmatrix}. \quad (3.37)$$

Останній вираз знову містить тільки константи, тому знаходження локальних 12x12 матриць жорсткості є тривіальною задачею (3.26). Знаходження локальних векторів навантажень відрізняється від попереднього випадку тим, що вектор розширюється до 12 елементів, по три компоненти навантаження на вузол, кожен з яких необхідно помножити на третину площі відповідної сторони тетраедра. Після знаходження всіх локальних матриць жорсткості та векторів навантаження, за допомогою процедури ансамблювання, їх необхідно зібрати в глобальну СЛАР,

розв'язок якої є наближеним розв'язком вихідної крайової задачі (3.32). Розв'язок зручно шукати наближено з допомогою стабілізованого методу спряжених градієнтів.

Як і в попередньому випадку, відомо [84, 85, 99, 103], що при симетричній матриці характеристик середовища $[D]$ (для ізотропних чи ортотропних тіл) розв'язок існує, оператор, і відповідно матриця СЛАР, даної задачі є симетричними обмеженими та додатно визначеними, що разом з лінійною незалежністю барицентричних координат, їх узгодженістю та допустимістю для C^0 гладких розв'язків, є достатньою умовою збіжності побудованої скінченно-елементної моделі.

Лінійна стаціонарна зв'язана задача термопружності

Зв'язані задачі є мультифізичними і зазвичай розв'язуються двоетапно – спочатку окремо знаходять температурне поле, а потім на його основі – поле переміщень, чи навпаки, в залежності від наявних крайових умов [156]. Тут, на основі попередньо описаних методів розв'язування задачі стаціонарної теплопровідності та задачі пружності пропонується об'єднана чисельна модель розв'язування зв'язаної задачі термопружності в КМ складної структури, що на відміну від традиційних, дає змогу, за наявності, одночасно враховувати крайові умови у вигляді теплових потоків, поверхневих навантажень, та заданих поверхневих температур і переміщень. Об'єднання здійснюється використанням єдиного диференціального матричного оператора. Такий підхід є особливо зручним при обчисленнях програмного забезпечення високого рівня абстрактності, наприклад пакетів FEMLab/COMSOL або FreeFem++.

Моделювання зв'язаної задачі термопружності дає змогу знайти ефективний коефіцієнт теплопровідності λ_{eff} та ефективний лінійний коефіцієнт температурного розширення α_{eff} (ТКЛР) [157, 158]. ТКЛР характеризує теплове розширення твердих матеріалів, при якому змінюються лінійні розміри і форма тіла при зміні його температури та сталому тиску [23, 159]. Експериментально коефіцієнт знаходять за допомогою методів дилатометрії [159]. Теоретично його

можна визначити моделюванням відповідного експерименту, тобто розв'язуванням мультифізичної задачі пружності та теплопровідності. При нагріванні в тілі виникають напруження, спричинені тепловим розширенням матеріалу тіла і навпаки. Розміри теплового розширення при однаковій температурі для різних матеріалів є різними і в загальному випадку ТКЛР можна визначити як:

$$\alpha_{eff} = \frac{1}{d} \frac{\Delta u_x}{\Delta T}, \quad (3.38)$$

при заданому тепловому потоці q (умова Неймана на $\Gamma_f \subset \mathbb{R}^2$) та температурі навколишнього середовища T_∞ (умова Діріхле на протилежній стороні $\Gamma_{u_\infty} \subset \mathbb{R}^2$). Крім того, необхідно обмежити всі компоненти переміщення $u_x = u_y = u_z = 0$ на Γ_{u_∞} , та поперечні переміщення $u_y = u_z = 0$ на бічних сторонах об'єму, залишивши можливість деформуватися тільки в одному напрямку.

Побудуємо чисельну модель. У кожній точці об'єму є невідомими значення температури T та переміщень вздовж координатних осей u_x, u_y, u_z :

$$\mathbf{u}(x, y, z) = \mathbf{u}(\mathbf{r}) = \{T(\mathbf{r}) \quad u_x(\mathbf{r}) \quad u_y(\mathbf{r}) \quad u_z(\mathbf{r})\}^T \quad (3.39)$$

Об'єднаємо зв'язки між переміщеннями та деформаціями (тензор деформацій) і між температурою та потоком тепла (градієнт) в єдиний тензор:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}) = [\mathcal{L}]\{\mathbf{u}\} &= \{q_x \quad q_y \quad q_z \quad \varepsilon_x \quad \varepsilon_y \quad \varepsilon_z \quad \gamma_{xy} \quad \gamma_{xz} \quad \gamma_{yz}\}^T = \\ &= \left\{ \frac{\partial T}{\partial x} \quad \frac{\partial T}{\partial y} \quad \frac{\partial T}{\partial z} \quad \frac{\partial u_x}{\partial x} \quad \frac{\partial u_y}{\partial y} \quad \frac{\partial u_z}{\partial z} \quad \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \quad \frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \quad \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right\}^T, \end{aligned} \quad (3.40)$$

де $[\mathcal{L}]$ – матриця диференціального оператора даної задачі (в слабкій формі), яку можна записати як:

$$[\mathcal{L}] = \begin{bmatrix} \partial/\partial x & \partial/\partial y & \partial/\partial z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \partial/\partial x & 0 & 0 & \partial/\partial y & \partial/\partial z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \partial/\partial y & 0 & \partial/\partial x & 0 & \partial/\partial z \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \partial/\partial z & 0 & \partial/\partial x & \partial/\partial y \end{bmatrix}^T. \quad (3.41)$$

Об'єднаємо зв'язки між тензором деформацій та тензором напружень (закон

Гука) і між градієнтом температури та потоком тепла (закон Фур'є) через єдину матрицю характеристик середовища:

$$[\mathbf{D}] = \begin{bmatrix} \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A & B & B & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & B & A & B & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & B & B & A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C \end{bmatrix}, \quad \begin{aligned} A &= \frac{E(1-\mu)}{(1+\mu)(1-2\mu)}, \\ B &= \frac{\mu E}{(1+\mu)(1-2\mu)}, \\ C &= \frac{E}{2+2\mu}. \end{aligned} \quad (3.42)$$

Система диференціальних рівнянь балансу для даної задачі записується як:

$$[\mathcal{L}]^T [\mathbf{D}] [\mathcal{L}] \{\mathbf{u}\} + \{\mathbf{X}\} = 0, \quad (3.43)$$

де $\{\mathbf{X}\}$ – внутрішні джерела тепла чи внутрішні сили. Знаючи лінійний коефіцієнт теплового розширення α компонентів середовища, можна знайти внутрішні сили:

$$X = \frac{\alpha E}{1-2\mu} \cdot \frac{\partial T}{\partial x}, \quad Y = \frac{\alpha E}{1-2\mu} \cdot \frac{\partial T}{\partial y}, \quad Z = \frac{\alpha E}{1-2\mu} \cdot \frac{\partial T}{\partial z}. \quad (3.44)$$

В свою чергу, під дією напружень матеріал нагрівається – це еквівалентно присутності внутрішнього джерела тепла:

$$Q = \frac{\alpha E}{1-2\mu} \cdot \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\alpha E}{1-2\mu} \cdot \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\alpha E}{1-2\mu} \cdot \frac{\partial u_z}{\partial z}, \quad (3.45)$$

звідки:

$$\{\mathbf{X}\} = \{Q \quad X \quad Y \quad Z\}^T = [\mathcal{L}]^T [\mathbf{J}] \{\mathbf{u}\}, \quad (3.46)$$

де $\{\mathbf{J}\}$ – допоміжна матриця виду:

$$[\mathbf{J}] = \frac{\alpha E}{1-2\mu} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^T. \quad (3.47)$$

Отримані вирази дають змогу записати основне рівняння зважених нев'язок для розв'язку крайової задачі:

$$\begin{aligned}
& \iiint_{\Omega_i} [\mathbf{N}]_i^T ([\mathcal{L}]^T [\mathbf{D}]_i [\mathcal{L}] \{\tilde{\mathbf{u}}\}_i) d\Omega + \iiint_{\Omega_i} [\mathbf{N}]_i^T ([\mathcal{L}]^T ([\mathbf{J}] \{\tilde{\mathbf{u}}\}_i)) d\Omega - \\
& - \iint_{\Gamma_{fi}} [\mathbf{N}]_i^T \frac{\partial \{\tilde{\mathbf{u}}\}_i}{\partial \mathbf{n}} d\Gamma + \iint_{\Gamma_{fi}} \mathbf{f}_i [\mathbf{N}]_i^T d\Gamma = 0.
\end{aligned} \tag{3.48}$$

Це рівняння зводиться до слабкої форми, включаючи в себе крайові умови Неймана:

$$\begin{aligned}
& \left(\iiint_{\Omega_i} ([\mathcal{L}] [\mathbf{N}]_i)^T [\mathbf{D}]_i ([\mathcal{L}] [\mathbf{N}]_i) d\Omega - \right. \\
& \left. - \iiint_{\Omega_i} [\mathbf{N}]_i^T ([\mathcal{L}]^T [\mathbf{J}] [\mathbf{N}]_i) d\Omega \right) \{\mathbf{u}\}_i = \iint_{\Gamma_{fi}} \mathbf{f}_i [\mathbf{N}]_i^T d\Gamma
\end{aligned} \tag{3.49}$$

Як і в попередньому випадку, матриця базисних функцій є розрідженою 4x16 матрицею. вираз $[\mathcal{L}][\mathbf{N}]$ для всіх елементів записується як:

$$\begin{aligned}
& [\mathcal{L}][\mathbf{N}] = [[\mathbf{M}]_1, [\mathbf{M}]_2, [\mathbf{M}]_3, [\mathbf{M}]_4], \\
& [\mathbf{M}]_k = \begin{bmatrix} b_k & c_k & d_k & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b_k & 0 & 0 & c_k & d_k & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_k & 0 & b_k & 0 & d_k \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_k & 0 & b_k & c_k \end{bmatrix}^T.
\end{aligned} \tag{3.50}$$

Другий доданок матриці жорсткості, що описує внутрішні джерела тепла та внутрішні сили, для симплекс-елементів обчислюється на основі барицентричних координат тетраедра, аналогічно до вектора навантажень, з тією різницею, що результат необхідно помножити на чверть об'єму тетраедра:

$$\begin{aligned}
& \iiint_{\Omega_i} [\mathbf{N}]_i^T ([\mathcal{L}]^T [\mathbf{J}] [\mathbf{N}]_i) d\Omega = \\
& = \frac{\Omega_i}{4} \frac{\alpha E}{1-2\mu} \cdot \begin{bmatrix} [\mathbf{M}]_1 & [\mathbf{M}]_2 & [\mathbf{M}]_3 & [\mathbf{M}]_4 \\ [\mathbf{M}]_1 & [\mathbf{M}]_2 & [\mathbf{M}]_3 & [\mathbf{M}]_3 \\ [\mathbf{M}]_1 & [\mathbf{M}]_2 & [\mathbf{M}]_3 & [\mathbf{M}]_3 \\ [\mathbf{M}]_1 & [\mathbf{M}]_2 & [\mathbf{M}]_3 & [\mathbf{M}]_3 \end{bmatrix}, \\
& [\mathbf{M}]_k = \begin{bmatrix} 0 & b_k & c_k & d_k \\ b_k & 0 & 0 & 0 \\ c_k & 0 & 0 & 0 \\ d_k & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{3.51}$$

Знаходження локальних векторів навантажень відрізняється від попереднього випадку тим, що вектор розширюється до 16 елементів, по чотири компоненти (потік тепла + навантаження) на вузол, кожен з яких необхідно помножити на третину площі відповідної сторони тетраедра. Після знаходження всіх локальних матриць жорсткості та векторів навантаження, за допомогою процедури ансамблювання, їх необхідно зібрати в глобальну СЛАР, розв'язок якої є наближеним розв'язком вихідної крайової задачі (3.43).

Особливістю цієї задачі є те, що диференціальний оператор та відповідно СЛАР будуть несиметричними навіть при симетричній матриці характеристик середовища $[D]$ (для ізотропних чи ортотропних тіл), завдяки врахуванню внутрішніх джерел тепла та сил. Оскільки цей доданок у виразі матриці жорсткості стоїть зі знаком мінус, а ТКЛР відповідають нерівності $0 < \alpha < \lambda, E, \mu$, можна переконатися, що система та її диференціальний оператор завжди буде додатно визначена і обмежена (не даватиме безмежностей при інтегруванні). Такі властивості є достатніми для збіжності модельних обчислень за умови лінійної незалежності, допустимості для C^0 гладкості та узгодженості інтерполяційного базису. Названі умови виконуються для обраних симплекс-елементів.

Важливою відмінністю практичної реалізації є неможливість використання такого наближеного методу розв'язування СЛАР як стабілізований метод спряжених градієнтів, що придатний тільки до симетричних систем. Натомість, в даному випадку, використовується стабілізований метод бі-спряжених градієнтів, що є узагальненням попереднього.

3.3 Розроблення методів знаходження ефективних характеристик

композиційних матеріалів на основі методу теплоелектричної аналогії

У попередньому розділі, на основі теорії подібності, було показано теплоелектричну аналогію фізичних процесів, що відбуваються в неперервному середовищі. Спираючись на це, далі буде доведено відповідну повну аналогію неперервних та дискретних систем, що утворюються при побудові чисельного

розв'язку задач методом скінченних елементів. На основі такої аналогії будуть виведені вирази для знаходження ефективних теплофізичних характеристик композиційних матеріалів складної структури, що моделюється мікрорівневими моделями.

Розглянемо процес переходу від неперервної системи до її дискретного аналогу. Для забезпечення умов однозначності та виконання третьої теореми подібності, необхідно проаналізувати геометричні властивості обидвох систем. Для прикладу розглянемо двовимірні лінійні симплекс-елементи в задачі стаціонарної теплопровідності. Розширення розгляду на вищі розмірності є тривіальним. Приймаючи для елемента деякий коефіцієнт провідності (жорсткості) α , або більш узагальнено – тензор характеристик середовища $[\mathbf{D}]$, можна знайти локальну матрицю жорсткості, що визначає взаємозв'язок між вузлами елемента:

$$[\mathbf{K}] = \iint ([\mathcal{L}][\mathbf{N}])^T [\mathbf{D}] ([\mathcal{L}][\mathbf{N}]) d\Omega = ([\mathcal{L}][\mathbf{N}])^T \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \alpha \end{bmatrix} ([\mathcal{L}][\mathbf{N}]) \Omega. \quad (3.52)$$

Виходячи з того, що коефіцієнти матриці градієнтів $[\mathcal{L}][\mathbf{N}]$ мають безпосередній геометричний зміст – є проекціями сторін елемента на координатні осі, отримаємо:

$$\begin{aligned} [\mathbf{K}] &= \frac{1}{2\Omega} \begin{bmatrix} b_1 & c_1 \\ b_2 & c_2 \\ b_3 & c_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \alpha \end{bmatrix} \frac{1}{2\Omega} \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & b_3 \\ c_1 & c_2 & c_3 \end{bmatrix} \Omega = \\ &= \frac{\alpha}{4\Omega} \begin{bmatrix} b_1^2 + c_1^2 & b_1 b_2 + c_1 c_2 & b_1 b_3 + c_1 c_3 \\ b_1 b_2 + c_1 c_2 & b_2^2 + c_2^2 & b_2 b_3 + c_2 c_3 \\ b_1 b_3 + c_1 c_3 & b_2 b_3 + c_2 c_3 & b_3^2 + c_3^2 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (3.53)$$

Площу трикутника можна записати через коефіцієнти цієї ж матриці, наприклад, приймаючи базовим перший вузол:

$$2\Omega = \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} x_2 - x_1 & y_2 - y_1 \\ x_3 - x_1 & y_3 - y_1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} c_3 & -b_3 \\ -c_2 & b_2 \end{vmatrix}. \quad (3.54)$$

Повторюючи ці дії для інших вузлів, отримаємо:

$$2\Omega = b_1c_2 - b_2c_1 = b_1c_3 - b_3c_1 = b_2c_3 - b_3c_2. \quad (3.55)$$

Враховуючи останню формулу, взаємозв'язок між вузлами елемента можна виразити за допомогою провідностей Y , або обернених до них величин – опорів R [160, 161]:

$$\begin{aligned} [\mathbf{K}]_{1,2} = [\mathbf{K}]_{2,1} = Y_{1,2} &= \frac{1}{R_{1,2}} = \frac{1}{2} \alpha \frac{b_1b_2 + c_1c_2}{b_1c_2 - b_2c_1}, \\ [\mathbf{K}]_{1,3} = [\mathbf{K}]_{3,1} = Y_{1,3} &= \frac{1}{R_{1,3}} = \frac{1}{2} \alpha \frac{b_1b_3 + c_1c_3}{b_1c_3 - b_3c_1}, \\ [\mathbf{K}]_{2,3} = [\mathbf{K}]_{3,2} = Y_{2,3} &= \frac{1}{R_{2,3}} = \frac{1}{2} \alpha \frac{b_2b_3 + c_2c_3}{b_2c_3 - b_3c_2}. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Локальна матриця жорсткості (опорів/провідностей) набуде вигляду:

$$[\mathbf{K}] = \begin{bmatrix} -(Y_{1,2} + Y_{1,3}) & Y_{1,2} & Y_{1,3} \\ Y_{1,2} & -(Y_{1,2} + Y_{2,3}) & Y_{2,3} \\ Y_{1,3} & Y_{2,3} & -(Y_{1,3} + Y_{2,3}) \end{bmatrix}. \quad (3.57)$$

Отримана матриця, є нічим іншим, ніж комбінацією діагональної матриці провідностей та булевої матриці з'єднань з методу вузлових потенціалів – методу розрахунку електричних кіл через систему лінійних алгебраїчних рівнянь, в якій невідомими є потенціали у вузлах кола [86]. У матричному вигляді система рівнянь для методу вузлових потенціалів записується як:

$$[\mathbf{A}][\mathbf{Y}][\mathbf{A}]^T\{\mathbf{U}\} = -[\mathbf{A}](\{\mathbf{J}\} + [\mathbf{Y}]\{\mathbf{E}\}), \quad (3.58)$$

де: $[\mathbf{A}]$ – булева матриця з'єднань (матриця інцидентності вузлів до ребер); $[\mathbf{Y}]$ – діагональна матриця провідностей; $\{\mathbf{U}\}$ – шукані вузлові потенціали; $\{\mathbf{J}\}$ – джерела струму (потоків); $\{\mathbf{E}\}$ – джерела напруги. Використовуючи елементи аналогії (Таблиця 2.1), цю систему рівнянь можна звести до:

$$[\mathbf{K}]\{\mathbf{U}\} = \{\mathbf{f}\}, \quad [\mathbf{K}] = [\mathbf{A}][\mathbf{Y}][\mathbf{A}]^T, \quad \{\mathbf{f}\} = -[\mathbf{A}](\{\mathbf{J}\} + [\mathbf{Y}]\{\mathbf{E}\}), \quad (3.59)$$

звідки, робиться висновок, що елементи аналогії між фізичними процесами безпосередньо закладені в базисні функції лінійних скінченних елементів – вони відображають параметри опорів/провідностей аналогічної дискретної системи (Рис. 3.5). Якщо ж розглядати задачі механіки, то матриця жорсткості $[\mathbf{K}]$ буде

описувати поведінку симплекс-елементу, кожне ребро якого є ідеалізованою пружиною з заданим коефіцієнтом жорсткості аналогічної дискретної механічної системи. І так далі, для інших аналогій, зокрема й для мультифізичних задач. Також очевидно, що можна розглядати взаємозв'язок не тільки між сусідніми вузлами. У такому випадку ситуація буде аналогічною до використання комплекс-елементів (Рис. 3.5). Слід зазначити, що аналогії між неперервними та дискретними скінченно-елементними системами можна поширити на нестационарні задачі. При їх розгляді набувають безпосереднього фізичного змісту матриці демпфування, що описують ємнісні характеристики системи, та матриці маси, що описують індуктивні характеристики аналогічних дискретних систем.

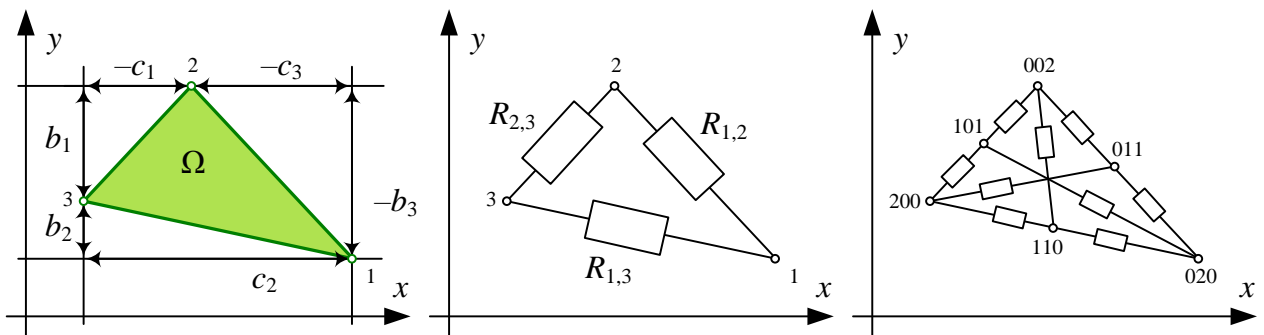


Рис. 3.5 Приклад фрагменту аналогічної дискретної системи для неперервних задач провідності на основі двовимірних симплекс та комплекс елементів

Виведемо формули знаходження ефективного коефіцієнту провідності неперервного гетерогенного середовища. Для систем з регулярною структурою λ_{eff} визначають на основі аналізу переносу тепла в елементарній комірці. Для отримання простих наближених залежностей для λ_{eff} проводять дискретизацію об'єкту моделювання на комірки ізометричними і адіабатичними поверхнями, в результаті чого об'єкт подається у вигляді сукупності ділянок з паралельним і послідовним з'єднанням теплових опорів [32, 128, 129]. Такий підхід є актуальним, якщо можна передбачити температурне поле, наприклад, якщо топологія КМ є простою, багат шаровою з однорідними шарами.

Виходячи з теплоелектричних аналогій, виведемо залежність λ_{eff} для

однорідних шарів КМ у формі паралелепіпеда [128]. На *Рис. 3.6.a* зображено модель однорідного шару КМ, поверхні якого l_1 та l_2 є ізотермічними з температурами T_1 та T_2 , відповідно. Торці шару є адіабатними. Внутрішні джерела тепла відсутні, коефіцієнт теплопровідності матеріалу λ . Потрібно знайти значення стаціонарного теплового потоку, що проходить через цей шар.

Згідно з (3.8) та теплоелектричною аналогією, різницю температур можна знайти як:

$$\lambda_{eff} = \frac{d \cdot q_{\Gamma}}{\Delta T} = \frac{d}{R_{T,d}}, \quad (3.60)$$

де: $R_{T,d} = \Delta T / q_{\Gamma}$ – так званий, тепловий або енергетичний опір ділянки неперервного середовища. Згідно з законом Фур'є, різницю температур можна розписати як:

$$\Delta T = \int_{l_1}^{l_2} \frac{q_{\Gamma}(l)}{\Gamma \lambda} dl, \quad (3.61)$$

звідки можна знайти значення питомого теплового опору:

$$R_T = \frac{1}{q_1} \int_{l_1}^{l_2} \frac{q_{\Gamma}(l)}{\Gamma(l) \lambda(l)} dl, \quad (3.62)$$

де: $\Gamma(l)$ – аналітичний опис площі ізотермічної поверхні на відстані l від початку відліку; $q_{\Gamma}(l)$ – тепловий потік, через ізотермічну поверхню з площею $\Gamma(l)$; q_1 – тепловий потік, через ізотермічну поверхню з площею $\Gamma(l_1)$.

Якщо на шляху теплового потоку відсутні джерела або стоки енергії, як в тілі, так і на його поверхні, то потік не міняє свого значення, тобто $q_{\Gamma} = q_1$. За умови що $\lambda = const$, вираз (11) можна записати у вигляді:

$$R_T = \frac{1}{\lambda} \int_{l_1}^{l_2} \frac{dl}{\Gamma(l)}. \quad (3.63)$$

Елемент довжини dl шляху теплового потоку, для поверхонь паралелепіпеду (*Рис. 3.6.a*) рівний $dl = dx$, а аналітичний опис ізотермічної поверхні $\Gamma = L_1 L_2$, де L_1 і L_2 це довжина та ширина поверхні, звідки значення питомого теплового

опору в конкретному випадку визначається як:

$$R_T = \frac{1}{\lambda} \int_{l_1}^{l_2} \frac{dx}{L_1 L_2} = \frac{l_2 - l_1}{\lambda L_1 L} = \frac{\delta}{\lambda \Gamma}. \quad (3.64)$$

Розглянемо послідовну модель композиційного матеріалу, що складається з n різнорідних, орієнтованих ортогонально до теплового потоку шарів, товщина та теплопровідність яких δ_i та λ_i , відповідно. Температури поверхонь шарів становлять T_i та T_{i+1} (Рис. 3.6.b).

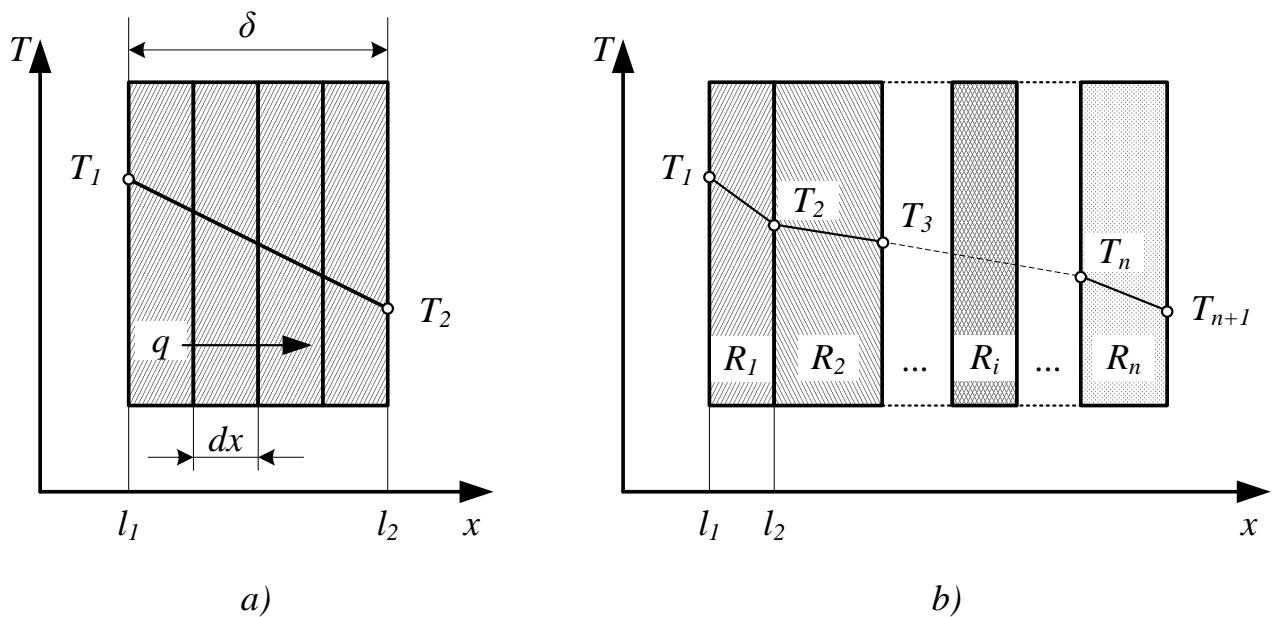


Рис. 3.6 Модель композиційного матеріалу:

a) однорідний шар; b) багат шаровий КМ

Кожен шар КМ можна виразити через питомий тепловий опір R_{Ti} . Всі питомі теплові опори, як видно з Рис. 3.6.b, з'єднані послідовно, тому загальний питомий тепловий опір КМ буде рівним:

$$R_T = \sum_{i=1}^n R_{Ti} = \sum_{i=1}^n \frac{\delta_i}{\lambda_i \Gamma} = \frac{1}{\Gamma} \sum_{i=1}^n \frac{\delta_i}{\lambda_i}. \quad (3.65)$$

Знайдемо вираз питомого теплового опору для багат шарового КМ, з гетерогенними шарами, що лежать паралельно до потоку тепла. Для цього необхідно прийняти припущення, про те, що гетерогенні шари розділені один від одного нескінченно тонким, тепло-непровідним (адіабатним) прошарком. У такому випадку температурне поле кожного з шарів стає рівномірним, і для

кожного з шарів згідно (3.61) можна визначити значення питомого теплового опору R_{Ti} . Оскільки шари розміщені паралельно до потоку тепла, то значення загального питомого теплового опору КМ визначається як:

$$\frac{1}{R_T} = \sum_{i=1}^n \frac{1}{R_{Ti}} = \sum_{i=1}^n \frac{\lambda_i \Gamma_i}{\delta_i} \Rightarrow R_T = \frac{\delta}{\sum_{i=1}^n \lambda_i \Gamma_i}. \quad (3.66)$$

Прийняте припущення про наявність адіабатних прошарків дає змогу значно спростити обчислення, однак в такому випадку виникає питання щодо адекватності моделі, оскільки при використанні моделей багат шарового композиційного матеріалу з коефіцієнтами теплопровідності, що сильно відрізняються, їх результати будуть дуже спотворені та не відображатимуть реального фізичного процесу. Проблеми подібного роду присутні і при розрахунку λ_{eff} для композиційних матеріалів з компонентами армування у вигляді різномірних вкраплень та волокон. Так реальний тепловий потік, зображений на *Рис. 3.7.a, b*, замінюється на спрощену модель з паралельними лініями потоку, між якими присутні адіабатні прошарки *Рис. 3.7.c*. Враховуючи те, що кількість вкраплень в моделі може бути дуже великою, при обчисленні λ_{eff} , подібні спрощення накопичують велику похибку.

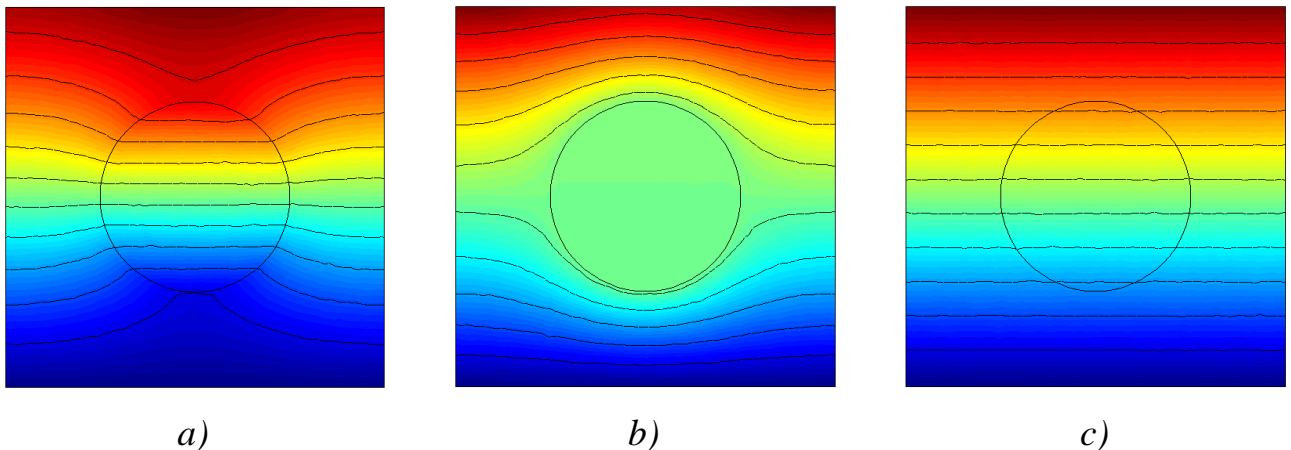


Рис. 3.7 Напрямок теплового потоку та відповідні ізотермічні рівні в моделі КМ з сферичним вкрапленням армування: а) температурне поле при λ вкраплення $<$ λ матриці; б) температурне поле при λ вкраплення $>$ λ матриці; в) спрощена температурне поле

Для знаходження ефективних теплофізичних характеристик композиційних матеріалів складної структури пропонується використовувати результати моделювання задачі теплопровідності. Дискретна модель (3.19)–(3.26), побудована на основі розбиття мікрорівневої моделі структури КМ на скінченні симплекс-елементи, відображає теплове коло. Після аналізу задачі теплопровідності, при граничній умові Діріхле, тобто сталій температурі на одній поверхні КМ, та граничній умові Неймана, тобто сталому тепловому потоці на протилежній поверхні, стають відомі значення температури у вузлах дискретних елементів, отже, стає відома температура на поверхнях КМ. Для знаходження значення λ_{eff} необхідно знайти сталу різницю температур ΔT між поверхнями КМ. В результаті моделювання отримана температура на поверхні може бути нерівномірною, особливо у випадках моделювання КМ з коефіцієнтами теплопровідності компонентів армування, що сильно відрізняються. Тому, для знаходження ΔT доцільно використати модель паралельного з'єднання опорів (3.66): неоднорідну температуру поверхні, утворену при заданому тепловому потоці, описує набір вузлів скінченних елементів, при цьому на протилежній поверхні КМ температура є відомою і рівномірною – кожен елемент поверхні відображатиме питомий тепловий опір R_{Ti} , значення якого виражається як:

$$R_{Ti} = \frac{1}{3(\Gamma_q)_i \cdot q} \sum_{j=1}^3 \left((T_{\Gamma_q})_{i,j} - T_{\infty} \right), \quad (3.67)$$

де, $n=3$ – кількість вузлів елемента поверхні; $(\Gamma_q)_i$ – площа елемента поверхні; q – відомий тепловий потік через Γ_q (умова Неймана); $(T_{\Gamma_q})_{i,j}$ – значення температури у i -му вузлі j -го елемента на поверхні КМ; T_{∞} – відома температура на протилежній поверхні КМ (умова Діріхле).

Згідно з (3.64) та (3.66):

$$\frac{1}{R_T} = \sum_{i=1}^{P_{\Gamma_q}} \frac{1}{R_{Ti}} = \frac{1}{L_1 L_2} \sum_{i=1}^{P_{\Gamma_q}} \frac{1}{\frac{1}{3(\Gamma_q)_i \cdot q} \sum_{j=1}^3 \left((T_{\Gamma_q})_{i,j} - T_{\infty} \right)} = \frac{q}{\Gamma_q} \cdot \sum_{i=1}^{P_{\Gamma_q}} \frac{3(\Gamma_q)_i}{\sum_{j=1}^3 \left((T_{\Gamma_q})_{i,j} - T_{\infty} \right)}, \quad (3.68)$$

де: L_1 і L_2 – довжина та ширина поверхні КМ, що в добутку рівні Γ_q ; P_{Γ_q} –

кількість елементів поверхні КМ.

Різниця температур, між поверхнями КМ виражається як:

$$\Delta T = \left(\frac{1}{\Gamma_q} \cdot \sum_{i=1}^{P_{\Gamma_q}} \frac{3(\Gamma_q)_i}{\sum_{j=1}^3 ((T_{\Gamma_q})_{i,j} - T_{\infty})} \right)^{-1}. \quad (3.69)$$

На основі (3.60) ефективний коефіцієнт теплопровідності КМ визначається як:

$$\lambda_{eff} = \frac{d}{R_{T,d}} = \frac{d \cdot q_{\Gamma}}{\Delta T} = \frac{d \cdot q}{\Gamma_q (T_{\Gamma_q} - T_{\infty})} = \frac{d \cdot q}{\Gamma_q} \sum_{i=1}^{P_{\Gamma_q}} \frac{3(\Gamma_q)_i}{\sum_{j=1}^3 ((T_{\Gamma_q})_{i,j} - T_{\infty})}. \quad (3.70)$$

Розширюючи таку формалізацію на подібні механічні та зв'язані тепломеханічні задачі, отримаємо вирази для знаходження ефективних теплофізичних характеристик мікрорівневої моделі композиційних матеріалів зі складною структурою. Для задачі пружності:

$$E_{eff} = \frac{d \cdot f_x}{\Gamma_f (u_{x,f} - u_{x,\infty})} = \frac{d \cdot f_x}{\Gamma_f} \sum_{i=1}^{P_{\Gamma_f}} \frac{3(\Gamma_f)_i}{\sum_{j=1}^3 ((u_{x,f})_{i,j} - u_{x,\infty})}, \quad (3.71)$$

$$\mu_{eff} = \frac{\Delta u_y}{\Delta u_x} = \frac{\sum_{k=1}^{P_{\Gamma}} |u_{y_1,k} - u_{y_2,k}|}{\Gamma_f} \sum_{i=1}^{P_{\Gamma_f}} \frac{3(\Gamma_f)_i}{\sum_{j=1}^3 ((u_{x,f})_{i,j} - u_{x,\infty})},$$

де: u_{y_1} та u_{y_2} – відповідні поперечні переміщення на бокових сторонах елементарного об'єму. Для зв'язаної задачі термопружності:

$$\alpha_{eff} = \frac{1}{d} \frac{\Delta u_x}{\Delta T} = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^{P_{\Gamma_f}} \frac{\sum_{j=1}^3 ((u_{x,f})_{i,j} - u_{x,\infty})}{3 (T_f)_{i,j} - T_{\infty}}. \quad (3.72)$$

У даному підрозділі вирішується завдання етапу розв'язку оптимізаційної задачі, в підпункті побудови мікрорівневої моделі синтезу ефективних характеристик КМ у вигляді залежності від структурних параметрів композиції, що детально формалізує цільові функції. Як результат, алгоритм знаходження ефективних характеристик КМ можна формалізувати наступним чином:

1. Побудувати елементарний об'єм КМ Ω за допомогою одного з методів побудови мікрорівневих моделей структури (3.1)–(3.7) або їх комбінації, внаслідок чого буде отримано мікрорівневу коміркову модель p -компонентної структури КМ (матриця плюс компоненти армування), що описується парою $\bigcup_p(\Omega_p, \mathbf{D}_p)$, де: \mathbf{D}_p – набір матриць характеристик p -ї складової компоненти чи матриці, $\mathbf{D}_p = \{\lambda_p, E_p, \mu_p, \alpha_p\}$, див. (3.24), (3.31) та (3.42); Ω_p – відповідна геометрична область, тобто її топологія.
2. Проаналізувати моделі з допомогою чисельного розв'язку фізико-математичних задач, що описують відповідний необхідній ефективній характеристиці процес, методом скінченних елементів:
 - лінійна стаціонарна задача теплопровідності (3.9)–(3.26) для наближеного знаходження температурного поля $T(\mathbf{r} \in \Omega)$ та ефективного коефіцієнту теплопровідності λ_{eff} ;
 - лінійна стаціонарна задача пружності (3.29)–(3.37) для наближеного знаходження зв'язаного поля переміщень $\mathbf{u}(\mathbf{r} \in \Omega) = \{u_x(\mathbf{r}), u_y(\mathbf{r}), u_z(\mathbf{r}),\}^T$, ефективних модуля пружності E_{eff} та коефіцієнту Пуассона μ_{eff} ;
 - лінійна стаціонарна зв'язана задача термопружності (3.39)–(3.51) для наближеного знаходження зв'язаного поля температури та переміщень $\mathbf{u}(\mathbf{r} \in \Omega) = \{T(\mathbf{r}), u_x(\mathbf{r}), u_y(\mathbf{r}), u_z(\mathbf{r}),\}^T$ та ефективних коефіцієнту теплопровідності λ_{eff} та лінійного коефіцієнту температурного розширення α_{eff} ;
3. На основі обчислених потенціальних полів, знайти набір ефективних характеристик моделі з допомогою рівнянь (3.70)–(3.72), що відповідає модельній формалізації цільових функцій (критеріїв оптимальності) початкової задачі оптимального проектування композиційного матеріалу. При цьому, оптимізаційними параметрами можуть бути такі типові структурні параметри композиційної моделі, як концентрація компонент

армування, їх розміри, орієнтація, тощо. Зміна параметрів призведе до перерозподілу відповідних значень \mathbf{D}_p та Ω_p , і, як наслідок, до зміни значень ефективних модельних характеристик.

На основі абстракції, що задається: математичною теорією поля; теорією подібності; методами аналогії; методом скінченних елементів у формулюванні зважених нев'язок; запропонований підхід подальшим розвитком можна легко розширити на інші макроскопічні фізичні процеси переносу густини інтенсивних змінних стану, що відбуваються в неперервному гетерогенному середовищі.

3.4 Висновки до розділу 3

Даний розділ присвячений розв'язуванню поставлених в роботі задач вдосконалення чисельних моделей та методів знаходження ефективних теплофізичних характеристик композиційних матеріалів у процесі їх автоматизованого проектування. Зокрема:

1. Дістали подальшого розвитку основні методи синтезу мікрорівневих моделей складних структур композиційних матеріалів: генерування випадкових еліпсоїдних включень, випадкових волокнистих включень, випадкових коміркових моделей, випадкових скалярних полів, функціонально-градуєваних перехідних шарів. Основна відмінність від відомих методів полягає у можливості одночасного використання всіх методів генерування структури та її використання для дискретизації при подальшому розв'язуванні задач аналізу теплофізичних процесів. Це дає змогу здійснити декомпозицію обчислень та ефективно реалізувати їх з допомогою технологій паралельних та розподілених обчислень на пристроях з SIMD архітектурою.
2. Розроблено метод побудови випадкових функціонально-градуєваних перехідних шарів, що дає змогу моделювати, рекурентно при різних масштабах, структури гетерогенних середовищ, як комбінацію детермінованих елементів з заданими стохастичним перехідними шарами

між ними, і таким чином враховувати особливості неоднорідностей структури композиційних матеріалів.

3. На основі методу скінченних елементів дістали подальшого розвитку чисельні моделі теплофізичних процесів, що розглядаються у складних мікрорівневих структурах композиційних матеріалів. Основною відмінністю від відомих є об'єднана за допомогою єдиного матричного диференціального оператора формалізація зв'язаних мультифізичних задач, що дає змогу одночасно враховувати мультифізичні крайові умови. Такий підхід є особливо зручним при використанні в обчисленнях програмного забезпечення високого рівня абстрактності.
 4. На основі використання теорії подібності та методу теплоелектричних аналогій до скінченно-елементної моделі композиційних матеріалів складної структури, вдосконалено методи знаходження ефективних теплофізичних характеристик: коефіцієнту теплопровідності, модуля пружності, коефіцієнту Пуассона та температурного коефіцієнту лінійного розширення; що на основі чисельного моделювання розв'язують обернені задачі аналізу відповідних теплофізичних процесів. Отримані вирази дають змогу формалізувати критерії оптимальності та розв'язувати відповідні задачі оптимального проектування композиційних матеріалів, з допомогою обчислювальної техніки, уникаючи натурних експериментів.
- Основні результати даного розділу опубліковані в роботах [1-7, 11, 12].

РОЗДІЛ 4

РЕАЛІЗАЦІЯ ТА ВЕРИФІКАЦІЯ МОДЕЛЕЙ І МЕТОДІВ ЗНАХОДЖЕННЯ ТЕПЛОФІЗИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОЗИТИВ

4.1 Реалізація декомпозиції обчислень з допомогою технології OpenCL

У попередніх розділах зазначено, що основним чинником, що гальмує використання чисельних мікрорівневих моделей композиційних матеріалів в задачах їх оптимального проектування є необхідність великої кількості машинних обчислень, і тому використання відповідної доменної декомпозиції, що реалізується технологіями паралельних обчислень, є актуальною задачею.

Для реалізації доменної декомпозиції модельних обчислень обрано технологію OpenCL, як таку, що підтримується максимально широким колом розробників обчислювальної техніки з SIMD архітектурою. Розроблені методи генерування мікрорівневих моделей композиційних матеріалів зі складною структурою на основі регулярних комірок-вокселів не містять кроків, що не піддаються декомпозиції, і тому можуть бути максимально ефективно реалізовані з допомогою обраної технології.

Розглянемо реалізацію методу побудови випадкових скалярних полів. Елементарний об'єм є тривимірною матрицею скалярних інтенсивностей розміру "size", що кратний двійці. Матриця розміщується в пам'яті координатора. Враховуючи типові етапи виконання OpenCL програми, пропонується алгоритм:

1. Заповнити елементарний об'єм базовим випадковим рівномірним розподілом – у кожен комірку помістити випадкове число в діапазоні від 0 до 1.
2. Створити на пристрої два буфери пам'яті "data" та "buffer" розміру "size"x"size"x"size". У перший – скопіювати попередньо створений базовий випадковий розподіл інтенсивностей.
3. Створити три програмні ядра Гаусового фільтру, що будуть запускатися на виконання – по одному ядру на кожен вимір задачі.
4. Створити чергу команд.

5. Визначити кількість програмних ядер, що будуть одночасно запущені на виконання, відповідно до наявної на пристрої кількості робочих груп обчислювальних вузлів (по можливості береться максимальна кількість, в ідеальному випадку – по ядру на кожен вузол моделі елементарного об'єму композиційного матеріалу).
6. Застосувати фільтри по одному на вимір задачі:
 - a. Заповнити буфер "buffer" нулями.
 - b. Запустити на виконання знайдену кількість відповідних даному виміру програмних ядер. Дані, що фільтруються, розміщені в буфері "data", результат розміщується в буфері "buffer".
 - c. Скопіювати отримані відфільтровані результати з буферу "buffer" в буфер "data".
7. Скопіювати з пристрою дані, розміщені в будь-якому з буферів, – після останнього виконання кроку б.с вони будуть однаковими.
8. Нормалізувати отримані дані.
9. Знищити всі створені програмні об'єкти.

Оскільки далеко не всі OpenCL пристрої підтримують обчислення з плаваючою комою подвійної точності, у даній роботі відповідні обчислення проводяться в одинарній точності, тобто з використанням типу даних float. З метою мінімізації кількості звернень до пам'яті, Гаусові фільтри реалізовано у вигляді простої функції, див. (2.4):

```
float GaussianFilter(
    float r,
    float x, float y, float z,
    float fx, float fy, float fz)
{
    return exp(-(x*x/fx/fx + y*y/fy/fy + z*z/fz/fz) /
        ((r/2.0) * (r/2.0)));
}
```

Наступним кроком є створення трьох програмних ядер, що будуть запускатися на виконання (по одному ядру на кожен вимір задачі). При створенні

ядер необхідно враховувати ту особливість, що кількість їх запусків на виконання повинна бути кратною кількості груп робочих вузлів, наявних у пристрої, що зазвичай кратна двійці. Тому для спрощення, розміри матриці елементарного об'єму композиційного матеріалу також вибираються рівними деякому степеневі двійки. Крім іншого це дає змогу обійти проблему фільтрації на границях матриці перенесенням індексів на протилежну сторону елементарного об'єму за допомогою простих бітових операцій. Утворені при цьому структури будуть ідентичними на протилежних сторонах елементарного об'єму. Нижче наведено одне з трьох програмних ядер, що утворюють Гаусовий фільтр, див. (2.2):

```

__kernel void applyGaussianFilterX(
    int discreteRadius,
    float ellipsoidScaleFactorX,
    float ellipsoidScaleFactorY,
    float ellipsoidScaleFactorZ,
    __global float *data,
    __global float *buffer,
    int size)
{
    long i = get_global_id(0);
    long j = get_global_id(1);
    long k = get_global_id(2);

    for( int p = -discreteRadius; p <= discreteRadius; ++p)
        buffer[(i * size * size) + (j * size) + k] +=
            data[((i+p)&(size-1)) * size * size) +
                (j * size) + k] *
            GaussianFilter(
                discreteRadius,
                p, 0, 0,
                ellipsoidScaleFactorX,
                ellipsoidScaleFactorY,
                ellipsoidScaleFactorZ);
}

```

Кількість програмних ядер, що будуть одночасно запуснені на виконання, відповідно до наявної на пристрої кількості робочих вузлів, по можливості береться максимальною. Для цього перевіряється інформація конкретного пристрою за OpenCL параметром "CL_DEVICE_MAX_WORK_GROUP_SIZE".

Для побудови випадкових градуїюваних перехідних шарів, описаний алгоритм та його програмну реалізацію слід підставити в процедуру, описану в попередньому розділі, див. (3.6), (3.7).

Мультимасштабне моделювання структури композиційних матеріалів реалізовано на основі ітераційного застосування алгоритму побудови випадкових скалярних полів. На кожній ітерації, вхідними даними є поточні значення інтенсивностей комірок елементарного об'єму – функція інтенсивності. До неї додається випадкове скалярне поле, огрублене Гаусовим фільтром необхідного для поточного масштабу радіусу. Після нормалізації отримана функція інтенсивності передається як вхідні дані на наступну ітерацію.

Розглянемо реалізацію методу побудови випадкових еліпсоїдних включень:

1. Підготувати на пристрої два буфери пам'яті "data" та "initialPoints". Перший буфер розміром "size"x"size"x"size" міститиме результат, другий буфер розміром "кількість включень"x7 – характеристики включень.
2. Згенерувати необхідну кількість характеристик еліпсоїдних включень, що охоплюють: дискретні (відносно розміру елементарного об'єму "size") x, y, z координати включень; α, β, γ кути обертання навколо координатних осей; радіус включення. Дані скопіювати в буфер "initialPoints".
3. Створити OpenCL програмні ядра, що будуть запускатися на виконання, передаючи вхідними аргументами коефіцієнти a, b, c видовження включень вздовж координатних осей, відсотковий розмір перехідного шару та значення інтенсивності, що будуть присвоєні включенням.
4. Створити чергу команд.
5. Визначити кількість програмних ядер, що будуть одночасно запуснені на виконання, відповідно до наявної на пристрої кількості робочих груп

обчислювальних вузлів (в ідеальному випадку по ядру на кожну комірку моделі елементарного об'єму композиційного матеріалу).

6. Запустити ядра на виконання.
7. Скопіювати з пристрою обчислені дані, розміщені в буфері "data".
8. Знищити всі створені програмні об'єкти.

Як і у випадку побудови випадкових скалярних полів та градуїованих перехідних шарів, з метою побудови ідентичних структур на протилежних сторонах моделі КМ використовується спеціальна процедура обчислення геометричної відстані між комірками елементарного об'єму, що визначає найближче положення комірки при абстрактному повторенні об'єму на всіх границях:

```
void distanceOnRepeatedSides(
    float ax, float ay, float az,
    float bx, float by, float bz,
    float *rx, float *ry, float *rz,
    int size)
{
    (*rx) = ax - bx;
    float tmp = ax - size - bx;
    if(tmp * tmp < (*rx) * (*rx)) (*rx) = tmp;
    else tmp = ax + size - bx;
    if(tmp * tmp < (*rx) * (*rx)) (*rx) = tmp;
    (*ry) = ay - by;
    tmp = ay - size - by;
    if(tmp * tmp < (*ry) * (*ry)) (*ry) = tmp;
    else tmp = ay + size - by;
    if(tmp * tmp < (*ry) * (*ry)) (*ry) = tmp;
    (*rz) = az - bz;
    tmp = az - size - bz;
    if(tmp * tmp < (*rz) * (*rz)) (*rz) = tmp;
    else tmp = az + size - bz;
    if(tmp * tmp < (*rz) * (*rz)) (*rz) = tmp;
}
```

Для реалізації обертання включень довкола координатних осей використовується відповідна процедура:

```
inline void rotateXYZ(
    float *x, float *y, float *z,
    float aox, float aoy, float aoz){
    float tmpX, tmpY, tmpZ;
    tmpY = cos(aox) * (*y) - sin(aox) * (*z);
    tmpZ = sin(aox) * (*y) + cos(aox) * (*z);
    tmpX = cos(aoy) * (*x) - sin(aoy) * tmpZ;
    (*z) = sin(aoy) * (*x) + cos(aoy) * tmpZ;
    (*x) = cos(aoz) * tmpX - sin(aoz) * tmpY;
    (*y) = sin(aoz) * tmpX + cos(aoz) * tmpY;}
```

OpenCL ядро побудови еліпсоїдних включень для конкретної комірки елементарного об'єму визначає відстань до центру найближчого включення, враховуючи його орієнтацію та можливе видовження. Якщо комірка потрапляє у область включення чи його перехідний шар, їй присвоюється відповідне значення інтенсивності. Програмний код ядра виглядає наступним чином:

```
__kernel void randomEllipsoids(
    __global float *initialPoints, int ellipsoidNum,
    __global float *data, float transitionLayerSize,
    float ellipsoidScaleFactorX,
    float ellipsoidScaleFactorY,
    float ellipsoidScaleFactorZ,
    float coreValue, int size){
    int i = get_global_id(0); int j = get_global_id(1);
    int k = get_global_id(2);
    if(data[(i * size * size) + (j * size) + k] >= 0){
        for( int c = 0; c<ellipsoidNum; ++c){
            float kk, jj, ii;
            distanceOnRepeatedSides(initialPoints[c*7+0],
                initialPoints[c*7+1], initialPoints[c*7+2],
                k, j, i, &kk, &jj, &ii, size);
            rotateXYZ(&kk, &jj, &ii, initialPoints[c*7+3],
                initialPoints[c*7+4], initialPoints[c*7+5]);}
```

```

kk *= kk; jj *= jj; ii *= ii;
float curRadius =
    kk/ellipsoidScaleFactorX/ellipsoidScaleFactorX +
    jj/ellipsoidScaleFactorY/ellipsoidScaleFactorY +
    ii/ellipsoidScaleFactorZ/ellipsoidScaleFactorZ;
float sphereRadius = initialPoints[c*7+6];
if(curRadius <= sphereRadius*(1.0f-transitionLayerSize)*
    sphereRadius*(1.0f-transitionLayerSize))
    data[(i * size * size) + (j * size) + k] = coreValue;
else if(curRadius <= sphereRadius*sphereRadius){
    float newVal = (sphereRadius - sqrt(curRadius))/
        sphereRadius / transitionLayerSize * coreValue;
    if(data[(i * size * size) + (j * size) + k] < newVal)
        data[(i * size * size) +
            (j * size) + k] = newVal;}}}}

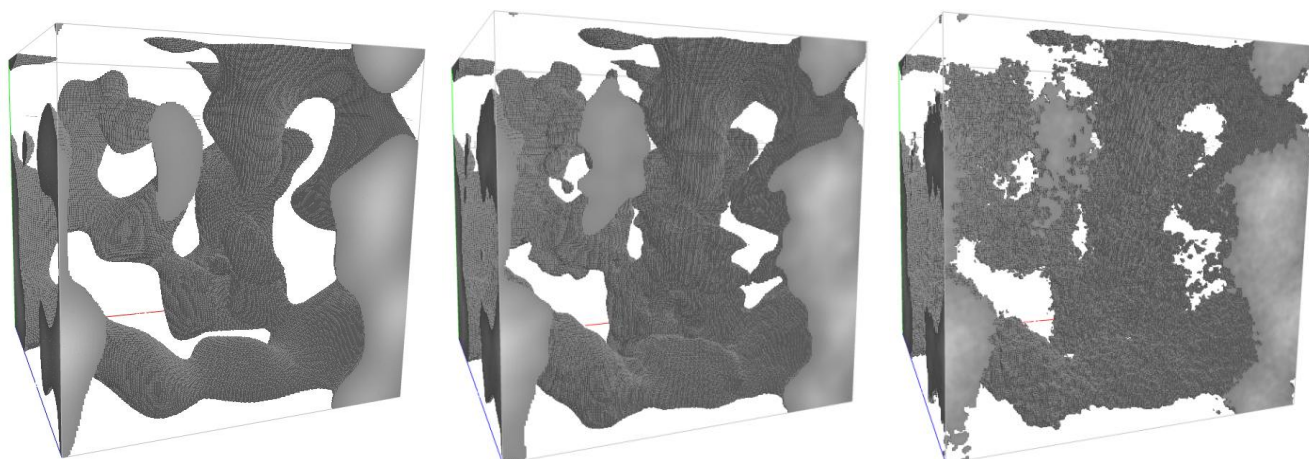
```

Методи побудови випадкових коміркових моделей на основі діаграм Вороного та методи побудови волокнистих включень на основі кривих Без'є реалізуються аналогічно до попередньо описаних. В силу своєї громіздкості ці програмні коди тут не наводяться.

Всі методи були програмно реалізовані на алгоритмічній мові C++11 з використанням OpenCL версії 1.2, та Qt SDK версії 5.4.1. Робоча операційна система Windows 7 Ultimate x64. Програма зібрана під розрядність x64 за допомогою компілятора MinGW версії 4.9.2. Моделювання проводилися на персональному комп'ютері пересічної комплектації. Зокрема:

- OpenCL GPU: "Cedar (AMD Radeon HD 6300M Series)", AMD OpenCL SDK 2.9.1 driver 1445.5 (VM), 2x12 обчислювальні вузли 0,750 ГГц, (робоча група 4x4x4).
- OpenCL CPU: "Intel(R) Core(TM) i5-2410M CPU @ 2.30GHz", AMD OpenCL SDK 2.9.1 driver 1445.5 (sse2,avx), 2x2 обчислювальні вузли 2.294 ГГц, (робоча група 8x8x8).

Також моделювання проводилося в однопотоковій версії програми, без використання OpenCL. Отримані результати наведені на наступних рисунках.



Масштаб 1

Масштаб 2

Масштаб 3

Рис. 4.1 Результати застосування єдиного перерізу інтенсивностей $\geq 0,63$ при різних масштабах моделювання випадкових скалярних полів

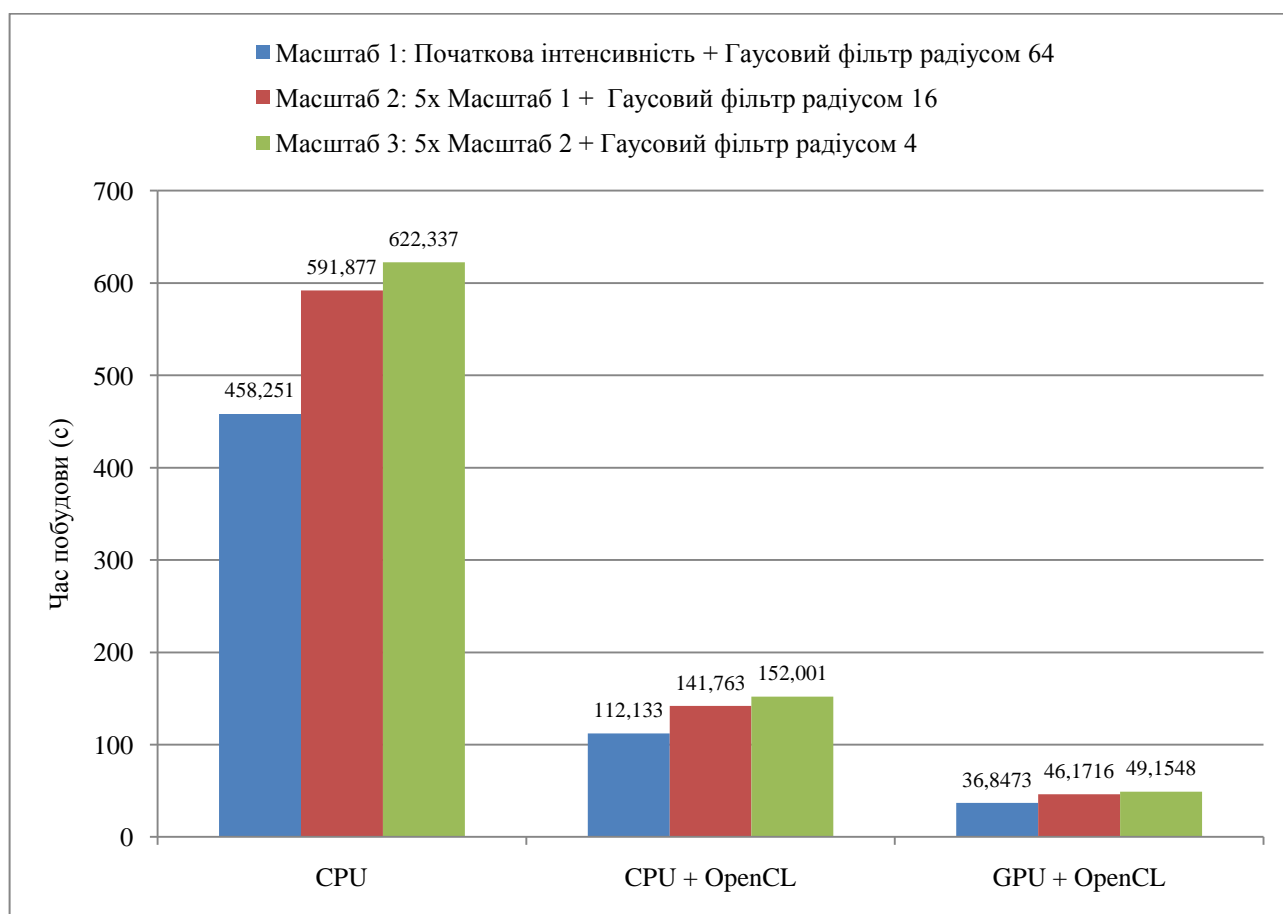
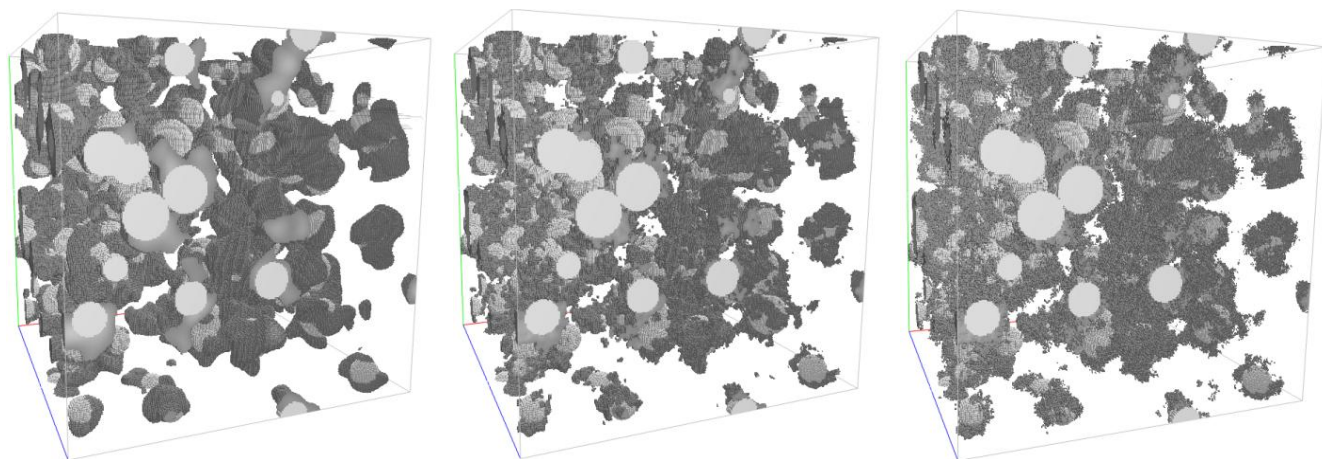


Рис. 4.2 Результати мультимасштабного моделювання випадкових полів для елементарних об'ємів у вигляді матриці розміром $256 \times 256 \times 256$ елементів. Початковим є рівномірний розподіл інтенсивностей.

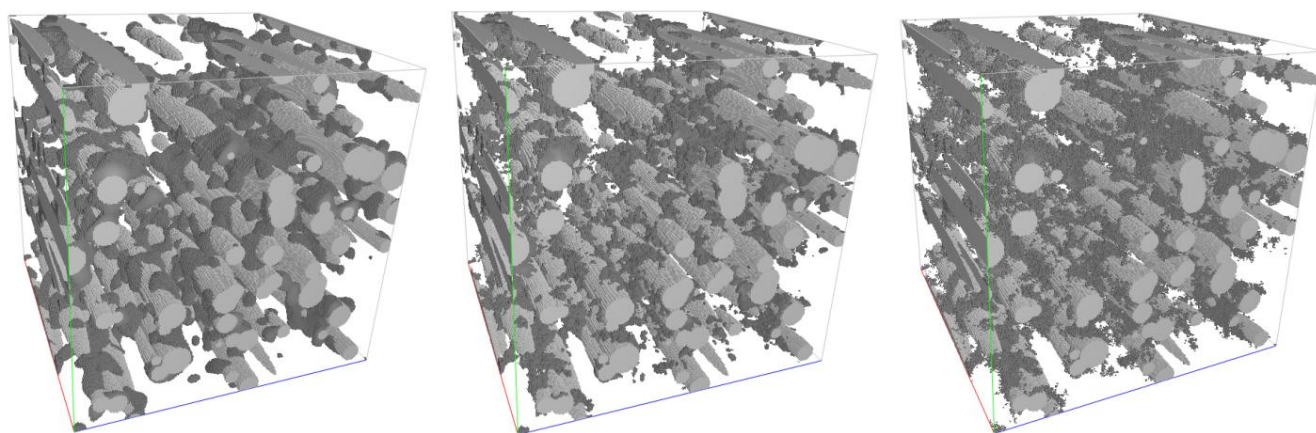


Масштаб 1

Масштаб 2

Масштаб 3

Рис. 4.3 Результати мультимасштабного моделювання випадкових градуйованих перехідних шарів. Початковим є заповнення елементарного об'єму 150 сферами, з радіусами 16-32 елементи. Перехідний шар становить половину радіусу кожної сфери. Початкова інтенсивність перехідного шару змінюється лінійно між фазами. Показано результат застосування єдиного перерізу інтенсивностей $\geq 0,63$ при різних масштабах



Масштаб 1

Масштаб 2

Масштаб 3

Рис. 4.4 Результати мультимасштабного моделювання випадкових градуйованих перехідних шарів. Початковим є заповнення елементарного об'єму 75 еліпсоїдами (сфера 100% по X, 10% по Y, 10% по Z) з радіусами 128-256 елементи. Перехідний шар становить половину радіусу кожного еліпсоїда. Початкова інтенсивність перехідного шару міняється лінійно між фазами. Показано результат застосування єдиного перерізу інтенсивностей $\geq 0,63$ при різних масштабах

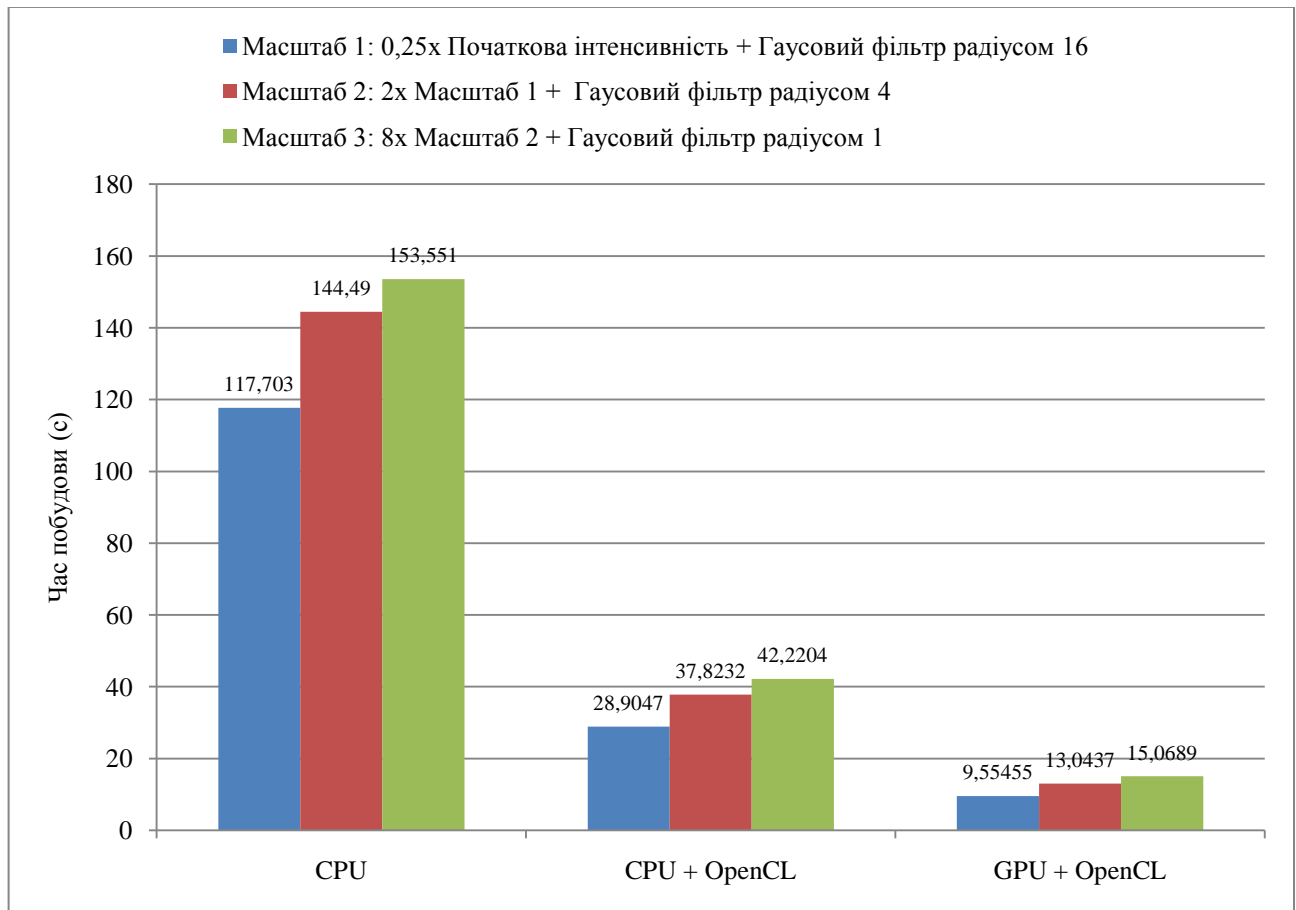


Рис. 4.5 Результати мультимасштабного моделювання випадкових градуйованих перехідних шарів для елементарних об'ємів у вигляді матриці розміром $256 \times 256 \times 256$ елементів.

Побудова та ансамблювання матриць систем лінійних алгебраїчних рівнянь описаних скінченно-елементних моделей теплофізичних процесів мають лінійну складність і є тривіальними задачами, що можуть бути реалізовані без декомпозиції. В силу своєї громіздкості програмні коди тут не наводяться.

Оскільки задача розв'язування лінійних рівнянь та її декомпозиція технологіями паралельних та розподілених обчислень є окремою складною задачею, що виходить за рамки даної роботи, для реалізації методів розв'язку отриманих симетричних та несиметричних СЛАР використовуються сторонні програмні бібліотеки розв'язку задач лінійної алгебри з допомогою технологій CUDA, OpenCL, та OpenMP – ViennaCL [162]. Зокрема, для розв'язку симетричних систем лінійних рівнянь використовується реалізація стабілізованого методу спряжених градієнтів [163]; для розв'язку несиметричних

систем – реалізація стабілізованого методу бі-спряжених градієнтів [164].

Як і у випадку ансамблювання СЛАР, реалізація процедур знаходження ефективних характеристик моделей композиційних матеріалів є тривіальною задачею з лінійною складністю. Приклад знаходження ефективного коефіцієнту теплопровідності для мультимасштабної моделі КМ з еліпсоїдними включеннями та наявними перехідними шарами між фазами композиції наведено на наступних рисунках, з яких видно явище утворення перколяційного порогу характеристики при зміні концентрації компонент армування.

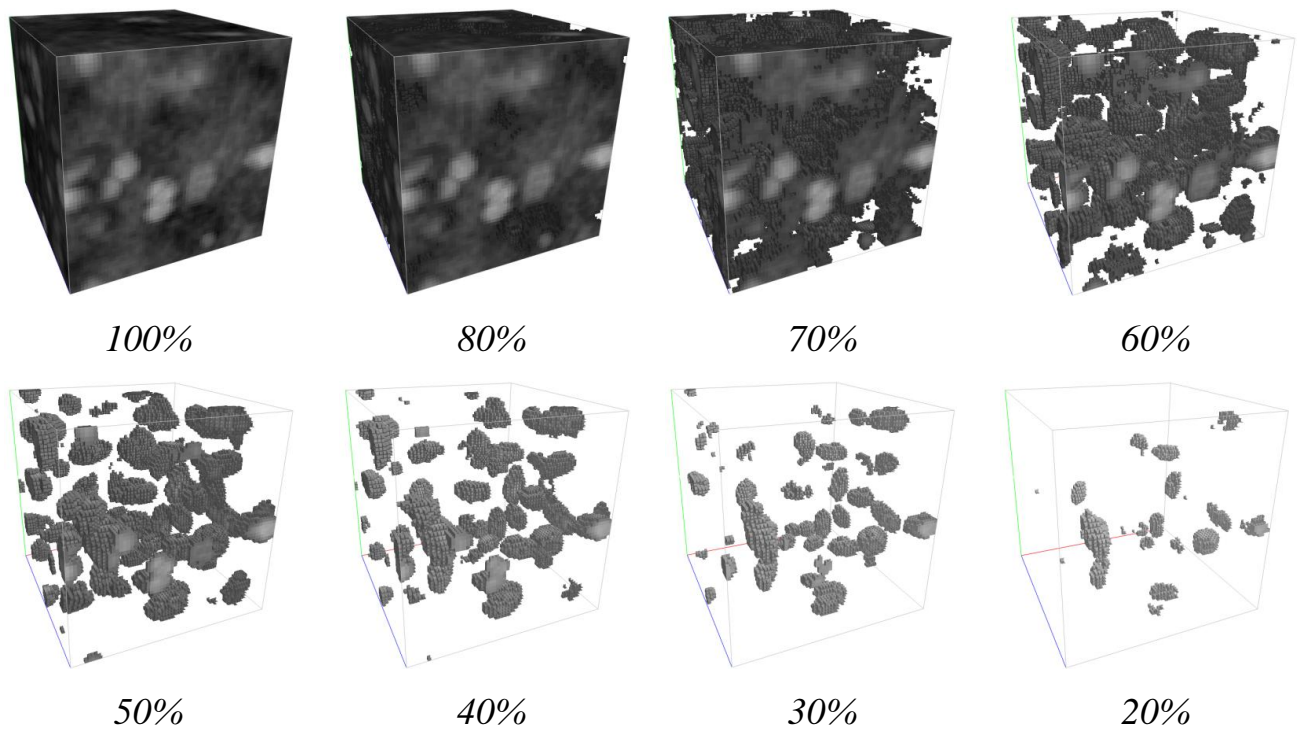


Рис. 4.6 Результати мультимасштабного моделювання структури КМ. Елементарний об'єм 64x64x64 елементи. Матриця КМ – Алюміній (коефіцієнт теплопровідності 237 Вт/мК). Армування – еліпсоїдні вкраплення Карбону (коефіцієнт теплопровідності 1500 Вт/мК). Початкова інтенсивність 100 еліпсоїдних вкраплень з випадковим радіусом 8-12 елементів. При зміні масштабу застосовується Гаусовий фільтр малого радіусу (16-8-4-2 елементи відповідно кожній зміні масштабу), що еквівалентно моделюванню складних перехідних шарів. Показано інтенсивності елементарного об'єму при різних % концентраціях компонентів армування

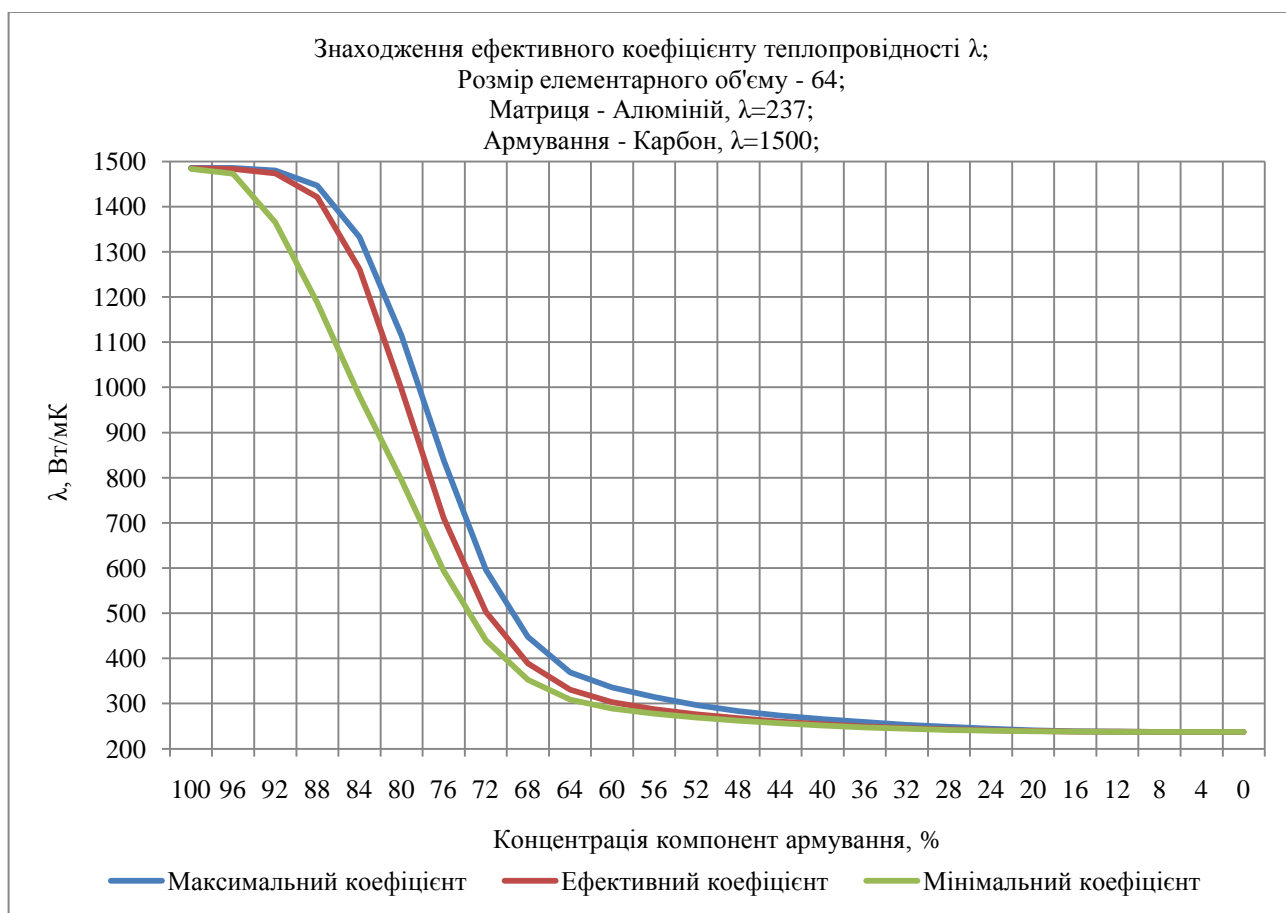


Рис. 4.7 Результати знаходження ефективного коефіцієнту теплопровідності. Зображено мінімальний, максимальний та ефективний коефіцієнти при різних концентраціях армування. В діапазоні 64-92% чітко видно перколяційний поріг

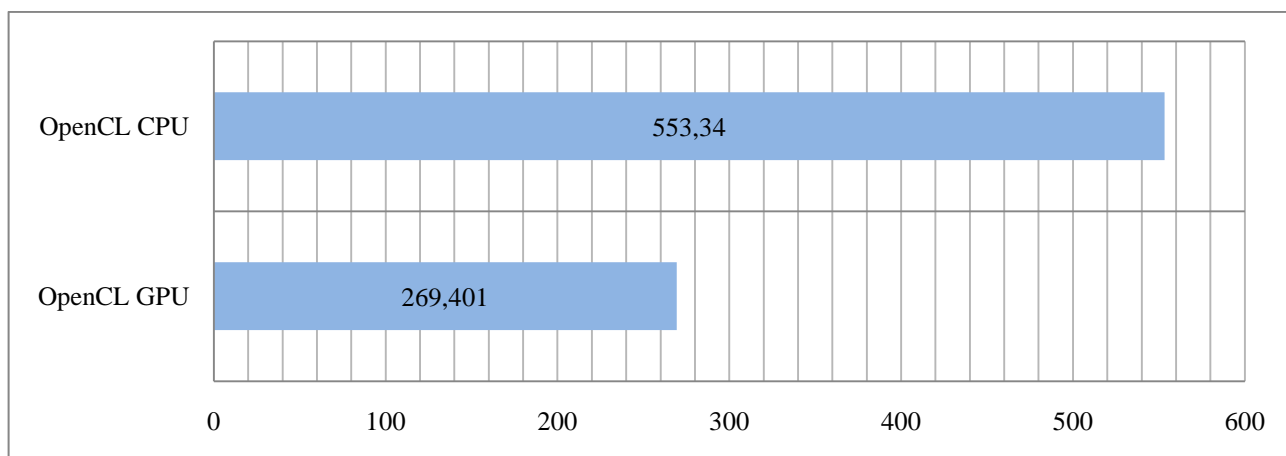


Рис. 4.8 Порівняння часу модельних обчислень на графічній карті та центральному процесорі персонального комп'ютера пересічної комплектації з використанням технології OpenCL

4.2 Перевірка збіжності модельних обчислень серіями експериментів

У попередніх розділах даної роботи показано, що для побудови апостеріорних оцінок точності скінченно-елементної моделі та підтвердження її адекватності проведенням ряду чисельних експериментів необхідно гарантувати умови збіжності відповідних модельних обчислень: лінійної незалежності, повноти, допустимості та узгодженості обраних в методі, кускових інтерполяційних функцій.

Розглянемо виконання наведених умов на прикладі знаходження ефективного коефіцієнту теплопровідності. Розширення розгляду на інші коефіцієнти є аналогічним.

Реалізованими програмно є скінченні симплекс-елементи, що описуються лінійними функціями координат, тобто поліномами першого порядку. Кількість базисних інтерполяційних функцій для кожного елемента рівна кількості його вузлів. За визначенням симплекс-елементів (див. (2.73)–(2.75)), його інтерполяційні функції є виразами відповідних барицентричних координат, що лінійно незалежні.

Використання симплекс-елементів є частковим випадком використання сімейства поліноміальних Лагранжевих елементів (див. (2.72)). Згідно з відомою апроксимаційною теоремою Стоуна-Вейєрштрасса, обрана система базисних функцій є повною, тобто за необхідності, при збільшенні порядку поліномів може як завгодно точно апроксимувати шуканий розв'язок.

Присутні у визначальних рівняннях зважених нев'язок (3.19), (3.35), (3.49) диференціальні оператори містять похідні щонайвище першого порядку, що відповідає C^1 гладким розв'язкам. Це означає, що допустимими для апроксимації є сімейства C^0 гладких базисних функцій, якими є функції форми симплекс-елементів.

Оскільки симплекс-елементи визначаються розміщенням вузлів дискретизації, сусідні елементи мають спільні вузли. Відповідні барицентричні координати вздовж спільної границі будуть однаковими, що відповідає умові узгодженості скінченно-елементного базису. В сукупності з допустимістю, дана

умова визначає неперервність апроксимованого розв'язку при переході між елементами, але ніяк не впливає на значення його похідних.

Таким чином, теоретично модельні обчислення є збіжними. Розглянемо експериментальну перевірку та підтвердження даного факту для програмної реалізації модельних обчислень. Збіжність скінченно-елементного чисельного методу – це поступове наближення послідовно обчислених результатів до гранично точного результату, по мірі того, як уточнюються деякі обчислювальні параметри, такі як розміри інтерполяційних елементів, їх форма або порядок. В обчислювальному процесі, що збігається, різниця результатів між такими ітераціями поступово зменшується і в границі прямує до нуля.

Розглянемо ітераційний процес згущення дискретизації, наприклад, на основі ітераційних методів побудови нерегулярних адаптивних сіток, що відповідають критерію Делоне. Крок дискретизації практично можна вибрати наступним чином: будується послідовність перехідних характеристик дискретної системи для ряду зменшуваних значень кроку дискретизації. Після цього вибирається те значення кроку, починаючи з якого перехідна характеристика зі зменшенням кроку змінюється незначно. В основу такого прийому покладено той факт, що при прямуванні кроку до нуля, процеси в еквівалентній дискретній системі збігаються з процесами в неперервній системі [165]. Згідно оцінок Ніцше і Шульца (2.105), похибку апроксимації методу скінченних елементів для додатно визначених обмежених лінійних диференціальних операторів можна оцінити у вигляді норми, що описує верхню границю. В даному випадку це означає, що при згущенні дискретизації отримане потенціальне поле у вузлах дискретизації та в сукупності буде прямувати до точного розв'язку знизу – на кожній ітерації потенціали повинні зростати на деяке значення, що постійно зменшуватиметься. Це також пояснюється геометрично, див. *Рис. 2.6* – при наближенні до екстремальної точки квадратичної форми такого диференціального оператора різниця між наближеними розв'язками постійно зменшується.

В попередніх розділах було також зазначено, що однією з переваг використання реалізованих мікрорівневих коміркових моделей структури КМ

безпосередньо як сітки скінченних елементів, завдяки простим шаблонними методам дискретизації, є можливість спрощення апостеріорних оцінок точності та відповідна можливість перевірки реалізації моделей завдяки регулярності сітки – елементи одразу відповідають теоретичному характерному розміру, що фігурує у формулюванні теоретичних основ методу скінченних елементів. Так відповідно до цих ж оцінок Ніцше і Шульца (2.105), реалізовані моделі аналізу теплофізичних процесів в структурах КМ, і відповідно методи знаходження ефективних характеристик цих композицій матимуть другий порядок збіжності:

$$\|u - \tilde{u}_T\|_{\mathcal{H}^0(\Omega)=\mathcal{L}_2(\Omega)} \leq Ch^2 \|u\|_{\mathcal{H}^2(\Omega)}, \quad p=1, \quad k=1, \quad s=0, \quad (4.1)$$

тут: p – порядок рівняння в слабкій формі; k – порядок інтерполяційної функції; s – порядок похідної від шуканого розв'язку, що розглядається, тобто сам розв'язок. Отриманий порядок стає очевидним при розгляді локальних матриць жорсткості скінченних елементів, що при ансамблюванні фактично описують міжвузловий зв'язок, аналогічний скінченно-різницевою схемам другого порядку.

Для прикладу було використано модель алюмінієвої матриці з коефіцієнтом теплопровідності 237 Вт/мС, наповненої сферичними вкрапленнями Карбону з коефіцієнтом теплопровідності 1500 Вт/мС. Умовні розміри моделі КМ $10^{-2} \times 10^{-2} \times 10^{-2}$ м. Концентрація вкраплень радіусом 10^{-3} м сягає 10%, що приблизно еквівалентно 24 сферичним вкрапленням в межах даного об'єму. Вкраплення розташовані випадковим чином. Координати вкраплень наведені в *Таблиця 4.1*. Мінімальний допустимий розмір елементів в усіх випадках рівний 5×10^{-4} м. На верхній грані задано крайову умову Неймана – тепловий потік 10^5 Вт/м²С, на нижній грані задано крайову умову Діріхле – сталу температуру 20⁰С. Розв'язування системи лінійних рівнянь методу скінченних елементів проводилося без використання технології OpenCL, на 32-х розрядній машині в подвійній точності, методом Гауса. Результати моделювання реалізації порівнювались з результатами моделювання в системі ANSYS 14.0 (*Рис. 4.10*). Отримані результати наведені в *Таблиця 4.2*.

Таблиця 4.1

**Координати сферичних вкраплень в моделі
дисперсно-наповненого композиційного матеріалу**

№	x	y	z	№	x	y	z
1	0,0051063	0,0021082	0,0086278	13	0,0085656	0,0072597	0,0050233
2	0,0020703	0,0020795	0,0084279	14	0,0093588	0,0089114	0,0020450
3	0,0049440	0,0078008	0,0060029	15	0,0046134	0,0075866	0,0031278
4	0,0069850	0,0031327	0,0079058	16	0,0061430	0,0015646	0,0015372
5	0,0098898	0,0039024	0,0015408	17	0,0031818	0,0073436	0,0017246
6	0,0075933	0,0060496	0,0080929	18	0,0082677	0,0044105	0,0037437
7	0,0047102	0,0084762	0,0081151	19	0,0002502	0,0029532	0,0064946
8	0,0004211	0,0013577	0,0031351	20	0,0084978	0,0003494	0,0085717
9	0,0094528	0,0084106	0,0083623	21	0,0060472	0,0011883	0,0064091
10	0,0032673	0,0070403	0,0067922	22	0,0053334	0,0041471	0,0064598
11	0,0001342	0,0052607	0,0095242	23	0,0089727	0,0003582	0,0061180
12	0,0005298	0,0098614	0,0015448	24	0,0076946	0,0087682	0,0093722

Таблиця 4.2

**Результати моделювання задачі теплопровідності,
та знаходження коефіцієнту ефективної теплопровідності
моделі дисперсно-наповненого композиційного матеріалу**

Параметри дискретизації	Послідовність чисельних експериментів при згущенні дискретизації						Результат в системі ANSYS
	№1	№2	№3	№4	№5	№6	
Вузли	2984	3781	4779	5766	6713	8119	–
Елементи	14937	19112	24358	29731	35110	43837	139461
Мінімальний двогранний кут	17,5 ⁰	20 ⁰	22,5 ⁰	25 ⁰	27,5 ⁰	30 ⁰	–

продовження таблиці 4.2

Максимальна температура у вузлах [$^{\circ}\text{C}$]	23,6787	23,6923	23,7054	23,7162	23,7246	23,7311	23,6420
Різниця між поточним і попереднім результатом [$^{\circ}\text{C}$]	–	0,0136	0,0131	0,0108	0,0084	0,0065	–
Максимальна температура в точці (0,005 0,005 0,01) [$^{\circ}\text{C}$]	23,5385	23,5352	23,5535	23,5644	23,5820	23,5865	23,5220
Різниця між поточним і попереднім результатом [$^{\circ}\text{C}$]	–	–0,0033	0,0183	0,0109	0,0176	0,0045	–
λ_{eff} [Вт/мС]	282,790	281,367	280,049	279,240	278,443	277,851	–
Різниця між поточним і попереднім результатом [Вт/мС]	–	–1,423	–1,318	–0,809	–0,797	–0,592	–
Кількість вузлів	2984	3781	4779	5766	6713	8119	–

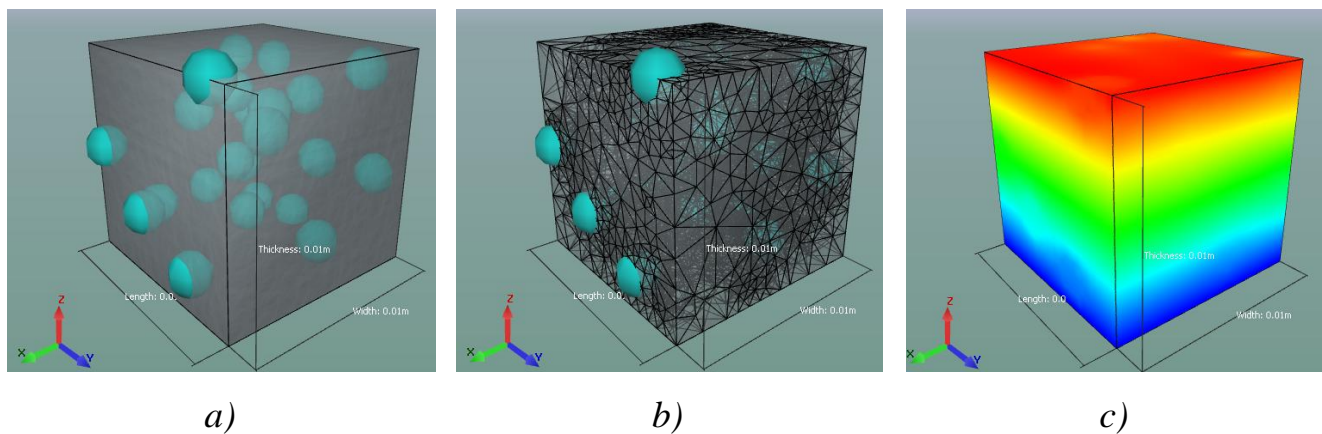


Рис. 4.9 Зображення результатів моделювання: а) модель структури; б) дискретизація; с) температурне поле

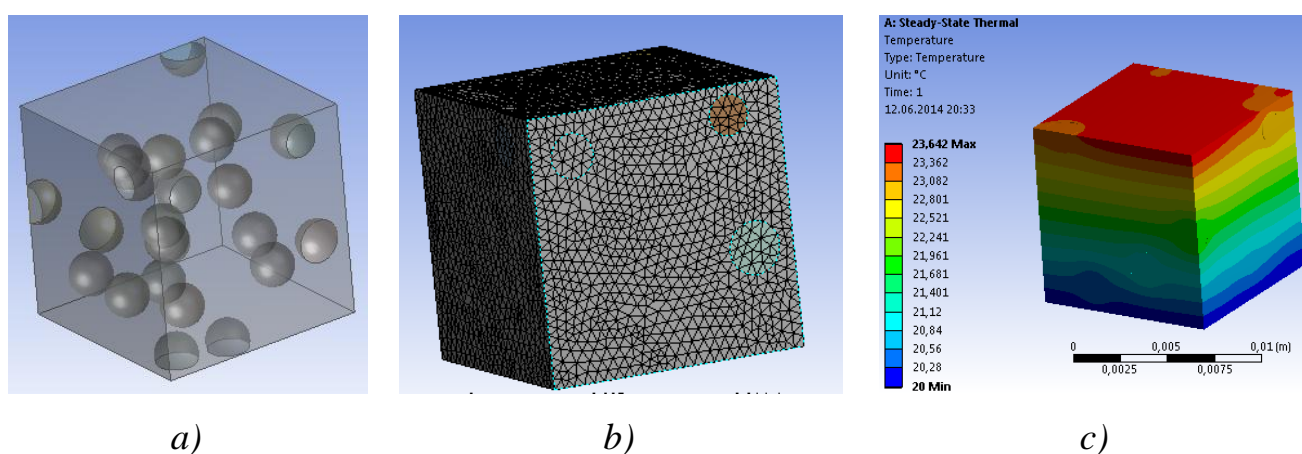


Рис. 4.10 Порівняння результатів моделювання у системі ANSYS 14.0: а) модель структури; б) дискретизація; с) температурне поле

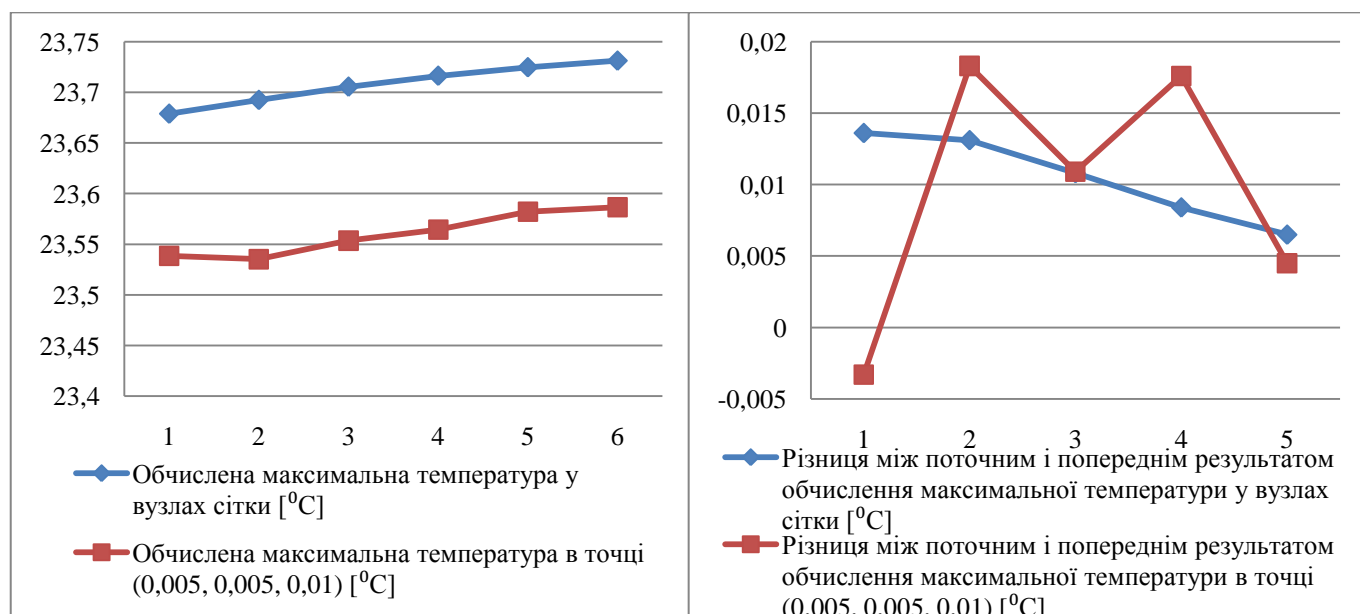


Рис. 4.11 Графіки залежності розв'язку від густини дискретизації

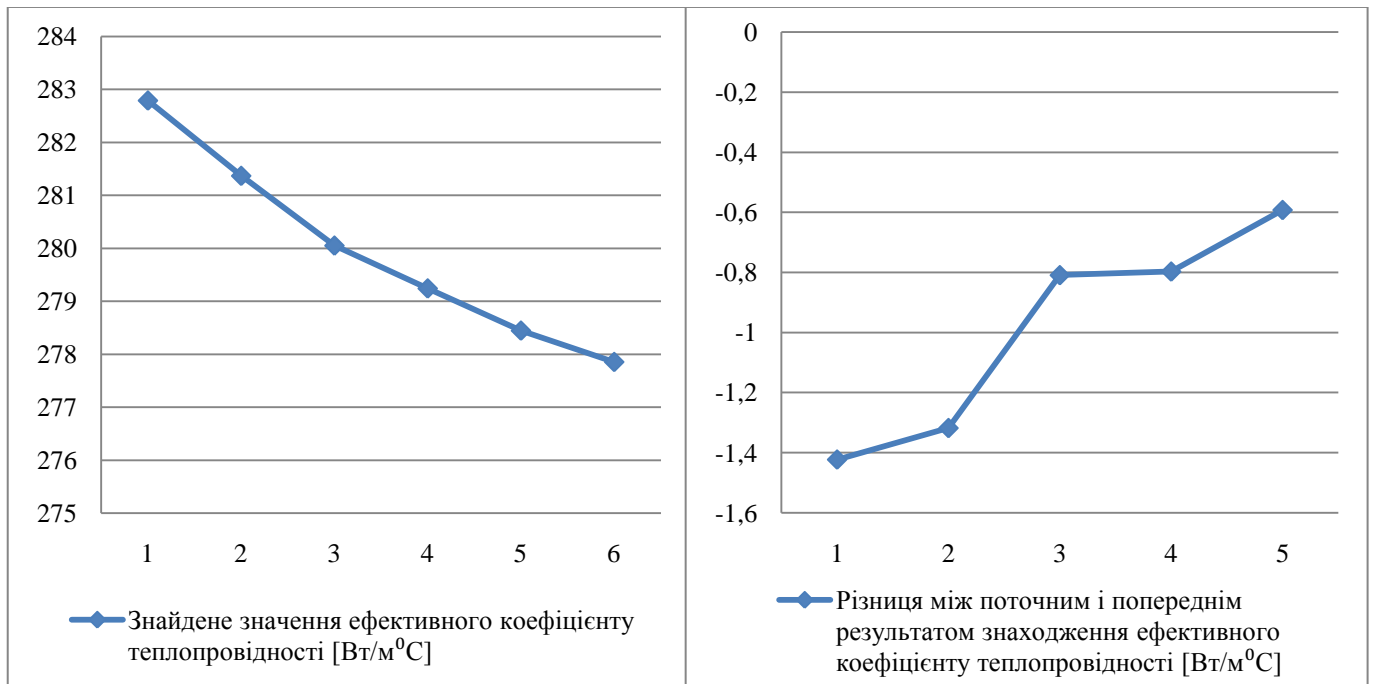


Рис. 4.12 Графіки залежності обчислення коефіцієнту ефективної теплопровідності від густини дискретизації

З отриманих результатів видно, що на кожній ітерації згущення дискретизації, потенціальне поле, як і очікувалося, прямує до точного розв'язку знизу. Різниця між значеннями потенціалів у вузлах дискретизації між ітераціями постійно зменшується. Це дає підставу зробити висновок про те, що програмно реалізована модель відповідає умові збіжності і використовуючи густу дискретизацію, за допомогою неї, можна знайти достатньо точний розв'язок. Спираючись на оцінку верхньої границі похибки апроксимації методу скінченних елементів, отримані результати також свідчать про більшу точність результатів у порівнянні з обраною аналогічною системою моделювання.

На *Рис. 4.13* наведено результати знаходження ефективних теплофізичних характеристик моделі композиційного матеріалу з Алюмінієвою матрицею та сферичними включеннями Карбону різної концентрації та різного радіусу. Вихідні характеристики матриці: $\lambda = 210$ Вт/мК; $E = 68$ ГПа; $\mu = 0,36$; $\alpha = 25,5 \times 10^{-6}$ К⁻¹. Вихідні характеристики компонент армування: $\lambda = 2000$ Вт/мК; $E = 1220$ ГПа; $\mu = 0,2$; $\alpha = 1,1 \times 10^{-6}$ К⁻¹. З рисунку чітко видно явище утворення перколяційного порогу знайдених характеристик.

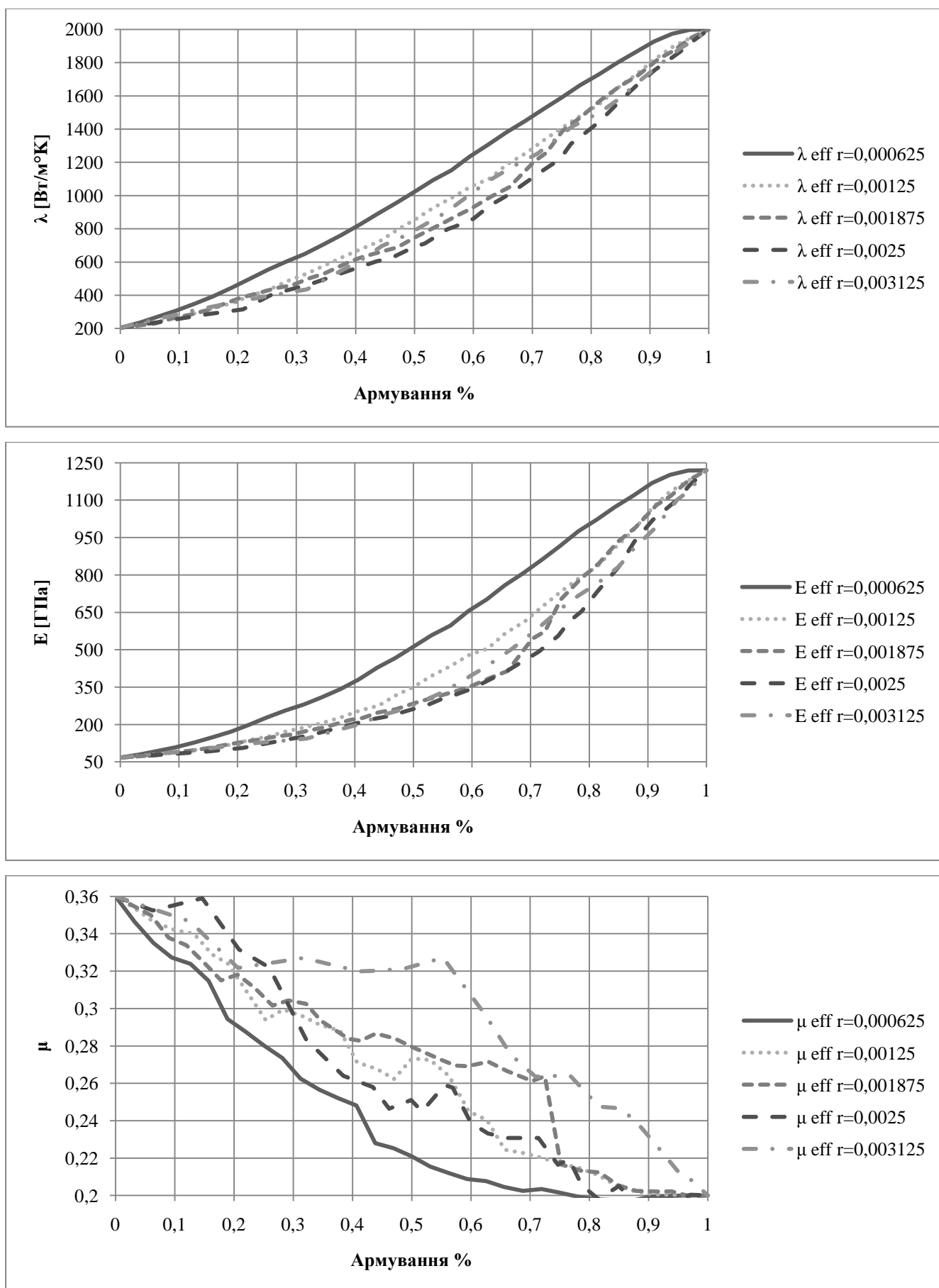
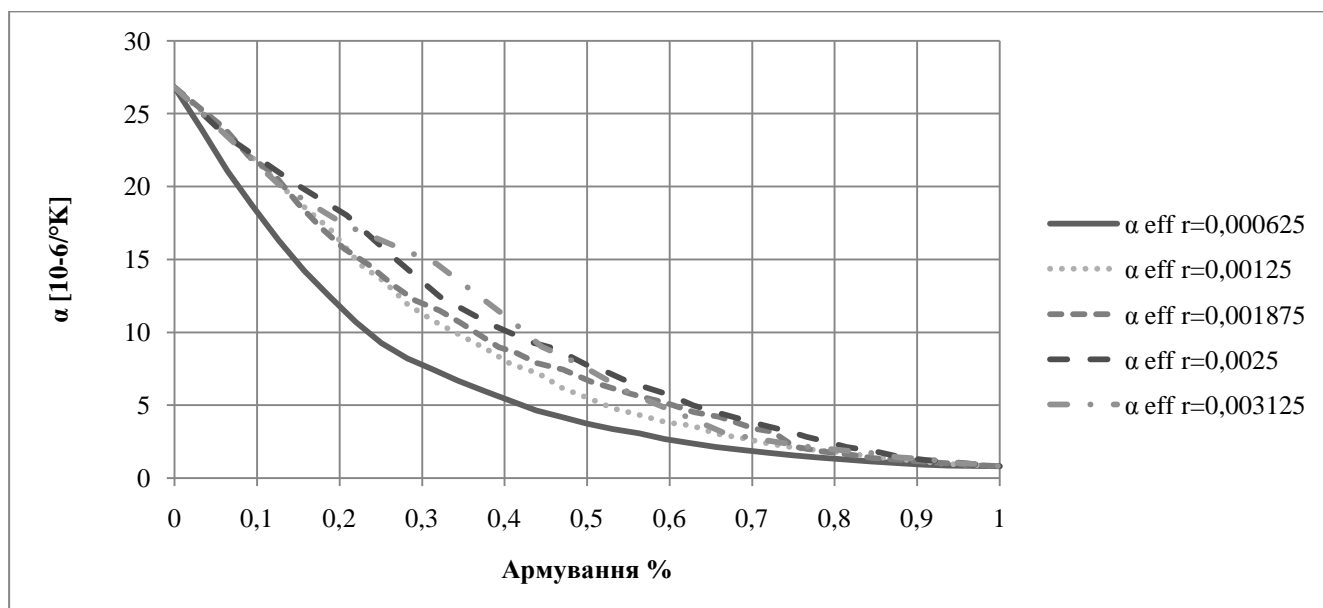


Рис. 4.13 Результати знаходження ефективних характеристик КМ



Наведені результати є прикладом обчислення значень багатокритеріальної цільової функції для задач оптимального проектування композиційного матеріалу на основі чисельного моделювання. З результатів також видно, що використання технології паралельних і розподілених обчислень OpenCL для реалізації доменної декомпозиції модельних обчислень дає понад десятикратне прискорення навіть при використанні персональних комп'ютерів пересічної комплектації. Це дає змогу зробити висновок про можливість використання розроблених моделей та методів у ітераційних, обчислювально-затратних задачах оптимального проектування композиційних матеріалів, і таким чином вирішити основне завдання дисертаційної роботи.

4.3 Порівняння результатів з натурними експериментами

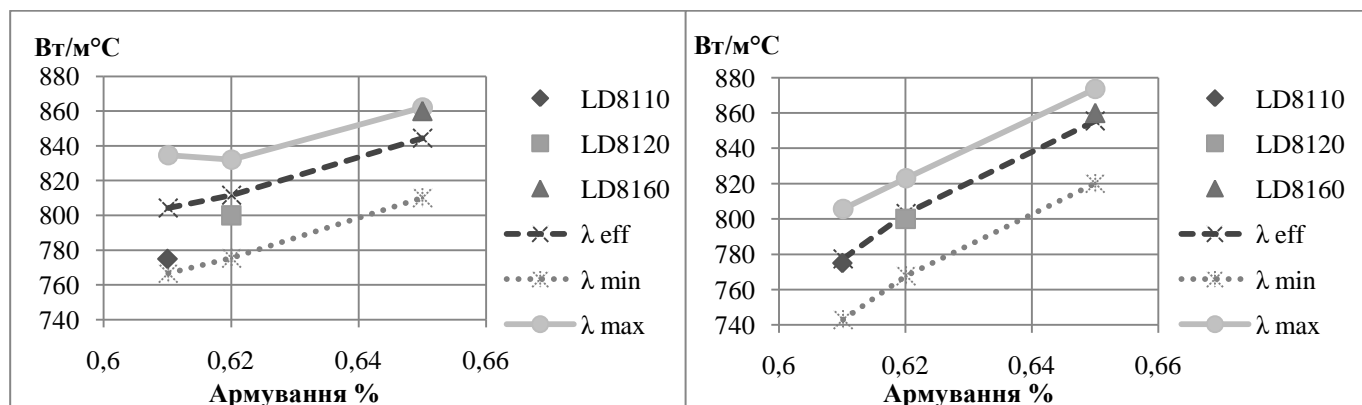
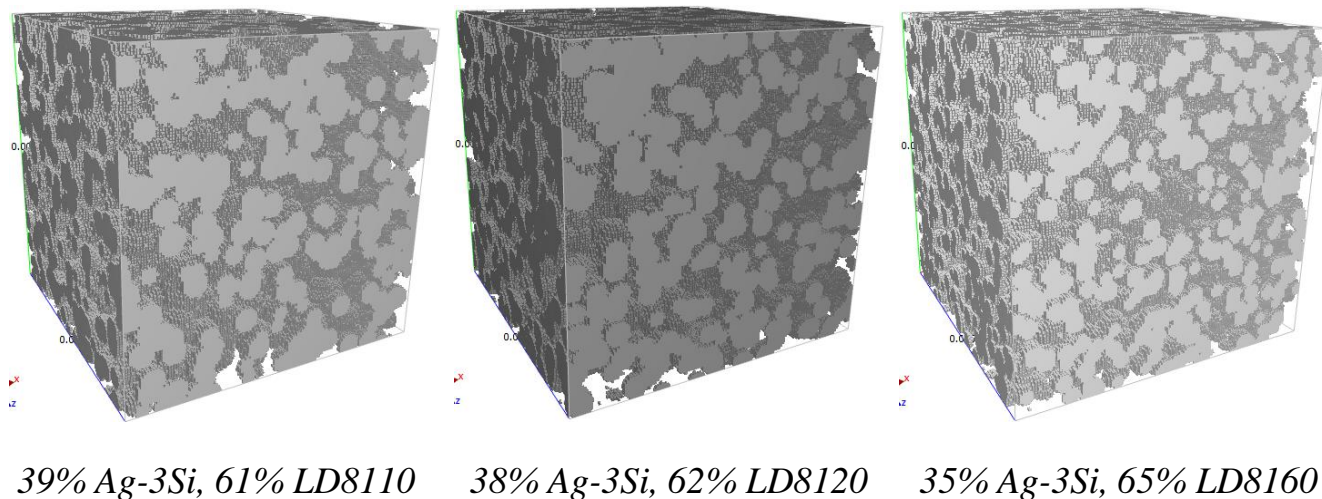
Верифікація проводилася порівнянням з результатами натурних експериментів [166]. Модель верифікації:

- елементарний об'єм з 128x128x128 елементами в еквіваленті $5 \cdot 10^{-3} \text{ м}^3$;
- матриця з сплаву Ag-3Si з теплопровідністю $\lambda=370 \text{ Вт/м}^\circ\text{C}$;
- фаза армування – синтетичні алмази розміром $4,5 \cdot 10^{-4} \text{ м}$ у пропорціях: алмаз LD8110 – 61% і алмаз LD8120 – 62%; та $3,5 \cdot 10^{-4} \text{ м}$ у пропорціях: алмаз LD8160 – 65% до матриці композиту,

теплопровідність $\lambda=1200$ Вт/м°C;

- модель структури – матриця із сферичними вкрапленнями.

Відносна похибка ефективного коефіцієнту теплопровідності не перевищує 7,21%. При верифікації для композиту алмазів, що розрізняються за якістю (LD8110: $\lambda=1140$ Вт/м°C, LD8120: $\lambda=1180$ Вт/м°C, LD8160: $\lambda=1220$ Вт/м°C) відносна похибка обчислень не перевищувала 1% (Рис. 4.14).



$$\lambda_{Ag-3Si} = 370, \lambda_{LD} = 1200,$$

$$\epsilon \leq 7,21\%$$

$$\lambda_{Ag-3Si} = 370, \lambda_{LD8110} = 1140, \lambda_{LD8120} = 1180,$$

$$\lambda_{LD8160} = 1220, \epsilon \leq 1\%$$

Рис. 4.14 Верифікація результатів моделювання з натурними експериментами

4.4 Висновки до розділу 4

Даний розділ присвячений розв'язуванню поставлених у роботі задач реалізації в програмному забезпеченні, з допомогою технології паралельних і розподілених обчислень OpenCL, розроблених методів синтезу структури

композиційних матеріалів, чисельного аналізу теплофізичних процесів в цих структурах та відповідного знаходження ефективних теплофізичних характеристик. Також розв'язується задача підтвердження адекватності, збіжності та точності розроблених і реалізованих моделей та методів на основі проведення апостеріорних оцінок за серіями чисельних експериментів з їх порівнянням із результатами, отриманими аналогічною системою ANSYS 14.0. та натурними експериментами. Зокрема:

1. На прикладі використання технології OpenCL розроблено алгоритми та програмні коди реалізації декомпозиції методів побудови мікрорівневих моделей структури композиційних матеріалів з компонентами армування у формі випадкових еліпсоїдних включень, скалярних випадкових полів та випадкових функціонально-градуєваних перехідних шарів.
2. Наведено результати мультимасштабного моделювання комбінованих мікрорівневих моделей структури композиційних матеріалів, з яких видно, що реалізація декомпозиції обчислень дає понад десятикратне прискорення навіть для персональних комп'ютерів пересічної комплектації. Це відкриває можливість подальшого її використання в складних задачах оптимального проектування КМ.
3. Відповідно до загальноприйнятого алгоритму чисельного моделювання задач аналізу фізичних процесів підтверджено вимоги до теоретичної збіжності модельних обчислень, а результатами чисельних експериментів підтверджено збіжність обчислень відповідної програмної реалізації.
4. Порівнянням результатів моделювання з результатами, отриманими в аналогічній системі, з яких, спираючись на апостеріорні оцінки верхньої границі похибки апроксимації чисельного методу підтверджено, що аналог поступається в точності отриманого розв'язку.
5. Порівнянням результатів моделювання з натурними експериментами встановлено, що відносна похибка знайдених ефективних характеристик не перевищує 1%.

Основні результати даного розділу опубліковані в роботах [1, 4, 8].

ВИСНОВКИ

У роботі вирішено наукове завдання вдосконалення мікрорівневих моделей та методів знаходження ефективних теплофізичних характеристик композиційних матеріалів у процесі їх автоматизованого проектування. Це дає можливість розширення рамок адекватності моделей відносно складних композиційних структур та ефективного використання методів в ітераційних процесах проектування, уникаючи ресурсно-витратних натурних експериментів. Отримано такі основні результати:

1. Здійснено аналіз задачі знаходження ефективних характеристик композиційних матеріалів при їх проектуванні. Виявлено необхідність: вдосконалення методів синтезу мікрорівневих моделей структури матеріалів на основі використання коміркових моделей; чисельних моделей аналізу теплофізичних процесів у цих структурах на основі методу скінченних елементів для розв'язування зв'язаних мультифізичних задач; відповідних методів знаходження ефективних характеристик на основі використання теорії подібності та методу аналогій.
2. На основі використання коміркових моделей розвинуто методи моделювання складних композиційних структур, що дають змогу однотипно досліджувати основні класи композитів. Основною відмінністю від відомих методів є можливість одночасного використання комбінацій різних методів побудови структури та використання її як дискретизації.
3. На основі використання коміркових моделей композиційних структур та алгоритму маскування вперше розроблено метод моделювання складних перехідних шарів між фазами композиції, що дає змогу враховувати особливості неоднорідності середовища.
4. На основі використання методу скінченних елементів розвинуто моделі аналізу зв'язаних теплофізичних процесів, що з допомогою єдиної формалізації дають змогу враховувати комплексні крайові умови та досліджувати теплофізичні процеси в складних композиційних структурах.
5. На основі використання методу теплоелектричних аналогій вдосконалено

методи знаходження ефективних теплофізичних характеристик (коефіцієнту теплопровідності, модуля пружності, коефіцієнту Пуассона, температурного коефіцієнту лінійного розширення) гетерогенних середовищ, що дають змогу досліджувати складні композиційні структури уникаючи натурних експериментів.

6. Моделі та методи знаходження ефективних характеристик композиційних матеріалів на основі чисельного моделювання реалізовано з допомогою технології паралельних та розподілених обчислень OpenCL, застосування якої дає змогу пришвидшити модельні обчислення на порядок.
7. Збіжність результатів обчислень підтверджено проведенням чисельних експериментів, їх апостеріорними оцінками, порівнянням з результатами аналогічної системи моделювання та натурними експериментами. Відносна похибка модельних обчислень не перевищує одного відсотка.
8. Вперше розроблено алгоритми та програмні коди реалізації декомпозиції модельних обчислень на прикладі використання технології OpenCL, що становить практичну цінність.
9. Отримані результати роботи впроваджено в навчальний процес підготовки за базовим напрямком "Комп'ютерні науки" та за спеціальністю "Системне проектування" у Національному університеті "Львівська політехніка".

Можливим шляхом розвитку отриманих в роботі результатів є їх вдосконалення з метою розширення кола розгляду фізичних, економічних, екологічних процесів та знаходження відповідних ефективних характеристик композиційних матеріалів з подальшим їх застосуванням у задачах оптимального проектування конструкцій.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Яворський Н. Побудова мікрорівневих моделей структури композиційних матеріалів у задачах їх оптимального проектування / Н. Яворський, І. Фармага, У. Марікуца // Науковий вісник НЛТУ України. – 2015. – № 25.8. – С. 359-366.
2. Jaworski N. Finding Effective Thermal Characteristics of Composite Materials Based on the Analysis of Thermal Conductivities / N. Jaworski, I. Farmaga, M. Lobur // Вісник НУ "Львівська політехніка": Комп'ютерні системи проектування. теорія і практика. – 2012. – № 747. – С. 59-65.
3. Яворський Н. Розроблення дискретної моделі знаходження ефективних теплофізичних характеристик композитних матеріалів зі складною структурою / Н. Яворський, І. Фармага, У. Марікуца // Вісник НУ "Львівська політехніка": Комп'ютерні науки та інформаційні технології. – 2012. – № 744. – С. 152-158.
4. Jaworski N. Effective Thermal Characteristics Synthesis Microlevel Models in the Problems of Composite Materials Optimal Design / N. Jaworski // ECONTECHMOD: an international quarterly journal on economics of technology and modelling processes. – 2015. – Vol. 4. – No. 2. – P. 3-12.
5. Jaworski N. Thermal Analysis Methods for Design of Composite Materials with Complex Structure / N. Jaworski, I. Farmaga, O. Matviyukiv, M. Lobur, P. Spiewak, L. Ciupinski, K. Kurzydowski // ECS Transactions. – 2014. – Vol. 59. – No. 1. – P. 513-523.
6. Farmaga I. Finite Element Meshing of Composites with Spherical Inclusions / I. Farmaga, M. Lobur, P. Shmigelskyi, N. Javorskyi, P. Śpiewak // Machine Dynamics Research. – 2011. – Vol. 35. – No. 3. – P. 13-21.
7. Jaworski N. Finding the Composite Materials Linear Temperature Expansion Coefficient Based on Thermoelasticity Problem Numerical Simulation / N. Jaworski, I. Farmaga, R. Karvatskiy // Proc. of the XXII Ukrainian-Polish Conf. "CAD in Machinery Design. Implementation and Educational Issues (CADMD'2014)". – Lviv (Ukraine), 2014. – P. 77-83.

8. Jaworski N. Synthesis of Particle-Reinforced Composite Material Effective Heat Conduction Coefficient in TERMET Software. The Numerical Experiment / N. Jaworski, I. Farmaga, U. Marikutsa, Y. Hnatyshyn // IEEE Proc. of the X-th Int. Conf. "Perspective Technologies and Methods in MEMS Design (MEMSTECH'2014)". – Lviv (Ukraine), 2014. – P. 42-47.
9. Jaworski N. Thermal Analysis Methods for Design of Composite Materials with Complex Structure / N. Jaworski, I. Farmaga, O. Matviyukiv, M. Lobur, P. Spiewak, L. Ciupinski, K. Kurzydowski // Meeting Abstracts of "Electrochemical Conference on Energy & the Environment (ECEE'2014)". – Shanghai (China), 2014. – P. 585.
10. Jaworski N. Research of composite materials optimal design task based on numerical simulation / N. Jaworski, I. Farmaga, M. Lobur, P. Spiewak // Proc. of the 8-th Int. Scientific and Technical Conference "Computer Sciences and Information Technologies (CSIT'2013)". – Lviv (Ukraine), 2013. – P. 46-48.
11. Jaworski N. Architecture of the Composite Materials Distributed Heterogeneous Computer-Aided Design System / N. Jaworski, M. Lobur, I. Farmaga, K. Kurzydowski // IEEE Proc. of the XII-th Int. Conf. "The Experience of Designing and Application of CAD Systems in Microelectronics (CADSM'2013)". – Polyana-Svalyava (Ukraine), 2013. – P. 440-442.
12. Farmaga I. Regular and Adaptive Meshing Algorithms for Modeling of Spherical Inclusions by Finite Element Method / I. Farmaga, M. Lobur, P. Shmigelskyi, N. Javorskyi, P. Śpiewak // IEEE Proc. of the XI-th Int. Conf. "Modern Problems of Radio Engineering, Telecommunications and Computer Science (TCSET'2012)". – Lviv-Slavske (Ukraine), 2012. – P. 505-507.
13. Смердов А. Разработка методов проектирования композитных материалов и конструкций ракетно-космической техники: автореферат дис. на соиск. уч. степ. докт. техн. наук / Смердов А. – Москва: МГУ, 2007. – 34 с.
14. Зиновьев П. Оптимальное проектирование композитных материалов / Зиновьев П., Смердов. А. – Москва: МГТУ, 2006. – 104 с.
15. Lubin G. Handbook of Composites / Lubin G. [перевод с англ. А. Геллера,

- М. Гельмонта]. – Москва: Машиностроение, 1988. – 448 с.
16. Композиционные материалы. Справочник / [Вишняков Л., Грудина Т. и др.]. – Киев: Наукова думка, 1985. – 594 с.
 17. Поклонский Н. Основы импедансной спектроскопии композитов / Поклонский Н., Горбачук. Н. – Минск: БГУ, 2005. – 130 с.
 18. Шевченко В. Основы физики полимерных композиционных материалов / Шевченко В. – Москва: МГУ, 2010. – 99 с.
 19. Полимерные композиционные материалы: структура, свойства, технология / [Кербер М., Виноградов Г. и др.]. – СПб: Профессия, 2008. – 560 с.
 20. Нарусберг В. Устойчивость и оптимизация оболочек из композитов / Нарусберг В., Тетерс. Г. – Рига: Зинатне, 1988. – 299 с.
 21. Christensen R. Mechanics of composite Materials / Christensen R. [пер. с англ. под ред. Ю. Тарнопольского]. – Москва: Мир, 1982. – 336 с.
 22. Hashin Z. Analysis of Composite Materials. A Survey / Z. Hashin // Journal of Applied Mechanics. – 1983. – Vol. 50. – P. 481-505.
 23. Физический энциклопедический словарь / [под ред. Прохорова А.]. – Москва: Сов. Энциклопедия, 1983. – 944 с.
 24. Vasiliev V. Optimal Design. Theory and Applications to Materials and Structures / Vasiliev V. – Lancaster, 1999. – 340 p.
 25. Torquato S. Optimal Design of Heterogeneous Materials / S. Torquato // Annu. Rev. Mater. Res. – 2010. – Vol.40. – P. 101-129.
 26. Смердов А. Особенности постановки и решения задач оптимизации структуры и состава пространственно армированных углерод-углеродных и углекерамических композитных конструкций ракетной техники / А. Смердов, С. Тащилов, К. Пономарев, А. Миронихин // Вестник МГТУ сер. "Машиностроение". – 2012. – С. 137-147.
 27. Бардзокас Д. Математическое моделирование физических процессов в композиционных материалах периодической структуры / Бардзокас Д., Зобнин А. – Москва: Едиториал УРСС, 2003. – 376 с.
 28. Barbero J. Introduction to Composite Materials Design [2nd ed.] / Barbero J. –

- New-York: CRC Press, 2011. – 520 p.
29. Анісімов В. Полімерні композиційні матеріали з підвищеною зносо- та абразивостійкістю на основі блок-кополіуретанів: автореф. дис. на здоб. наук. ступ. д.т.н. / Анісімов В. – Львів: НУ "Львівська політехніка", 2014. – 42 с.
 30. Harris B. Engineering composite materials / Harris B. – London: The Institute of Materials, 1999. – 558 p.
 31. Майстренко А. Формирование структуры композиционных алмазосодержащих материалов в технологических процессах / Майстренко А. – Київ: Наукова думка, 2014. – 342 с.
 32. Дульнев Г. Теплопроводность смесей и композиционных материалов. Справочная книга / Дульнев Г., Заричняк Ю. – Ленинград: Энергия, 1974. – 264 с.
 33. Torquato S. Random Heterogeneous Materials. Microstructure and Macroscopic Properties / Torquato S. – New-York: Springer, 2002. – 556 p.
 34. Павлов П. Физика твердого тела / Павлов П., Хохлов А. – Москва: Высшая школа, 2000. – 494 с.
 35. Maxwell C. Treatise on electricity and magnetism [Vol. 1] / Maxwell C. – London: Oxford University press, 1892. – 504 p.
 36. Hashin Z. The elastic moduli of heteroheneous materials / Z. Hashin // Journal of Applied Mechanics. – 1962. – Vol. 29. – No. 1. – P. 143-150.
 37. Brucker K. Effective thermal conductivity of common geometric shapes / K. Brucker, J. Majdalani // International Journal of Heat and Mass Transfer. – 2005. – Vol. 48. – P. 4779-4796.
 38. Ramm A. Heat Transfer in a Medium in Which Many Small Particles Are Embedded / A. Ramm // International Journal Math. Model. Nat. Phenom. – 2013. – Vol. 8. – No. 1. – P. 193-199.
 39. Wang M. Predictions of effective physical properties of complex multiphase materials / M. Wang, N. Pan // International Journal Materials Science and Engineering. – 2008. – Vol. R 63. – P. 1-30.
 40. Dvorak G. Micromechanics of Composite Materials / Dvorak G. –

- New-York: Springer, 2013. – 454 p.
41. Barber P. Polymer Composite and Nanocomposite Dielectric Materials for Pulse Power Energy Storage / P. Barber, S. Balasubramanian, [et al.] // *Materials*. – 2009. – Vol. 2. – P.1697-1733.
 42. Mårtensson E. Modelling electrical properties of composite materials / Mårtensson E. – Universitetservice, US-AB, Stockholm, Sweden, 2003. – 88 p.
 43. Torquato S. Statistical Description of Microstructures / S. Torquato // *Annu. Rev. Mater. Res.* – 2002. – Vol. 32. – P. 77-111.
 44. Никитин Д. Особенности теплопереноса в полимерных наноккомпозитах / Д. Никитин, В. Лиопо, В. Струк, А. Никитин // *Веснік Гродзенскага дзяржаўнага ўніверсітэта імя Янкі Купалы. Серыя 6. Тэхніка* – 2012. – Т. 4. – № 141. – С. 80-89.
 45. Yue V. Modeling of the effective thermal conductivity of composite materials with FEM based on resistor networks approach / V. Yue, Y. Zhang, Z. Hu, J. Liu, Z. Cheng // *Microsyst Technol.* – 2010. – Vol 16. – P. 633-639.
 46. Feng J. Statistical reconstruction of two-phase random media / J. Feng, C. Li, S. Cen, D. Owen // *Computers and Structures*. – 2014. – Vol. 137. – P. 78-92.
 47. Peyrega C. 3D Morphological Modelling of a Random Fibrous Network / C. Peyrega, D. Jeulin, C. Delisee, J. Malvestio // *Image Anal. Stereol.* – 2009. – Vol. 28. – P. 129-141.
 48. Roberts A. Elastic properties of model random three-dimensional open-cell solids / A. Roberts, E. Garboczi // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2002. – Vol. 50. – P. 33-55.
 49. Roberts A. Computation of the linear elastic properties of random porous materials with a wide variety of microstructure / A. Roberts, E. Garboczi // *Proc. R. Soc. Lond.* – 2002. – Vol. A 458. – P. 1033-1054.
 50. Roberts A. Chord-distribution functions of three-dimensional random media: Approximate first-passage times of Gaussian processes / A. Roberts // *Physical Review*. – 1999. – Vol. E 59. – No. 5. – P. 4953-4963.
 51. Roberts A. Statistical reconstruction of three-dimensional porous media from two-

- dimensional images / A. Roberts // *Physical Review*. – 1997. – Vol. E 56. – P. 3203-3212.
52. Roberts A. Structure-Property Correlations in Model Composite Materials / A. Roberts, M. Knackstedt // *Physical Review*. – 1996. – Vol. E 54. – P. 2313-2328.
53. Matthews F. Finite element modelling of composite materials and structures / Matthews F., Davies G., Hitchings D., Soutis C. – New-York: CRC Press LLC, 2000. – 226 p.
54. Barbero E. Finite element analysis of composite materials / Barbero E. – New-York: CRC Press LLC, 2008. – 360 p.
55. Клованич С. Метод конечных элементов в нелинейных задачах инженерной механики / Клованич С. – Запоріжжя: Світ геотехніки, 2009. – 400 с.
56. Эфрос А. Физика и геометрия беспорядка / Эфрос А. – Библиотека "Квант", выпуск 19, Москва: Наука, 1982. – 270 с.
57. Belashi A. Percolation Modelling in Polymer Nanocomposites: diss. of the req. for the Ph.D. Deg. in Engineer. / Belashi A. – University of Toledo, 2011. – 147 p.
58. Dunn M. Elastic moduli of composites reinforced by multiphase particles / M. Dunn, H. Ledbetter // *Journal of Applied Mechanics*. – 1955. – Vol. 62. – No. 4. – P. 1023-1028.
59. Odegard G. Modeling of the mechanical properties of nanoparticle/polymer composites / G. Odegard, T. Clancy, T. Gates // *Polymer*. – 2005. – Vol. 46. – No. 2. – P. 553-562.
60. Reiter T. Micromechanical Models for Graded Composite Materials / T. Reiter, G. Dvorak, V. Tvergaard // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 1997. – Vol. 45. – No. 8. – P. 1281-1302.
61. Ostoja-Starzewski M. Random Field Models of Heterogeneous Materials / M. Ostoja-Starzewski // *International Journal of Solids and Structures*. – 1998. – Vol. 35. – No. 19. – P. 2429-2455.
62. Кулак М. Фрактальная механика материалов / Кулак М. – Минск: Вышэйшая школа, 2002. – 304 с.

63. Rahman S. A random field model for generating synthetic microstructures of functionally graded materials / S. Rahman // *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. – 2008. – Vol. 76. – No. 1. – P. 972-993.
64. Rahman S. Multi-scale fracture of random heterogeneous materials / S. Rahman // *Ships and Offshore Structures*. – 2009. – Vol. 4. – No. 3. – P. 261-274.
65. Crownover R. Introduction to Fractals and Chaos / Crownover R. [пер. с англ. Стерина Б.]. – Москва: Постмаркет, 2000. – 352 с.
66. Герега А. Ансамбль перколяционных кластеров фаз как основа самоподобной структуры композитов / А. Герега, В. Вировий // *Сучасні будівельні матеріали*. – 2012. – Т. 1. – № 93. – С. 53-57.
67. Рассоха А. Структура Фурано-эпоксидных композитов: Фрактально-перколяционный подход / А. Рассоха, А. Черкашина // *Інтегровані технології та енергозбереження*. – 2012. – № 1. – С. 57-62.
68. Бортников А. Текстурно-Фрактальный анализ микроскопических срезов образцов композиционных материалов, наполненных техническим углеродом / А. Бортников, Н. Минакова // *Известия Томского политехнического университета*. – 2006. – Т. 6. – № 309. – С. 64-67.
69. Алифанов О. Обратные задачи теплообмена / Алифанов О. – Москва: Машиностроение, 1988. – 280 с.
70. Ватульян А. Обратные задачи в механике деформируемого твердого тела / Ватульян А. – Москва: ФИЗМАЛИТ, 2007. – 224 с.
71. Кабанихин С. Обратные и некорректные задачи / Кабанихин С. – Новосибирск: Сибирское научное издательство, 2009. – 457 с.
72. Lobur M. Analysis and Problem Statement of the Optimal Thermal Design of Technical Objects / M. Lobur, I. Farmaga, U. Marikutsa, O. Matviyiv, L. Ciupinski // *Proc. of the Inter. Conf. MICROTHERM'2011*. – Lodz (Poland). – 2011.
73. Алифанов О. Автоматизированная система научных измерений для исследования перспективных теплотехнических материалов методами обратных задач теплообмена / О. Алифанов, С. Будник, В. Михайлов,

- А. Ненарокомов, Д. Титов // Матер. конф. "Новые технологии и современные системы автоматизации". – 2005. – № 5. – С. 67-68.
74. ISO 8301:1991. Thermal insulation. Determination of steady-state thermal resistance and related properties. Heat flow meter apparatus.
75. ДСТУ Б В.2.7-105-2000 (ГОСТ 7076-99). Матеріали і вироби будівельні. Метод визначення теплопровідності і термічного опору при стаціонарному тепловому режимі. – Київ: "Видання офіційне", 2001.
76. ГОСТ 24392-80. Кремний и германий монокристаллические. Измерение удельного электрического сопротивления четырехзондовым методом. – Москва: Издание официальное, 2001.
77. ГОСТ 6433.2-71. Материалы электроизоляционные твердые. Методы определения электрического сопротивления при постоянном напряжении. – Москва: Издание официальное, 2001.
78. ДСТУ 3651.1-97. Метрологія. Одиниці фізичних величин. Похідні одиниці фізичних величин Міжнародної системи одиниць та позасистемні одиниці. Основні поняття, назви та позначення. [аналог ISO 1000:1992. SI units and recommendations for the use of their multiples and of certain other units].
79. Kanit T. Determination of the size of the representative volume element for random composites: statistical and numerical approach / T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, D. Jeulin // International Journal of Solids and Structures. – 2003. – Vol. 40. – P. 3647-3679.
80. Madi K. Estimating RVE sizes for 2D/3D viscoplastic composite materials / Madi K., Forest S., Dominique J., Doussuge M. – Materiaux, Dijon. – 2006. – 12 p.
81. Ostoja-Starzewski M. Material spatial randomness: From statistical to representative volume element / M. Ostoja-Starzewski // Probabilistic Engineering Mechanics. – 2006. – Vol. 21. – P. 112-132.
82. Drugan W. A micromechanics-based nonlocal constitutive equations and estimates of representative volume element size for elastic composites / W. Drugan, J. Willis // Journ. Mech. Phys. Solids. – 1996. – Vol. 44. P. 497-524.

83. Лыков А. Теория теплопроводности / Лыков А. – Москва: Высшая школа, 1967. – 600 с.
84. Лурье А. Теория упругости / Лурье А. – Москва: Наука, 1970. – 940 с.
85. Timoshenko S. Theory of Elasticity / Timoshenko S., Goodier J. [пер. с англ. под ред. Шапиро Г.]. – Москва: Наука, 1979. – 560 с.
86. Нейман Л. Теоретические основы электротехники [в 2-х т. Том 1. 3-е изд., перераб. и доп.] / Нейман Л., Демирчян К. – Ленинград: Энергоиздат. Ленингр. отд-ние, 1981. – 536 с.
87. Нейман Л. Теоретические основы электротехники [в 2-х т. Том 2.] / Нейман Л., Демирчян К. – Ленинград: Энергоиздат. Ленингр. отд-ние, 1967. – 410 с.
88. Лыков А. Теория переноса энергии и вещества / Лыков А., Михайлов Ю. – Минск: издательство академии наук БССР, 1959. – 332 с.
89. Дьярмати И. Неравновесная термодинамика. Теория поля и вариационные принципы / Дьярмати И. – Москва: Мир, 1974. – 304 с.
90. Kondepudi D. Modern Thermodynamics. From Heat Engines to Dissipative Structures / Kondepudi D., Prigogine I. [пер. с англ. Данилова А.]. – Москва: Мир, 2002. – 464 с.
91. Бурдаков В. Термодинамика [в 2 ч. Ч 1. Основной курс] / Бурдаков В., Дзюбенко Б., Меснякин С., Михайлова Т. – Москва: Дрофа, 2009. – 480 с.
92. Бурдаков В. Термодинамика [в 2 ч. Ч 2. Специальный курс] / Бурдаков В., Дзюбенко Б., Меснякин С., Михайлова Т. – Москва: Дрофа, 2009. – 362 с.
93. Feynmann R. The Character of Physical Law / Feynmann R. [пер. с англ. Наппельбаума Э., Голышева В.]. – Москва: АСТ, 2014. – 256 с.
94. Эткин В. Энергодинамика (синтез теорий переноса и преобразования энергии) / Эткин В. – СПб: Наука, 2008. – 410 с.
95. Lienhard J. IV A Heat Transfer Textbook [4th edition] / Lienhard J. IV, Lienhard J. V – Cambridge, 2012. – 766 p.
96. Щеглов И. Дискретизация сложных двумерных и трехмерных областей для решения задач математического моделирования: автореф. дис. на стиск. уч.

- степ. к. ф.-м. н. / Щеглов И. – Москва: МГТУ, 2010. – 18 с.
97. Szabó B. Introduction to Finite Element Analysis. Formulation, Verification and Validation / Szabó B., Babuška I. – New-York: Wiley, 2011. – 368 p.
 98. Bathe K. Finite Element Procedures / Bathe K. – NJ Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1996. – 1052 p.
 99. Zienkiewicz O. Finite elements and approximation / Zienkiewicz O., Morgan K. [пер. с англ. Квасова Б., Бахвалова Н.]. – Москва: Мир, 1986. – 318 с.
 100. Brenner S. The Mathematical Theory of Finite Element Methods [3-rd Edition] / Brenner S., Scott R. – New-York: Springer, 2008. – 404 p.
 101. Mithcell A. The Finite Element Method in Partial Differential Equations / Mithcell A. [пер. с англ. под ред. Яненко Н.]. – Москва: Мир, 1981. – 215 с.
 102. Fletcher C. Computational Galerkin Methods / Fletcher C. [пер. с англ. Соколовской Л., Шидловского В.]. – Москва: Мир, 1988. – 352 с.
 103. Михлин С. Вариационные методы в математической физике [2-е изд. перераб. и доп] / Михлин С. – Москва: Наука, 1970. – 512 с.
 104. Strang G. An Analysis of the Finite Element Method / Strang G., Fix G. [пер с англ. Агошкова В., Василенко В., Шайдурова В., под ред. Марчука Г.]. – Москва: Мир, 1977. – 352 с.
 105. Thomee V. Galerkin Finite Element Methods for Parabolic Problems [2-nd ed.] / Thomee V. – New-York: Springer, 2006. – 382 p.
 106. Norrie D. An Introduction to Finite Element Analysis / Norrie D., Vries G. [пер. с англ. Демидова Г., Урванцева А., Марчука Г.]. – Москва: Мир, 1981. – 304 с.
 107. Марчук Г. Введение в проекционно-сеточные методы / Марчук Г., Агошков В. – Москва: Наука, 1981. – 416 с.
 108. Strang G. Linear Algebra and Its Applications / Strang G. [пер. с англ.]. – Москва: Мир, 1980. – 460 с.
 109. Digimat [electronic resource]. – Access mode: <http://e-xstream.com/product/digimat>, title from screen, accessed July 10 2015.
 110. Digimat – The Nonlinear Multi-scale Material and Structure Modeling Platform [electronic resource]. – Access mode: <http://www.mscsoftware.com/>

- product/digimat, title from screen, accessed July 10 2015.
111. Helius Composite. Practical tools for composite design [electronic resource]. – Access mode: <http://www.autodesk.com/products/helius-composite/overview>, title from screen, accessed July 10 2015.
 112. Helius: CompositePro. The composite engineer's Toolbox [electronic resource]. – Access mode: <http://www.firehole.com/products/comppro>, title from screen, accessed July 10 2015.
 113. Шашков А. Волновые явления теплопроводности: Системно-структурный подход [изд. 2-е, доп.] / Шашков А., Бубнов В., Яновский С. – Москва: Едиториал УРСС, 2004. – 296 с.
 114. Гельфанд И. Лекции по линейной алгебре [4-е изд., доп.] / Гельфанд И. – Москва: Наука, 1971. – 272 с.
 115. Винберг Э. Курс Алгебры [2-е изд., испр. и доп.] / Винберг Э. – Москва: Факториал Пресс, 2001. – 558 с.
 116. Александров П. Введение в теорию размерности. Введение в теорию топологических пространств и общую теорию размерности / Александров П., Пасынков Б. – Москва: Наука, 1973. – 576 с.
 117. Александров П. Введение в теорию множеств и общую топологию / Александров П. – Москва: Наука, 1977. – 368 с.
 118. Арнольд. В. Математические методы классической механики [3-е изд.] / Арнольд. В. – Москва: Наука, 1989. – 472 с.
 119. Айзерман М. Классическая механика [2-е изд. перераб.] / Айзерман М. – Москва: Наука, 1980. – 368 с.
 120. Banach S. Rachunek Rozniczkowy i Calkowy / Banach S. [пер. с польск. Зуховицкого С.]. – Москва: Наука, 1966. – 436 с.
 121. Farlow S. Partial Differential Equations for Scientists and Engineers / Farlow S. [пер. с англ. Плиса А., под ред. Похожаева С.]. – Москва: Мир, 1985. – 384 с.
 122. Кочин Н. Векторное исчисление и начала тензорного исчисления [9-е изд.] / Кочин Н. – Москва: Наука, 1965. – 426 с.
 123. Ладыженская О. Краевые задачи математической физики /

- Ладыженская О. – Москва: Наука, 1973. – 408 с.
124. Гантмахер Ф. Теория матриц [2-е изд., доп.] / Гантмахер Ф. – Москва: Наука, 1966. – 576 с.
125. Shewchuk J. An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain [Technical Report] / Shewchuk J. – Pittsburgh: Carnegie Mellon University, 1994. – 64 p.
126. Веников В. Теория подобия и моделирования / Веников В. – Москва: Высшая школа, 1976. – 480 с.
127. Гухман А. Введение в теорию подобия [изд. 2-е. доп. и перераб.] / Гухман А. – Москва: Высшая школа, 1973. – 296 с.
128. Дульнев Г. Тепло- и массообмен в радиоэлектронной аппаратуре / Дульнев Г. – Москва: Высшая школа, 1984. – 247 с.
129. Федасюк Д. Методи та засоби теплового проектування мікроелектронних пристроїв / Федасюк Д. – Львів: Видавництво Державного університету "Львівська політехніка", 1999. – 228 с.
130. Robertson A. An Electrical-Analog Method for Transient Heat-Flow Analysis / A. Robertson, D. Gross // Journal of Research of the National Bureau of Standards. – 1958. – Vol. 61. – No. 2. – P. 105-115.
131. Westendorp G. Electric circuit diagram equivalents of fields [el. resource]. – Access mode: <http://westy31.home.xs4all.nl/Electric.html>, title from screen, accessed July 21 2015.
132. Tanenbaum A. Distributed Systems. Principles and Paradigms / Tanenbaum A., van Steen M. [пер. с англ.]. – СПб: Питер, 2003. – 878 с.
133. Hughes C. Parallel and Distributed Programming Using C++ / Hughes C., Hughes T. [пер. с англ.]. – Москва: Вильямс, 2004. – 672 с.
134. Breshears C. The Art of Concurrency. A Thread Monkey's Guide to Writing Parallel Applications / Breshears C. – US, California, Sebastopol: O'Reilly Media Inc, 2009. – 304 p.
135. Немнюгин С. Параллельное программирование для многопроцессорных вычислительных систем / Немнюгин С., Стесик О. – СПб: БХВ, 2002. – 400 с.

136. Foster I. Designing and Building Parallel Programs, 2003 [electronic resource]. – Access mode: http://www-rohan.sdsu.edu/faculty/mthomas/courses/docs/foster/Foster_Designing_and_Building_Parallel_Programs.pdf, title from screen, accessed July 22 2015.
137. Nelson P. Parallel Programming Paradigms: dissertation of the requirements for the degree of Doctor of Philosophy / University of Washington, 1987. – 142 p.
138. Jorge L. Architectural Patterns for Parallel Programming / Arjona O., Roberts G. – London: University College, 1998. – 26 p.
139. Багдасаров Г. Измерение производительности и масштабируемости программного комплекса MARPLE3D / Г. Багдасаров, С. Дьяченко, О. Ольховская // Москва: ИПМ им. М.В.Келдыша. – 2012. – № 37. – 23 с. (Препринт).
140. Amdahl G. Validity of the Single Processor Approach to Achieving Large-Scale Computing Capabilities / G. Amdahl // New-York: AFIPS Conference Proceedings. – Vol. 30. – P. 483-485.
141. Munshi A. OpenCL Programming Guide / Munshi A., Gaster B., Mattson T., Fung J., Ginsburg D. – New-York: Addison-Wesley, 2011. – 648 p.
142. The OpenCL Specification 1.0.48. Khronos OpenCL Working Group, Editor: Munshi A., 2009 [electronic resource]. – Access mode: <https://www.khronos.org/registry/cl/specs/opengl-1.0.pdf>, title from screen, accessed July 22 2015.
143. Conformant Companies. Khronos Group. Retrieved 8 April 2015. [electronic resource]. – Access mode: <https://www.khronos.org/conformance/adopters/conformant-companies#opencl>, title from screen, accessed July 22 2015.
144. Muller J. Handbook of Floating-Point Arithmetic / Muller J., Brisebarre N., [et al.]. – Boston: Birkhauser, 2009. – 579 p.
145. Яшкардин В. IEEE 754 – стандарт двоичной арифметики с плавающей точкой. 04.06.2012 [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.softelectro.ru/ieee754.html>, название с экрана, доступ 23 Июля 2015.
146. The IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic (IEEE 754-2008). – ISO/IEC/IEEE 60559:2011.

147. Shewchuk J. What Is a Good Linear Finite Element? Interpolation, Conditioning, Anisotropy, and Quality Measures (Preprint) / Shewchuk J. – Berkeley: University of California, 2002. – 66 p.
148. Галанин М., Щеглов И. Разработка и реализация алгоритмов трехмерной триангуляции сложных пространственных областей: итерационные методы [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://www.keldysh.ru/papers/2006/prep09/prep2006_09.html, название с экрана, доступ 29 Июля 2015.
149. Галанин М., Щеглов И. Разработка и реализация алгоритмов трехмерной триангуляции сложных пространственных областей: прямые методы [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://keldysh.ru/papers/2006/prep10/prep2006_10.html, название с экрана, доступ 29 Июля 2015.
150. Скворцов А. Триангуляция Делоне и её применение / Скворцов А. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2002. – 128 с.
151. Shewchuk J. Delaunay Refinement Mesh Generation / Shewchuk J. – Pittsburgh: Carnegie-Mellon Univ., PA school of computer science, 1997. – 215 p.
152. Shewchuk J. Adaptive precision floating-point arithmetic and fast robust geometric predicates / Shewchuk J. – Discrete & Computational Geometry. – 1997. – Vol. 18. – No. 3. – P. 305-363.
153. Lorensen, W. Marching cubes: A high resolution 3d surface construction algorithm / W. Lorensen, E. Cline // ACM Computer Graphics. – 1987. – Vol. 21. – No. 4. – P. 163-169.
154. Chernyaev E. Marching Cubes 33: Construction of Topologically Correct Isosurfaces / E. Chernyaev // Saint-Petersburg: GRAPHICON'95. – 1995. – 9 p.
155. Smistad E. Real-Time Surface Extraction and Visualization of Medical Images using OpenCL and GPUs / E. Smistad, A. Elster, F. Lindseth // NIK: Norsk Informatikkonferanse. – 2012. – P. 141-152.
156. Коваленко А. Основы термоупругости / Коваленко А. – Київ: Наукова думка, 1970. – 308 с.
157. ДСТУ 3651.1-97 Метрологія. Одиниці фізичних величин. Похідні одиниці фізичних величин Міжнародної системи одиниць та позасистемні одиниці.

- Основні поняття, назви та позначення. – Київ: Видання офіційне. – 1998.
158. ISO 1000:1992 SI units and recommendations for the use of their multiples and of certain other units.
 159. Волков Д. Приборы и методы для измерения теплофизических свойств веществ / Волков Д., Кораблев В., Заричняк Ю. – СПб: ИТМО, 2006. – 66 с.
 160. Komarudin M. Resistor network analogy of non-obtuse finite element model for electrical impedance tomography / M. Komarudin // *Electrican Jurnal Rekayasa dan Teknologi Elektro*. – 2007. – Vol. 1. – No. 1. – P. 1-10.
 161. Silvester P. *Finite Elements for Electrical Engineers* / Silvester P., Ferrari R. [пер. с англ. под ред. Дубровки Ф.]. – Москва: Мир, 1986. – 228 ст.
 162. ViennaCL – Linear Algebra Library using CUDA, OpenCL, and OpenMP [electronic resource]. – Access mode: <http://viennacl.sourceforge.net>, title from screen, accessed August 06 2015.
 163. ViennaCL – The Vienna Computing Library / `viennacl::linalg::cg_tag` Class Reference [electronic resource]. – Access mode: http://viennacl.sourceforge.net/doc/classviennacl_1_1linalg_1_1cg_tag.html, title from screen, accessed August 06 2015.
 164. ViennaCL – The Vienna Computing Library / `viennacl::linalg::bicgstab_tag` Class Reference [electronic resource]. – Access mode: http://viennacl.sourceforge.net/doc/classviennacl_1_1linalg_1_1bicgstab__tag.html>, title from screen, accessed August 06 2015.
 165. Быков В. Цифровое моделирование в статистической радиотехнике / Быков В. – Москва: Советское радио, 1971. – 328 ст.
 166. Weber L. Diamond-based Metal Matrix Composites for Thermal Management made by Liquid Metal Infiltration: Potential and Limits / L. Weber, R. Tavangar // *Int. Journ. Advanced Materials Research*. – 2009. – Vol. 59. – P. 111-115.

Додаток А

Акти про впровадження результатів роботи

Attestation

on the implementation of dissertation results

NAZARIY JAWORSKI

"Models and methods of composite materials design with thermophysical characteristics consideration"

This attestation confirms that scientific theoretical and practical results, obtained by N.B.Jaworski, the postgraduate student of CAD Department at Lviv Polytechnic National University, in his dissertation "Models and methods of composite materials design with thermophysical characteristics consideration" have been implemented in international FP7-PEOPLE-2010-IRSES project

"Developing Multidomain MEMS Models for Educational Purposes - EduMEMS"
No. 269295.

Following dissertation result is used in EduMEMS:

models for analyzing thermal processes in heterogeneous composite materials, used in MEMS component level design. By combining formal descriptions of thermal related problems, developed models take into account complex multi-physical boundary conditions.

The result obtained in the dissertation has practical value for the development of software tools in MEMS design, and especially useful in engineering applications with high abstraction level interfaces. It provides increased efficiency and flexibility for the multiphysics MEMS components design.

This attestation represents the scientific assessment of the dissertation results and has no basis for financial settlements.

1. 10. 2015

Prof. dr hab. Mariusz Zubert

Mariusz Zubert

Head of *Department of Microelectronic and Computer Science*

Prof. dr hab. Andrzej Napieralski
Head of Department
of Microelectronics
and Computer Science

Andrzej Napieralski
Professor Andrzej Napieralski

Lodz University of Technology
Wólczańska Street 221/223
90-924 Lodz

Акт

про впровадження результатів дисертації

НАЗАРІЙ ЯВОРСЬКИЙ

"Моделі та методи проектування композиційних матеріалів з врахуванням теплофізичних характеристик"

Цей акт підтверджує, що наукові, теоретичні та практичні результати, отримані Яворським Н.Б., аспірантом кафедри систем автоматизованого проектування Національного університету "Львівська політехніка", в його дисертації "Моделі та методи проектування композиційних матеріалів з врахуванням теплофізичних характеристик" були впроваджені в міжнародний проект FP7-PEOPLE-2010-IRSES "Розроблення мультидомених моделей мікроелектромеханічних систем для навчальних цілей - EduMEMS"

№. 269295.

Наступні результати дисертації використані в EduMEMS:

моделі аналізу теплофізичних процесів в гетерогенних композиційних матеріалах, які використовуються на компонентному рівні проектування MEMS. За рахунок об'єднання формалізованих описів зв'язаних теплових задач, розроблені моделі враховують комплексні мультифізичні крайові умови.

Результат, що отриманий в дисертації має практичну цінність при розробці програмних інструментів проектування MEMS і особливо корисний при використанні в інженерних системах з інтерфейсами високого рівня абстрактності. Він забезпечує підвищену ефективність та гнучкість у процесі проектування MEMS на компонентному рівні.

Цей акт відображає наукову цінність результатів дисертації та немає ніяких підстав для фінансових розрахунків.

1.10.2015

Професор, доктор наук Маріус Зюберт

Завідувач кафедри мікроелектроніки та комп'ютерних наук

Професор, доктор наук Анджей Наперальський

Лодзький технічний університет

Вулиця Волчанська 221/223

90-924 Лодзь

Текст перекладу вігнотідає оригіналу
Зав. кафедри прикладної інформатики, д.ф.н., проф.

8.10.2015

Зюберт (О. Левченко)



«З А Т В Е Р Д Ж Е Н О»
Проректор з науково-випускничої
роботи Національного університету
"Львівська політехніка"
О. Навидчак
" 8 " жовтня 2015 р.

А К Т
впровадження у навчальний процес результатів дисертаційної роботи
аспіранта кафедри "Системи автоматизованого проектування"
Яворського Назарія Борисовича
"Моделі та методи проектування композиційних
матеріалів з врахуванням теплофізичних характеристик"
на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук

Дисертаційна робота аспіранта Яворського Назарія Борисовича "Моделі та методи проектування композиційних матеріалів з врахуванням теплофізичних характеристик" виконана на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 05.13.12 "Системи автоматизації проектувальних робіт", науковий керівник: д.ф.м.н., проф. каф. САП Кособуцький П.С. У роботі розв'язано завдання вдосконалення та реалізації з допомогою технологій розподілених та паралельних обчислень мікрорівневих моделей та методів знаходження ефективних теплофізичних характеристик композиційних матеріалів, на основі чисельних методів моделювання теплофізичних процесів.

Розроблені у дисертації методи синтезу мікрорівневих структур композиційних матеріалів, чисельні моделі аналізу теплофізичних процесів в гетерогенних композиційних структурах, методи знаходження ефективних характеристик матеріалів з допомогою чисельного моделювання відповідних процесів, а також програмне середовище, що реалізоване з допомогою технологій паралельних та розподілених обчислень, використовуються в процесі викладання лекційних курсів та лабораторних робіт з дисциплін: "Технології розподілених систем та паралельних обчислень" для студентів базового напрямку 6.050101 "Комп'ютерні науки" і вибіркового блоку 6.05010103 "Системи проектування"; "Комп'ютерні методи в інженерії мікроелектромеханічних систем" для студентів базового напрямку 6.050101 "Комп'ютерні науки".

Акт затверджено на засіданні кафедри 6-го 29 вересня 2015 протокол № 3.

Директор Інституту комп'ютерних
наук та інформаційних технологій
д.т.н., професор



Медиковський М. О.

Зав. кафедри "Системи
автоматизованого проектування"
д.т.н., професор



Лобур М. В.