

На правах рукописи



Сагдеева Юлия Альбертовна

**МЕТОД ЧИСЛЕННОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ
ОСРЕДНЕННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОЗИТОВ
НА ОСНОВЕ ВЕЙВЛЕТ-ПРЕОБРАЗОВАНИЯ И
МЕТОДА КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ**

05.13.18 — Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук

Казань – 2007

Работа выполнена в Институте прикладной механики
Уральского отделения РАН (г.Ижевск).

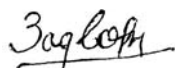
Научный руководитель	кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Копысов Сергей Петрович
Официальные оппоненты:	доктор физико-математических наук, доцент Даутов Рафаил Замилович, кандидат физико-математических наук Мартыненко Сергей Иванович
Ведущая организация	Институт математического моделирования РАН, г. Москва.

Защита диссертации состоится «25» октября 2007г. в _____ на заседании диссертационного совета Д 212.081.21 в Казанском государственном университете по адресу: 420008, г.Казань, ул. Кремлевская, 18, корп.2.

С диссертационной работой можно ознакомиться в научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского Казанского государственного университета.

Автореферат разослан «20» сентября 2007г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 212.081.21,
к.ф.-м.н., доцент

 Задворнов О.А.

Общая характеристика работы

Актуальность проблемы. Промышленные композитные материалы состоят из большого числа микроструктурных компонент с разными характеристиками, сочетание которых определяет свойства материала в целом. Процессы, происходящие в композиционных материалах, описываются дифференциальными уравнениями с быстро осциллирующими коэффициентами, численное решение которых требует значительных вычислительных затрат, поскольку предполагает использование расчетной сетки очень малого шага. Это привело к появлению новой области математических исследований, целью которой является построение таких методов осреднения дифференциальных операторов с частными производными, что решения получаемых уравнений с осредненными коэффициентами близки к решениям исходных уравнений и адекватно описывают поведение композита. Осредненные (эффективные) характеристики композиционных материалов определяются экспериментально или численно, а также существует ряд аналитических оценок.

Существующие аналитические оценки свойств композитов (например, оценки Хашина-Штрикмана и оценки Фойгта-Рейсса для упругих констант, тепловых и фильтрационных свойств), как правило, дают достаточно широкий диапазон возможных значений свойств материала и могут использоваться только для грубой оценки.

В настоящее время разработаны численные методы получения эффективных характеристик материалов с периодической структурой в задачах линейной упругости, теплопроводности, диффузии и др. — это методика асимптотического осреднения, описанная Н.С. Бахваловым, Г.П. Панасенко, Б.Е. Победрей, Э. Санчес-Паленсией и А. Бенсусаном. Однако, в данном случае необходимо решение задач в классе функций периодических на ячейке, что осложняет реализацию данного метода. Лишь в случае определенной симметрии исследуемого образца и материала периодические граничные условия можно заменить непериодическими краевыми условиями.

Недостаточность классических методов осреднения побуждает развивать новые математические подходы. Основу одного из подходов составило использование вейвлетов — класса базисных функций, которые применяются в цифровой обработке сигналов, при сжатии информации, распознавании образов и др.

Одно из главных преимуществ вейвлет-преобразования заключается в возможности получать представление величин на интересующем

уровне масштаба. С помощью вейвлет-преобразования получают осредненное представление функции (грубый масштаб – «низкое разрешение») и выделяют ее локальные компоненты (мелкий масштаб – «высокое разрешение»). Данное свойство преобразования позволяет вести многомасштабный анализ исследуемой функции или анализ с переменным разрешением. Свойства вейвлетов позволяют предположить, что вейвлет-преобразование будет полезным и при осреднении решений уравнений в частных производных.

Цель работы. Разработка метода осреднения эллиптических дифференциальных уравнений на основе вейвлет-преобразования и метода конечных элементов для прогнозирования эффективных свойств и анализа осредненных решений уравнений для композитов с известными структурой и свойствами составляющих компонент.

Методы исследований. Используется математический аппарат статической теории упругости, стационарной теории теплопроводности и теории фильтрации, теория дискретного вейвлет-преобразования, теория метода конечных элементов, методы линейной алгебры, феноменологические модели механики композитов.

Достоверность и обоснованность результатов. Достоверность полученных в работе результатов и выводов подтверждается сравнением с известными данными экспериментальных и теоретических исследований других авторов, тестированием численных алгоритмов и программного комплекса на решениях модельных задач.

Научная новизна работы состоит в следующем:

- разработана методика численного осреднения линейных эллиптических краевых задач второго порядка с быстро осциллирующими коэффициентами для вычисления эффективных характеристик с помощью одномерного и двумерного вейвлет-преобразования Хаара и метода конечных элементов в областях периодической и непериодической структуры;

- предложены способы повышения эффективности вейвлет-преобразования за счет усечения матриц с выбором порогового значения и программной реализации вейвлет-осреднения с использованием сжатого формата хранения матриц без нулевых элементов;

- численным моделированием получены осредненные значения модуля Юнга, коэффициента Пуассона, коэффициентов теплопроводности и проницаемости в одномерном и двумерном случаях для композитов со случайной структурой, материалов с включениями разной формы (квадратные, круглые и ромбические включения), разной объемной долей (объемная доля включений составляла от 7% до 50%), различно-

го взаимного расположения включений (симметричное и несимметричное), когда свойства составляющих компонент композита различаются на порядки.

Теоретическая и практическая ценность. Разработанная методика вейвлет-осреднения и вычисления осредненных характеристик может быть использована для оценки эффективных характеристик существующих композитных материалов, а также для прогнозирования упругих, тепловых и фильтрационных свойств при создании новых материалов. Получаемые осредненные решения дифференциальных уравнений могут использоваться в качестве приближений к точному решению, когда необходимо знать глобальное поведение решений (например, такое приближение на грубых сетках используется в многосеточных методах решения дифференциальных уравнений и при построении предобуславливателей для решения систем алгебраических уравнений).

Апробация работы. Основные положения диссертационной работы обсуждались на следующих научных конференциях: Всероссийской молодежной школе-конференции «Численные методы решения линейных и нелинейных краевых задач», 27 июня – 1 июля 2003, Казань; Конференции молодых ученых ФТИ УрО РАН «КоМУ-2004», 8–10 декабря 2004, Ижевск; Международной конференции по избранным вопросам современной математики, 4–8 апреля 2005, Калининград; 14 Зимней школе по механике сплошных сред, 28 февраля – 3 марта 2005, Пермь; VI International Congress on Math. Modeling, 20–26 сентября 2004, Нижний Новгород; 14-й Всероссийской школе-конференции молодых ученых, 4 октября – 7 октября 2005, Пермь; Научной конференции «Теория управления и математическое моделирование», 3–8 июля 2006, Ижевск; III научно-практической конференции «Проблемы механики и материаловедения», 14–15 июня 2006, Ижевск; Всероссийской молодежной школе-конференции «Численные методы решения задач математической физики», 26 июня – 1 июля 2006, Казань; IX Всероссийском съезде по теоретической и прикладной механике, 22–28 августа 2006, Нижний Новгород; 15 Зимней школе по механике сплошных сред, 26 февраля – 3 марта 2007, Пермь.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 19 печатных работ. Из них в рецензируемых журналах 4 работы, в журналах, рекомендованных ВАК, 1 работа.

Благодарности. Диссертационная работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты №№07-01-96069, 06-07-89015, 02-07-90265) и УрО РАН.

Структура и объем работы. Работа состоит из введения, четырех

глав, 15 параграфов (нумерация параграфов по главам), заключения, списка литературы и содержит 56 рисунков, 13 таблиц. Объем работы 124 страницы. Библиографический список включает 91 наименование.

Содержание работы

Во введении обоснована актуальность темы, сформулированы цели и научная новизна работы, отмечена практическая ценность результатов, изложено краткое содержание работы по главам.

Первая глава содержит обзор основных методов получения эффективных характеристик композитов. Выделено три группы методов. В п. 1.1 рассмотрены преимущества и недостатки экспериментального определения свойств композиционных материалов. В п. 1.2 описаны уравнения с быстро осциллирующими коэффициентами, приведены постановки задач статической теории упругости, стационарной теории теплопроводности и теории фильтрации, а также введено понятие эффективных оценок. В п. 1.3 описаны известные верхние и нижние аналитические оценки для упругих эффективных модулей, коэффициента теплопроводности и проницаемости, использующие информацию только об объемных долях включений и материала. Это оценки Фойгта-Рейсса (называемые также смесевыми), получаемые на основе закона сохранения энергии, и более точные оценки Хашина-Штрикмана, получаемые из вариационного принципа Хашина-Штрикмана. В п. 1.4 рассмотрены численные методы вычисления оценок свойств, среди которых наиболее проработанным является асимптотический метод осреднения, предложенный Н.С. Бахваловым, Г.П. Панасенко¹ и Б.Е. Победрей. Рассмотрены методы давлений и ренормализации получения осредненных фильтрационных свойств, а также многосеточный метод осреднения дифференциальных уравнений.

Вторая глава посвящена описанию многомасштабного анализа на основе вейвлет-преобразования Хаара и метода конечных элементов. В п. 2.1 вводится понятие семейств масштабирующих функций $\phi_{j,k}(x) = 2^{j/2}\phi(2^j x - k)$, $k, j \in \mathbb{Z}$, и вейвлетов $\psi_{j,k}(x) = 2^{j/2}\psi(2^j x - k)$, $k, j \in \mathbb{Z}$. В качестве вейвлет-базиса был выбран базис Хаара, поскольку он обладает свойствами ортогональности и симметрии:

$$\psi(x) = \begin{cases} 1, & x \in [0, 1/2) \\ -1, & x \in [1/2, 1] \end{cases}, \quad \phi(x) = \begin{cases} 1, & x \in [0, 1] \\ 0, & x \notin [0, 1] \end{cases}.$$

¹Бахвалов Н. С., Панасенко Г. П. Осреднение процессов в периодических средах. — М.: Наука. — 1984.

В п. 2.2 описана многомасштабная декомпозиция функции. Известно, что пространства, порождаемые вейвлетами и масштабирующими функциями, $V_j = \text{span}\{\phi_{j,k}(x)\}$ и $W_j = \text{span}\{\psi_{j,k}(x)\}$, $j, k \in \mathbb{Z}$ удовлетворяют соотношению $V_j = V_{j-1} \oplus W_{j-1}$, где $\oplus$ — прямая сумма. Поэтому функция $f_j(x) \in V_j$ представляется в виде:

$$f_j(x) = \sum_k c_{j,k}(x) \phi_{j,k}(x) = \sum_k c_{j-1,k} \phi_{j-1,k}(x) + \sum_k d_{j-1,k} \psi_{j-1,k}(x).$$

Пусть произвольный вектор c_j имеет размер 2^j . Этот вектор представим как последовательность коэффициентов разложения некоторой функции $f_j(x) \in V_j$:

$$f_j = \sum_{k=1}^{2^j} c_{j,k} \phi_{j,k}, \quad c_j = (c_{j,1}, c_{j,2}, \dots, c_{j,2^j}).$$

Коэффициенты разложения в пространствах V_j , V_{j-1} и W_{j-1} связаны между собой: $c_{j-1} = P_j c_j$, $d_{j-1} = Q_j c_j$. Вектор c_{j-1} является проекцией вектора c_j на пространство V_{j-1} , т.е. его огрубленным представлением. Вектор d_{j-1} соответствует уточняющим коэффициентам. Матрица $W_j = \begin{pmatrix} P_j \\ Q_j \end{pmatrix}$ является матрицей вейвлет-преобразования.

Вейвлет-преобразование Хаара ортогонально: $W_j^{-1} = W_j^T$.

В п. 2.3 рассмотрено применение вейвлет-преобразования для осреднения решения эллиптических дифференциальных уравнений в комбинации с методом конечных разностей (МКР) или методом конечных элементов (МКЭ) на примере одномерного уравнения $\frac{d}{dx} \left(k(x) \frac{du}{dx} \right) = f$, $x \in [0, 1]$. В работе вейвлет-преобразование впервые использовалось в комбинации с МКЭ. Методом конечных элементов исходное дифференциальное уравнение $Lu = f$ заменялось аппроксимирующим его на некоторой сетке дискретным уравнением $L_h u_h = f_h$, решение которого сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений

$$Au = b, \tag{1}$$

где матрица A имеет размер $2^j \times 2^j$, симметрична и положительно определена. Затем к системе (1) применялось вейвлет-преобразование Хаара W_n :

$$WAW^T W u = W b. \tag{2}$$

Система (2) имеет блочный вид. Вектор неизвестных разбивается на две составляющих компоненты — вектор осредненных неизвестных и

вектор «деталей» (уточняющих компонент):

$$\begin{pmatrix} P_j \\ Q_j \end{pmatrix} A(P_j^T Q_j^T) \begin{pmatrix} u_{j-1}^c \\ u_{j-1}^d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{j-1}^c \\ b_{j-1}^d \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Вводились следующие обозначения, которые используются далее при описании вычислительных особенностей:

$$K_{11} = Q_j A Q_j^T, \quad K_{12} = Q_j A P_j^T, \quad K_{21} = P_j A Q_j^T, \quad K_{22} = P_j A P_j^T,$$

$$u_1 = u_{j-1}^d, \quad u_2 = u_{j-1}^c, \quad b_1 = b_{j-1}^d, \quad b_2 = b_{j-1}^c.$$

Система (3) принимает вид

$$\begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} \\ K_{21} & K_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}.$$

Исключая u_1 из первого уравнения, получим

$$S u_2 = b, \quad (4)$$

где S – дополнение Шура: $S = K_{22} - K_{21} K_{11}^{-1} K_{12}$, $b = b_2 - K_{21} K_{11}^{-1} b_1$. Разрешив (4), получаем искомое осредненное решение u_2 . Применяя вейвлет-преобразование несколько раз, на каждом шаге имеем решение с разной степенью осреднения.

В п. 2.4 вводится расширение вейвлет-представления с одномерного случая на двумерный в пространстве $L_2(\mathbb{R}^2)$. Базисные функции образуются за счет комбинаций тензорных произведений базисных функций для одномерного случая. Разложение системы уравнений проводится аналогично одномерному случаю. Преобразованный вектор неизвестных состоит из четырех компонент – три компоненты содержат информацию о быстро осциллирующих составляющих решения по трем возможным направлениям, а одна компонента описывает осредненное поведение решения.

В п. 2.5 предложена и обоснована численная методика получения осредненных характеристик композитов. Методика основана на совместном применении МКЭ, вейвлет-осреднения системы, описанного в пп. 2.3 и 2.4, и решении краевых задач при определенных граничных условиях:

а) Модуль Юнга (одномерный случай). Рассматривалась модельная задача: одноосное напряженное состояние упругого стержня

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left(E(x) \frac{du(x)}{dx} \right) &= 0, \quad x \in (-l, l); \\ E(-l) u'(-l) &= -p, \quad E(l) u'(l) = p, \end{aligned} \quad (5)$$

где p – давление, l – половина длины стержня.

Для однородной и изотропной среды с модулем Юнга $E(x) = E = \text{const}$, решение задачи имеет вид

$$u = \frac{p}{E}x. \quad (6)$$

Предполагалось, что композитный стержень реагирует на внешнюю нагрузку как однородный, поэтому из (6) следует, что $E = \frac{x}{u}p$.

Эффективный модуль Юнга E^w определялся на основе численного решения методом конечных элементов и вейвлет-осреднения задачи (5) по соотношению

$$E^w = \frac{1}{N_n} \sum_{i=1}^{N_n} E_i, \quad \text{где } E_i = \frac{x_i}{u_i^w} p, \quad (7)$$

E_i — модуль упругости в узле сетки x_i , $u_i^w = u(x_i)$ — значение перемещения в узле сетки x_i , осредненное с помощью вейвлет-преобразования, N_n — число узлов сетки.

В соотношении (7) используются координаты узлов новой сетки осредненного поля перемещений. Координаты этих узлов для стержня определяются согласно схеме на рис. 1. Вектор неизвестных системы (1), сформированной в МКЭ, дает значения неизвестной функции в узлах сетки. В случае вейвлет-преобразования Хаара на каждом шаге число неизвестных в системе сокращается в два раза, а каждый столбец (строка) матрицы осредненной системы уравнений получается с помощью преобразования двух соседних столбцов (строк) матрицы исходной системы. Две соседние переменные в векторе неизвестных исходной системы преобразуются в одну неизвестную осредненной системы. Переменные в векторе неизвестных упорядочены по номеру узла, то есть на каждом шаге осредняются значения, соответствующие соседним узлам сетки. Полученные осредненные значения уже нельзя сопоставить какому-либо узлу исходной сетки, т.к. они сочетают в себе значения для двух узлов. Новый узел помещается посередине между двумя осредняемыми узлами. Недостатком данного подхода является то, что осредненное решение определено лишь на части исходной области, поскольку узлы новой сетки смещаются к центру. Шаг новой сетки h_1 будет отличаться от старого h_0 в два раза: $h_1 = 2h_0$. Этот недостаток преодолевается с помощью расширения физической области на фиктивную область. Например, решение продолжается за пределы новой сетки нечетным образом относительно своих значений на границе.

б) Модуль Юнга и коэффициент Пуассона (двумерный случай). Эффективные значения двух констант — модуля Юнга E и коэффициента

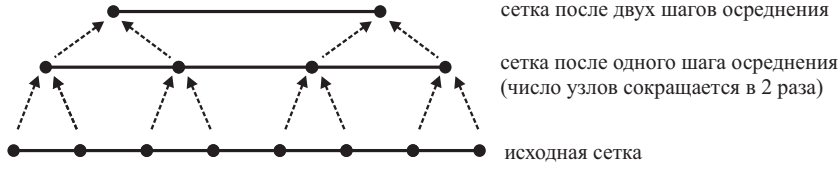


Рис. 1. Схема изменения сетки при осреднении (одномерный случай)

Пуассона ν — в плоскости пластины вычислялись по следующей схеме. Рассматривалась краевая задача

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + f_i = 0 \quad (8)$$

с граничными условиями $\sigma_{ij}(x)n_j(x)|_{x=\pm l} = p$, $\sigma_{ij}(x)n_j(x)|_{y=0,y=l} = 0$. Эта задача в силу симметрии эквивалентна задаче на четверти области с краевыми условиями

$$\begin{aligned} u_x|_{x=0} &= 0, & u_y|_{y=0} &= 0, \\ \sigma_{ij}(x)n_j(x)|_{x=l} &= p, & \sigma_{ij}(x)n_j(x)|_{y=l} &= 0. \end{aligned} \quad (9)$$

Методом конечных элементов и вейвлет-осреднением вычисляется осредненное поле перемещений в узлах конечно-элементной сетки.

Обозначим через u_{ij}^1 и u_{ij}^2 составляющие x и y осредненного перемещения u в узле (x_i, y_j) . В условиях одноосного растяжения вдоль оси x модуль Юнга и коэффициент Пуассона в направлении оси x в узле (x_i, y_j) определяются по формулам

$$E_{ij} = \frac{x_i}{u_{ij}^1} p, \quad \nu_{ij} = \frac{x_i u_{ij}^2}{y_j u_{ij}^1}. \quad (10)$$

Используя (10), находим значения констант в каждом узле и затем вычисляем эффективное значение

$$E^w = \frac{1}{n_x n_y} \sum_i \sum_j E_{ij}, \quad \nu^w = \frac{1}{n_x n_y} \sum_i \sum_j \nu_{ij}. \quad (11)$$

Координаты новой сетки в двумерном случае определяются аналогично одномерному случаю. За один шаг осредняются значения сразу в четырех узлах, причем число неизвестных в системе сокращается в четыре раза.

Таким образом, методика вейвлет-осреднения для получения упругих эффективных свойств имеет вид:

Шаг 1. Рассматривается задача (8), (9) в перемещениях для одноосного напряженного состояния композитной пластины или стержня;

Шаг 2. Методом конечных элементов формируется матрица системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) (1);

Шаг 3. К полученной СЛАУ применяется вейвлет-преобразование Хаара (2); в результате имеем систему для осредненного вектора (4);

Шаг 4. Существует два варианта дальнейших вычислений: а) система (4) разрешается относительно вектора неизвестных и в качестве результата имеем вектор осредненных перемещений, б) к системе (4) вновь применяется вейвлет-преобразование; таким образом, могут быть получены осредненные значения перемещений на нескольких масштабах;

Шаг 5. Осредненные модуль Юнга пластины (или стержня) и коэффициент Пуассона пластины определяются из (11).

в) Коэффициент теплопроводности (проницаемости). Эффективный коэффициент теплопроводности определяется на основе вейвлет-осреднения и решения методом конечных элементов двумерной стационарной краевой задачи теплопроводности

$$-\nabla^T K(x) \nabla u + Q = 0, \quad (12)$$

с граничными условиями $T|_{x=0} = T_0$, $K^{(m)} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=l} = -q_0$, $\frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=0} = \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=l} = 0$. В расчетах принималось $T_0 = 0$, $q_0 = -40$, $Q = 0$.

Обозначим через T_{ij}^w — осредненное с помощью вейвлет-преобразования поле температуры в узле сетки (x_i, y_j) . Эффективный коэффициент теплопроводности рассчитывался как среднее значение по всем узлам

$$K_x^w = \frac{1}{n_x n_y} \sum_i \sum_j K_x^{ij}, \quad K_x^{ij} = -\frac{q_0 x_i}{T_{ij}^w}.$$

Для задачи фильтрации при условиях выполнения закона Дарси, коэффициент проницаемости K определяется по такой же схеме, как отношение произведения начальной скорости фильтрации на координату узла к значению давления в узле.

В **третьей главе** показаны результаты расчетов по предложенному методу вейвлет-осреднения. В п. 3.1 приводится конечно-элементная постановка задачи теории упругости, теплопроводности и фильтрации.

В п. 3.2 рассмотрено пять задач осреднения коэффициентов и решений одномерного дифференциального уравнения вида

$$-(k(x)u')' = f, \quad u(a) = u_0, \quad u'(b) = u_1. \quad (13)$$

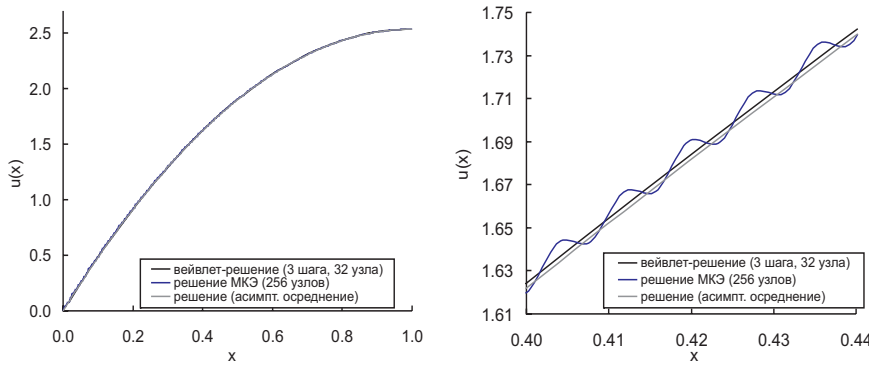


Рис. 2. Решения: а) вейвлет-решение, конечно-элементное решение, решение по асимптотическому методу; б) увеличенный фрагмент интервала (0.40; 0.44)

В Задаче 1 рассматривалось вейвлет-осреднение для однородного материала $k(x) = k = \text{const}$. В этом случае осредненный коэффициент k^w естественным образом совпадает с начальным модулем материала k . В Задаче 2 получено осредненное решение уравнения (13) с быстро меняющимся периодическим коэффициентом $k(x)$ ($k(x)$ принимало значение 0 или 1), $u_0 = 0$, $u_1 = 0$. На рис. 2 показаны графики решения дифференциального уравнения, соответствующие конечно-элементному решению на сетке из $N_n = 256$ узлов, решению, осредненному с помощью $j = 3$ шагов вейвлет-преобразования Хаара (число узлов сетки $N_n = 32$), и решению, полученному с помощью асимптотического метода осреднения. Обе модели осреднения хорошо аппроксимируют осциллирующее решение и практически совпадают. В Задачах 3–4 получены осредненные решения уравнения (13) для непериодического коэффициента k ; сделан вывод о том, что в этих задачах вейвлет-осреднение описывает поведение решения точнее, чем асимптотическое осреднение. В Задаче 5 исследовалось изменение осредненного модуля Юнга $k(x) = E(x)$ для стержня в зависимости от числа включений n_v ($n_v = 1, \dots, 10$) и шага осреднения j ($j = 1, \dots, 12$) при одинаковой объемной доле включений $c^{(v)} = 0.3$. Согласно графикам на рис. 3 наблюдается незначительный рост значений модуля E на последних шагах осреднения. Также можно заметить, что с ростом числа включений уменьшается диапазон вариаций значений модуля, так как чем

меньше характерный размер неоднородности (включения) в сравнении с размером исследуемой области, тем меньше в среднем оказывает влияние эта неоднородность. В примере с одним включением этот модуль изменяется в диапазоне $E \in [1.392, 1.492]$, тогда как для примера с десятью включениями модуль изменяется в диапазоне $E \in [1.479, 1.49]$, т.е. практически не зависит от шага осреднения.

В п. 3.3 рассматривались результаты двумерного вейвлет-осреднения для задач теории теплопроводности, фильтрации и упругости. В Задачах 6–8 проводится осреднение коэффициента проницаемости $K(x)$ для уравнения (12) для расчетных областей трех типов: области с квадратным включением (доля включения $c^{(v)} = 0.25$), области шахматной структуры и области, в которой проницаемость распределена по закону $d = z^{-\ln(a)}$ (рис. 4–6).

В Задаче 6 проводится анализ для разных отношений проницаемости материала $K^{(m)} = \alpha \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ и включения $K^{(v)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, $\alpha = 0.01, 0.1, 1, 10, 100$. Различие в коэффициенте при сравнении с асимптотическим методом не превышает 1%. Полученный коэффициент удовлетворяет оценкам Фойгта-Рейсса и Хашина-Штрикмана.

В случае шахматной структуры (задача 7) для материалов с проницаемостью K_1 и K_2 известна теоретическая эффективная проницаемость среды $K^g = \sqrt{K_1 K_2}$ (среднее геометрическое двух величин). Получены следующие результаты для вейвлет-осреднения на сетке 128×128 узлов, когда различие в модулях материала составляет один и два порядка: при $K_1 = 100$ и $K_2 = 1$ осредненный с помощью вейвлет-преобразования коэффициент $K^w = 9.5$ ($K^g = 10$, относительная ошибка $\eta = 5\%$), при $K_1 = 10$ и $K_2 = 1$ осредненный с помощью вейвлет-преобразования модуль $K^w = 3.08$ ($K^g = 3.16$, относительная ошибка $\eta = 2.5\%$). Для сравнения при $K_1 = 100$ и $K_2 = 1$ оценки Хашина-Штрикмана задают широкий интервал $2.92 \leq K \leq 34.21$, а оценки Фойгта-Рейсса (арифметическое и гармоническое среднее) $1.98 \leq K \leq 50.5$; во втором случае при $K_1 = 10$ и $K_2 = 1$

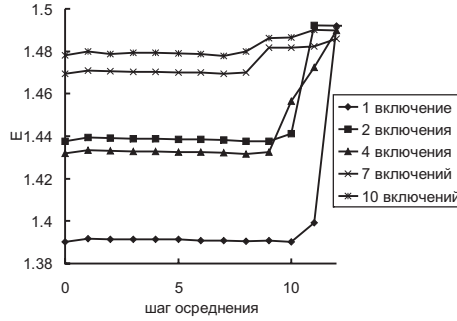


Рис. 3. Модуль Юнга E в зависимости от шага осреднения j

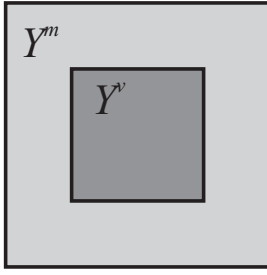


Рис. 4. Квадратное включение

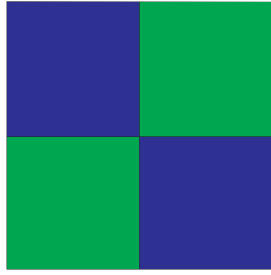


Рис. 5. Шахматная структура

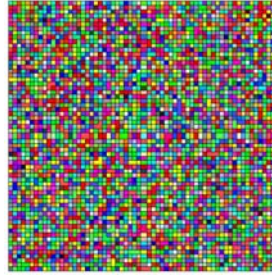


Рис. 6. Случайное поле проницаемости

оценки Хашина-Штрикмана задают интервал $2.38 \leq K \leq 4.19$, а оценки Фойгта-Рейсса $1.82 \leq K \leq 5.5$. Коэффициенты, полученные с помощью вейвлет-осреднения, удовлетворяют этим аналитическим оценкам.

В Задаче 8 для распределения коэффициентов материала $d = z^{-\ln(a)}$, где z — случайно распределенная величина на интервале $(0, 1)$, известно, что значение эффективного коэффициента проницаемости определяется как геометрическое среднее значений данного распределения. Результаты моделирования для разных значений параметра $a = 2, 5, 10$ приведены в табл. 1. Во втором-четвертом столбцах приведены статистические данные о начальном распределении проницаемости — максимальное значение K_{max} , минимальное значение K_{min} , средне-квадратическое отклонение σ . В пятом-восьмом столбцах показаны соответственно арифметическое среднее K^a , гармоническое среднее K^h , геометрическое среднее K^g и значение K^w , полученное с помощью вейвлет-осреднения. Результаты моделирования близки к геометрическим средним — относительная погрешность $\frac{|K^g - K^w|}{K^g}$ мала и равна для разных a соответственно 3.5%, 3.6%, 3.7%. Арифметическое и гармоническое средние дают настолько широкий интервал оценок, что их использование не имеет смысла. Оценки Хашина-Штрикмана в данном случае не применимы, так как они могут использоваться только для двухфазного материала.

В Задаче 9 сравнивается распределение температур на разных шагах осреднения для пластины с девятью включениями (рис. 7) (коэффициент теплопроводности матрицы $K^{(m)} = 1$, включения $K^{(v)} = 0.1$). На рис. 8 показано конечно-элементное решение на сетке 64×64 узла. На

Таблица 1. Сравнение аппроксимаций эффективной проницаемости для случайного распределения коэффициента проницаемости композита

a	K_{max}	K_{min}	σ	K^a	K^h	K^g	K^w
2	255.87	1.00	4.45	2.57	1.6	2	2.07
5	$6.06e + 6$	1.00	67936.3	992.47	2.59	4.95	5.13
10	$2.5e + 10$	1.00	$2.01e + 8$	$2.21e + 6$	3.29	9.86	9.5

рис. 9 и 10 показано распределение температуры после двух и четырех шагов осреднения. После четырех шагов, когда сетка становится достаточно грубой, решение сглаживается и описывает поведение температуры в среднем.

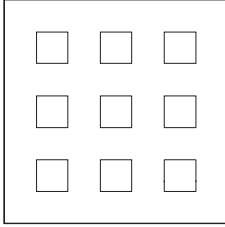


Рис. 7. Девять включений

В Задаче 10 исследовалось изменение коэффициента теплопроводности в зависимости от изменения формы включения в пластинке (квадратная, круглая и ромбическая формы) при постоянной объемной доле включения $c^{(v)} = 0.25$, $K^{(v)} = 10$, $K^{(m)} = 1$. Для сравнения приводятся полученные осредненные коэффициенты теплопроводности: а) для включения квадратной формы $K^{as} = 1.548$ (асимптотическое осреднение), $K^w = 1.522$ (вейвлет-осреднение) и $K^b = 1.598$ (метод многосеточного осреднения)²; б) для включения круглой формы $K^{as} = 1.516$, $K^w = 1.514$ и $K^b = 1.563$; в) для включения в форме ромба $K^{as} = 1.573$, $K^w = 1.537$ и $K^b = 1.608$. Отличие коэффициентов K^{as} и K^w мало и составляет от 1 до 2%. Следует отметить, что теоретические оценки будут давать одинаковый результат в независимости от формы включения. Оценки Хашина-Штрикмана для трансверсально изотропного материала имеют следующие значения: нижняя граница $K_l^{hs} = 1.514$, верхняя — $K_u^{hs} = 2.394$. Полученные с помощью вейвлетов оценки близки к нижней границе и удовлетворяют диапазону $[K_l^{hs}, K_u^{hs}]$. Нижняя и верхняя оценки Фойгта-Рейсса (гармоническое и арифметическое среднее) равны соответственно $K_l^{fr} = 1.29$ и $K_u^{fr} = 3.25$. Эти оценки также выполнены.

Задача 11 содержит сравнение экспериментальных и численных оценок осредненного коэффициента теплопроводности одиннадцатипустотной области. Вычисленный по методу вейвлет-осреднения эффективный коэффициент теплопроводности равен $K = 0.62$. В эксперименте $K = 0.64$. Расхождение расчетных и опытных данных составило 3.6%.

В Задаче 12 вычислялись осредненные значения модуля Юнга E

²Moulton J. D., Dendy J. E., Hyman J. M. The black box multigrid numerical homogenization algorithm // Journal of Computational Physics. — 1998. — Vol. 142. — P. 80–108.

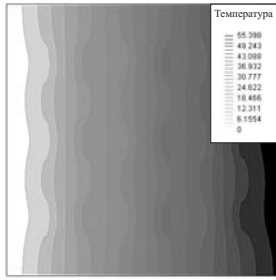


Рис. 8.
Конечно-элементное
решение

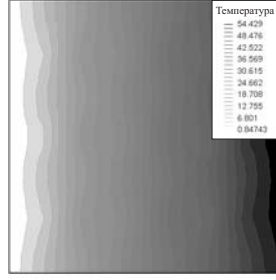


Рис. 9.
Вейвлет-решение
($j = 2$)

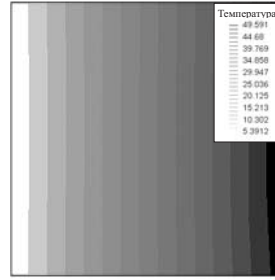


Рис. 10.
Вейвлет-решение
($j = 4$)

Таблица 2. Зависимость упругих констант от объемной доли включения

Объемная доля включения, $c^{(v)}$	Вейвлет- преобразование		Асимптотическое осреднение	
	E	ν	E	ν
0.1	0.889	0.297	0.931	0.298
0.2	0.792	0.301	0.869	0.295
0.3	0.726	0.305	0.814	0.292
0.4	0.675	0.308	0.761	0.298
0.5	0.63	0.309	0.712	0.288

и коэффициента Пуассона ν пластинки с одним включением для разной объемной доли включения ($E^{(m)} = 1$, $\nu^{(m)} = 0.3$, $E^{(v)} = 0.5$, $\nu^{(v)} = 0.3$). Результаты вейвлет-осреднения после $j = 6$ шагов (область стягивается в точку) представлены в табл. 2. В той же таблице показаны результаты асимптотического осреднения. Различия для значений модуля Юнга при объемной доле $c^{(v)} = 0.1$ имеют порядок 5%, тогда как при $c^{(v)} = 0.5$ отклонение близко к 15%. Такое поведение при большой объемной доле объясняется тем, что в этом случае напряженное состояние в пластине уже больше нельзя считать близким к одноосному.

В Задаче 13 исследовалось изменение модуля Юнга E и коэффициента Пуассона ν для пластинки с $n_v = 12$ включениями, $c^{(v)} = 0.27$. В этом случае относительная погрешность для E по сравнению с асимп-

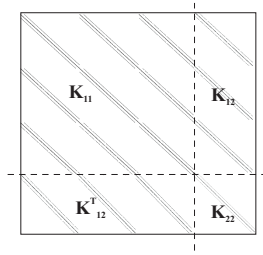


Рис. 11. Портрет матрицы WAW^T

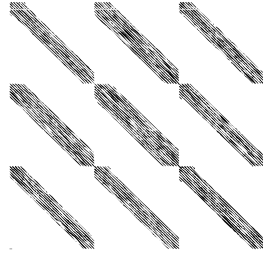


Рис. 12. Матрица K_{11}^{-1} (сетка 64×64)

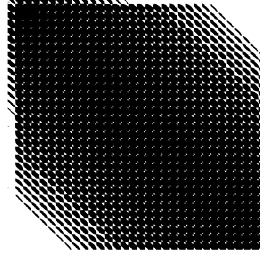


Рис. 13. Структура дополнения Шура S (сетка 64×64)

тотическим методом составляет 1.5%. Коэффициент Пуассона практически не меняется.

В Задаче 14 проводилось сравнение аналитических оценок Хашина-Штрикмана и Фойгта-Рейсса для упругих констант (модуль Юнга, коэффициент Пуассона, модуль сдвига, объемный модуль) для пластинки с четырьмя круглыми включениями при разных соотношениях начальных модулей Юнга. Полученные значения попадают внутрь интервала, задаваемого оценками Фойгта-Рейсса и близки к нижним или верхним оценками Хашина-Штрикмана.

В **четвертой главе** описаны вычислительные особенности, присущие вейвлет-преобразованию. Основными операциями при осреднении являются преобразование (2) матрицы A и вектора правых частей, обращение матрицы K_{11} , матричные и матрично-векторные операции умножения и сложения. В п. 4.1 исследовалась структура матриц A , K_{11} , K_{12} , K_{22} , S , участвующих в вычислении, на примере двумерной задачи теории упругости. Матрица системы A сильно разрежена, а ненулевые элементы компактно размещаются в трех «лентах-полосах». После применения вейвлет-преобразования структура матрицы меняется — она становится блочной, причем каждый малый блок имеет портрет, близкий к портрету исходной матрицы и несет информацию или об уточнениях (локальные свойства), или об осреднении исходной матрицы. На рис. 11 представлена структура преобразованной матрицы. Пунктирной линией показано разделение матрицы WAW^T на блоки K_{11} , K_{12} , K_{12}^T , K_{22} . Каждая из подматриц имеет блочную структуру (K_{11} — девять блоков, K_{12} и K_{21} — три блока).

При обращении матрицы K_{11} возникает заполнение (рис. 12), для хранения которого требуется дополнительная память. Система уравнений для дополнения Шура также становится более плотной (рис. 13). В процессе одного шага осреднения разреженность матрицы для представленной сетки теряется. Но было установлено, что элементы матрицы Шура S и матрицы K_{11}^{-1} убывают пропорционально расстоянию от главной диагонали. Приводится пример распределения модулей элементов матрицы S и K_{11}^{-1} , полученной в задаче теории фильтрации. Распределение таково, что более 70% всех элементов этих матриц по модулю меньше величины 10^{-6} .

В п. 4.2 для увеличения эффективности вычислительной процедуры предлагается несколько процедур усечения матрицы, когда малые элементы, меньшие заданного порогового значения, обнуляются. Использование процедуры усечения ускорило работу метода за счет уменьшения затрат памяти. Для хранения матриц предложено использовать сжатый строчный (столбцовый) формат без нулей.

Анализ ошибки вычислений при задании порогового значения для всех матриц, участвующих в алгоритме, на примере задачи фильтрации (Задача 6) дает следующие результаты. Вычислялась относительная погрешность получаемого значения осредненного коэффициента проницаемости и полей решений. В качестве «точного» выбирались поля решений и коэффициент проницаемости при пороговом значении $t = 10^{-16}$. Пороговое значение в расчетах выбиралось равным $t = K_{max}/10^s$, где $s = 5, 7, 9, 11, 13$ и $K_{max} = \max\{K^{(m)}, K^{(v)}\}$. Расчеты были проведены для разных значений параметра $\alpha = 0.01, 0.1, 10, 100$, задающего свойства материала (см. условия задачи 6) и значениях $K_{max} = 1, 1, 10, 100$.

Определялись значения относительной погрешности полей давления в евклидовой норме $\eta = \sum_{i=1}^{N_n} (p_i - p_i^0)^2 / \sum_{i=1}^{N_n} (p_i^0)^2$ при разных α , где p_i — поле давления в i -ом узле, подсчитанное для порогового значения $t = K_{max}/10^s$, p_i^0 — поле давления в i -ом узле, подсчитанное для контрольного порогового значения $t = 10^{-16}$. Для всех α выбор порогового значения t с $s \geq 7$ приводит к погрешности, не превышающей 3%, причем в большинстве случаев погрешность составляет всего лишь несколько десятых процента. При этом от 50 до 90% всех ненулевых элементов имеют модуль в диапазоне от $K_{max}/10^7$ до 10^{-16} . Таким образом, значительное сокращение занимаемой памяти для хранения элементов не приводит к большой погрешности результатов и существенного накопления ошибки с ростом шага осреднения не проис-

Таблица 3. Относительная ошибка при вычислении коэффициента проницаемости в зависимости от α и порогового значения t

α	K_{max}	Пороговое значение (нуль), t				
		$K_{max}/10^5$	$K_{max}/10^7$	$K_{max}/10^9$	$K_{max}/10^{11}$	$K_{max}/10^{13}$
0.01	1	400%	3.5%	<1%	<1%	<1%
0.1	1	35%	< 1%	<1%	<1%	<1%
10	10	14.8%	< 1%	<1%	<1%	<1%
100	100	134%	<1%	<1%	<1%	<1%

ходит.

В табл. 3 показана относительная погрешность для осредненного коэффициента проницаемости. При $s = 7, 9, 11, 13$ относительная погрешность не превышает одного процента кроме одного значения в первой строке таблицы при $\alpha = 0.01$, хотя и в этом случае погрешность 3.5% является удовлетворительной. При $s = 5$ наблюдается резкий рост относительной ошибки.

Предлагаемая объектно-ориентированная модель вейвлет-преобразования представлена в п. 4.3. Описаны классы, участвующие в вейвлет-преобразовании, и связи между ними. Предлагаемая модель позволяет эффективно добавлять, расширять и изменять необходимые для вейвлет-преобразования классы. Были реализованы отдельно классы для одномерного и двумерного вейвлет-осреднения конечно-элементной системы с разным числом степеней свободы.

Заключение содержит основные результаты и выводы по работе.

Заключение

1. Разработана методика численного вейвлет-осреднения решений линейных эллиптических дифференциальных уравнений второго порядка с быстро осциллирующими коэффициентами и вычисления эффективных характеристик для композитов различной структуры.

2. Предложены способы повышения эффективности вейвлет-преобразования за счет усечения матриц с выбором порогового значения и использования сжатого формата хранения матриц без нулевых элементов. Разработан программный комплекс для численного осреднения систем линейных алгебраических уравнений МКЭ и вычисления осредненных характеристик композиционных материалов.

3. Численным моделированием получены осредненные значения характеристик в задачах теории теплопроводности, теории упругости и фильтрации в одномерном и двумерном случаях для композитов со слу-

чайной структурой, материалов с включениями разной формы, разной объемной долей, различного взаимного расположения включений, когда свойства составляющих компонент композита различаются на порядки.

Публикации по теме диссертации

1. *Копысов С. П., Сагдеева Ю. А.* Многомасштабный анализ на основе МКЭ и вейвлет-преобразования // Труды Математического центра имени Н. И. Лобачевского. «Численные методы решения линейных и нелинейных краевых задач». — Т. 20. — Казань: Изд-во Казанского мат. общества, 2003. — С. 181–190.
2. *Sagdeeva Y. A.* The multiresolution decomposition for obtaining the averaged characteristics of composites // Book of Abstracts of the Intern. Congress on Math. Modeling. — Nizhny Novgorod: University of Nizhny Novgorod, 2004. — P. 339.
3. *Копысов С. П., Сагдеева Ю. А.* Двумерное вейвлет-осреднение на основе базиса Хаара // Тезисы докладов Конференции молодых ученых ФТИ УрО РАН «КоМУ-2004». — 2004. — С. 50.
4. *Копысов С. П., Сагдеева Ю. А.* Двумерное вейвлет-преобразование Хаара и его применение к многомасштабному анализу: Деп. в ВИНИТИ №796-В2004. — Ижевск: ИПМ УрО РАН, 2004.
5. *Kopyssov S. P., Sagdeeva Y. A.* Receiving the effective characteristics of composites by 2D wavelet-transformation // Proceedings of the Intern. Conference on selected problems of contemporary mathematics. — Kaliningrad: Kaliningrad State University, 2005. — Pp. 154–155.
6. *Копысов С. П., Сагдеева Ю. А.* Определение эффективного коэффициента теплопроводности с помощью вейвлет-осреднения // Материаловедение и обработка материалов. — Ижевск: Изд-во ИПМ УрО РАН, 2005. — С. 243–250.
7. *Копысов С. П., Сагдеева Ю. А.* Вейвлет-осреднение в задачах теории упругости композитных материалов // Проблемы термогазодинамики и прочности механических систем. — Ижевск: Изд-во ИПМ УрО РАН, 2005. — С. 108–123.

8. Копысов С. П., Сагдеева Ю. А. Применение вейвлет-осреднения для получения осредненных характеристик композитов // Тезисы докладов 14 Зимней школы по механике сплошных сред. — Пермь: Изд-во Пермского государственного технического университета, 2005. — С. 171.
9. Копысов С. П., Сагдеева Ю. А. Метод определения осредненных модулей упругостей композиционных материалов // Тезисы докладов 14-й Всероссийской школы-конференции молодых ученых. — Пермь: Изд-во Пермского государственного технического университета, 2005. — С. 62.
10. Копысов С. П., Сагдеева Ю. А. Вычислительные особенности двумерного вейвлет-осреднения в задачах многомасштабного анализа // *Вычислительные методы и программирование*. — 2005. — Т. 6, № 1. — С. 1–8.
11. Копысов С. П., Сагдеева Ю. А. Численное определение осредненных характеристик композитов на основе МКЭ и вейвлет-преобразования // *Изв. инс-та матем. и информатики УдГУ*. — 2006. — Т. 37, № 3. — С. 67–68.
12. Копысов С. П., Сагдеева Ю. А. Метод численного определения упругих осредненных характеристик композитов // *Проблемы механики и материаловедения*. — Ижевск: Изд-во ИПМ УрО РАН, 2006. — С. 8–9.
13. Копысов С. П., Сагдеева Ю. А. Численное осреднение свойств композитов // Труды математического центра им. Н.И. Лобачевского. «Численные методы решения задач математической физики». — Т. 33. — Казань: Изд-во Казанского математического общества, 2006. — С. 186–197.
14. Копысов С. П., Сагдеева Ю. А. Численное определение упругих модулей композитов на основе вейвлет-преобразования // IX Всероссийский съезд по теоретической и прикладной механике. Аннотация докладов. — Т. III. — Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского государственного университета, 2006. — С. 118.
15. Копысов С. П., Сагдеева Ю. А. Об определении эффективных характеристик сред периодической и непериодической структуры //

Материалы XV Международной конференции по механике и современным прикладным программным системам. — М.: Вузовская книга, 2007. — С. 290–291.

16. Копысов С. П., Сагдеева Ю. А. Об одном методе определения эффективных упругих характеристик композитов с помощью вейвлет-преобразования // *Интеллектуальные системы в производстве*. — 2007. — Т. 1. — С. 49–61.
17. Копысов С. П., Сагдеева Ю. А. Применение вейвлет-преобразования при численном осреднении дифференциальных уравнений с быстро осциллирующими коэффициентами // *Известия вузов. Математика*. — 2007. — № 7. — С. 80–83.
18. Копысов С. П., Сагдеева Ю. А. Моделирование эффективных свойств композитов с помощью вейвлет-преобразования Хаара // Сборник статей 15 Зимней школы по механике сплошных сред. — Т. 2. — Пермь: Институт механики сплошных сред УрО РАН, 2007. — С. 233–236.
19. WaveletHomogenization: свид. об официальной регистрации программы для ЭВМ. — №2007611891 Рос. Федерация; авторы и правообладатели Копысов С.П., Сагдеева Ю.А.; заявл. 19.03.07; опубл. 10.05.07.

Издательство Института прикладной механики УрО РАН.
426067, г.Ижевск, ул. Т.Барамзиной, 34.
Лицензия на издательскую деятельность
ИД №04874 от 24.05.2001.
