

Міністерство освіти і науки України
Національний університет "Львівська політехніка"

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

АВТОРЕФЕРАТ

дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата технічних наук

Львів – 2016

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Національному університеті "Львівська політехніка" Міністерства освіти і науки України.

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор
Кособуцький Петро Сидорович,
Національний університет "Львівська політехніка",
професор кафедри систем автоматизованого проектування.

Офіційні опоненти: доктор технічних наук, професор
Глоба Лариса Сергіївна,
Національний технічний університет України
"Київський політехнічний інститут", м. Київ,
завідувач кафедри інформаційно-телекомунікаційних мереж;

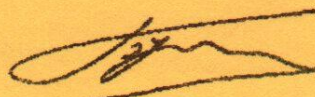
кандидат технічних наук, доцент
Шило Галина Миколаївна,
Запорізький національний технічний університет,
м. Запоріжжя, доцент кафедри інформаційних
технологій електронних засобів.

Захист дисертації відбудеться 19 травня 2016 р. о 14⁰⁰ год. на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 35.052.05 у Національному університеті "Львівська політехніка" за адресою: 79013, м. Львів, вул. Професорська, 2, XI навчальний корпус, аудиторія 218.

З дисертацією можна ознайомитися в бібліотеці Національного університету "Львівська політехніка" за адресою 79013, Львів, вул. Професорська, 1.

Автореферат розісланий "15" квітня 2016р.

Учений секретар спеціалізованої
вченої ради Д 35.052.05 д.т.н., проф.



Р. А. Бунь

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

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.

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" Національного університету "Львівська політехніка" та безпосередньо 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 у гетерогенних композиційних матеріалах, які використовуються на компонентному рівні проектування мікроелектромеханічних систем.
2. TEMPUS "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 поставленої 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 у 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 у складних композиційних структурах з допомогою комбінації методу теплоелектричних аналогій та методу скінченних елементів [3]; алгоритми дискретизації моделей структури композиційних матеріалів у задачах аналізу теплофізичних процесів [6, 12]; модель дослідження термопружних характеристик композиційних матеріалів із сферичними вкрапленнями [7]; оцінки збіжності результатів моделювання теплофізичних процесів у композиційних матеріалах складної структури [8]; постановки задачі оптимального проектування композиційних матеріалів [10]; модель реалізації розподілених обчислень у 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 та обговорювалися на:

- XXII Ukrainian-Polish Conference "CAD in Machinery Design. Implementation and Educational Issues (CADMD'2014)", Lviv, October 10-11 2014;
- X International Conference "Perspective Technologies and Methods in MEMS Design (MEMSTECH'2014)", Lviv, June 22-24 2014;
- "Electrochemical Conference on Energy & the Environment (ECEE'2014)", Shanghai, China, March 14 2014;
- VIII International Scientific and Technical Conference "Computer Sciences and Information Technologies (CSIT'2013)", Lviv, November 11-16 2013;
- XII International Conference "The Experience of Designing and Application of CAD Systems in Microelectronics (CADSM'2013)", Polyana-Svalyava, February 19-23 2013;

- XI International Conference "Modern Problems of Radio Engineering, Telecommunications and Computer Science (TCSET'2012)", Lviv-Slavske, February 21-24 2012;
- наукових семінарах кафедри "Системи автоматизованого проектування" Національного університету "Львівська політехніка" (2013-2015 рр.).

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 даних [4-6], шість публікацій у 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.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи, сформульовано мету і задачі, наукову новизну та практичну цінність одержаних результатів, показано зв'язок роботи з науковими програмами, планами та темами. Наведено дані про впровадження результатів роботи, її апробацію, публікації та особистий внесок здобувача.

У **першому розділі** проведено аналіз задачі знаходження ефективних характеристик композиційних матеріалів (КМ) при їх проектуванні на основі чисельного моделювання фізичних процесів. Для цього досліджено місце задачі у процесі проектування композиційних матеріалів. Виявлено, що завдяки фундаментальній можливості змін характеристик матеріалів шляхом керування 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.

Проаналізовано відомості про вплив структури композиційних матеріалів на їх фізичні характеристики. 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'язування задач аналізу та проектування композитів.

Досліджено переваги та недоліки основних моделей структури та методів знаходження ефективних характеристик КМ. Виявлено, що актуальним є завдання розроблення мікрорівневих моделей на основі використання чисельних методів розв'язку задач аналізу фізичних процесів та їх реалізації з допомогою технологій паралельних та розподілених обчислень. Це дасть можливість більш адекватно

описати широке коло складних композиційних структур і фізичних явищ (наприклад явищ утворення перколяційних порогів характеристик матеріалів при зміні їх структурних параметрів) та ефективно використати реалізовані моделі в ітераційних процесах проектування, уникаючи при цьому складних та ресурсно-затратних натурних експериментів.

Розглянуто особливості застосування чисельних методів моделювання фізичних процесів для знаходження ефективних характеристик мікрорівневих моделей КМ. Виявлено, що актуальним є питання побудови на основі методу скінченних елементів формально однотипної мікрорівневої моделі. Це дасть можливість одночасно досліджувати зв'язані мультифізичні задачі та синтезувати відповідні ефективні характеристики КМ шляхом постановки та розв'язування задач аналізу фізичних процесів у межах деякого елементарного об'єму КМ серіями чисельних експериментів.

У **другому розділі** описано методологічні основи задачі знаходження ефективних характеристик композиційних матеріалів зі складною структурою при їх проектуванні з допомогою чисельного моделювання теплофізичних процесів. Зокрема, досліджено методи моделювання мікроструктур КМ. Виявлено, що для розв'язування задачі необхідно використовувати за основу коміркові моделі структури. 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. Враховуючи складність мікроструктур КМ, елементарні об'єми композиції доцільно представляти у вигляді регулярних комірок, належність до фази матеріалу яких задається випадковою функцією. При достатньо великій кількості регулярних комірок з'являється можливість моделювати структури у вигляді випадкових скалярних полів, що описують КМ з компонентами, які взаємно проникають. Використання таких моделей дає змогу вдосконалити можливості моделювання перехідних шарів між фазами композиції, у тому числі з допомогою ітераційних процедур мультимасштабного моделювання структур.

Моделювання випадкових скалярних полів складається з таких етапів:

- побудова розподілу в елементарному об'ємі, що представляє тривимірну матрицю, елементи якої є випадковими скалярними інтенсивностями;
- огрублення розподілу деяким фільтром, шляхом обчислення інтенсивності, як середнього значення сусідніх, зважених необхідним коефіцієнтом;
- застосування перерізу отриманого огрубленого поля на деякому рівні вибраного діапазону або застосування одночасно кількох перерізів.

При великій кількості комірок з'являється можливість однотипно моделювати всі основні види структур композиційних матеріалів, що розрізняють за типом компонент армування. Основною проблемою реалізації таких моделей КМ є необхідність використання великої кількості машинної пам'яті та виконання великої кількості обчислень. Однак, 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).

Досліджено аналітичні фізико-математичні моделі фізичних процесів у неперервних середовищах. Синтезовано відповідний загальний алгоритм опису макроскопічних процесів переносу густини, так званих інтенсивних змінних стану, що відбуваються в неперервному середовищі. Аналітичні фізико-математичні моделі теплофізичних процесів у неперервних середовищах базуються на математичному апараті теорії поля. Його основними аксіомами є: 1) аксіома неперервності, що визначає неперервність середовища та однозначність його можливих деформацій; 2) аксіома перманентності матерії, що описує додатну визначеність та обмеженість диференціальних операторів, які визначають теплофізичні процеси; 3) аксіома неперервності в часі, що дає можливість виводу визначальних диференціальних рівнянь балансу системи; 4) аксіома рівноваги потенціалів, що дає можливість описати фізичні процеси на основі феноменологічних законів. Завдяки такому підходу з'являється можливість описувати максимально широке коло макроскопічних фізичних процесів, що відбуваються в неперервному середовищі, шляхом: 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 основного диференціального рівняння. Для подальших досліджень необхідно поставити крайову задачу. 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.

Досліджено способи використання чисельних методів для наближеного розв'язку фізико-математичних задач. Це дає змогу обрати за основу метод скінченних елементів, який увібрав у себе всі переваги проекційних та сіткових чисельних методів, що дає можливість однотипно моделювати мультифізичні процеси. Алгоритм методу складається з таких етапів: 1) в області моделювання вибирається скінченна кількість вузлів, значення неперервної величини в кожному з яких це змінна, що потрібно знайти; 2) між вузлами вибираються підобласті (елементи), їх сукупність апроксимує форму області; 3) 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.

Досліджено способи використання методів аналогій та теорії подібності в моделюванні фізичних процесів. Це дає змогу взяти за основу метод теплоелектричних аналогій. 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 із зосередженими фізичними

параметрами. Завдяки цьому можна формально однотипно синтезувати ефективні характеристики композиційних матеріалів шляхом проведення ряду чисельних експериментів.

Досліджено методи доменної декомпозиції та застосування технологій паралельних і розподілених обчислень. Це дає змогу взяти за основу технологію OpenCL. Дана технологія реалізовує концепцію паралелізму даних на широкому колі обчислювальних пристроїв, що мають SIMD архітектуру і дозволяють максимально ефективно виконувати запрограмовані алгоритми, які використовують декомпозицію даних задач. Одним з ключових питань використання SIMD пристроїв для чисельного розв'язку задач математичної фізики є особливості реалізації обчислень з плаваючою комою. Питання є визначальним при оцінках стійкості обчислень. Згідно специфікації OpenCL, кожен пристрій, що підтримує технологію, повинен здійснювати обчислення відповідно до стандарту IEEE-754-2008, що підтримується переважною більшістю наявних програмних і апаратних систем. Тому, результати обчислень на OpenCL пристроях не можуть відрізнятися від результатів, отриманих звичним способом.

Третій розділ присвячено розв'язуванню поставлених у роботі задач у частині вдосконалення чисельних моделей та методів знаходження ефективних теплофізичних характеристик композиційних матеріалів у процесі їх автоматизованого проектування.

Модель елементарного об'єму структури композиційного матеріалу представляється у вигляді тривимірної матриці скалярних інтенсивностей умовно в діапазоні від нуля до одиниці. Відповідно до класифікації композиційних матеріалів за різновидами компонентів армування, запропоновано та обґрунтовано наведені нижче методи побудови мікрорівневих моделей структури.

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

$$\frac{(x-x_0)^2}{a^2} + \frac{(y-y_0)^2}{b^2} + \frac{(z-z_0)^2}{c^2} \leq r^2, \quad (1)$$

де: x, y, z – індекси комірки; x_0, y_0, z_0 – координати еліпсоїда; a, b, c – діаметрально протилежні точки осей еліпсоїда; r – радіус. Підтримуються просторові обертання включень, шляхом попереднього застосування матриць обертання. Підтримується можливість моделювання перехідних шарів, шляхом введення додаткової перевірки умови входження в ядро примітиву – еліпсоїду меншого радіусу. Якщо умова виконується, комірки присвоюється наперед вказане значення інтенсивності ядра в діапазоні від нуля до одиниці. Якщо ж комірка потрапляє в перехідний шар, їй присвоюється значення інтенсивності, пропорційне відстані від ядра. Складність алгоритму рівна $O(N \cdot E/C)$, де N – кількість комірок, E – кількість включень, C – кількість обчислювальних вузлів пристрою.

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

$$B(t) = \sum_{i=0}^n B_i \cdot \frac{n!}{i!(n-i)!} \cdot t^i (1-t)^{n-i}. \quad (2)$$

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. Якщо комірка знаходиться за межами волокна, тобто, якщо найближчими є кінцеві вузли, а проекція комірки на пряму не потрапляє в кінцевий сегмент, інтенсивність встановлюється пропорційно відстані до кінцевого вузла. 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.

3. *Генерування випадкових коміркових моделей* на основі діаграм Вороного. 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 нуля до одиниці, тому здійснюється нормалізація. Складність алгоритму рівна $O(N \cdot V/C)$, де V – кількість вузлів діаграми Вороного.

4. *Генерування функціонально-градуїтованих перехідних шарів* між фазами компонентів армування КМ. Пропонується наступний метод:

- застосувати до початкової функції інтенсивностей, збереженої у матриці елементарного об'єму, подвійний переріз на необхідних рівнях; прийняти значення, що не потрапляють в переріз як замасковані та присвоїти їм протилежні по знаку значення, зменшені на деяку константу; немає необхідності створювати окрему матрицю маскування;
- створити нову матрицю такого ж розміру та побудувати в ній поле з застосуванням необхідного фільтру, за допомогою описаного методу побудови випадкових скалярних полів;
- помножити не замасковані значення функції інтенсивності, на необхідний коефіцієнт та додати до них значення побудованого випадкового поля;
- нормалізувати не замасковані значення;
- зняти маску.

Запропонований метод дає змогу моделювати рекурентно при різних масштабах структури гетерогенних середовищ, як комбінацію детермінованих елементів із заданими стохастичними перехідними шарами між ними.

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

Впродовж виконання роботи досліджено вплив використання класів регулярних скінченно-елементних сіток та нерегулярних адаптивних скінченно-елементних сіток на результати чисельного моделювання процесу теплопровідності в мікрорівневих структурах композиційних матеріалів. Побудова регулярних сіток є

на порядки простішою і швидшою. Така дискретизація особливо ефективна в процесі розв'язування задачі оптимального проектування КМ, що передбачає проведення великої кількості чисельних експериментів оскільки відповідні процедури легко піддаються декомпозиції. Пропонується використовувати побудовані коміркові мікрорівневі моделі структури КМ безпосередньо у якості регулярної сітки скінченних елементів. Для цього застосовується прямий шаблонний метод дискретизації, в якому кожен вісім сусідніх комірок, розглядаються як вершини куба, що розбивається на шість симплекс елементів. Такий підхід, на відміну від класичного (структура-дискретизація-побудова та розв'язування СЛАР), виключає етап дискретизації та, на третину, зменшує кількість необхідних обчислень.

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 з допомогою єдиного матричного диференціального оператора формалізація зв'язаних мультифізичних задач. Вона дає змогу, за наявності, одночасно враховувати мультифізичні крайові умови. Оскільки коло теплофізичних явищ є досить широким, для спрощення розгляд обмежено лінійними стаціонарними задачами теплопровідності та пружності, на основі яких виводиться формулювання зв'язаної задачі термopужності. Її моделювання дає змогу знаходити ефективний коефіцієнт теплопровідності λ_{eff} та ефективний лінійний коефіцієнт температурного розширення (ТКЛР) при крайових умовах: заданому тепловому потоці q та температурі довколишнього середовища T_∞ . Крім того, обмежуються всі компоненти переміщення $u_x = u_y = u_z = 0$ на стороні де задана температура, та поперечні переміщення $u_y = u_z = 0$ на бічних сторонах об'єму, залишивши можливість деформуватися тільки в одному напрямку.

У кожній точці об'єму є невідомими значення температури T та переміщень вздовж координатних осей u_x, u_y, u_z . Слід зауважити, що потенціальне поле повинне бути неперервним при переході між фазами композиту, тобто необхідно вказати крайову умову четвертого роду. Але, при подальшому чисельному розв'язуванні задачі методом скінченних елементів, умова автоматично задовольняється вимогою узгодженості скінченно-елементного базису, тому явно не вказується.

Зв'язок між переміщеннями та деформаціями (тензор деформацій) і між температурою та потоком тепла (градієнт) записується в єдиний тензор:

$$\{\boldsymbol{\varepsilon}\} = [\mathcal{L}]\{\mathbf{u}\} = \left\{ \frac{\partial T}{\partial x}, \frac{\partial T}{\partial y}, \frac{\partial T}{\partial z}, \frac{\partial u_x}{\partial x}, \frac{\partial u_y}{\partial y}, \frac{\partial u_z}{\partial z}, \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x}, \frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x}, \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right\}^T, \quad (3)$$

де: $[\mathcal{L}]$ – матриця диференціального оператору задачі (в слабкій формі), яка рівна:

$$[\mathcal{L}] = \begin{bmatrix} \partial/\partial x & \partial/\partial y & \partial/\partial z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \partial/\partial x & 0 & 0 & \partial/\partial y & \partial/\partial z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \partial/\partial y & 0 & \partial/\partial x & 0 & \partial/\partial z \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \partial/\partial z & 0 & \partial/\partial x & \partial/\partial y \end{bmatrix}^T. \quad (4)$$

Зв'язок між тензором деформацій та тензором напружень (закон Гука) і між градієнтом температури та потоком тепла (закон Фур'є) записується через матрицю (9x9) характеристик середовища $[\mathbf{D}]$, що включає вирази від модуля пружності E , коефіцієнту Пуассона μ та коефіцієнту теплопровідності λ фаз композиції.

Система диференціальних рівнянь балансу для цієї задачі записується як:

$$\begin{aligned}
 & [\mathcal{L}]^T [\mathbf{D}] [\mathcal{L}] \{\mathbf{u}\} + \{\mathbf{X}\} = 0, \quad \{\mathbf{X}\} = \{Q \quad X \quad Y \quad Z\}^T = [\mathcal{L}]^T [\mathbf{J}] \{\mathbf{u}\}, \\
 & X = \frac{\alpha E}{1-2\mu} \cdot \frac{\partial T}{\partial x}, \quad Y = \frac{\alpha E}{1-2\mu} \cdot \frac{\partial T}{\partial y}, \quad Z = \frac{\alpha E}{1-2\mu} \cdot \frac{\partial T}{\partial z}, \\
 & Q = \frac{\alpha E}{1-2\mu} \cdot \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\alpha E}{1-2\mu} \cdot \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\alpha E}{1-2\mu} \cdot \frac{\partial u_z}{\partial z}, \\
 & [\mathbf{J}] = \frac{\alpha E}{1-2\mu} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^T.
 \end{aligned} \tag{5}$$

Отримані вирази дають змогу записати рівняння зважених нев'язок:

$$\left(\iiint_{\Omega_i} ([\mathcal{L}][\mathbf{N}]_i)^T [\mathbf{D}]_i ([\mathcal{L}][\mathbf{N}]_i) d\Omega - \iiint_{\Omega_i} [\mathbf{N}]_i^T ([\mathcal{L}]^T [\mathbf{J}] [\mathbf{N}]_i) d\Omega \right) \{\mathbf{u}\}_i = \iint_{\Gamma_{Ti}} \mathbf{f}_i [\mathbf{N}]_i^T d\Gamma, \tag{6}$$

де: $[\mathbf{N}]$ – базисні функції скінченного елемента. Використовуючи для апроксимації скінченні симплекс елементи, матриця базисних функцій стає розрідженою матрицею (4x16). Вираз $[\mathcal{L}][\mathbf{N}]$ для всіх елементів записується як:

$$\begin{aligned}
 & [\mathcal{L}][\mathbf{N}] = [[\mathbf{M}]_1, [\mathbf{M}]_2, [\mathbf{M}]_3, [\mathbf{M}]_4], \\
 & [\mathbf{M}]_k = \begin{bmatrix} b_k & c_k & d_k & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b_k & 0 & 0 & c_k & d_k & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_k & 0 & b_k & 0 & d_k \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_k & 0 & b_k & c_k \end{bmatrix}^T,
 \end{aligned} \tag{7}$$

де: a, b, c, d є відповідними компонентами рядків оберненої матриці координат симплекс елемента. Другий доданок матриці жорсткості, що описує внутрішні джерела тепла та внутрішні сили, для симплекс елементів обчислюється як:

$$\begin{aligned}
 & \iiint_{\Omega_i} [\mathbf{N}]_i^T ([\mathcal{L}]^T [\mathbf{J}] [\mathbf{N}]_i) d\Omega = \\
 & = \frac{\Omega_i}{4} \frac{\alpha E}{1-2\mu} \cdot \begin{bmatrix} [\mathbf{M}]_1 & [\mathbf{M}]_2 & [\mathbf{M}]_3 & [\mathbf{M}]_4 \\ [\mathbf{M}]_1 & [\mathbf{M}]_2 & [\mathbf{M}]_3 & [\mathbf{M}]_3 \\ [\mathbf{M}]_1 & [\mathbf{M}]_2 & [\mathbf{M}]_3 & [\mathbf{M}]_3 \\ [\mathbf{M}]_1 & [\mathbf{M}]_2 & [\mathbf{M}]_3 & [\mathbf{M}]_3 \end{bmatrix}, \quad [\mathbf{M}]_k = \begin{bmatrix} 0 & b_k & c_k & d_k \\ b_k & 0 & 0 & 0 \\ c_k & 0 & 0 & 0 \\ d_k & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.
 \end{aligned} \tag{8}$$

Особливістю задачі є те, що диференціальний оператор та (відповідно до ансамблювання) СЛАР – є несиметричними навіть при симетричній матриці характеристик середовища завдяки вкладу доданку внутрішніх джерел. Однак

можна переконатися, що система та її оператор завжди є додатно визначені і обмежені. Ці властивості достатні для збіжності модельних обчислень за умови лінійної незалежності, допустимості та узгодженості інтерполяційного базису. Названі умови виконуються для використаних симплекс елементів. Через несиметричність матриці, для розв'язку СЛАР доцільно використовувати такий наближений метод, як стабілізований метод бі-спряжених градієнтів.

На основі застосування теорії подібності та методу теплоелектричних аналогій до скінченно-елементної моделі КМ, розроблено методи знаходження ефективних теплофізичних характеристик: коефіцієнту теплопровідності, модуля пружності, коефіцієнту Пуассона та температурного коефіцієнту лінійного розширення. Показано теплоелектричну аналогію фізичних процесів, що відбуваються у неперервному середовищі. Для забезпечення умов однозначності та виконання третьої теореми подібності аналізуються геометричні властивості обох систем. Для прикладу розглянуто симплекс елементи в задачі стаціонарної теплопровідності. Спираючись на безпосередній геометричний зміст матриці градієнтів $[\mathcal{L}][\mathbf{N}]$, що описує проекції сторін елемента на координатні осі, показано її відповідність комбінації діагональної матриці провідностей та булевої матриці з'єднань з методу вузлових потенціалів. Цей метод використовується для розрахунку електричних кіл шляхом запису СЛАР, в якій невідомими є потенціали у вузлах кола. Зроблено висновок, що елементи аналогії між фізичними процесами безпосередньо закладені в базисні функції лінійних скінченних елементів і відображають параметри провідностей аналогічної дискретної системи.

Для знаходження ефективних теплофізичних характеристик КМ складної структури запропоновано використовувати елементи теплоелектричної аналогії та результати чисельного моделювання. Дискретизація відображає теплове коло. Після моделювання стають відомі значення температури у вузлах дискретних елементів, звідки стає відома температура на поверхнях КМ, яка може бути не рівномірною, особливо у випадках моделювання структур з характеристиками компонентів армування, що сильно відрізняються. Тому, для знаходження ΔT доцільно використати модель паралельного з'єднання опорів. Неоднорідну температуру поверхні при заданому тепловому потоці описує набір вузлів скінченних елементів. При цьому, на протилежній поверхні КМ температура є відомою і рівномірною – кожен елемент поверхні відображає питомий тепловий опір, звідки різниця температур між поверхнями КМ записується як:

$$\Delta T = \left(\frac{1}{\Gamma_q} \cdot \sum_{i=1}^{P_{\Gamma_q}} \frac{3(\Gamma_q)_i}{\sum_{j=1}^3 ((T_{\Gamma_q})_{i,j} - T_\infty)} \right)^{-1}, \quad (9)$$

де, 3 – кількість вузлів елемента поверхні; $(\Gamma_q)_i$ – площа елемента поверхні; q – відомий тепловий потік через Γ_q ; $(T_{\Gamma_q})_{i,j}$ – значення температури у i -му вузлі j -го елемента на поверхні КМ; T_∞ – відома температура на протилежній поверхні КМ. Ефективний коефіцієнт теплопровідності КМ визначається як:

$$\lambda_{eff} = \frac{d}{R_{T,d}} = \frac{d \cdot q_{\Gamma}}{\Delta T} = \frac{d \cdot q}{\Gamma_q (T_{\Gamma_q} - T_{\infty})} = \frac{d \cdot q}{\Gamma_q} \sum_{i=1}^{P_{\Gamma_q}} \frac{3(\Gamma_q)_i}{\sum_{j=1}^3 ((T_{\Gamma_q})_{i,j} - T_{\infty})}. \quad (10)$$

Розширюючи формалізацію на задачі пружності та термопружності, отримуємо вирази для знаходження ефективних теплофізичних характеристик мікрорівневої моделі композиційних матеріалів зі складною структурою. Для задачі пружності:

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

$$\mu_{eff} = \frac{\Delta u_y}{\Delta u_x} = \frac{\sum_{k=1}^{P_{\Gamma}} |u_{y_1,k} - u_{y_2,k}|}{\Gamma_f} \sum_{i=1}^{P_{\Gamma_f}} \frac{3(\Gamma_f)_i}{\sum_{j=1}^3 ((u_{x,f})_{i,j} - u_{x,\infty})}, \quad (11)$$

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

$$\alpha_{eff} = \frac{1}{d} \frac{\Delta u_x}{\Delta T} = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^{P_{\Gamma_f}} \frac{\sum_{j=1}^3 \frac{(u_{x,f})_{i,j} - u_{x,\infty}}{(\Gamma_f)_{i,j} - T_{\infty}}}{3}. \quad (12)$$

Четвертий розділ присвячено реалізації програмного забезпечення, з допомогою технології паралельних і розподілених обчислень OpenCL, для розроблених методів синтезу структури композиційних матеріалів, чисельного аналізу теплофізичних процесів у цих структурах та відповідного знаходження ефективних теплофізичних характеристик. Також досліджено адекватність, збіжність та точність розроблених і реалізованих моделей та методів на основі проведення апостеріорних оцінок і серій чисельних експериментів з їх порівнянням до результатів аналогічної системи ANSYS 14.0 та натурних експериментів.

На прикладі використання технології OpenCL вперше 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-градуїтованих перехідних шарів. Приклад порівняння результатів моделювання наведено на *рис. 1*.

Результати свідчать, що реалізація декомпозиції обчислень дає більш ніж десятикратне прискорення навіть для персональних комп'ютерів пересічної комплектації. Це відкриває можливість подальшого її використання у складних задачах оптимального проектування КМ. Відповідно до загальноприйнятого алгоритму чисельного моделювання фізичних процесів, підтверджено вимоги теоретичної збіжності модельних обчислень. Шляхом проведення серій чисельних експериментів, практично підтверджено збіжність обчислень відповідної програмної реалізації. Згідно оцінок, реалізовані чисельні моделі мають другий порядок збіжності до гранично точного розв'язку (*рис. 2, та рис. 3*).

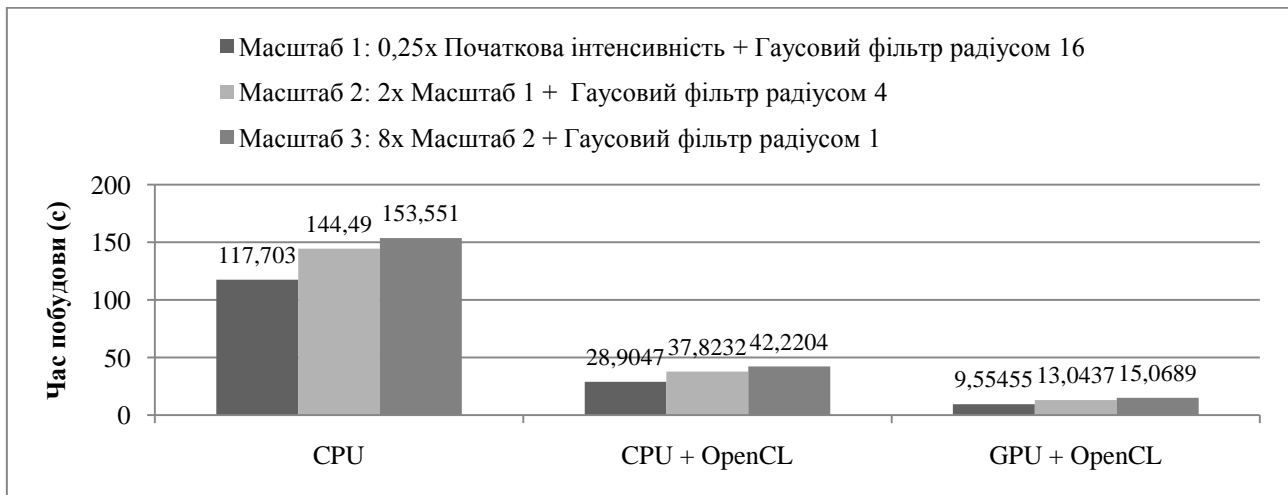
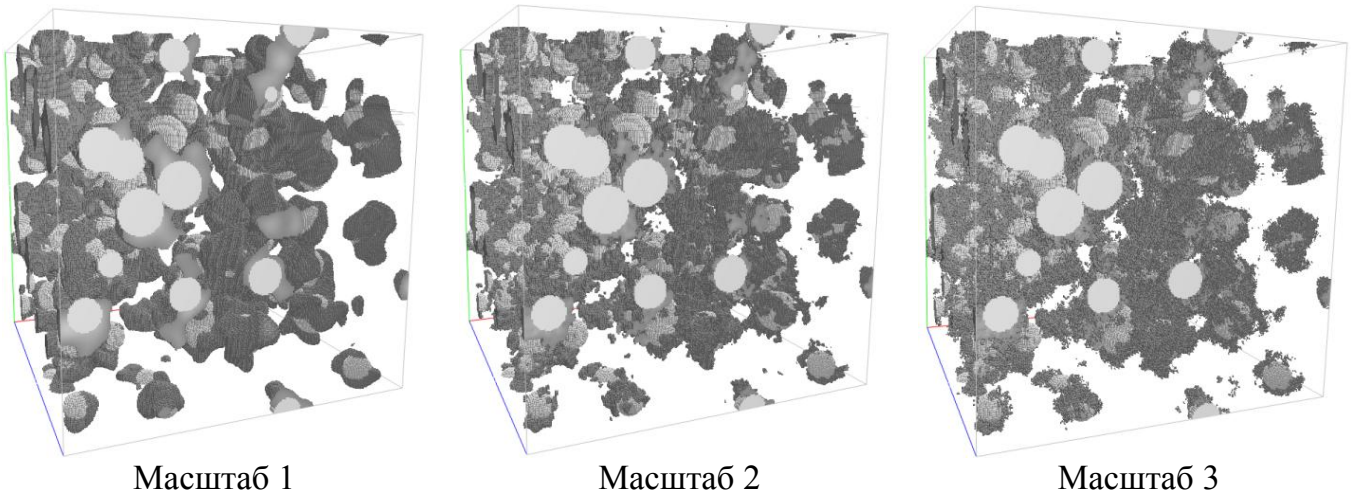


Рис. 1. Результати моделювання комбінацій моделей структури КМ для елементарних об'ємів у вигляді матриці розміром $256 \times 256 \times 256$ елементів

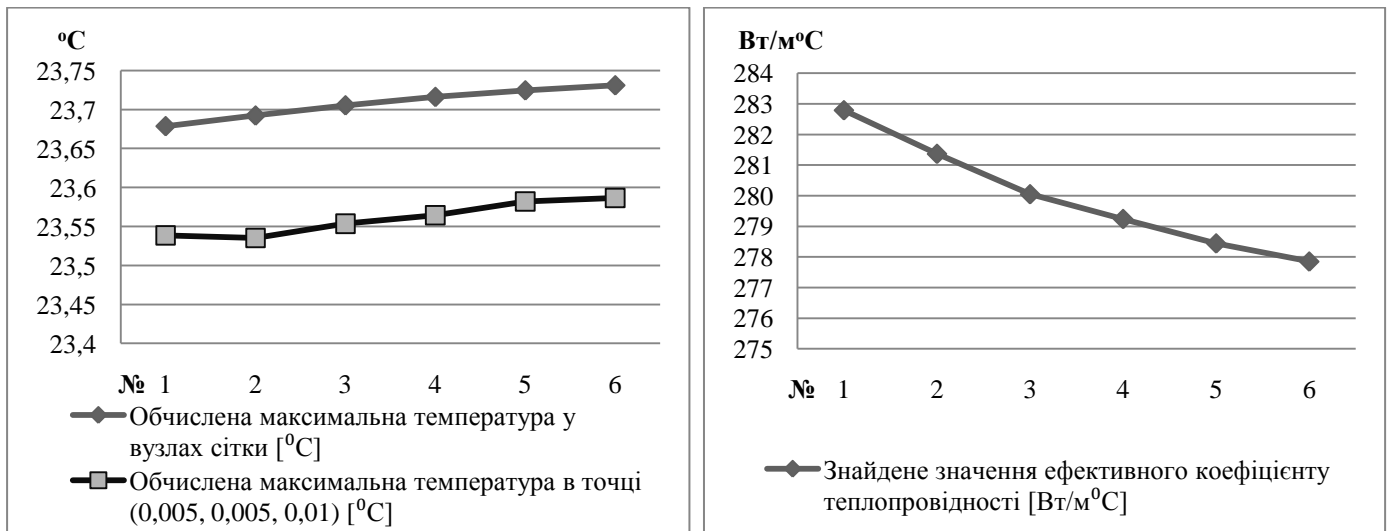


Рис. 2. Результати серії чисельних експериментів моделювання задачі теплопровідності та відповідного знаходження ефективного коефіцієнту теплопровідності, при поступовому згущенні дискретизації моделі структури композиційного матеріалу (алюмінієва матриця $\lambda=237$ Вт/м°C, наповнена сферичними вкрапленнями карбону $\lambda=1500$ Вт/м°C. Умовні розміри моделі КМ $10^{-2} \times 10^{-2} \times 10^{-2}$ м. Концентрація вкраплень радіусом 10^{-3} м сягає 10%, тепловий потік = 10^5 Вт/м²°C, температура довколишнього середовища = 20°C), з яких видно монотонну збіжність отриманих значень до гранично точного розв'язку

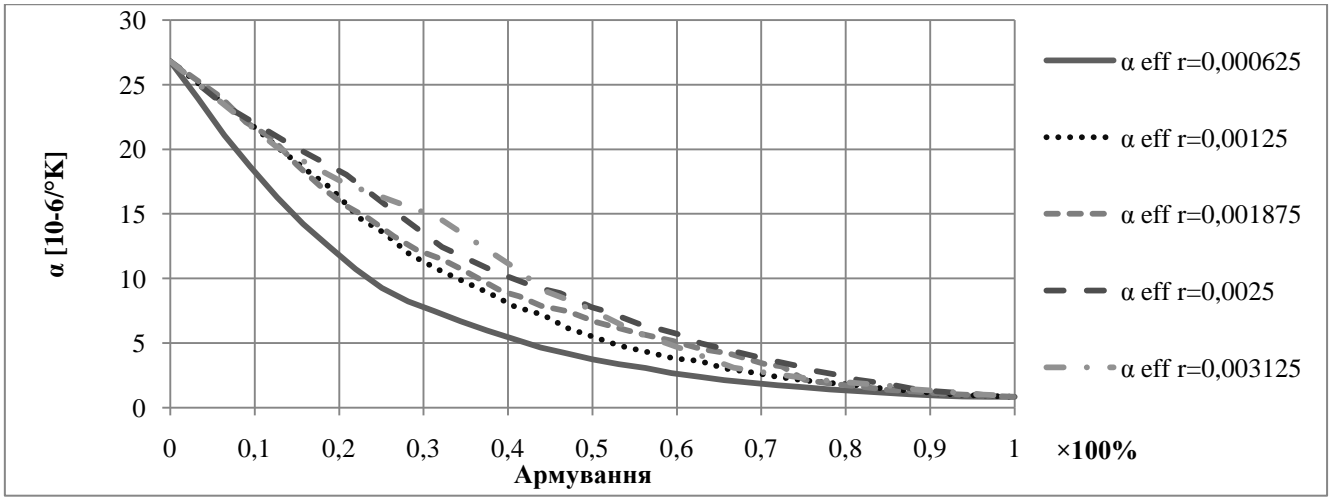
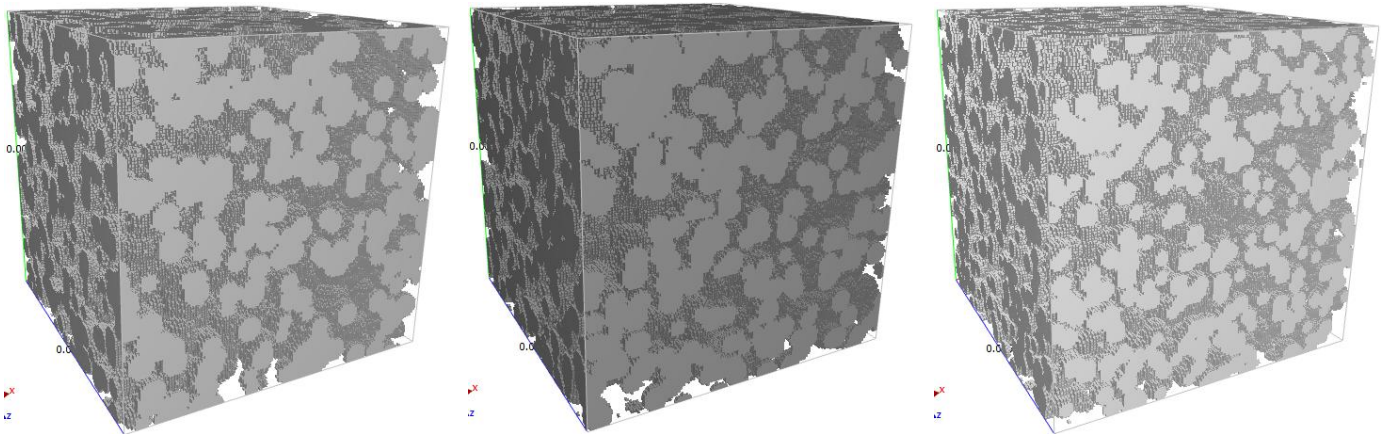


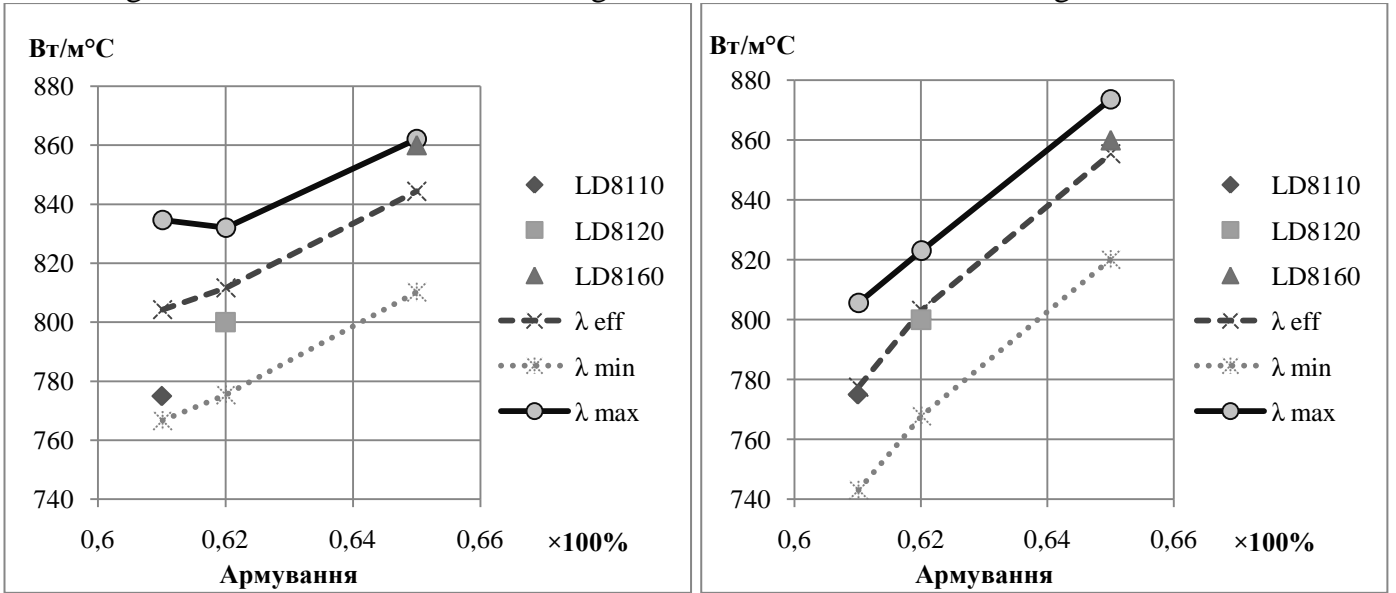
Рис. 3. Приклад знаходження ТКЛР для моделі КМ з алюмінієвою матрицею та сферичними включеннями карбону різної концентрації та різного радіусу, де чітко видно явище утворення перколяційного порогу знайдених характеристик



39% Ag-3Si, 61% LD8110

38% Ag-3Si, 62% LD8120

35% Ag-3Si, 65% LD8160



$\lambda_{Ag-3Si} = 370 \text{ Вт/м}^\circ\text{С}, \lambda_{LD} = 1200 \text{ Вт/м}^\circ\text{С},$

$\epsilon \leq 7,21\%$

$\lambda_{Ag-3Si} = 370 \text{ Вт/м}^\circ\text{С}, \lambda_{LD8110} = 1140 \text{ Вт/м}^\circ\text{С},$
 $\lambda_{LD8120} = 1180 \text{ Вт/м}^\circ\text{С}, \lambda_{LD8160} = 1220 \text{ Вт/м}^\circ\text{С},$

$\epsilon \leq 1\%$

Рис. 4. Верифікація результатів моделювання з натурними експериментами

Верифікацію здійснено шляхом порівняння з результатами натурних експериментів. Модель верифікації:

- елементарний об'єм з 128^3 елементами в еквіваленті $5 \cdot 10^{-3} \text{ м}^3$;
- матриця із 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, $\lambda=1200 \text{ Вт/м}^\circ\text{C}$;
модель структури – матриця з сферичними вкрапленнями.

Відносна похибка ефективного коефіцієнту теплопровідності не перевищує 7,21%. При верифікації для композиту алмазів (61%: $\lambda=1140 \text{ Вт/м}^\circ\text{C}$, 62%: $\lambda=1180 \text{ Вт/м}^\circ\text{C}$, 65%: $\lambda=1220 \text{ Вт/м}^\circ\text{C}$) відносна похибка обчислень не перевищує 1% (рис. 4). Результати натурних експериментів взяті з [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].

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА 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".

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

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 Національного університету "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 Національного університету "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, 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, 2014. – P. 42-47.
9. Jaworski N. Thermal analysis methods for design of composite materials with complex structure / N. Jaworski, I. Farmaga, O. Matviyiv, M. Lobur, P. Śpiewak, 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. Śpiewak // Proc. of the 8-th Int. Scientific and Technical Conference "Computer Sciences and Information Technologies (CSIT'2013)". – Lviv, 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, 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, 2012. – P. 505-507.

АНОТАЦІЇ

Яворський Н. Б. Моделі та методи проектування композиційних матеріалів з врахуванням теплофізичних характеристик. – На правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 05.13.12 – "Системи автоматизації проектувальних робіт". – Національний університет "Львівська політехніка" Міністерства освіти і науки України, Львів, 2016.

У роботі розв'язано завдання вдосконалення та реалізації з допомогою технологій паралельних обчислень моделей та методів знаходження ефективних теплофізичних характеристик композиційних матеріалів при їх проектуванні. Розвинуто методи моделювання структур композиційних матеріалів завдяки одночасній побудові їх складних комбінацій та безпосереднього використання у

якості дискретизації. Розвинуто чисельні моделі аналізу теплофізичних процесів у композиційних структурах завдяки об'єднаній формалізації зв'язаних задач, що дає змогу одночасно враховувати змішані крайові умови та однотипно досліджувати мультифізичні процеси. Вдосконалено методи знаходження ефективних характеристик, що дають змогу синтезувати такі характеристики для мікрорівневих моделей композиційних матеріалів у задачах проектування, уникаючи натурних експериментів.

Ключові слова: композиційний матеріал, проектування, модель структури, чисельне моделювання, теплофізична характеристика, декомпозиція обчислень.

Яворский Н. Б. Модели и методы проектирования композиционных материалов с учетом теплофизических характеристик. – На правах рукописи.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.13.12 – "Системы автоматизации проектировочных работ". – Национальный университет "Львівська політехніка" Министерства образования и науки Украины, Львов, 2016.

В работе решено задание совершенствования и реализации с помощью технологий распределенных и параллельных вычислений микроуровневых моделей и методов нахождения эффективных теплофизических характеристик композиционных материалов при их проектировании с использованием численных методов моделирования теплофизических процессов. Это дает возможность расширения рамок адекватности моделей относительно сложных композиционных структур и эффективного использования методов в итерационных процессах проектирования, избегая ресурсно-затратных натурных экспериментов.

Получили дальнейшее развитие методы синтеза микроуровневых моделей сложных структур композиционных материалов. Отличием от известных является возможность одновременного использования разных методов генерации структуры и исключения этапа дискретизации объекта моделирования при дальнейшем решении задач анализа физических процессов, благодаря непосредственному использованию регулярной ячеечной микроуровневой структуры композиционных материалов в качестве сетки конечных элементов. Это позволяет на треть уменьшить количество вычислений, осуществить их декомпозицию и эффективно ее реализовать с помощью технологий параллельных и распределенных вычислений.

На основе использования метода построения случайных скалярных полей в регулярных ячеистых моделях структуры композиционных материалов и алгоритма маскировки, впервые разработан метод построения случайных функционально-градуированных переходных слоев, что позволяет моделировать, рекуррентно при различных масштабах, композиционные структуры.

Получили дальнейшее развитие основные численные модели теплофизических процессов в микроуровневых структурах композиционных материалов. Отличием от известных является объединенная с помощью единого матричного дифференциального оператора формализация связанных мультифизических задач, что позволяет одновременно учитывать связанные краевые условия и единственным образом исследовать протекание мультифизических процессов в микроуровневых моделях композиционных материалов. Такой подход особенно удобен при

использовании в вычислениях прикладного программного обеспечения высокого уровня абстрактности.

Усовершенствованы основные методы нахождения эффективных теплофизических характеристик композиционных материалов с помощью численного моделирования соответствующих процессов – на основе использования теории подобия и метода теплоэлектрических аналогий к микроуровневой конечно-элементной модели композиционных материалов сложной структуры, разработаны методы нахождения эффективных теплофизических характеристик. Полученные выражения позволяют синтезировать эффективные характеристики сложных микроуровневых моделей структур композиционных материалов в качестве критериев оптимальности для решения соответствующих задач проектирования композиционных материалов, избегая при этом натуральных экспериментов.

Модели и методы нахождения эффективных характеристик композиционных материалов на основе численного моделирования реализованные в прикладном программном обеспечении с помощью технологии параллельных и распределенных вычислений OpenCL, применение которой позволило ускорить модельные вычисления на порядок. Сходимость результатов вычислений подтверждено проведением численных экспериментов, их апостериорными оценками, сравнением с результатами аналогичной системы моделирования и натурными экспериментами. Полученный результат свидетельствует о возможности избегания основной проблемы реализации методов оптимального проектирования композитов на основе численного моделирования (необходимости проведения большого количества итерационных вычислений) путем их декомпозиции и параллельного выполнения.

Ключевые слова: композиционный материал, проектирование, модель структуры, численное моделирование, теплофизическая характеристика, декомпозиция вычислений.

Yavorskyi N. B. Models and methods of composite materials design with thermophysical characteristics consideration. – On the rights of manuscript.

PhD thesis (Candidate of Technical Sciences) in specialty 05.13.12 – "Computer-aided Design Systems". – Lviv Polytechnic National University, Ministry of Education and Science of Ukraine, Lviv, 2016.

The thesis solved the problem of improving and implementation by technologies of parallel computing models and methods for composite materials effective thermal characteristics finding in the tasks of their design. Were developed the composite structures modeling methods due to the simultaneous construction of complex structure combinations and their immediate usage as the discretization. Were developed the thermal processes numerical analysis models, that taking place in composite structures, due to the joint formalization of coupled problems, which allow one to take into account mixed boundary conditions at the same time and describe multiphysical processes in one way. Were improved the methods of effective characteristics finding that allow one to synthesize composite materials microlevel models effective characteristics at design processes, avoiding natural experiments.

Keywords: composite material, design, structure model, numerical modeling, thermophysical characteristic, calculations decomposition.

Підписано до друку 11.04.2016
Формат 60x84/16. Папір офсетний. Друк на різнографі.
Умовн. друк. арк. 0.9
Наклад 100 прим. Зам. 160401

Видавництво ІПІ "Вежа і Ко"
Реєстраційне свідоцтво серії ДК № 3033 від 21.11.2007 р.
с. Андріївка, Буський район, Львівська обл. 80563

Друк ІПІ "Вежа і Ко"