

Univerza  
v Ljubljani  
Fakulteta  
*za gradbeništvo  
in geodezijo*



Jamova 2  
1000 Ljubljana, Slovenija  
<http://www3.fgg.uni-lj.si/>

**DRUGG** – Digitalni repozitorij UL FGG  
<http://drugg.fgg.uni-lj.si/>

V zbirki je izvorna različica doktorske disertacije.

Prosimo, da se pri navajanju sklicujete na bibliografske podatke, kot je navedeno:

University  
of Ljubljana  
Faculty of  
*Civil and Geodetic  
Engineering*



Jamova 2  
SI – 1000 Ljubljana, Slovenia  
<http://www3.fgg.uni-lj.si/>

**DRUGG** – The Digital Repository  
<http://drugg.fgg.uni-lj.si/>

This is an original PDF file of doctoral thesis.

When citing, please refer as follows:

Hudobivnik, B. 2016. Reševanje močno povezanih inženirskih problemov z uporabo a avtomatskega odvajanja. = Automatic differentiation based solution of strongly coupled problems in engineering. Doctoral dissertation. Ljubljana, Univerza v Ljubljani, Fakulteta za gradbeništvo in geodezijo. (Mentor Korelc, J.)

<http://drugg.fgg.uni-lj.si>

Datum arhiviranja / Archiving Date: 24-02-2016

Univerza  
v Ljubljani

Fakulteta za  
*gradbeništvo in  
geodezijo*



DOKTORSKI ŠTUDIJSKI  
PROGRAM III. STOPNJE  
GRAJENO OKOLJE

Kandidat:  
**BLAŽ HUDOBIVNIK**

**REŠEVANJE MOČNO POVEZANIH INŽENIRSKIH  
PROBLEMOV Z UPORABO AVTOMATSKEGA  
ODVAJANJA**

Doktorska disertacija številka: 31/GO

**AUTOMATIC DIFFERENTIATION BASED SOLUTION  
OF STRONGLY COUPLED PROBLEMS IN  
ENGINEERING**

Doctoral thesis No.: 31/GO

Komisija za doktorski študij je na 41. seji, 3. julija 2013, po pooblastilu 30. seje Senata Univerze v Ljubljani z dne 20. januarja 2009, dala soglasje k temi doktorske disertacije.

Za mentorja je bil imenovan prof. dr. Jože Korelc.

Ljubljana, 10. februar 2016



Univerza  
v Ljubljani

Fakulteta za  
*gradbeništvo in  
geodezijo*



**Komisijo za oceno ustreznosti teme doktorske disertacije v sestavi:**

- prof. dr. Jože Korelc, UL FGG,
- prof. dr. Tomaž Rodič, UL NTF,
- prof. dr. prof. dr. Goran Turk, UL FGG,

je imenoval Senat Fakultete za gradbeništvo in geodezijo na 39. seji, 27. marca 2013.

**Poročevalce za oceno doktorske disertacije v sestavi:**

- prof. dr. Boštjan Brank, UL FGG,
- prof. dr. Goran Turk, UL FGG,
- izr. prof. dr. Marko Kegl, UM FS,

je imenoval Senat Fakultete za gradbeništvo in geodezijo na 23. seji, 4. novembra 2015.

**Komisijo za zagovor doktorske disertacije v sestavi:**

- prof. dr. Matjaž Mikoš, dekan UL FGG, predsednik,
- prof. dr. Jože Korelc, UL FGG, mentor,
- prof. dr. Boštjan Brank, UL FGG,
- prof. dr. Goran Turk, UL FGG,
- izr. prof. dr. Marko Kegl, UM FS,

je imenoval Senat Fakultete za gradbeništvo in geodezijo na 25. seji, 27. januarja 2016.

## **STRAN ZA POPRAVKE**

**Stran z napako**

**Vrstica z napako**

**Namesto**

**Naj bo**

“Ta stran je namenoma prazna.”

## **IZJAVE**

Podpisani **Blaž Hudobivnik** izjavljam, da sem avtor doktorskega dela z naslovom **”Reševanje močno povezanih inženirskih problemov z uporabo avtomatskega odvajanja”**.

Izjavljam, da je elektronska različica v vsem enaka tiskani različici.

Izjavljam, da dovoljujem objavo elektronske različice v digitalnem repozitoriju UL FGG.

Ljubljana, februar 2016

Blaž Hudobivnik

“Ta stran je namenoma prazna.”



## BIBLIOGRAFSKO-DOKUMENTACIJSKA STRAN IN IZVLEČEK

- UDK:** 519.63:519.21::(043)  
**Avtor:** Blaž Hudobivnik  
**Mentor:** prof. dr. Jože Korelc  
**Naslov:** Reševanje močno povezanih inženirskih problemov z uporabo avtomatskega odvajanja  
**Obseg in oprema:** 159 str., 72 sl., 39 pregl., 407 en.  
**Ključne besede:** avtomatsko odvajanje, povezani problemi, inženirski problemi, velike deformacije, termo-hidro-mehanski problem, kvadratična konvergenca, matrične funkcije, hiperelastični modeli, Henckyjev model, Ogdenov model, model Cam-Clay, metoda končnih elementov

**Izvleček:** V doktorski disertaciji je predstavljen pristop k formulaciji in reševanju močno povezanih inženirskih problemov po metodi končnih elementov z uporabo tehnologije avtomatskega odvajanja, kar nam omogočata orodji *AceGen* in *AceFEM*. Prikazano je, da je možno poljubno šibko obliko diferencialnih enačb povezanega problema preoblikovati v skalarno funkcijo, t. i. psevdo-potencial. Z uporabo avtomatskega odvajanja in ustreznih izjem pri odvajanju se lahko iz psevdo-potenciala avtomatsko izpeljejo enačbe problema in konsistentna tangentna matrika končnega elementa, ki zagotovijo kvadratično konvergenco Newton-Raphsonove iteracijske metode. Hkrati taka formulacija problema vodi do izjemno hitrih in računsko natančnih kod končnih elementov. Z velikim številom fizikalnih polj se soočimo s problemom naraščanja programske kode končnega elementa z vsakim dodanim poljem. Problem smo rešili z aditivno razdelitvijo celotnega povezanega problema na posamezne podprobleme, katerih koda končnega elementa bo zapisana v ločenem končnem elementu na način, da se ohrani kvadratična konvergenca Newton-Raphsonove iteracije. Na računskih primerih termo-hidro-mehanskih problemov je pokazano, da je ločena formulacija primerno učinkovita in računsko enakovredna skupni formulaciji. Ločena formulacija končnih elementov je lastnost sekvenčnega pristopa, zato smo na različnih primerih pokazali, da je enovito oz. celovito reševanje polnega sistema učinkovitejše od ločenega oz. sekvenčnega reševanja. V doktorski disertaciji je predstavljen tudi nov pristop k izračunu matričnih funkcij. Te so nujne za formulacijo nelinearnih mehanskih problemov, kot so nekateri hiperelastični modeli (npr. Henckyjev in Ogdenov model) in natančen opis evolucije plastičnega tečenja v primeru velikih deformacij. Predstavljena je nova metoda avtomatske izpeljave poljubne matrične funkcije in njenega prvega in drugega odvoda za matrike dimenzije  $3 \times 3$  z realnimi lastnimi vrednostmi. Opisana metoda nudi alternativo formulacijam, ki temeljijo na lastnih vrednostih, saj je rodovna funkcija za razliko od lastnih vrednosti stabilna in gladka. Rodovna funkcija je izražena z lastnimi vrednostmi matrike, zato je v okolici večkratnih lastnih vrednosti razvita v potenčno vrsto. Kreirana je bila tudi knjižnica podprogramov za izračun standardnih matričnih funkcij v zaključeni obliki. S tem lahko izbrane matrične funkcije pri formulaciji problemov obravnavamo kot elementarne funkcije. Na posameznih matrikah in različnih kombinacijah hiperelastičnih in elasto-plastičnih modelov smo pokazali, da so izpeljane matrične funkcije in njeni odvodi točni in natančni, formulacija pa je učinkovita.

“Ta stran je namenoma prazna.”

## BIBLIOGRAPHIC-DOCUMENTALISTIC INFORMATION AND ABSTRACT

**UDC:** 519.63:519.21::(043)  
**Author:** Blaž Hudobivnik  
**Supervisor:** Prof. Jože Korelc, Ph.D.  
**Title:** Automatic differentiation based solution of strongly coupled problems in engineering  
**Notes:** 159 p., 72 fig., 39 tab., 407 eq.  
**Keywords:** automatic differentiation, coupled problems, engineering problems, large strains, thermo-hydro-mechanical problem, finite strains, quadratic convergence, matrix functions, Hyperelastic models, Hencky model, Ogden model, Cam-Clay model, finite element method

**Abstract:** The doctoral thesis presents an approach for the formulation and solution of strongly coupled engineering problems with the finite element method using the automatic differentiation technique that the software tools *AceGen* and *AceFEM* enables. It has been shown that it is possible to transform arbitrarily weak form of differential equation of coupled problems into scalar function pseudo-potential. By using the automatic differentiation and appropriate exceptions in the differentiation procedure, the equations of the problem and the consistent tangent matrix of finite element can be automatically derived from the pseudo-potential, which ensures quadratic convergence of the Newton-Raphson iterative procedure. At the same time such formulation of the problem leads to an extremely fast and accurate finite element codes. With a large number of physical fields we are faced with the problem of increasing size of element software code with each added field. The problem was solved by additive split of the total problem to individual subproblems, for which the code is derived inside separate finite element in a manner that preserves the quadratic convergence of the Newton-Raphson iteration. It has been shown on the numerical examples of the thermo-hydro-mechanical problems that separate formulation is suitably efficient compared to the unified formulation. The separate formulation of finite elements is a property of sequential approach. Therefore, we have shown on several examples that unified solution of the full system is more efficient than sequential solution procedure. Additionally, a new approach to the evaluation of matrix functions is presented. These are necessary for the formulation of non-linear mechanical problems, such as certain hyperelastic models (e.g. Hencky and Ogden models) and the exact evolution of plastic flow in the case of large deformations. A new method of automatic derivation of an arbitrary matrix function and its first and second derivatives of the matrix of dimensions  $3 \times 3$  with real eigenvalues is presented. The described method provides an alternative to the formulations based on the eigenvalues, because the generating function is stable and smooth compared to the eigenvalues. The generating function is a function of the eigenvalues of matrix. Therefore it is expanded into power series in the vicinity of multiple eigenvalues. A library of subroutines which calculate the standard matrix functions in closed form was created. Thus, matrix functions can be considered as elementary functions when formulating problems. We have shown on individual matrices and various combinations of hyperelastic and elasto-plastic models that the derived matrix function and its derivatives are accurate and precise, and the formulation is efficient.



## ZAHVALA

Na prvem mestu se zahvaljujem mentorju prof. dr. Jožetu Korelcu, da mi je zaupal mesto mladega raziskovalca, in mi s tem omogočil doktorski študij na Grajenem okolju. Iskreno se mu zahvaljujem za vso pomoč, podporo, nasvete ter za vse potrpljenje tekom raziskovalnega dela, ter da mi je omogočil delo na različnih seminarjih, projektih in programskih skupinah.

Zahvaljujem se prof. dr. Boštjanu Branku za konstruktivne pripombe pri pregledu doktorske disertacije. Hkrati se prof. dr. Branku in asist. Andjelki Stanić zahvaljujem za skupaj opravljeno raziskovalno delo na veliko raznovrstnih zanimivih primerih, ki smo jih skupaj reševali.

Zahvaljujem se prof. dr. Tomažu Rodiču, Tomažu Šuštarju, Matevžu Pintarju in Teji Vodlak s C3M d.o.o., za vsakoletno sodelovanje na mednarodnem seminarju v Padovi, kjer smo se ukvarjali s termomagnetno-mehanskimi povezanimi problemi in optimizacijo, kar je bila zame še nepoznana tematika.

Zahvaljujem se sodelavcem na Katedri za stavbe in konstrukcijske elemente, doc. dr. Romanu Kuniču, doc. dr. Mitji Koširju in asist. Luki Pajku za prijetno in zanimivo sodelovanje pri analizi konstrukcijskih sklopov.

Zahvaljujem se tudi trenutnim in bivšim sodelavcem in sodelavkam na katedri za metalne konstrukcije, Blažu Čermelju, s katerim sva si 3 leta delila pisarno, asist. dr. Teji Melink, Barbari Gorenc, Urši Šolinc, Nini Zupan, doc. dr. Primožu Možetu, doc. dr. Francu Sinurju in Boštjanu Jursinoviču za pomoč in prijetno vzdušje v zadnjih štirih letih. Februarja 2014 smo prekmalu izgubili tudi visokega strokovnjaka, cenjenega in spoštovanega prof. dr. Darka Bega, ki je v času mojega raziskovanja odlično vodil katedro.

Zahvaljujem se prorektorju prof. dr. Goranu Turku za konstruktivne pripombe in slovnične popravke pri pregledu doktorske disertacije. Zahvaljujem se tudi vsem mladim in starejšim raziskovalcem na fakulteti za občasno druženje in nasvete, ko sem jih potreboval. Zahvaljujem se tudi ostalim zaposlenim na fakulteti: vsem knjižničarkam, ki so skrbele, da so bili moji prispevki vedno ažurni; Romani H. za lektoriranje mojih angleških prispevkov; Elizabeti A., Barbari V. in Anji V. iz referata, ki so skrbele za potek vseh postopkov; računalniškemu centru, predvsem Darku M., ki je moral nemalokrat reševati moj sistem; snažilkam, predvsem Ajki in Anici, ki sta skrbeli, da je bila moja pisarna vedno čista in za vso dobroto in prijaznost, ki sta mi jo namenili; varnostnicama Gabrieli in Brigiti ter hišnikoma Rajku in Jožetu.

Zahvaljujem se vsem prijateljem in sošolcem: Robertu, Slavku, vsem Lukom, Andrejem in Gašperjem, Mateju ter ostalim s katerim smo se bolj ali manj pogosto družili, pa najsi bo ob pivu, čaju, kosilu, biljardu ali pa na avtomobilskem, kolesarskem ali pohodniškem izletu.

Na zadnje se zahvaljujem tudi domačim, predvsem mami Tatjani, bratu Luki in njegovi ženi Ani, stari mami Mariji, stricu Primožu in Darku ter najmlajši članici družine, nečakinji Klari, ki nas je razveselila julija 2015. Dober mesec po pričetku raziskovalnega dela, decembra 2011, nas je prekmalu zapustil oče Miroslav, ki me je vedno spodbujal k ustvarjanju in raziskovanju in mi skupaj z mamo omogočil srečno in brezskrbno otroštvo ter nemoten zaključek dodiplomskega in podiplomskega študija.



## KAZALO VSEBINE

<b>IZJAVE</b>	<b>III</b>
<b>BIBLIOGRAFSKO-DOKUMENTACIJSKA STRAN IN IZVLEČEK</b>	<b>V</b>
<b>BIBLIOGRAPHIC-DOCUMENTALISTIC INFORMATION AND ABSTRACT</b>	<b>VII</b>
<b>ZAHVALA</b>	<b>IX</b>
<b>KAZALO SLIK</b>	<b>XV</b>
<b>KAZALO PREGLEDNIC</b>	<b>XIX</b>
<b>LIST OF FIGURES</b>	<b>XXI</b>
<b>LIST OF TABLES</b>	<b>XXV</b>
<b>1 UVOD</b>	<b>1</b>
1.1 Predstavitev problema . . . . .	1
1.2 Predstavitev stanja na obravnavanem področju . . . . .	2
1.3 Tema doktorske disertacije . . . . .	5
1.4 Zasnova doktorske disertacije . . . . .	6
1.5 Oznake in notacija . . . . .	6
<b>2 NA AVTOMATSKEM ODVAJANJU BAZIRANA FORMULACIJA POVEZANIH PROBLEMOV</b>	<b>11</b>
2.1 Avtomatizacija izpeljave enačb . . . . .	12
2.1.1 Formulacija ADB problema s potencialom . . . . .	12
2.1.2 Formulacija ADB splošne šibke oblike enačb problema . . . . .	14
2.2 Avtomatizacija implementacije povezanih problemov . . . . .	16
2.2.1 Karakteristična formula . . . . .	17
2.2.2 Aditivna razdelitev enostavnega povezanega problema . . . . .	17
2.2.3 Aditivna razdelitev splošnega problema . . . . .	18
2.2.4 Implementacije kode končnih elementov . . . . .	21

2.2.5	Reševanje povezanih problemov . . . . .	24
<b>3</b>	<b>ENAČBE VEČFAZNIH POVEZANIH PROBLEMOV</b>	<b>25</b>
3.1	Opis večfaznega sistema . . . . .	25
3.2	Kinematične enačbe . . . . .	26
3.2.1	Gibanje in deformacijski gradient . . . . .	26
3.2.2	Mere deformacij . . . . .	28
3.2.3	Časovni odvodi . . . . .	31
3.3	Konstitutivni zakoni . . . . .	32
3.3.1	Plinasta faza – mešanica suhega zraka in vodne pare . . . . .	32
3.3.2	Sorpcija . . . . .	33
3.3.3	Darcyjev zakon . . . . .	34
3.3.4	Fourierjev zakon . . . . .	35
3.3.5	Fickov zakon . . . . .	35
3.4	Ravnotežne enačbe . . . . .	35
3.4.1	Zakon o ohranitvi mase . . . . .	36
3.4.2	Zakon o ohranitvi gibalne količine . . . . .	40
3.4.3	Zakon o ohranitvi vrtilne količine . . . . .	42
3.4.4	Zakon o ohranitvi energije . . . . .	43
3.4.5	Zakon o ohranitvi entropije . . . . .	44
3.4.6	Mere napetosti . . . . .	45
3.4.7	Izbrane ravnotežne enačbe glede na začetno konfiguracijo . . . . .	46
3.5	Šibke oblike diferencialnih enačb obravnavanih povezanih problemov . . . . .	46
3.5.1	Šibka oblika zakona o ohranitvi gibalne količine v začetni konfiguraciji . . . . .	47
3.5.2	Šibka oblika zakona o ohranitvi gibalne količine v trenutni konfiguraciji . . . . .	48
3.5.3	Materialni modeli . . . . .	49
3.5.4	Šibke oblike zakona o ohranitvi energije . . . . .	54
3.5.5	Šibke oblike zakona o ohranitvi mase . . . . .	55
<b>4</b>	<b>AVTOMATIZACIJA FORMULACIJE POVEZANIH PROBLEMOV</b>	<b>57</b>
4.1	Splošen izoparametrični koncept . . . . .	58
4.1.1	Izbira interpolacijske funkcije . . . . .	64
4.1.2	Identifikacija vozlišč . . . . .	65



4.2	Psevdo potenciali povezanih termo-hidro-mehanskih problemov . . . . .	66
4.2.1	Formulacija ADB pseudo-potenciala mehanskega problema . . . . .	67
4.2.2	Formulacija ADB pseudo-potenciala energijske enačbe . . . . .	69
4.2.3	Formulacija ADB pseudo-potenciala masne enačbe tekočine . . . . .	71
4.2.4	Formulacija ADB pseudo-potenciala masne enačbe plina . . . . .	72
4.3	Formulacija ADB reziduala in tangentne matrike povezanega problema . . . . .	74
4.3.1	Formulacija ADB matrik enovitih implementacij . . . . .	75
4.3.2	Formulacija ADB matrik ločenih implementacij . . . . .	78
4.3.3	Formulacija ADB lokalnih matrik . . . . .	81
4.4	Formulacija splošnega končnega elementa . . . . .	85
<b>5</b>	<b>MATRIČNE FUNKCIJE</b>	<b>89</b>
5.1	Izpeljava zaključenih oblik matričnih funkcij z avtomatskim odvajanjem . . . . .	89
5.1.1	Splošen zapis matričnih funkcij . . . . .	89
5.1.2	Obravnava slabo pogojenih območij . . . . .	91
5.1.3	Avtomatizacija odvajanja matričnih funkcij . . . . .	93
5.1.4	Izpeljava izbranih elementarnih matričnih funkcij . . . . .	95
5.2	Alternative za določitev matričnih funkcij . . . . .	100
5.2.1	Spektralni razcep . . . . .	100
5.2.2	Razvoj matrične funkcije v potenčno vrsto . . . . .	100
5.2.3	Izpeljava matrične funkcije iz splošne rodovne funkcije brez razvojev . . . . .	102
5.3	Učinkovitost in natančnost matričnih funkcij v zaključeni obliki . . . . .	103
5.3.1	Primerjava računske natančnosti in učinkovitosti na primeru polnih nesimetričnih matrik . . . . .	103
5.3.2	Primerjava računske natančnosti in učinkovitosti potence in vsote potenc na primeru simetričnih matrik . . . . .	109
5.4	Aplikacija matričnih funkcij v mehaniki . . . . .	112
5.4.1	Implementacija Ogdenovega materialnega modela . . . . .	113
5.4.2	Implementacija Henckyjevega materialnega modela . . . . .	115
5.5	Učinkovitost in natančnost matričnih funkcij na primeru metode končnih elementov . . . . .	115
5.5.1	Predstavitev elementov . . . . .	115
5.5.2	Opis testnega primera . . . . .	116
5.5.3	Primerjava rezultatov . . . . .	119

<b>6 RAČUNSKI PRIMERI RAZLIČNIH TERMO-HIDRO-MEHANSKIH POVEZANIH PROBLEMOV</b>	<b>125</b>
6.1 Študija učinkovitosti različnih nivojev povezanosti ločene in enovite implementacije končnih elementov . . . . .	125
6.1.1 Končni elementi . . . . .	126
6.1.2 Opis računskih primerov . . . . .	126
6.1.3 Primerjava rezultatov . . . . .	129
6.2 Študija učinkovitosti ločenih in enovitih implementacij končnih elementov na primeru enovitega in ločenega reševanja . . . . .	131
6.2.1 Končni elementi . . . . .	131
6.2.2 Opis računskih primerov . . . . .	133
6.2.3 Primerjava rezultatov . . . . .	134
<b>7 ZAKLJUČEK</b>	<b>139</b>
<b>8 POVZETEK</b>	<b>141</b>
<b>9 SUMMARY</b>	<b>147</b>
<b>VIRI</b>	<b>153</b>

## KAZALO SLIK

Slika 2.1:	Newton Raphsonova iterativna shema z adaptivnimi časovnimi koraki . . . . .	13
Slika 2.2:	Lega eksplicitne in karakteristične formule tangentne matrike in reziduala . . .	17
Slika 2.3:	Primer dveh implementacij termo-mehanskega problema . . . . .	18
Slika 2.4:	Formulacija ADB $K$ -tega elementa . . . . .	20
Slika 2.5:	Shema strukture matrik $\mathbf{R}_e^{(K)}$ in $\mathbf{K}_e^{(K)}$ vseh $n_K$ podproblemov . . . . .	20
Slika 2.6:	Celovit pristop k implementaciji povezanih problemov -2D štirikotnik . . . . .	21
Slika 2.7:	Ločen in sekvenčni pristop k implementaciji povezanih problemov -2D štirikotnik . . . . .	23
Slika 2.8:	Gnezdna iterativna shema sekvenčnega reševanja za en korak . . . . .	24
Slika 3.1:	Začetna in trenutna konfiguracija telesa $B$ . . . . .	26
Slika 4.1:	Diskretizacija telesa $B$ . . . . .	57
Slika 4.2:	Topološki končni element $\Omega_e$ z $n_K$ elementi $\Omega_e^{(K)}$ $K$ -te izvorne kode . . . . .	58
Slika 4.3:	Izoparametrična preslikava na referenčno konfiguracijo . . . . .	60
Slika 4.4:	Izoparametrična preslikava deformiranja končnega elementa $\Omega_e$ . . . . .	61
Slika 4.5:	Izsek kode <i>AceGen</i> za izračun začetnih koordinat heksahedra . . . . .	65
Slika 4.6:	Izsek kode <i>AceGen</i> za izračun začetnih koordinat za štirikotnik . . . . .	65
Slika 4.7:	Izsek kode <i>AceGen</i> za izračun poroznosti $n$ , gostote $\rho_l$ in zasičenosti $S_l$ . . . . .	68
Slika 4.8:	Izsek kode <i>AceGen</i> za izračun pomožnih spremenljivk (4.38) do (4.40) mehan- skega problema . . . . .	68
Slika 4.9:	Izsek kode <i>AceGen</i> za izračun pseudo-potenciala $W_\alpha^T$ (4.46) . . . . .	70
Slika 4.10:	Izsek kode <i>AceGen</i> za izračun pseudo-potenciala $W_{\mathcal{H}}^T$ (4.46) . . . . .	70
Slika 4.11:	Izsek kode <i>AceGen</i> za izračun naravnih robnih pogojev $W^T$ (3.187) . . . . .	70
Slika 4.12:	Izsek kode <i>AceGen</i> za izračun Jacobijeve determinante lupinskega elementa . .	71
Slika 4.13:	Izsek kode <i>AceGen</i> za izračun časovnih odvodov, temperaturno odvisnih vi- skoznosti, relativne prepustnosti in Darcyjevega tok . . . . .	71
Slika 4.14:	Izsek kode <i>AceGen</i> za izračun plinskih konstitutivnih enačb . . . . .	72
Slika 4.15:	Izsek kode <i>AceGen</i> za izračun psevdopotenciala $W^l$ (4.50) . . . . .	73
Slika 4.16:	Izsek kode <i>AceGen</i> za izračun Fickove enačbe (3.61) . . . . .	73

Slika 4.17:	Izsek kode <i>AceGen</i> za izračun naravnih robnih pogojev $W^l$ (3.192) . . . . .	73
Slika 4.18:	Izsek kode <i>AceGen</i> za izračun naravnih robnih pogojev $W^g$ (3.193) . . . . .	73
Slika 4.19:	Izsek kode <i>AceGen</i> za izračun pseudo-potenciala $W^g$ (4.53) . . . . .	74
Slika 4.20:	Enoviti implementaciji na primeru štirivozliščnega elementa problema THGM	76
Slika 4.21:	Ločene implementacije na primeru štirivozliščnega elementa problema THGM	79
Slika 4.22:	Reprezentativna koda <i>AceGen</i> notranje iteracije . . . . .	81
Slika 4.23:	Formulacija ADB splošnega elementa povezanega problema z noranjo zanko .	82
Slika 4.24:	Von Misesov in Cam-Clay kriterij plastičnega tečenja v prostoru glavnih nape- tosti . . . . .	85
Slika 4.25:	Koda <i>AceGen</i> definicije elastičnega potenciala $W$ in notranjega reziduala $\mathbf{Q}_g$ .	86
Slika 4.26:	Izsek kode <i>AceGen</i> elementa enovite implementacije za izračun enostavnega termo-mehanskega problema . . . . .	87
Slika 4.27:	Izsek kode <i>AceGen</i> dveh elementov ločene implementacije za izračun enostav- nega termo-mehanskega problema . . . . .	88
Slika 5.1:	Lastne vrednosti $\lambda_i$ in rodovna funkcija potence matrike na območju $p \rightarrow 0$ .	91
Slika 5.2:	Lastne vrednosti $\lambda_i$ in rodovna funkcija potence matrike na območju $r \rightarrow \pm 1$	92
Slika 5.3:	Avtomatizacija izračuna matrične funkcije in njenih odvodov . . . . .	94
Slika 5.4:	Zapis ADB končne vrste za približek eksponenta matrike $\mathcal{F}(\mathbf{A}) = \exp \mathbf{A}$ in njegovih prvih in drugih odvodov . . . . .	101
Slika 5.5:	Zapis ADB končne vrste za približek logaritma matrike $\mathcal{F}(\mathbf{A}) = \log \mathbf{A}$ in njegovih prvih in drugih odvodov . . . . .	101
Slika 5.6:	Zapis ADB končne vrste za približek vsote potenc matrike $\mathcal{F}(\mathbf{A}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) =$ $\sum_{k=1}^n \xi_k \mathbf{A}^{\eta_k}$ in njenih prvih in drugih odvodov . . . . .	102
Slika 5.7:	Območja matrik $\mathbf{M}(a)$ za različne matrične funkcije . . . . .	104
Slika 5.8:	Računska natančnost eksponenta in logaritma matrike . . . . .	105
Slika 5.9:	Računska natančnost korena in potence matrike . . . . .	105
Slika 5.10:	Računska natančnost vsote potenc matrike . . . . .	105
Slika 5.11:	Računska natančnost odvodov eksponenta matrike . . . . .	106
Slika 5.12:	Računska natančnost odvodov logaritma matrike . . . . .	106
Slika 5.13:	Računska natančnost odvodov korena matrike . . . . .	106
Slika 5.14:	Računska natančnost odvodov potence matrike . . . . .	107
Slika 5.15:	Računska natančnost odvodov vsote potenc matrike . . . . .	107
Slika 5.16:	Učinkovitost zaključene oblike eksponenta matrike $\exp \mathbf{M}$ . . . . .	107

Slika 5.17:	Učinkovitost logaritma matrike $\log \mathbf{M}$ . . . . .	108
Slika 5.18:	Učinkovitost korena matrike $\sqrt{\mathbf{M}}$ . . . . .	108
Slika 5.19:	Učinkovitost potence matrike $\mathbf{M}^\eta$ . . . . .	109
Slika 5.20:	Učinkovitost vsote potenc matrike $\sum \xi_k \mathbf{M}^{\eta_k}$ . . . . .	109
Slika 5.21:	Območja matrik $\mathbf{M}_i(a)$ za funkciji $\mathbf{A}^\eta$ in $\sum \xi_k \mathbf{A}^{\eta_k}$ . . . . .	110
Slika 5.22:	Računska natančnost potenc in vsote potenc matrike . . . . .	110
Slika 5.23:	Računska natančnost prvih odvodov potenc in vsote potenc matrike . . . . .	111
Slika 5.24:	Računska natančnost drugih odvodov potenc in vsote potenc matrike . . . . .	111
Slika 5.25:	Normiran računski čas potence matrike $\xi \mathbf{M}^\eta$ . . . . .	112
Slika 5.26:	Normiran računski čas vsote potenc $\sum \xi_k \mathbf{M}^{\eta_k}$ . . . . .	112
Slika 5.27:	Izsek kode <i>AceGen</i> za izračun deviatoričnega dela desnega Cauchy-Greenovega deformacijskega tenzrja $\widehat{\mathbf{C}} \equiv \mathbb{C}ISO$ . . . . .	114
Slika 5.28:	Izsek kode <i>AceGen</i> za izračun deformacijske energije Ogdenovega modela (5.45) . . . . .	114
Slika 5.29:	Izsek kode <i>AceGen</i> za izračun deformacijske energije Henckyjevega modela (5.49) . . . . .	115
Slika 5.30:	Začetno stanje primerov . . . . .	118
Slika 5.31:	Pomik - sila diagram končnih elementov NH, MR, He in $Og _{m=3}$ . . . . .	123
Slika 5.32:	Pomik - sila diagram elementov s Von-Misesovim kriterijem tečenja $\square$ -Mi . . . . .	123
Slika 5.33:	Pomik - sila diagram elementov s kriterijem tečenja Cam-Clay $\square$ -CC . . . . .	123
Slika 6.1:	Funkcija množitelja $\lambda(t)$ po času $t$ . . . . .	128
Slika 6.2:	Robni pogoji posameznega podproblema <b>THM</b> . . . . .	129
Slika 6.3:	Robni pogoji primerov <b>THM</b> in <b>THGM</b> . . . . .	133

“Ta stran je namenoma prazna.”

## KAZALO PREGLEDNIC

Preglednica 2.1:	Lastnosti različnih implementacij elementa . . . . .	17
Preglednica 3.1:	Transformacija vektorjev, tenzorjev in operatorjev . . . . .	28
Preglednica 3.2:	Izvleček nelinearnih mer deformacij . . . . .	32
Preglednica 3.3:	Povzetek tenzorjev napetosti z njihovimi konjugiranimi stopnjami deformacij . . . . .	46
Preglednica 4.1:	Standardne fizikalne količine . . . . .	59
Preglednica 4.2:	Povzetek psevdopotencialov in pripadajočih šibkih oblik . . . . .	66
Preglednica 4.3:	Možne kombinacije enačb povezanih problemov THGM . . . . .	67
Preglednica 5.1:	Lastnost izpeljanih zaprtih potenc matrike glede na različne sheme . . . . .	94
Preglednica 5.2:	Definicije skalarnih rodovnih funkcij . . . . .	95
Preglednica 5.3:	Numerični parametri rodovnih funkcij . . . . .	96
Preglednica 5.4:	Primerjani končni elementi glede na deformacijsko energijo in funkcijo tečenja . . . . .	116
Preglednica 5.5:	Matrične funkcije in njihovi odvodi, ki se pojavijo znotraj končnih elementov . . . . .	117
Preglednica 5.6:	Lastnosti avtomatsko kreirane kode . . . . .	117
Preglednica 5.7:	Materialne parametri za vse modele . . . . .	118
Preglednica 5.8:	Materialne lastnosti izohoričnega dela energije . . . . .	119
Preglednica 5.9:	Normiran povprečen $K_e$ in $R_e$ čas sestavljanja . . . . .	120
Preglednica 5.10:	Celotni čas računskega primera, skupno število iteracij in povprečno število iteracij nakorak . . . . .	120
Preglednica 5.11:	Norma prirastkov pomikov tipičnega časovnega koraka za $Og_{\square} m = 1$ . . . . .	121
Preglednica 5.12:	Norma prirastkov pomikov tipičnega časovnega koraka za $Og_{\square} m = 2$ . . . . .	122
Preglednica 5.13:	Norma prirastkov pomikov tipičnega časovnega koraka za $Og_{\square} m = 3$ . . . . .	122
Preglednica 5.14:	Norma prirastkov pomikov tipičnega časovnega koraka za modele $He_{\square}$ . . . . .	122
Preglednica 5.15:	Norma prirastkov pomikov za vse elasto-plastične modele $\square$ -Mi in CC . . . . .	122
Preglednica 6.1:	Konstitutivni materialni modeli, obravnavani v računskih primerih . . . . .	125

Preglednica 6.2:	Povzetek psevdo potencialov za primer 1 . . . . .	126
Preglednica 6.3:	Skupna velikost izvorne kode [kB] in števila enačb . . . . .	127
Preglednica 6.4:	Materialni karakteristike termo-hidro-mehanskega povezanega problema	128
Preglednica 6.5:	Primerjava hitrosti konvergence in celotnih časov računskih primerov . .	130
Preglednica 6.6:	Primerjava normiranih povprečnih časov za iteracijo, $t_n = t_{KR,B}/t_{KR,A}$	130
Preglednica 6.7:	Primerjava normiranih povprečnih časov na iteracijo, reševanje sistema in sestavljanja matrik elementa . . . . .	131
Preglednica 6.8:	Povzetek šibkih oblik za primer 2 . . . . .	132
Preglednica 6.9:	Primerjava velikosti izvorne kode [kB] in število enačb . . . . .	132
Preglednica 6.10:	Primerjava velikosti izvorne kode in število enačb elementov tipa <b>B</b> . . .	133
Preglednica 6.11:	Primerjava velikosti kode in števila enačb robnih elementov . . . . .	133
Preglednica 6.12:	Materialni karakteristike plinov . . . . .	134
Preglednica 6.13:	Materialni karakteristike termo-hidro-mehanskega povezanega problema	135
Preglednica 6.14:	Primerjava učinkovitosti primerov z različnimi implementacijami in pri- stopi reševanja . . . . .	136
Preglednica 6.15:	Konvergenca <b>THGM</b> primerov z enovitim reševanjem . . . . .	136
Preglednica 6.16:	Konvergenca primerov <b>THGM</b> ločene implementacije z sekvenčnim re- ševanjem . . . . .	137



## LIST OF FIGURES

Figure 2.1: Newton-Raphson iteration scheme for adaptive time step . . . . .	13
Figure 2.2: Schematic position of explicit and characteristic formulas of tangent matrix and residual . . . . .	17
Figure 2.3: Example of two implementations of thermo-mechanical problem . . . . .	18
Figure 2.4: ADB formulation of $K$ -th element . . . . .	20
Figure 2.5: Schematic structure of matrices $\mathbf{R}_e^{(K)}$ and $\mathbf{K}_e^{(K)}$ of all $n_K$ subproblems . . . . .	20
Figure 2.6: Unified approach to implementation of coupled problems -2D Quadrilateral . . . . .	21
Figure 2.7: Separate and staggered approach to implementation of coupled problems -2D Quadrilateral . . . . .	23
Figure 2.8: Nested iteration scheme for staggered solution for single step . . . . .	24
Figure 3.1: Initial and current configuration of body $B$ . . . . .	26
Figure 4.1: Discretization of body $B$ . . . . .	57
Figure 4.2: Topological finite element $\Omega_e$ with $n_K$ elements $\Omega_e^{(K)}$ of $K$ -th source code . . . . .	58
Figure 4.3: Isoparametric mapping onto reference configuration . . . . .	60
Figure 4.4: Isoparametric mapping of the deformation of a finite element $\Omega_e$ . . . . .	61
Figure 4.5: <i>AceGen</i> input segment for the computation of the initial coordinates of heksahedron . . . . .	65
Figure 4.6: <i>AceGen</i> input segment for the computation of the initial coordinates of štirikotnik . . . . .	65
Figure 4.7: <i>AceGen</i> input segment for the computation porosity $n$ , density $\rho_l$ and saturation $S_l$ . . . . .	68
Figure 4.8: <i>AceGen</i> input segment for the computation of auxiliary variables (4.38) to (4.40) of mechanical problem . . . . .	68
Figure 4.9: <i>AceGen</i> input segment for the computation of pseudo-potential $W_\alpha^T$ (4.46) . . . . .	70
Figure 4.10: <i>AceGen</i> input segment for the computation of pseudo-potential $W_H^T$ (4.46) . . . . .	70
Figure 4.11: <i>AceGen</i> input segment for the computation of natural boundary conditions of $W^T$ (3.187) . . . . .	70
Figure 4.12: <i>AceGen</i> input segment for the computation of Jacobi determinant of shell element . . . . .	71
Figure 4.13: <i>AceGen</i> input segment for the computation of time derivatives, time dependent viscosities, relative permeability and Darcy flow . . . . .	71
Figure 4.14: <i>AceGen</i> input segment for the computation of gas constitutive equations . . . . .	72
Figure 4.15: <i>AceGen</i> input segment for the computation of pseudo-potential $W^l$ (4.50) . . . . .	73

Figure 4.16: <i>AceGen</i> input segment for the computation of Fick equation (3.61) . . . . .	73
Figure 4.17: <i>AceGen</i> input segment for the computation of natural boundary conditions $W^l$ (3.192) . . . . .	73
Figure 4.18: <i>AceGen</i> input segment for the computation of natural boundary conditions of $W^g$ (3.193) . . . . .	73
Figure 4.19: <i>AceGen</i> input segment for the computation of pseudo-potential $W^g$ (4.53) . . . . .	74
Figure 4.20: Unified implementations on an example of quadrilateral element of THGM problem	76
Figure 4.21: Separate implementations on an example of quadrilateral element of THGM problem	79
Figure 4.22: Representative <i>AceGen</i> code of internal iteration . . . . .	81
Figure 4.23: ADB formulation of generic element of coupled problem with internal loop . . . . .	82
Figure 4.24: Von Mises and Cam-Clay yield surface in the space of principal stresses . . . . .	85
Figure 4.25: <i>AceGen</i> code of definition of elastic energy $W$ and internal residual $Q_g$ . . . . .	86
Figure 4.26: <i>AceGen</i> input segment of the element according to unified implementation for the computation of the simple thermo-mechanical problem . . . . .	87
Figure 4.27: <i>AceGen</i> input segment of the two elements written according to separate implementations for the computation of simple thermo-mechanical problem . . . . .	88
Figure 5.1: Eigenvalues $\lambda'_i$ and generating function of matrix power in region $p \rightarrow 0$ . . . . .	91
Figure 5.2: Eigenvalues $\lambda'_i$ and generating function of matrix power in region $r \rightarrow \pm 1$ . . . . .	92
Figure 5.3: Automation of calculation of matrix function and its derivatives . . . . .	94
Figure 5.4: ADB form of truncated series approximation of matrix exponential $\mathcal{F}(\mathbf{A}) = \exp \mathbf{A}$ and its first and second derivatives . . . . .	101
Figure 5.5: ADB form of truncated series approximation of matrix Logarithm $\mathcal{F}(\mathbf{A}) = \log \mathbf{A}$ and its first and second derivatives . . . . .	101
Figure 5.6: ADB form of truncated series approximation of matrix power sum $\mathcal{F}(\mathbf{A}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) = \sum_{k=1}^n \xi_k \mathbf{A}^{\eta_k}$ and its first and second derivatives . . . . .	102
Figure 5.7: Areas of matrices $\mathbf{M}(a)$ for different matrix functions . . . . .	104
Figure 5.8: Accuracy of matrix exponential and logarithm . . . . .	105
Figure 5.9: Accuracy of matrix square root and power . . . . .	105
Figure 5.10: Accuracy of matrix power sum . . . . .	105
Figure 5.11: Accuracy of derivatives of matrix exponential . . . . .	106
Figure 5.12: Accuracy of derivatives of matrix logarithm . . . . .	106
Figure 5.13: Accuracy of derivatives of matrix square root . . . . .	106
Figure 5.14: Accuracy of derivatives of matrix power . . . . .	107
Figure 5.15: Accuracy of derivatives of matrix power sum . . . . .	107

Figure 5.16: Efficiency of closed-form matrix exponential $\exp \mathbf{M}$ . . . . .	107
Figure 5.17: Efficiency of matrix Logarithm $\log \mathbf{M}$ . . . . .	108
Figure 5.18: Efficiency of matrix square root $\sqrt{\mathbf{M}}$ . . . . .	108
Figure 5.19: Efficiency of matrix power $\mathbf{M}_i^\eta$ . . . . .	109
Figure 5.20: Efficiency of matrix power sum $\sum \xi_k \mathbf{M}^{\eta k}$ . . . . .	109
Figure 5.21: Areas of matrices $\mathbf{M}_i(a)$ for functions $\mathbf{A}^\eta$ and $\sum \xi_k \mathbf{A}^{\eta k}$ . . . . .	110
Figure 5.22: Accuracy of matrix power and sum of powers . . . . .	110
Figure 5.23: Accuracy of first derivatives of matrix power and sum of powers . . . . .	111
Figure 5.24: Accuracy of second derivatives of matrix power and sum of powers . . . . .	111
Figure 5.25: Normalized evaluation time of matrix power $\xi \mathbf{M}^\eta$ . . . . .	112
Figure 5.26: Normalized evaluation time of sum of matrix powers $\sum \xi_k \mathbf{M}^{\eta k}$ . . . . .	112
Figure 5.27: <i>AceGen</i> input segment for the computation of deviatoric part of right Cauchy-Green deformation tensor $\hat{\mathbf{C}} \equiv \mathbb{C} \text{ISO}$ . . . . .	114
Figure 5.28: <i>AceGen</i> input segment for the computation of the Ogden model (5.45) . . . . .	114
Figure 5.29: <i>AceGen</i> input segment for the computation of the Hencky model (5.49) . . . . .	115
Figure 5.30: Initial state of examples . . . . .	118
Figure 5.31: Displacement - force graph of elements NH, MR, He and $\text{Og} _{m=3}$ . . . . .	123
Figure 5.32: Displacement - force graph of elements with Von-Mises yield criterion $\square$ -Mi . . . . .	123
Figure 5.33: Displacement - force graph of elements with Cam-Clay yield criterion $\square$ -CC . . . . .	123
Figure 6.1: Function of multiplier $\lambda(t)$ in time $t$ . . . . .	128
Figure 6.2: Boundary conditions of each subproblem of <b>THM</b> problem . . . . .	129
Figure 6.3: Boundary conditions of <b>THM</b> and <b>THGM</b> examples . . . . .	133

“Ta stran je namenoma prazna.”

## LIST OF TABLES

Table 2.1: Characteristics of different implementations of element . . . . .	17
Table 3.1: Transformation of vectors, tensors and operators . . . . .	28
Table 3.2: Summary of nonlinear strain measures . . . . .	32
Table 3.3: Summary of stress tensors and their work conjugated strain rates . . . . .	46
Table 4.1: Standard physical quantities . . . . .	59
Table 4.2: The summary of pseudo-potential and corresponding weak forms . . . . .	66
Table 4.3: Possible combinations of equations of THGM coupled problems . . . . .	67
Table 5.1: Properties of derived closed form matrix power for different matrix patterns . . . . .	94
Table 5.2: Definitions of scalar generating functions . . . . .	95
Table 5.3: Numerical parameters of generating function . . . . .	96
Table 5.4: Compared finite elements accordingly to strain energy function and yield function . . . . .	116
Table 5.5: Appearance of matrix functions and their derivatives within the finite elements . . . . .	117
Table 5.6: Characteristics of automatically generated codes . . . . .	117
Table 5.7: Material parameters for all models . . . . .	118
Table 5.8: Material characteristics of isochoric parts of potentials . . . . .	119
Table 5.9: Normalized $\mathbf{K}_e$ and $\mathbf{R}_e$ assembly time . . . . .	120
Table 5.10: Total simulation time, total number of iterations and average number of iterations per step . . . . .	120
Table 5.11: Norm of increments of displacements for typical time step of $\text{Og}_\square m = 1$ . . . . .	121
Table 5.12: Norm of increments of displacements for typical time step of $\text{Og}_\square m = 2$ . . . . .	122
Table 5.13: Norm of increments of displacements for typical time step of $\text{Og}_\square m = 3$ . . . . .	122
Table 5.14: Norm of increments of displacements for typical time step of models $\text{He}_\square$ . . . . .	122
Table 5.15: Norm of increments of displacements for all elasto-plastic models $\square$ -Mi & CC . . . . .	122
Table 6.1: Constitutive material models considered in simulations . . . . .	125
Table 6.2: The summary of pseudo-potentials for example 1 . . . . .	126
Table 6.3: Comparison of source code size [kB] and No. of equation . . . . .	127

Table 6.4: Material parameters of thermo-hydro-mechanical coupled problem . . . . .	128
Table 6.5: Comparison of convergence speed and total simulation times . . . . .	130
Table 6.6: Comparison of normalised average iteration time, $t_n = t_{KR,B}/t_{KR,A}$ . . . . .	130
Table 6.7: Comparison of normalised average iteration, solver and element assembly times . .	131
Table 6.8: The summary of weak forms for example 2 . . . . .	132
Table 6.9: Comparison of source code size [kB] and number of equations . . . . .	132
Table 6.10: Comparison of source code size and number of equations of elements of type <b>B</b> . .	133
Table 6.11: Comparison of code size and number of equations of boundary elements . . . . .	133
Table 6.12: Material parameters of gases . . . . .	134
Table 6.13: Material parameters of thermo-hydro-mechanical coupled problem . . . . .	135
Table 6.14: Comparison of numerical efficiency of examples with different element implemen- tations and solution procedures . . . . .	136
Table 6.15: Convergence of <b>THGM</b> example with unified solving procedure . . . . .	136
Table 6.16: Convergence of <b>THGM</b> example of separate implementation with sequential solu- tion procedure . . . . .	137



“Ta stran je namenoma prazna.”



# 1 UVOD

## 1.1 Predstavitev problema

Povsod okoli nas se odvijajo različni fizikalni pojavi. Te pojave želimo matematično opisati in jih simulirati z ustreznimi programskimi orodji v računalniškem okolju. Večina posameznih fizikalnih pojavov, kot so prevajanje toplote po trdni snovi, mehanski odziv trdnega telesa, tok tekočin po poroznem mediju ipd., je že dodobra raziskanih. Ti pojavi se običajno opišejo s pripadajočim fizikalnim poljem. Fizikalno polje je pojem, ki vsaki točki v prostoru in času predpisuje vrednost izbrane fizikalne količine. V disertaciji bomo uporabljali le skalarna in vektorska polja. Skalarna polja so temperature, pritiski tekočin, mase tekočin... in vektorska pomiki, magnetno in električno polje... Fizikalni pojav deformiranja telesa opisuje veja mehanike. Fizikalno polje, ki je rezultat reševanja mehanskega problema so pomiki, možna pa je tudi izbira drugih polj. Fizikalni pojav prevajanja toplote telesa opisuje veja termodinamike, v disertaciji bo uporabljen izraz termalni problem, rezultat problema pa so temperature. Rezultat tekočinskega problema je lahko polje pritiskov tekočine (kapljevine ali plini). V zadnjih letih pa je vedno večji poudarek na interakciji med različnimi fizikalnimi pojavi oziroma problemi. Dobro je raziskano reševanje najosnovnejše interakcije med mehanskim in termalnim problemom. V splošnem pa interakcije med mehanskim, toplotnim, tekočinskim, kemijskim magnetnim, idr. nestacionarnim problemom, kjer upoštevamo še spremembo konfiguracije, niso več tako enostavne, zato univerzalni pristopi k rešitvi takih problemov ne obstajajo. Povezani problemi so problemi ki hkrati obravnavajo več različnih fizikalnih problemov, ki so medsebojno odvisni, ta odvisnost pa je lahko eno- ali dvosmerna ter šibka ali močna. Rezultat povezanega problema so fizikalna polja vsakega fizikalnega problema. Od nivoja povezanosti, predpostavk problema in želene natančnosti rezultatov je odvisno, kateri pristop bomo uporabili za reševanje problema. Inženirski problemi običajno narekujejo reševanje različnih povezanih problemov na izbrani geometriji. Rešitev inženirskega problema so osnovna fizikalna polja (npr. pomiki, temperature, ...) in njihove izpeljanke (npr. napetosti, deformacije, toplotni tok, ...) na izbrani geometriji.

Mnogo enostavnih problemov s pravilno geometrijo je možno rešiti analitično z reševanjem pripadajoče diferencialne enačbe, problem pa se pojavi, ko želimo reševati netrivialne probleme s poljubno geometrijo. Povezani problemi se na praktično vseh področjih znanosti in inženirstva primarno rešujejo z uporabo metode končnih elementov (MKE angl. FEM - *Finite element method*). Reševanje običajno poteka z uporabo Newton–Raphsonove iteracijske metode. Klasično so se povezani problemi reševali sekvenčno oz. zaporedno. V sekvenčnem pristopu (angl. *staggered/sequential scheme*) (Lewis in Schrefler, 1998, Šuštar, 2002, Matthies in Steindorf, 2002, 2003, Lewis in sod., 2004, Wang in sod., 2009) se vsak fizikalni problem obravnava ločeno. Posledično se z lastnim časovnim korakom in numeričnim modelom izvede linearizacija rezultirajočih enačb in Newton-Raphsonove iteracije na posameznem fizikalnem polju neodvisno od drugih. Polja se povežejo s prenosom podatkov tako, da je rešitev enega vhodni podatek drugega fizikalnega problema in obratno, kar se ponavlja, dokler rešitve ne dosežejo želene natančnosti. Sekvenčni pristop ima lahko različne modifikacije in nivoje povezanosti. Prednost tega pristopa je, da imamo majhne tangentne matrike, eno za vsak fizikalni problem, in posledično je lahko izračun posamezne iteracije krajši. Hkrati so lahko metode in uporabljeno programsko orodje za reševanje posameznega polja poljubni in med seboj neodvisni. Slabost pristopa je slaba globalna konvergenca iteracijske metode, kar pomeni, da je običajno treba izvesti veliko več globalnih iteracij

za dosego enakega nivoja natančnosti rešitve, druga slabost pa je potreba po sistemu za prenos podatkov med ločenimi programi. Posledično pristop za reševanje močno povezanih problemov z velikim številom fizikalnih polj ni primeren, saj število iteracij močno naraste z večanjem nelinearnosti in števila polj, hkrati pa konvergenca rezultatov na splošno tudi za zelo majhne korake ni zagotovljena.

Alternativa sekvenčnemu pristopu je celovit oz. enovit (angl. *monolithic/unified scheme*) pristop, kjer se povezan problem obravnava kot celoto. Linearizira se celotni problem, izpelje ena tangentna matrika in izvede polna Newton-Raphsonova iteracija z enakim časovnim korakom za vsa polja hkrati. Prednost tega pristopa je, da lahko s konsistentno linearizacijo celotnega problema zagotovimo kvadratično konvergenco metode, in je zato potrebnih občutno manj iteracij, ki pa so posledično dražje. Prav tako ni potrebe po sistemu za prenos podatkov. Slabost pristopa je, da pri dodajanju fizikalnih polj čas izpeljave in velikost programske kode naraščata, zato postaja problem s časom neobvladljiv. Hkrati sta linearizacija in kompozicija tangentne matrike dražji kot pri sekvenčnem pristopu, saj procedura zahteva povezane dele tangentne matrike. Ti niso nujno na voljo za vsa polja, kadar kombiniramo več različnih programskih orodij za reševanje po MKE. Ker se obravnava več fizikalnih polj hkrati, konvergenca iteracijske procedure nadzira problem, ki je najbolj občutljiv na spreminjanje časovnega koraka. Zaradi velike kompleksnosti implementacije tega pristopa se je njegova uporaba razširila šele v zadnjem času, saj z uporabo novih tehnologij in orodij lahko probleme zastavimo širše.

V disertaciji bomo pri formulaciji povezanih problemov, kjer je del problema mehanski problem, upoštevali tudi velike deformacije, kar zahteva pravilen opis mehanskih količin ter uporabo nelinearnih materialnih modelov. Osnovne mehanske modele je možno vpeljati in implementirati relativno enostavno, problem pa se pojavi pri formulaciji netrivialnih modelov, ki zahtevajo operacije nad deformacijskimi tenzorji, kot sta na primer Ogdenov (Ogden, 1972) in Henckyjev (Hencky, 1928) materialni model, ki zahtevata uporabo potence in logaritma tenzorja deformacij. Podobno natančen opis evolucije plastičnega tečenja zahteva formulacijo z uporabo eksponenta matrike (Itskov in Aksel, 2002, Korelc in Stupkiewicz, 2014). Za konsistentno linearizacijo teh problemov je treba poleg vrednosti tenzorskih funkcij poznati tudi vrednost njihovih prvih in drugih odvodov, ki pa jih ni enostavno določiti. Če bi bila na voljo numerična knjižnica podprogramov, ki bi učinkovito izračunala in vrnila izbrano matrično funkcijo podane matrike in njen prvi in drugi odvod in bi bili vsi definirani z natančnostjo računalnika na vsem definicijskem območju matrike, potem bi lahko bila ta matrična funkcija obravnavana enako kot druge elementarne funkcije, kot so eksponent, logaritem in potenca skalarja. Posledično bi se formulacija kompleksnih, povezanih, nelinearnih problemov poenostavila, hkrati pa bili rezultati do natančnosti računalnika točni.

## 1.2 Predstavitev stanja na obravnavanem področju

Z uporabo novih naprednih programskih tehnologij in orodij lahko neposredno vplivamo na zasnovu, predpostavke in metode reševanja inženirskega problema in pripadajočega numeričnega modela. Uporaba novih tehnologij vodi v avtomatizacijo metode končnih elementov (Korelc, 2009). Z metodo končnih elementov se ukvarjajo predvsem raziskovalci s področij matematike, računalništva in mehanike. Vsako od teh področij je razvilo svoje pristope, metode in programska orodja k reševanju problema avtomatizacije. Nivo avtomatizacije metode končnih elementov lahko z združevanjem različnih pristopov in orodij dvignemo. Razvitih je bilo več različnih pristopov, kot sta hibridni objektno orientirani (Eyheramendy in Zimmermann, 2000, Beall in Shephard, 1999) (npr. *FEniCS* (Logg, 2007), *FreeFem++* (Pironneau in sod., 2008)) in hibridni numerično simbolni (*AceGen* in *AceFEM* (Korelc, 2002)), in programskih orodij, kot so orodja za reševanje parcialnih diferencialnih enačb (npr. *SciNapse* (Akers in sod.,

1998) in *Ctadel* (van Engelen in sod., 1995)), različne numerične knjižnice (npr. *NAG*, ([www.nag.co.uk](http://www.nag.co.uk)) in *MATLAB* ([www.mathworks.com](http://www.mathworks.com))), specializirana orodja za reševanje po MKE (npr. *ABAQUS* ([www.3ds.com/products-services/simulia](http://www.3ds.com/products-services/simulia)), *ANSYS* ([www.ansys.com](http://www.ansys.com)), *FEAP* ([www.ce.berkeley.edu/feap](http://www.ce.berkeley.edu/feap))) in orodja za avtomatsko odvajanje (Griewank in Walther, 2008, Bartholomew-Biggs in sod., 2000, Bischof in sod., 2002). Izčrpnejši pregled so podali Gallopoulos in sod. (1994), Wriggers (2008), Melink (2014). Za avtomatizacijo formulacije povezanega problema z MKE je najpomembnejša uporaba metode avtomatskega odvajanja (AD - *automatic differentiation*). Izkaže se, da je hibridni numerično simbolni pristop najbolj prilagodljiv. Z uporabo metode avtomatskega odvajanja in optimizacije programske kode lahko v simbolnem okolju npr. *Mathematica* (Wolfram Research, 2013) avtomatiziramo formulacijo in izpeljavo enačb končnih elementov. Rezultat je optimirana programska koda v izbranem osnovnem programskem jeziku (npr. C ali Fortran), ki se lahko vključi v izbrano orodje za reševanje po MKE. Takšno kombinacijo omogočata orodji *AceGen* in *AceFEM* (Korelc, 2011). Vse navedene internetne povezave so bile dostopne 30. januarja 2016.

Na splošno potrebujemo za reševanje inženirskih problemov z metode končnih elementov šibko obliko diferencialnih enačb, s katerimi opišemo fizikalni problem (Lewis in Schrefler, 1998). Ta je osnova za izračun ravnotežnih enačb in tangentne matrike. Pot do teh pa je možna na več načinov (Wriggers, 2008). Enačbe se lahko vpeljejo klasično, tako da odvajamo na roke in enačbe prepisemo v programsko kodo, lahko pa se programske kode avtomatsko izpeljejo z uporabo ustreznega orodja za avtomatsko generacijo (Korelc, 2009, Logg, 2007, Bischof in sod., 2003). Izpeljati želimo enačbe in polno konsistentno linearizirano tangentno matriko povezanega problema ter izpeljavo avtomatizirati. To pa bo doseženo z metodo avtomatskega odvajanja.

Metoda avtomatskega odvajanja predstavlja aplikacijo klasičnega verižnega pravila na poljuben algoritem. Posledično so odvodi, ki jih dobimo z AD, analitično točni (Griewank in Walther, 2008). Izmed različnih implementacij metode AD (za podrobnosti glej Griewank in Walther (2008), Korelc (2009)) je za implementacijo povezanih problemov najpomembnejše tako imenovano odvajanje nazaj (*backward AD*). Čas odvajanja skalarne funkcije po poljubnem številu neodvisnih spremenljivk (izvrednotenje gradienta funkcije) je v primeru odvajanja nazaj neodvisen od števila neodvisnih spremenljivk. Zato bi bilo idealno, če bi lahko za poljuben problem zapisali skalarno funkcijo, katere gradient so enačbe problema. Nekateri problemi imajo tako skalarno funkcijo, imenovano tudi potencial problema, poznano. Takšni so npr. materiali, za katere lahko zapišemo elastično deformacijsko energijo (Wriggers, 2008, Bonet in Wood, 2000), kot so hiperelastični materiali in konzervativna obtežba. Nekonzervativni problemi pa potenciala nimajo in poznamo diferencialne enačbe problema in njene šibke oblike npr. elasto-plastični materiali, nekonzervativne obtežbe, kontakt s trenjem. Če enačbe sledijo iz šibke oblike diferencialne enačbe problema, uporaba odvajanja nazaj ni optimalna. V doktorski disertaciji bo prikazana rešitev tega problema. Šibko obliko je možno preoblikovati v skalarno funkcijo (t. i. psevdo-potencial), ki s pravilno definicijo izjem pri izvrednotenju gradienta omogoča optimalno uporabo AD (Korelc, 2009). Dejstvo, da je tangentna matrika definirana kot odvod enačb problema po vseh spremenljivkah problema, je še dodaten razlog uporabe avtomatskega odvajanja in načina odvajanja nazaj. Z vpeljavo psevdo-potenciala se znebimo odvečnih klicev procedure avtomatskega odvajanja, hkrati pa se postopek izpeljave reziduala in konsistentne tangentne matrike problema poenoti in avtomatizira, kar omogoča boljšo optimizacijo programske kode, ki posledično pomeni manjšo izvorno kodo elementov in hitrejši izračun matrik elementov.

Če želimo izvesti polno Newton-Raphsonovo iteracijsko metodo za povezane fizikalne probleme z neomejenim številom fizikalnih polj, se soočimo s problemom naraščanja programske kode končnega elementa z vsakim dodanim poljem. Sčasoma problem postane neobvladljiv, tako z gledišča časa, potreb-

nega za izpeljavo enačb, kot tudi z gledišča odpravljanja napak v kodi. Ta problem je treba zastaviti na tak način, da bo količina kode v posameznem elementu kar se da minimalna (Hudobivnik in Korelc, 2013). V večini problemov lahko upoštevamo zakon o aditivnosti energije oziroma dela, kar pomeni, da je možno celoten problem aditivno razdeliti na več posameznih podproblemov. Na ta način je posamezna polja možno ločiti na fizično ločene končne elemente, kjer se povezave med njimi vršijo le preko vozliščnih količin in posledično postanejo povezani problemi enostavnejši za implementacijo ter bolj obvladljivi. Rezultat posameznih elementov so polne lokalne matrike, posledično so polne tudi globalne matrike, kar nam omogoča, da povezan problem rešujemo celovito. Ločitev kode po elementih pa s stališča učinkovitosti ni trivialna za probleme, kjer so polja odvisna od notranjih spremenljivk, prav tako je pričakovati ponavljanje delov kode, kjer je delež enačb, ki je skupen več poljem, relativno velik.

Opisan pristop k reševanju inženirskih problemov bo prikazan na različnih primerih termo-hidro-mehanskih problemov, in sicer takih z enofaznim tokom (označeni s kratico THM) in z dvofaznim tokom (označeni s kratico THGM). Problemi THM se nanašajo na delno zasičen oz. zasičen porozen neizotermalen deformabilen medij z eno prosto tekočino (npr. vodo) in z dvema prostima tekočinama (npr. vodo in plinom) pri problemih THGM. Omenjeni problemi so relevantni na področjih, kot so gradbeništvo, geofizika, geotehnika, biomehanika, fizikalna kemija, medicina, ... Nabor materialov s temi lastnosti je širok: les, beton, opeka, zemljine, kamnine, biološko tkivo ... Nekaj problemov iz gradbeništva, na katerih se lahko aplicirajo problemi THM: konsolidacija zemljine, črpanje tekočin (vode, plina, olja ...), odziv stavbnega ovoja idr. Kombinacija toplote, tekoče in plinaste faze zahteva, da se opiše tudi prehod pare (izhlapevanje in utekočinjanje) med fazama. Osnove termo-hidro-mehanskih problemov so dobro poznane in predstavljene s strani mnogih avtorjev (Lewis in Schrefler, 1998, Obeid in sod., 2001, Schrefler, 1995, Coussy, 2004, Lewis in sod., 2004, Hozjan in sod., 2011, Hozjan in Svensson, 2011, Svensson in sod., 2011). Lewis in Schrefler (1998) ter de Boer (1998) podajajo sistematski zapis enačb termo-hidro-mehanskih problemov za implementacijo z metodo končnih elementov, medtem ko de Boer (1998) podaja splošnejše enačbe, vendar ne podaja konstitutivnih zakonov.

Avtorji pri obravnavi problemov THM na splošno upoštevajo majhne deformacije. Veliki pomiki in rotacije konfiguracije in visoko deformabilni materiali zahtevajo tudi izpeljavo enačb z upoštevanjem spremembe konfiguracije. Ti problemi so v literaturi v splošnem slabo obravnavani, večina primerov pa je podanih za šibko povezane probleme z mnogimi predpostavkami in omejeno aplikacijo na le dve polji. Simo in Miehe (1992) podajata primer termo-mehanskega problema, ki upošteva končne deformacije in plastifikacijo z upoštevanjem temperaturne ekspanzije in spremembo mehanskega dela v toplotno. Levenston in sod. (1998), Li in sod. (2004), Chapelle in sod. (2010), Uzuoka in Borja (2012) podajajo različne poromehanske povezane probleme z upoštevanjem končnih deformacij za zasičen in delno zasičen izotropen medij.

Kot smo omenili v prejšnjem poglavju, formulacija modelov s končnimi deformacijami, kot so nelinearni modeli, npr. Ogdenov (Ogden, 1972) in Henckyjev (Hencky, 1928, 1931, 1933) potencial, ter modeli evolucije plastičnosti (Korelc in Stupkiewicz, 2014, Simo in Miehe, 1992), zahteva uporabo tenzorskih funkcij. Izračun splošne matrike  $n \times n$  ni enostaven. Moler in Van Loan (1978) sta predstavila 19 načinov za izračun eksponenta matrike. Po 25 letih sta Moler in Van Loan (2003) dodala le nekaj izboljšav, kar se tiče učinkovitosti numeričnih metod za velike sisteme. Nobena izmed teh ne zadosti vsem našim zahtevam po učinkoviti rešitvi v zaključeni obliki, ki vrne rezultate z natančnostjo računalnika na vsem definicijskem intervalu. Najbolj splošne so metode z razvojem matrične funkcije v končno vrsto, npr. Padejevo ali potenčno, ali pa s spektralnim ali drugim razcepom matrike. Matrično funkcijo je možno določiti tudi z odvajanjem rodovne skalarne funkcije po matriki (Lu, 2004). Ta metoda je splošna in velja za poljubno matrično funkcijo dimenzije  $n \times n$ . Generirajočo funkcijo je Lu (2004) zapisal kot vsoto

pomožnih funkcij, ki operirajo nad lastnimi vrednostmi. Procedura zahteva analitično rešitev lastnih vrednosti matrike. Ker nas zanimajo problemi v mehaniki, se lahko omejimo na matrike dimenzije  $3 \times 3$ . V tem primeru je analitična rešitev za tri lastne vrednosti poljubne nesimetrične matrike znana (Goddard in Ledniczky, 1997, Korelc in Stupkiewicz, 2014). Ko so lastne vrednosti identično enake, je določitev matrične funkcije enostavna, ko pa so te skoraj enake, je zaradi slabe pogojenosti enačb potreben zahteven asimptotični razvoj rodovne funkcije. V doktorski disertaciji bomo metodo razširili na poljubne matrične funkcije.

### 1.3 Tema doktorske disertacije

Glavni namen doktorske disertacije je bil razviti učinkovit pristop k formuliranju in reševanju močno povezanih inženirskih problemov s poljubnim številom polj v standardnem simbolno-numeričnem okolju, tako da je moč izvesti polno Newton-Raphsonovo iteracijo, s čimer dosežemo kvadratično konvergenco rezultatov metode končnih elementov. Za doseg cilja sta bila uporabljena s strani prof. Korelca razviti (Korelc, 2009, 1997, 2011) izjemno napredni in odlični orodji *AceGen* in *AceFEM*, ki delujeta v okolju *Mathematica* (Wolfram Research, 2013). *AceGen* je orodje za avtomatsko izpeljavo enačb in avtomatsko generacijo programske kode. Omogoča avtomatizirano izpeljavo poljubnih konstitutivnih modelov, končnih elementov in numeričnih procedur, poleg tega pa tudi uporabo avtomatsko generiranih končnih elementov v različnih programskih okoljih Matlab<sup>©</sup>, FEAP<sup>©</sup>, ABAQUS<sup>©</sup> idr. *AceFEM* je simbolno-numerično okolje za analizo problemov po metodi končnih elementov.

Uporaba *AceGena* omogoča avtomatizacijo izpeljave enačb. Izkaže se, da je najugodnejše, če enačbe problema sledijo iz skalarne funkcije, psevdopotenciala, s klicom procedure avtomatskega odvajanja, zato je predstavljena formulacija le tega. Predstavili so tudi pristop k reševanju povezanih problemov. Povezane probleme smo rešili z novim pristopom, ki pa je formuliran z ločenimi končnimi elementi, kar je značilnost sekvenčnega pristopa. Na ta način so združene prednosti obeh pristopov, odpravljene pa so slabosti posameznega, saj tako izpeljemo več manjših lokalnih tangentnih matrik, ki nato združene tvorijo konsistentno linearizirano tangentno matriko, kar nam omogoča kvadratično konvergenco metode. Prikazano metodologijo izpeljave psevdopotenciala in formulacijo problema z ločenimi elementi smo aplicirali na različnih nivojih povezanosti termo-hidro-mehanskih povezanih problemov z eno in dvema tekočima fazama.

Ker so bile upoštevane tudi končne deformacije, je bilo treba v nemehanskih poljih upoštevati še spremembo konfiguracije. V posameznih enačbah pa nastopajo tudi matrične funkcije tenzorjev. Za izračun posamezne matrične funkcije smo poiskali ustrezno rodovno funkcijo, katere odvod po matriki nam je pripadajoča matrična funkcija. Dopolnjene so bile rodovne funkcije za eksponent matrike (Korelc in Stupkiewicz, 2014) in poiskane rodovne funkcije za logaritem, koren in potenco matrike, ki so tudi najpogosteje uporabljene matrične funkcije. Implementacija ni trivialna, saj je treba zagotoviti, da so funkcije definirane tudi v singularnih točkah, kar smo dosegli z razvojem rodovne funkcije v vrsto v okolici singularnih točk. Matrične funkcije so bile izračunane avtomatsko z uporabo avtomatskega odvajanja, ki ga omogoča orodje *AceGen*. Njihova uporaba je prikazana na različnih hiperelastičnih modelih z deformacijsko energijo, kot so Ogdenov, Henckyjev, in elasto-plastičnih, kot sta Misesov model in model Cam-Clay.

## 1.4 Zasnova doktorske disertacije

Doktorsko delo poleg uvodnega obsega naslednja okvirna poglavja in podpoglavja:

- 2. *poglavje*: Prikazane so osnove za avtomatizacijo izpeljave enačb splošnih in povezanih problemov. Podana je metodologija prevedbe poljubnega problema v psevdo-potencialno obliko.
- 3. *poglavje*: Predstavljena je izpeljava enačb potrebne za reševanje termo-hidro-mehanskih povezanih problemov. Podani so potrebni konstitutivni zakoni in enačbe kinematike. Izpeljane so lokalne diferencialne enačbe posameznega problema in izpeljane šibke oblike diferencialnih enačb.
- 4. *poglavje*: V poglavju je predstavljena formulacija končnih elementov s primeri iz kode. Izračun matrik končnih elementov sledi iz psevdo-potencialne, ki smo jo izpeljali iz šibkih oblik diferencialnih enačb.
- 5. *poglavje*: Celotno poglavje je namenjeno izpeljavi matričnih funkcij in analizi izpeljanih matričnih funkcij v zaključeni obliki z različnimi alternativnimi formulacijami.
  - 5.1 *poglavje*: Izpeljava matričnih funkcij v zaključeni obliki
  - 5.2 *poglavje*: Izpeljava alternativnih formulacij matričnih funkcij
  - 5.3 *poglavje*: Ocena učinkovitosti in točnosti matričnih funkcij
  - 5.4 *poglavje*: Aplikacija matričnih funkcij na nelinearnih mehanskih primerih
  - 5.5 *poglavje*: Ocena učinkovitosti in natančnosti na računskih primerih reševanja različnih mehanskih problemov
- 6. *poglavje*: Študija učinkovitosti ločenih in enovitih implementacij ter sekvenčnega in enovitega reševanja na primeru različnih termo-hidro-mehanskih povezanih problemov.
- 7. *poglavje*: Zaključki disertacije.
- 8. *poglavje*: Povzetek vsebine doktorske disertacije.
- 9. *poglavje*: Povzetek vsebine doktorske disertacije v angleščini.

## 1.5 Oznake in notacija

Na straneh, ki sledijo, je podan nabor standardnih oznak in znakov, uporabljenih v doktorski disertaciji. Spodnje preglednice so sestavljene iz treh stolpcov. V prvem stolpcu je oznaka v tekstu, v drugem stolpcu je podana oznaka v simbolni kodi *AceGen* oz. *Mathematica*, če je uporabljena, in v tretjem je podana razlaga oznake. Po potrebi bodo ob prvi omembi oznake v besedilu tudi dodatno pojasnjene.

### General

$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \text{tr}(\mathbf{A}\mathbf{B}^T)$		skalarni produkt tenzorjev drugega reda
$(\partial a / \partial \mathbf{B})_{ij} = \partial a / \partial B_{ij}$		odvod skalarne funkcije po tenzorju
$(\partial \mathbf{a} / \partial \mathbf{B})_{ijk} = \partial a_i / \partial B_{jk}$		odvod vektorske funkcije po tenzorju
$(\partial \mathbf{A} / \partial \mathbf{B})_{ijkl} = \partial A_{ij} / \partial B_{kl}$		odvod tenzorske funkcije po tenzorju
$(\mathbf{A}^T)_{ij} = A_{ji}$		transponiranje tenzorja drugega reda
$\mathbf{M} = \prod_{e=1}^{n_e} \mathbf{M}_e$		$\mathbf{A}$ predstavlja operator sestavljanja globalnih matrik $\mathbf{M}$ iz prispevkov posameznih elementov $\mathbf{M}_e$

### Računski odvod

$\frac{\hat{\delta}(f(\mathbf{a}))}{\hat{\delta}(\mathbf{a})}$	SMSD[f[a], a]	računski odvod funkcije $f(\mathbf{a})$ po argumentu $\mathbf{a}$
--	---------------	---



$\widehat{D}_{\mathbf{b}}\mathbf{a}$   $D_{\mathbf{y}}D_{\mathbf{x}}\mathbf{I}\mathbf{O}$  matrika neodvisnih spremenljivk, ki vsebuje odvode vektorja spremenljivk  $\mathbf{a}$  po spremenljivkah vektorja  $\mathbf{b}$

### Količine na globalnem nivoju problema rešenega po MKE

$n_e$  število vseh elementov  
 $n_{tn}$  število vseh vozlišč  
 $n_{tp}$  število vseh neznank problema  
 $n_{\text{dim}}$   $\text{ndim}$  število prostorskih dimenzij  
 $n_{\text{step}}$  celotno število časovnih oz. obtežnih korakov  
 $n$  indeks zadnjega uspešno skonvergirane koraka  
 $n + 1$  indeks trenutnega časovnega koraka ( $\mathbf{p} \equiv \mathbf{p}_{n+1}$ )  
 $n_{tg}$  celotno število integracijskih točk problema  
 $B$  telo (domena problema)  
 $B^h = \bigcup_{e=1}^{n_e} \Omega_e$  diskretizirano telo (domena)  
 $\partial B^h$  rob diskretiziranega telesa  
 $\mathbf{p}$  množica globalnih spremenljivk z neznano vrednostjo ( $\mathbf{p} = \mathbf{p}_{n+1} = \cup \hat{\mathbf{p}}$ )  
 $\mathbf{p}_n$  množica globalnih spremenljivk z neznano vrednostjo pri času  $t_n$   
 $\hat{\mathbf{p}}$  po vozliščih strukturirana urejena množica neznank problema  
 $\mathbf{K}, \mathbf{R}$  globalna tangentna matrika in rezidual  
 $t$   $\tau$  parameter časa  
 $\lambda$   $\lambda$  parameter (množitelj nivoja obtežbe)

### Količine na nivoju elementa

$\Omega_e$  domena elementa  
 $\partial\Omega_e$  rob elementa  
 $n_{en}$   $\text{nen}$  število vozlišč elementa  
 $n_{ten}$   $\text{nten}$  število topoloških vozlišč elementa  
 $n_p$   $\text{np}$  celotno število vozliščnih neznank problema elementa  
 $\mathbf{R}_e$   $\mathbb{R}e1$  rezidual elementa  
 $\mathbf{K}_e$   $\mathbb{K}e$  tangentna matrika elementa  
 $\mathbf{p}_e$   $\text{pe}$  množica vozliščnih neznank problema pri času  $t_{n+1}$   
 $\mathbf{p}_{en}$   $\text{pen}$  množica vozliščnih neznank problema prejšnjega koraka pri času  $t_{n+1}$   
 $n_{pI}$   $\text{npIDOF}$  število vozliščnih neznank in  $I$ -tega vozlišča  
 $\hat{\mathbf{p}}_e$   $\text{peIO}$  po vozliščih elementa strukturirana urejena množica neznank problema pri času  $t_{n+1}$   
 $\hat{\mathbf{p}}_{en}$   $\text{penIO}$  po vozliščih elementa strukturirana urejena množica neznank problema pri času  $t_n$

### Koordinatni sistem in oblikovne funkcije

$\mathbf{X}$   $\mathbb{X}$  materialne koordinate  
 $\Xi$   $\Xi$  referenčne koordinate  
 $\mathbf{X}$   $\mathbb{X}\mathbf{I}\mathbf{O}$  po vozliščih elementa strukturirana urejena množica materialnih koordinat  
 $\mathbf{J}_e$   $\mathbb{J}e$  Jacobijeva matrika  $\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \Xi}$  transformacije

$J_e$	Jed	determinanta Jacobijeve matrike
$t_\zeta$	t $\zeta$	debelina v smeri $\zeta$ (za formulacije 2D primerov in plošč/lupin)
$\mathbf{N}$	Nh	množica oblikovnih funkcij elementa

#### Količine na nivoju integracijske točke $g$

$n_g$	ng	število integracijskih točk elementa
$I_g$	Ig	indeks integracijske točke
$w_{gp}$	wgp	utež integracijske točke
$\mathbf{R}_g$	$\mathbb{R}g$	prispevek k rezidualu v integracijski točki
$\mathbf{K}_g$	$\mathbb{K}g$	prispevek k tangentni matriki v integracijski točki

#### Lokalni povezani problemi na nivoju integracijske točke elementa

$\mathbf{Q}_g$	$\mathbb{Q}g$	lokalni sistem enačb $\mathbf{Q}_g(\mathbf{p}_e, \mathbf{h}_g)$ v integracijski točki
$\mathbf{A}_g$	$\mathbb{A}g$	lokalna tangentna matrika
$\mathbf{r}_g$	rg	množica implicitnih spremenljivk $\mathbf{Q}_g = \mathbf{Q}_g(\mathbf{r}_g(\mathbf{p}_e), \mathbf{h}_g)$
$\frac{D\mathbf{h}_g}{D\mathbf{r}_g}$	DhDr	matrika implicitnih vrednosti

#### Povezani problemi

$\phi^i$		poljubno skalarno polje
$\phi$		množica vseh skalarnih polj $\phi^i$ povezanega problema
$\phi^{(K)}$		izbrana množica polj $\{\phi_i : i \in \mathbf{G}_K\}$ , katerih pripadajoče enačbe so izpeljane znotraj izvorne kode končnega elementa $K$
$\check{\phi}^{(K)}$		množica vseh polj $\{\phi_j : j \in \check{\mathbf{G}}_K\}$ , ki so potrebna za izpeljavo izvorne kode končnega elementa $K$
$\mathbf{G}^{(K)}$		množica indeksov polj $\mathbf{G}_K \subseteq \{1, \dots, n_c\}$ , katerih enačbe so izpeljane znotraj izvorne kode končnega elementa $K$
$\check{\mathbf{G}}^{(K)}$		množica indeksov vseh polj $\check{\mathbf{G}}_K \subseteq \{1, \dots, n_c\}$ , ki so potrebna za izpeljavo izvorne kode končnega elementa $K$
$n_c$		dolžina vektorskega polja $\phi$ povezanega problema
$n_K$		število izbranih množic $\phi^{(K)}$
$n_G^{(K)}$		število skalarnih polj v množici $\phi^{(K)}$
$\check{n}_G^{(K)}$		število skalarnih polj v množici $\check{\phi}^{(K)}$
$\mathbf{p}_e^{(K)}$	$\mathbb{P}p$	množica primarnih vozliščnih neznank polj $\phi^{(K)}$
$\check{\mathbf{p}}_e^{(K)}$	$\mathbb{P}e$	množica vseh vozliščnih neznank polj $\check{\phi}^{(K)}$
$\delta\mathbf{p}_e$ or $\eta_e$ .		variacija vozliščnih neznank elementa

#### Termo-hidro-mehanski problemi

$\mathbf{u}$	$\mathbb{u}IO$	po vozliščih strukturirana urejena množica vozliščnih pomikov
$\mathbf{T}$	$\mathbb{T}IO$	po vozliščih strukturirana urejena množica vozliščnih temperatur
$\mathbf{p}\pi$	$\mathbb{P}\pi IO$	po vozliščih strukturirana urejena množica vozliščnih pritiskov faze $\pi$
$\mathbf{u}$	$\mathbb{u}$	pomik pri času $t_{n+1}$
$T$	$\mathbb{T}$	temperatura pri času $t_{n+1}$
$p_\pi$	$\mathbb{P}\pi$	pritisek faze $\pi$ pri času $t_{n+1}$
$\phi_\pi$		količina $\phi$ , ki se nanaša na fazo $\pi \in \{s, l, g, v, d\}$ , $s$ – trdna snov, $l$ – tekočina, $g$ – plin, $v$ – para, $d$ – suh zrak.



$S_\pi$	$S\pi$	zasičenost tekoče faze $\pi$
$\mathbf{q}_\pi$	$\mathbb{Q}\pi$	Darcyjev tok tekoče faze $\pi$
$\mathbf{q}_T$	$\mathbb{Q}T$	toplotni tok
$\mathbf{J}_\alpha^\pi$	$\mathbb{J}_{\alpha\pi}$	difuzno-disperzni tok. $\pi$ je difuzna faza in $\alpha$ faza v kateri pride do difuzije
$n$	$\mathbf{n}$	poroznost
$\rho_\pi$	$\rho\pi$	gostota faze $\pi$
0	0	indeks, ki se nanaša na stanje pri začetni konfiguraciji pri času $t = 0$

### Mehanika kontinuuma

$\varphi$		preslikava konfiguracije telesa $\varphi : B \rightarrow \mathbb{E}^3$
$\varphi(B)$		trenutna konfiguracija telesa $B$
$\mathbf{x}$	$\mathbb{x}$	trenutne (prostorske) koordinate $\mathbf{x} = \varphi(\mathbf{X}, t)$
$\mathbf{H}$	$\mathbb{H}$	gradient pomikov $\partial\mathbf{u}/\partial\mathbf{X}$
$\mathbf{F}$	$\mathbb{F}$	deformacijski gradient $\mathbf{F} = \text{Grad } \varphi(\mathbf{X}, t)$
$\hat{\mathbf{F}}$	$\mathbb{F}\text{ISO}$	izohorični/deviatorični del deformacijskega gradienta
$J_F$	$\mathbb{J}\mathbb{F}$	determinanta $\mathbf{F}$
$\mathbf{C}$	$\mathbb{C}t$	levi Cauchy-Greenov deformacijski tenzor
$\hat{\mathbf{C}}$	$\mathbb{C}\text{ISO}$	izohorični/deviatorični del levega Cauchy-Greenov deformacijskega tenzorja
$\mathbf{b}$	$\mathbb{b}$	desni Cauchy-Greenov deformacijski tenzor
$W$	$\mathbb{W}$	elastična deformacijska energija na enoto volumna
$\widehat{W}$	$\mathbb{W}\text{ISO}$	deviatorično/isohorični del elastične deformacijske energije $W$
$U$	$\mathbb{U}$	volumski del elastične deformacijske energije $W$
$U_T$	$\mathbb{U}T$	deformacijska energija, ki je posledica temperaturnih sprememb v materialu
$P$	$\mathbb{P}$	deformacijska energija, ki je posledica pornih tlakov
$W$	$\mathbb{W}$	elastična deformacijska energija na enoto volumna
$W^P$	$\mathbb{W}$	psevdo-potencial
$\bar{\mathbf{b}}$	$\mathbb{b}\mathbb{b}$	sila na enoto mase začetne konfiguracije
$\bar{\mathbf{t}}$	$\mathbb{t}\mathbb{b}$	obtežba na enoto površine začetne konfiguracije
$\mathbf{E}$	$\mathbb{E}g$	Green-Lagrangeov deformacijski tenzor
$\boldsymbol{\tau}$	$\mathbb{T}$	Kirchhoffov napetostni tenzor
$\mathbf{S}$	$\mathbb{S}$	2. Piola-Kirchhoffov napetostni tenzor
$\boldsymbol{\sigma}$	$\mathbb{S}$	napetostni tenzor majhnih deformacij (tudi Cauchyjev napetostni tenzor)
$\mathbf{s}$	$\mathbb{S}$	deviatorični napetostni tenzor
$\boldsymbol{\varepsilon}$	$\mathbb{E}$	deformacijski tenzor majhnih deformacij
$\mathbf{e}$	$\mathbb{E}$	Almansijev deformacijski tenzor
$\mathcal{F}$	$\mathbb{F}$	funkcija tečenja
$\dot{\gamma}$	$\mathbb{G}g$	akumulirana plastična deformacija
$\mathbf{n}$	$\mathbb{n}$	smer plastičnega tečenja

“Ta stran je namenoma prazna.”

## 2 NA AVTOMATSKEM ODVAJANJU BAZIRANA FORMULACIJA POVEZANIH PROBLEMOV

V tem poglavju bo predstavljen pristop k avtomatizaciji reševanja povezanih problemov. Za izpeljavo enačb in kode povezanih problemov bo uporabljeno simbolno-numerično orodje *AceGen* (Korelc, 2011), ki je del okolja *Mathematica* (Wolfram Research, 2013). Orodje temelji na uporabi avtomatskega odvajanja in sprotne optimizacije programske kode, s čimer je možno izpeljavo enačb problema avtomatizirati (Griewank in Walther, 2008, Korelc, 2009). Implementacija procedure avtomatskega odvajanja v *AceGen*-u kombinira transformacijo kode-v-kodo (angl. *code-to-code*) z avtomatskim odvajanjem v načinu odvajanja nazaj (angl. *backward or adjoint mode*), za detajle glej (Griewank in Walther, 2008). Ta kombinacija vodi do izjemno računalniško učinkovitih programskih kod. Cena odvajanja nazaj je sorazmerna s številom odvajanih funkcij in neodvisna od števila neodvisnih spremenljivk, medtem ko je pri klasičnem odvajanju t.j. odvajanju naprej cena sorazmerna s številom neodvisnih spremenljivk. Rezultat procedure avtomatskega odvajanja bomo imenovali računski odvod, proceduro avtomatskega odvajanja pa bomo, če se držimo oznak po Korelc (2009), označili z

$$\frac{\hat{\delta}f(\mathbf{a})}{\hat{\delta}\mathbf{a}} \equiv \text{SMSD}[f[\mathbf{a}], \mathbf{a}]. \quad (2.1)$$

Izraz na desni strani enačbe je klic procedure AD okolja *AceGen* v kodi *Mathematica*. Računski odvod funkcije  $f(\mathbf{a})$  po  $\mathbf{a}$  se zapiše kot  $\frac{\hat{\delta}f(\mathbf{a})}{\hat{\delta}\mathbf{a}}$  in predstavlja analitični odvod algoritma za izračun funkcije  $f(\mathbf{a})$ , ker se z uporabo verižnega pravila upoštevajo vse računske operacije, ki so se izvršile med izvedenjem  $f(\mathbf{a})$ . Z namenom, da vzpostavimo relacijo med različnimi odvajanji (parcialni, totalni, smerni odvodi, ...) in rezultatom avtomatskega odvajanja, uvedemo še definicijo izjem pri odvajanju. Zapis odvoda funkcije  $f(\mathbf{a}, \mathbf{b}(\mathbf{a}))$  po  $\mathbf{a}$

$$\left. \frac{\hat{\delta}f(\mathbf{a}, \mathbf{b}(\mathbf{a}))}{\hat{\delta}\mathbf{a}} \right|_{\frac{D\mathbf{b}}{D\mathbf{a}}=\mathbf{0}} \equiv \text{SMSD}[f[\mathbf{a}, \mathbf{b}], \mathbf{a}, \text{"Constants"} \rightarrow \mathbf{b}] \quad (2.2)$$

pomeni, da se med avtomatskim odvajanjem odvisnost  $\mathbf{b}(\mathbf{a})$  od  $\mathbf{a}$  zanemari. Nasprotno pa lahko manjkajočo algoritmično odvisnost  $\mathbf{b}$  od  $\mathbf{a}$  podamo sami

$$\left. \frac{\hat{\delta}f(\mathbf{a}, \mathbf{b})}{\hat{\delta}\mathbf{a}} \right|_{\frac{D\mathbf{b}}{D\mathbf{a}}=\mathbf{M}} \equiv \text{SMSD}[f[\mathbf{a}, \mathbf{b}], \mathbf{a}, \text{"Dependency"} \rightarrow \{\mathbf{b}, \mathbf{a}, \mathbb{M}\}], \quad (2.3)$$

oziroma zamenjamo obstoječo s poljubno  $\mathbf{M}$ :

$$\left. \frac{\hat{\delta}f(\mathbf{a}, \mathbf{b}(\mathbf{a}))}{\hat{\delta}\mathbf{a}} \right|_{\frac{D\mathbf{b}}{D\mathbf{a}}=\mathbf{M}} \equiv \text{SMSD}[f[\mathbf{a}, \mathbf{b}], \mathbf{a}, \text{"Dependency"} \rightarrow \{\mathbf{b}, \mathbf{a}, \mathbb{M}\}]. \quad (2.4)$$

Bolj podroben opis avtomatskega odvajanja sta že podala Korelc (2009) in Melink (2014). Formulacija, temelječa na uporabi avtomatskega odvajanja, in ustreznih izjem je označena s kratico ADB (angl. *automatic differentiation based*).

Kot smo že predstavili v uvodnem poglavju, je za reševanje poljubnega problema z MKE potrebno po-

znati šibko obliko diferencialne enačbe, ki opiše problem. Šibke oblike diferencialnih enačb problemov so s stališča avtomatizacije in posledično sprotne optimizacije kode neugodne, saj zahtevajo več klicev procedure avtomatskega odvajanja, kar onemogoči učinkovito sprotno optimizacijo kode. Za najbolj učinkovito formulacijo povezanih problemov z uporabo avtomatskega odvajanja nazaj se izkaže, če gradient problema sledi iz skalarnega potenciala. Za nekatere primere tak potencial obstaja, izpeljava enačb takega primera je dana v poglavju 2.1.1. Če problema nima potenciala je alternativno možna transformacija šibke oblike v t.i. psevdo-potencialno obliko. En klic procedure avtomatskega odvajanja skalarne psevdo-potenciala ob ustrezno definiranih izjemah pri odvajanju vrne ustrezne enačbe problema. Transformacija splošne šibke oblike v psevdo-potencial in formulacija z avtomatskim odvajanjem je dana v poglavju 2.1.2.

## 2.1 Avtomatizacija izpeljave enačb

Definirajmo enačbe poljubnega nelinearnega problema kot

$$\mathbf{R}(\mathbf{p}) = \mathbf{0}. \quad (2.5)$$

Pri tem je rešitev sistema enačb vektor vseh neznanih spremenljivk  $\mathbf{p}$ . Za implicitno reševanje poljubnega nelinearnega problema po metodi končnih elementov se običajno uporablja Newton-Raphsonova iteracijska metoda. Z razvojem enačbe (2.5) v Taylorjevo vrsto v okolici poljubnega približka  $\mathbf{p}_n \neq \mathbf{p}$  dobimo razvoj:

$$\mathbf{R}(\mathbf{p}) = \mathbf{R}(\mathbf{p}_n) + \frac{\partial \mathbf{R}(\mathbf{p}_n)}{\partial \mathbf{p}} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_n) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathbf{R}(\mathbf{p}_n)}{\partial \mathbf{p}^2} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_n)^2 \dots = \mathbf{0}. \quad (2.6)$$

Če vzamemo linearni del enačbe (2.6), sledi linearen sistem enačb, katerega rešitev je vektor  $\mathbf{p}_{n+1}$ . Ta je zgolj približek točne rešitve enačbe (2.5), t.j.  $\mathbf{p}_{n+1} \approx \mathbf{p}$ :

$$\frac{\partial \mathbf{R}(\mathbf{p}_n)}{\partial \mathbf{p}} (\mathbf{p}_{n+1} - \mathbf{p}_n) + \mathbf{R}(\mathbf{p}_n) = \mathbf{0} \quad \rightarrow \quad \mathbf{K} \Delta \mathbf{p} + \mathbf{R} = \mathbf{0}. \quad (2.7)$$

Po Newton-Raphsonovi iteracijski metodi enačbo (2.5) rešujemo iterativno. V vsaki iteraciji je potrebno rešiti linearni sistem enačb (2.7), kjer je rešitev sistema nov vektor približkov  $\mathbf{p}_{n+1} = \mathbf{p}_n + \Delta \mathbf{p}$ , ki je vhodni podatek za naslednjo iteracijo. Postopek ponavljamo, dokler  $\Delta \mathbf{p}$  ne doseže predpisane tolerance  $\Delta \mathbf{p} < \varepsilon_{NR}$ . Pri tem je  $\mathbf{R}$  rezidual in  $\mathbf{K} = \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{p}}$  je gradient enačb problema oziroma tangentna matrika. Iterativno reševanje tega sistema je dano v algoritmu na sliki (2.1) za primer časovno odvisnega problema  $\mathbf{R} = \mathbf{R}(\mathbf{p}, t)$ . Prikazana formulacija vodi do kvadratične konvergence procedure. V naslednjih poglavjih bo prikazana izpeljava osnovnih matrik  $\mathbf{R}$  in  $\mathbf{K}$ , ki sledijo iz potenciala ali psevdo-potenciala poljubnega problema.

### 2.1.1 Formulacija ADB problema s potencialom

Naj bo rešitev problema definirana kot minimum potenciala  $\Pi(\mathbf{p}) = \int_{\Omega} W(\mathbf{p}) d\Omega$ , kjer je  $\mathbf{p} = \{p_1, p_2, \dots, p_{n_{tp}}\}^T$  vektor neznanih parametrov problema. Variacija potenciala  $\Pi(\mathbf{p})$  je definirana kot

$$\delta \Pi(\mathbf{p}) = \frac{\partial \Pi(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \delta \mathbf{p} = \int_{\Omega} \frac{\partial W(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} d\Omega \delta \mathbf{p} = 0. \quad (2.8)$$

---

```

Input:  $\Delta t_0; \bar{t}$ ; // Začetni časovni inkrement in končni čas
 $t_n \leftarrow 0; \Delta t \leftarrow \Delta t_0; \mathbf{p}_n \leftarrow \mathbf{0}$ ;
repeat
   $t \leftarrow t_n + \Delta t; n_{it} \leftarrow 0$ ;
  begin začetek iterativne shema za en korak
   $\mathbf{p} \leftarrow \mathbf{p}_n$ ; // začetni približek je rešitev prejšnjega  $\mathbf{p}_n$  koraka
  repeat
    Izračunaj  $\mathbf{R}$  in  $\mathbf{K}$  po metodi končnih elementov;
    reši sistem  $\mathbf{K}\Delta\mathbf{p} + \mathbf{R} = \mathbf{0}$  za neznan  $\Delta\mathbf{p}$ ;
     $\mathbf{p} \leftarrow \mathbf{p} + \Delta\mathbf{p}; n_{it} \leftarrow n_{it} + 1$ ;
  until  $\|\mathbf{R}\| < \varepsilon_{NR} \wedge \|\Delta\mathbf{p}\| < \varepsilon_{NR} \vee n_{it} > n_{max}$ ;
  if  $\|\mathbf{R}\| < \varepsilon_{NR} \wedge \|\Delta\mathbf{p}\| < \varepsilon_{NR}$  then
     $\mathbf{p}_n \leftarrow \mathbf{p}; t_n \leftarrow t$ ;
    posodobi  $\Delta t$ ; // določi nov časovni korak
  else
    zmanjšaj korak  $\Delta t$ ; // Vrnemo se na stanje koraka  $n$ , ponovimo
    shemo z manjšim  $\Delta t$ 
  end if
until  $t \leq \bar{t}$ ;
Result:  $\mathbf{p}$ ; // rezultati zadnjega koraka

```

---

Slika 2.1: Newton Raphsonova iterativna shema z adaptivnimi časovnimi koraki  
 Figure 2.1: Newton-Raphson iteration scheme for adaptive time step

---

kjer je  $\delta\mathbf{p} = \{\delta p_1, \delta p_2, \dots, \delta p_{n_{tp}}\}^T$  vektor variacij neznanih parametrov. Enačba (2.8) vodi do niza nelinearnih algebrskih enačb oblike

$$\mathbf{R} = \int_{\Omega} \frac{\partial W(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} d\Omega = \mathbf{0}. \quad (2.9)$$

Iz enačbe (2.9) sledi formulacija ADB problema s potencialom, kjer je parcialni odvod zamenjan z računskim odvodom:

$$\mathbf{R} = \int_{\Omega} \frac{\hat{\delta}W(\mathbf{p})}{\hat{\delta}\mathbf{p}} d\Omega = \mathbf{0}. \quad (2.10)$$

Po standardni formulaciji končnih elementov integracijo po domeni problema  $\Omega$  izrazimo z integracijo po domeni posameznih končnih elementov  $\Omega_e$ . Rezidual  $\mathbf{R}$  nato določimo s sestavljanjem prispevkov posameznih končnih elementov  $\mathbf{R}_e$ . Prispevek reziduala posameznega končnega elementa  $\mathbf{R}_e$  h globalnem vektorju reziduala  $\mathbf{R}$  lahko določimo z numerično integracijo, ponavadi uporabimo Gaussovo numerično integracijo

$$\mathbf{R}_e = \int_{\Omega_e} \frac{\hat{\delta}W(\mathbf{p}_e)}{\hat{\delta}\mathbf{p}_e} d\Omega_e \approx \sum_{g=1}^{n_g} w_{gp} \mathbf{R}_g, \quad (2.11)$$

kjer je  $w_{gp}$  standardna Gaussova utež v posamezni Gaussovi točki,  $n_g$  je število Gaussovih točk znotraj končnega elementa,  $\mathbf{p}_e$  vektor vozliščnih neznank elementa, ter  $\mathbf{R}_g$  prispevek posamezne Gaussove točke

k rezidualu elementa, ki se ga določi po enačbi

$$\mathbf{R}_g = \frac{\delta W(\mathbf{p}_e)}{\hat{\delta \mathbf{p}}_e}. \quad (2.12)$$

Pripadajoča formulacija ADB tangentne matrike v Gaussovi točki oz. elementu je

$$\mathbf{K}_e = \frac{\hat{\delta \mathbf{R}}_e}{\hat{\delta \mathbf{p}}_e} = \sum_{g=1}^{n_g} w_g \mathbf{K}_g, \quad \mathbf{K}_g = \frac{\hat{\delta \mathbf{R}}_g}{\hat{\delta \mathbf{p}}_e}. \quad (2.13)$$

Splošni obliki potenciala in matrik (2.12) in (2.13) lahko z uporabo orodja *AceGen* simbolno neposredno zapišemo v programu *Mathematica*. Spodaj je dan izsek enostavne simbolne kode, ki prikazuje izpeljavo reziduala in tangentne matrike z znanim potencialom z uporabo dveh klicev avtomatskega odvajanja  $\frac{\hat{\delta \square}}{\hat{\delta \mathbf{p}}_e} \equiv \text{SMSD}[\square, \mathbf{p}_e]$ :

```

pe=SMSReal[Table[p$$[i],{i,1,np}]];
W=fW[pe];
Rg=SMSD[W,pe];
Kg=SMSD[Rg,pe];

```

(2.14)

Pri tem ukaz `SMSD` predstavlja klic procedure avtomatskega odvajanja. Globalni matriki problema se določita z ustreznim sestavljanjem  $n_e$  rezidualov in tangentnih matrik elementov:

$$\mathbf{R} = \mathbf{A} \mathbf{R}_e, \quad \mathbf{K} = \mathbf{A} \mathbf{K}_e, \quad (2.15)$$

kjer  $\mathbf{A}$  predstavlja operator sestavljanja globalnih vektorjev in matrik iz posameznih prispevkov elementov.

### 2.1.2 Formulacija ADB splošne šibke oblike enačb problema

Za reševanje fizikalnih problemov imamo vedno na voljo diferencialno enačbo s katero opišemo fizikalni problem in njeno šibko obliko. Kadar potencial problema ni poznan se za reševanje po MKE uporablja šibka oblika problema. Naj bo posplošena šibka oblika definirana z

$$\int_{\Omega} \delta \mathbf{a}(\mathbf{p}) \cdot \mathbf{b}(\mathbf{p}) d\Omega + \dots = 0, \quad (2.16)$$

pri tem sta  $\mathbf{a}$  in  $\mathbf{b}$  tenzorja vmesnih in neodvisnih spremenljivk poljubnega reda,  $\delta \mathbf{a}$  pa smerni odvod variacije tenzorja  $\mathbf{a}$ . Ker je  $\delta \mathbf{a}$  fiktivna količina, na njej procedure avtomatskega odvajanja ni možno neposredno uporabiti, zato je šibko obliko najprej potrebno zapisati v diskretizirani obliki. Naj bo  $\mathbf{p}$  vektor neznanih spremenljivk problema in  $\delta \mathbf{a} = D\mathbf{a}(\mathbf{p})\delta \mathbf{p} = \frac{\partial \mathbf{a}(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \delta \mathbf{p}$ . Diskretizirana oblika posplošene šibke oblike je nato

$$\int_{\Omega} \delta \mathbf{a}(\mathbf{p}) \cdot \mathbf{b}(\mathbf{p}) d\Omega + \dots = \sum_{i=1}^{n_{tp}} \left( \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{a}(\mathbf{p})}{\partial p_i} \cdot \mathbf{b}(\mathbf{p}) d\Omega \right) \delta p_i + \dots = 0. \quad (2.17)$$

Iz (2.17) sledi vektor  $n_{t_p}$  algebraičnih enačb

$$\mathbf{R} = \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{a}(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \cdot \mathbf{b}(\mathbf{p}) d\Omega + \dots = \mathbf{0}. \quad (2.18)$$

Z zamenjavo parcialnega odvoda v (2.18) z računskim odvodom, dobimo formulacijo ADB šibke oblike

$$\mathbf{R} = \int_{\Omega} \frac{\hat{\delta} \mathbf{a}(\mathbf{p})}{\hat{\delta} \mathbf{p}} \cdot \mathbf{b}(\mathbf{p}) d\Omega + \dots = \mathbf{0}. \quad (2.19)$$

Tenzorje  $\frac{\hat{\delta} \mathbf{a}(\mathbf{p})}{\hat{\delta} \mathbf{p}}$  moramo za učinkovit izračun skalarnih produktov  $\frac{\hat{\delta} \mathbf{a}(\mathbf{p})}{\hat{\delta} \mathbf{p}} \cdot \mathbf{b}(\mathbf{p})$  izračunati v zaključeni obliki. Ta operacija lahko pri velikem številu komponent tenzorja  $\mathbf{a}$  vodi do nekontrolirane rasti dobljenih izrazov (Korelc, 2009). Prav tako izraz  $\frac{\hat{\delta} \mathbf{a}(\mathbf{p})}{\hat{\delta} \mathbf{p}}$  ni primeren za odvajanje nazaj saj numerična cena avtomatskega odvajanja linearno narašča s številom komponent tenzorja  $\mathbf{b}$ . Iz omenjenih razlogov optimizacija kode ni učinkovita. Formulacijo (2.19) je potrebno transformirati v ustrezno obliko tako, da bo odvajanih čim manj skalarnih funkcij. Da to dosežemo, uvedemo skalarni produkt tenzorjev  $\mathbf{a}$  in  $\mathbf{b}$ , t.i. psevdo-potencial oblike

$$W^P(\mathbf{p}) = \mathbf{a}(\mathbf{p}) \cdot \mathbf{b}(\mathbf{p}). \quad (2.20)$$

Pri tem je potrebno pri klicu procedure avtomatskega odvajanja dodatno definirati take izjeme pri odvajanju, da procedura odvajanja vrne pravilne enačbe problema. Alternativen zapis formulacije ADB diskretizirane šibke oblike se glasi:

$$\mathbf{R} = \int_{\Omega} \frac{\hat{\delta}(\mathbf{a}(\mathbf{p}) \cdot \mathbf{b}(\mathbf{p}))}{\hat{\delta} \mathbf{p}} \Bigg|_{\frac{D\mathbf{b}}{D\mathbf{p}}=\mathbf{0}} d\Omega + \dots = \int_{\Omega} \frac{\hat{\delta} W^P(\mathbf{p})}{\hat{\delta} \mathbf{p}} \Bigg|_{\frac{D\mathbf{b}}{D\mathbf{p}}=\mathbf{0}} d\Omega + \dots = \mathbf{0}. \quad (2.21)$$

V enačbo (2.21) vpeljana izjema pri odvajanju  $\frac{D\mathbf{b}}{D\mathbf{p}} = \mathbf{0}$  zagotovi, da avtomatsko odvajanje vrne enačbe problema, ki odgovarjajo šibki obliki (2.19). Formulacija (2.21) je veliko bolj učinkovita od diskretizirane šibke oblike (2.19), saj zahteva manj klicev odvajanja, posledično je kreiranje kode hitrejše in učinkovitost ustvarjene kode zaradi boljše sprotne optimizacije večja. Z diskretizacijo domene  $\Omega$  in uporabo numerične integracije na nivoju končnih elementov se rezidual (2.19) ali (2.21) zapiše v Gaussovi točki elementa:

$$\mathbf{R}_g = \mathbf{a}(\mathbf{p}_e) \cdot \frac{\hat{\delta} \mathbf{b}_e(\mathbf{p}_e)}{\hat{\delta} \mathbf{p}_e} = \frac{\hat{\delta} W^P(\mathbf{p}_e)}{\hat{\delta} \mathbf{p}_e} \Bigg|_{\frac{D\mathbf{b}}{D\mathbf{p}_e}=\mathbf{0}}. \quad (2.22)$$

Pripadajoča formulacija tangentne matrike elementa in globalne tangentne matrike je določena z enačbama (2.13) in (2.15). Spodaj je dan izsek enostavne simbolne kode, ki prikazuje izpeljavo rezidualov (2.22) in tangentne matrike (2.13) iz diskretizirane šibke oblike diferencialne enačbe (2.19), kjer sta  $\mathbf{a}$  in  $\delta \mathbf{b}$  vektorja, v splošnem pa sta lahko tudi tenzorja ali skalarja:

```

pe=SMSReal[Table[p$$[i],{i,1,np}]];
a=fa[pe];
b=fb[pe];
delta=SMSD[a,pe];
Rg=delta.b;
Kg=SMSD[Rg,pe];

```

(2.23)

Izsek kode alternativne formulacije s psevdo-potencialom (2.22) je:

```

pe=SMSReal[Table[p$$[i],{i,1,np}]];
a=fa[pe];
b=SMSFreeze[fb[pe]];
WP=a.lb;
Rg=SMSD[WP,pe,"Constant"→b];
Kg=SMSD[Rg,pe];

```

(2.24)

V kodi *AceGen* (2.24) je potrebno vektor  $\mathbf{b}$  zaradi pravilnosti izpeljave kode definirati kot pomožno spremenljivko, kar storimo npr. z ukazom `SMSFreeze` (Korelc, 2011). Na ta način se pomožna spremenljivka  $\mathbf{b}$  lahko obravnava kot neodvisna spremenljivka pri odvajanju in je v tem primeru pri proceduri odvajanja obravnavana kot vektor konstant.

## 2.2 Avtomatizacija implementacije povezanih problemov

Vzemimo povezan problem, ki je definiran z  $n_c$  neznanih skalarnih polj  $\phi^i$ , ki skupaj tvorijo vektor  $\phi = \{\phi^i : i \in \{1, \dots, n_c\}\} = \{\phi^1, \dots, \phi^{n_c}\}$ . Po metodi končnih elementov se polja  $\phi^i$  interpolirajo po domeni elementa z uporabo interpolacijskih funkcij  $N_I^i$ , kar rezultira k približku  $\phi_h^i$  točne vrednosti  $\phi^i$ :

$$\phi^i(\mathbf{X}) \approx \phi_h^i(\mathbf{X}) = \sum_{I=1}^{n_{en}^i} N_I^i(\mathbf{X}) p_{eI}^i = \mathbf{N}^i \cdot \mathbf{p}_e^i, \quad (2.25)$$

$$\mathbf{N}^i = \{N_1^i, \dots, N_I^i, \dots, N_{n_{en}^i}^i\}^T, \quad (2.26)$$

$$\mathbf{p}_e^i = \{p_{e1}^i, \dots, p_{eI}^i, \dots, p_{en_{en}^i}^i\}^T, \quad (2.27)$$

kjer sta  $p_{eI}^i$  vozliščna neznanka in  $N_I^i(\mathbf{X})$  oblikovna funkcija  $i$ -tega polja in  $I$ -tega vozlišča v končnem elementu  $e$ .  $n_{en}^i$  je število vozlišč polja  $\phi^i$  v elementu.  $\mathbf{p}_e^i$  je vektor  $n_{en}^i$  neznank polja  $i$  v elementu in  $\mathbf{N}^i$  vektor  $n_{en}^i$  oblikovnih funkcij polja  $i$ . V zgornji formulaciji je vsako polje lahko interpolirano na način, ki ni v povezavi oz. enak interpolaciji ostalih polj.  $\mathbf{X}$  je krajevni vektor glede na začetno konfiguracijo znotraj končnega elementa. Z zgoščevanjem mreže končnih elementov se rezultat približuje analitični rešitvi močnih enačb, katera v splošnem za poljuben problem in geometrijo ni poznana.

Skupno število vseh končnih elementov je  $n_e$ . Z upoštevanjem, da je problem definiran z  $n_c$  neznanimi polji, lahko ustrezno definiramo skupno število vozlišč v elementu  $n_{en}$  in število vseh neznank elementa  $n_p$ , kot vsota  $n_c$  prispevkov posameznih polj  $\phi^i$ :

$$n_{en} = \sum_{i=1}^{n_c} n_{en}^i, \quad n_p = \sum_{i=1}^{n_c} n_p^i = \sum_{i=1}^{n_c} \sum_{I=1}^{n_{en}^i} n_{pI}^i, \quad (2.28)$$

pri čemer so  $n_p^i$  število vseh neznank,  $n_{en}^i$  število vozlišč v elementu ter  $n_{pI}^i = 1$  število prostostnih stopenj  $I$ -tega vozlišča uporabljenih za diskretizacijo  $i$ -tega skalarnega polja  $\phi_i$ . Posledično imata vektor spremenljivk  $\mathbf{p}_e$  in vektor reziduala  $e$ -tega elementa  $\mathbf{R}_e$   $n_p$  komponent, tangenta matrika  $\mathbf{K}_e$  pa ima  $n_p^2$  komponent. Velikost simbolno ustvarjene kode elementa narašča s kvadratom števila neznank problema, kar postane pri velikem številu povezanih polj neobvladljivo. Kompleksnost problema lahko reduciramo na več načinov.

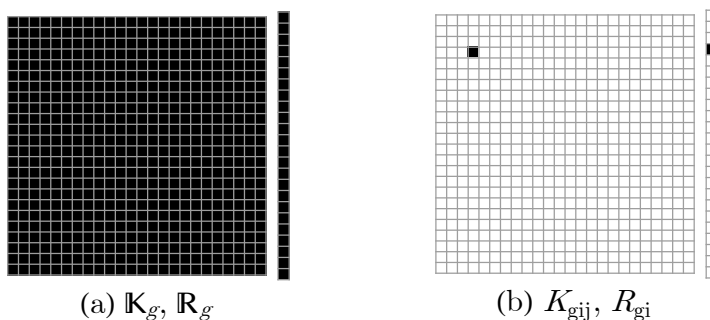


## 2.2.1 Karakteristična formula

Namesto eksplicitnih izrazov za vse komponente  $\mathbf{R}_e$  in  $\mathbf{K}_e$  lahko naredimo programsko kodo samo za karakteristično  $i$ -to komponento reziduala  $R_{g,i}$  in karakteristično  $i, j$ -to komponento tangentne matrike  $K_{g,i,j}$  v vsaki Gaussovi točki  $g$ , glej preglednico 2.1. Shemi eksplicitnih izrazov in karakterističnih enačb pa sta dani na sliki 2.2. Možnih formulacij je več in vplivajo na hitrost izpeljevanja kode, velikost kode in učinkovitost kode.

Preglednica 2.1: Lastnosti različnih implementacij elementa  
Table 2.1: Characteristics of different implementations of element

enačba matrik	Oznaka Izraza	zanka $\mathbf{R}$	zanka $\mathbf{K}$	Št. enačb $\mathbf{R}$	Št. enačb $\mathbf{K}$
<b>a</b> eksplicitna enačba v Gaussovi točki	$\mathbf{R}_g$ $\mathbf{K}_g$	×	×	$n_p$	$n_p \times n_p$
<b>b</b> karakteristična enačba po parametrih	$R_{g,i}$ $K_{g,i,j}$	✓	✓	1	1



Slika 2.2: Lega eksplicitne in karakteristične formule tangentne matrike in reziduala  
Figure 2.2: Schematic position of explicit and characteristic formulas of tangent matrix and residual

## 2.2.2 Aditivna razdelitev enostavnega povezanega problema

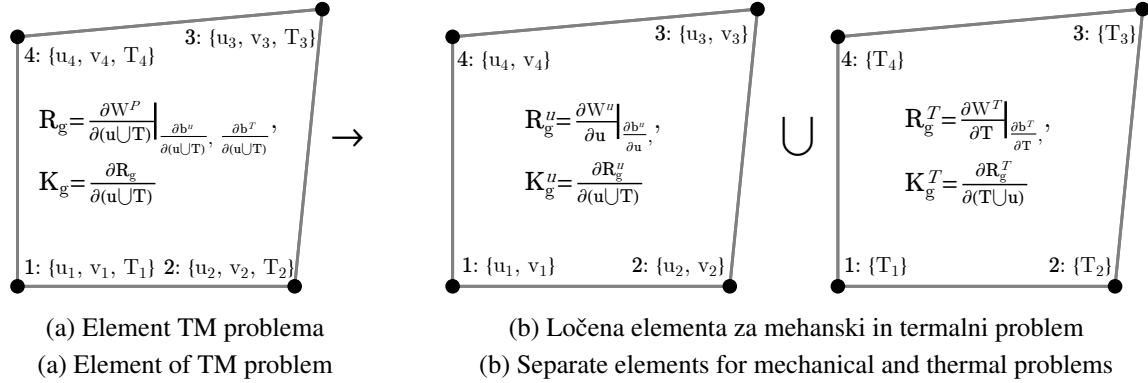
Kompleksnost problema lahko zmanjšamo tudi z aditivno razdelitvijo problema na več podproblemov. Za prikaz definirajmo enostaven termo-mehanski problem (TM). Pri tem izberemo  $n_c = 4$  neznanih skalarnih polj  $\phi = \{u, v, w, T\}$ . Celoten psevdo potencial je definiran kot vsota potencialov mehanskega  $W^u$  in toplotnega  $W^T$  dela:

$$W^P(\mathbf{u}, T) = W^u(\mathbf{u}, T) + W^T(T, \mathbf{u}), \quad W^u = \mathbf{a}^u(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{b}^u(\mathbf{u}, T), \quad W^T = \mathbf{a}^T(T) \cdot \mathbf{b}^T(T, \mathbf{u}), \quad (2.29)$$

kjer sta  $\mathbf{u} = \{u, v, w\}$  in  $T$  vektor pomikov in temperatura interpolirana po enačbi (2.25). Rezidual in tangentno matriko izpeljemo znotraj kode končnega elementa po enačbah (2.22) in (2.13), kot je prikazano na sliki 2.3a. Pri tem pomeni  $()^T$  količino, ki se nanaša na temperaturni problem. Operacija transportiranja je označena s pokončnim T:  $()^T$ .

Ker pa je psevdo-potencial  $W^P$  aditivna količina, se lahko poslužimo možnosti, da izpeljemo enačbe mehanskega in toplotnega problema v dveh fizično ločenih kodah končnega elementa (slika 2.3b).  $\mathbf{u} = \{u_1, v_1, \dots, u_4, v_4\}$  in  $\mathbf{T} = \{T_1, \dots, T_4\}$  sta vektorja vozliščnih pomikov in temperatur. Pseudo-potencial in izjeme pri odvajanju morajo biti definirane tako, da velja enakost  $\mathbf{R}_g \equiv \mathbf{R}_g^u \cup \mathbf{R}_g^T$  in  $\mathbf{K}_g \equiv \mathbf{K}_g^u \cup \mathbf{K}_g^T$ . Na ta način se izognemo naraščanju izvirne kode posameznega elementa z dodajanjem novih polj, hkrati postane posamezen problem bolj obvladljiv. To je ugodno tudi s stališča

splošnosti kode končnih elementov, saj lahko kodo toplotnega dela, kombiniramo z izvorno kodo poljubnega materialnega modela, ki mora zajemati tudi energijo, ki nastane zaradi temperaturnega raztezka, če ne sta problema neodvisna. Vse povezave med elementi se izvršijo preko vozliščnih neznank, do katerih imata oba elementa dostop.



Slika 2.3: Primer dveh implementacij termo-mehanskega problema  
Figure 2.3: Example of two implementations of thermo-mechanical problem

### 2.2.3 Aditivna razdelitev splošnega problema

Ker je psevdo-potencial problema vsota psevdo-potencialov podproblemov, lahko enačbe, ki pripadajo različnim poljem ali skupin polj, zapišemo v ločenih izvornih kodah. Rezidualne in tangentne matrike elementov, izpeljani v fizično ločenih končnih elementih, združimo pri sestavljanju globalnega reziduala  $\mathbf{R}$  in globalne tangentne matrike  $\mathbf{K}$ . V prejšnjem poglavju 2.2.2 smo predstavili razdelitev termo-mehanskega problema na dva podproblema in motivacijo za razdelitev, v splošnem lahko izberemo poljubno število vseh polj  $n_c$ , in podproblemov izpeljanih v  $n_K$  ločenih kodah končnih elementov. V ta namen definirajmo podmnožico, označeno  $\mathbf{G}_K$ , ki definira podmnožico  $\phi^{(K)}$  z  $n_G^{(K)}$  skalarnimi polji  $\phi^i$

$$\mathbf{G}_K \subseteq \{1, \dots, n_c\}, \quad \phi^{(K)} = \{\phi_i : i \in \mathbf{G}_K\}, \quad (2.30)$$

katere pripadajoče enačbe bodo formulirane v  $K$ -tem končnem elementu.  $n_G^{(K)}$  je dolžina množice  $\mathbf{G}_K$ , navzgor omejena z  $n_c$  t.j. velja  $1 \leq n_G^{(K)} \leq n_c$ .

Neznanke  $K$ -te izvorne kode so zapisane v vozliščih elementa. Zato definirajmo  $\hat{\mathbf{p}}_e^{(K)}$ , ki je strukturirana množica vozliščnih neznank polj  $\phi^{(K)}$  končnega elementa (2.27).

$$\hat{\mathbf{p}}_e^{(K)} = \{\mathbf{p}_e^i : i \in \mathbf{G}_K\}^T = \{\mathbf{p}_{eI}^{(K)} : I = 1, \dots, n_{en}^{(K)}\}. \quad (2.31)$$

Pri tem je  $\mathbf{p}_{eI}^{(K)}$  vektor neznank dolžine  $n_{pI}^{(K)}$  v vozlišču  $I$ , kjer je  $n_{pI}^{(K)}$  število prostostnih stopenj vozlišča  $I$  elementa  $K$ . V splošnem velja  $n_{pI}^{(K)} \leq n_G^{(K)}$ , v primeru, da je v vseh vozliščih enako število prostostnih stopenj, pa velja enakost  $n_{pI}^{(K)} = n_G^{(K)}$ . V primeru, da je izbrana podmnožica s skalarnim poljem  $G_K = \{i\}$  je  $n_G^{(K)} = n_{pI}^{(K)} = 1$  in  $\hat{\mathbf{p}}_e^{(K)} = \{\mathbf{p}_e^i\}^T$ . Unija strukturirane množice  $\hat{\mathbf{p}}_e^{(K)}$  je enaka vektorju vseh neznank  $\mathbf{p}_e^{(K)}$   $K$ -tega elementa:

$$\mathbf{p}_e^{(K)} = \bigcup \hat{\mathbf{p}}_e^{(K)} = \bigcup_{I=1}^{n_{en}^{(K)}} \mathbf{p}_{eI}^{(K)}, \quad (2.32)$$

Število vseh neznank  $n_p^{(K)}$  in vozlišč  $n_{en}^{(K)}$  elementa  $K$ -te skupine se zapiše z vsoto, analogno enačbi (2.28):

$$n_{en}^{(K)} = \sum_{i \in \mathbf{G}_K} n_{en}^i, \quad n_p^{(K)} = \sum_{i \in \mathbf{G}_K} n_p^i. \quad (2.33)$$

Ker obravnavamo povezane probleme, so enačbe  $K$ -tega elementa, katerih rešitev so neznanke  $\mathbf{p}_e^{(K)}$ , lahko odvisne tudi od ostalih polj  $\phi \setminus \phi^{(K)}$ , ki so potrebna za formulacijo povezanih delov enačb. V ta namen dodatno definirajmo podmnožico, označeno  $\check{\mathbf{G}}_K$ , dolžine  $\check{n}_G^{(K)}$ :

$$\check{\mathbf{G}}_K \subseteq \{1, \dots, n_c\}, \quad \check{\phi}^{(K)} = \{\phi_j : j \in \check{\mathbf{G}}_K\}. \quad (2.34)$$

Ta določa množico vseh polj  $\check{\phi}^{(K)}$ , ki so potrebna za formulacijo izvorne kode  $K$ -tega elementa, ki poleg primarnih polj  $\mathbf{G}_K$  lahko vključuje še morebitna dodatna sekundarna polja  $\check{\mathbf{G}}_K \setminus \mathbf{G}_K$ , ki so fizikalno povezana s polji  $\mathbf{G}_K$ . Torej velja  $\mathbf{G}_K \subseteq \check{\mathbf{G}}_K$  in  $\phi^{(K)} \subseteq \check{\phi}^{(K)} \subseteq \phi$ . Dolžina podmnožice  $\check{\mathbf{G}}_K$  je  $\check{n}_G^{(K)}$  in velja  $n_G \leq \check{n}_G^{(K)} \leq n_c$ . Polja  $\phi^{(K)}$  so imenovana primarna polja in polja  $\check{\phi}^{(K)} \setminus \phi^{(K)}$  sekundarna polja.

Problem definiramo tako, da ima izvorna koda  $K$  dostop do primarnih vozlišč sekundarnih polj  $\check{\mathbf{G}}_K \setminus \mathbf{G}_K$ . Zato definirajmo  $\hat{\mathbf{p}}_e^{(K)}$ , ki je strukturirana množica vozliščnih neznank vseh polj  $\check{\phi}^{(K)}$  kode elementa  $K$

$$\hat{\mathbf{p}}_e^{(K)} = \{\mathbf{p}_e^i : i \in \check{\mathbf{G}}_K\}^T = \{\check{\mathbf{p}}_{eI}^{(K)} : I = 1, \dots, \check{n}_{en}^{(K)}\}. \quad (2.35)$$

Pri tem je v vsakem vozlišču zapisan vektor neznank  $\check{\mathbf{p}}_{eI}^{(K)}$ . Vektor vseh neznank potrebnih za izpeljavo enačb  $K$ -tega elementa je nato

$$\check{\mathbf{p}}_e^{(K)} = \bigcup \hat{\mathbf{p}}_e^{(K)}. \quad (2.36)$$

Število vseh neznank  $\check{n}_p^{(K)}$  elementa  $K$ -te podskupine se določijo po enačbi (2.33), z vsoto števil neznank  $n_p^i$ , kjer je  $i \in \check{\mathbf{G}}_K$ . Enako po enačbi (2.33) definiramo število vseh vozlišč  $\check{n}_{en}^{(K)}$ , do katerih ima element  $K$ -te podskupine dostop.

V skladu s formulacijo ADB šibke oblike enačb problema prikazano v poglavju (2.1.2) definiramo še psevdo-potencial  $K$ -tega elementa z naslednjo enačbo

$$W_g^{(K)}(\check{\mathbf{p}}_e^{(K)}) = \sum_{i \in \mathbf{G}_K} W_g^{P,i}(\check{\mathbf{p}}_e^{(K)}) = \sum_{i \in \mathbf{G}_K} \sum_m \mathbf{a}_m^i \cdot \mathbf{b}_m^i, \quad (2.37)$$

kjer  $m$  teče po številu členov šibke oblike diferencialne enačbe, ki pripada  $i$ -temu skalarnemu polju. Psevdo potencial  $W_g^{(K)}$  uporabimo za izpeljavo reziduala  $\mathbf{R}_e^{(K)}$  in tangentne matrike  $\mathbf{K}_e^{(K)}$  končnega elementa  $e$  z izvorno kodo  $K$ . Rezidual in tangentna matrika v  $g$ -ti integracijski točki elementa  $K$  sta dana z enačbama

$$\mathbf{R}_g^{(K)} = \left. \frac{\delta W_g^{(K)}(\check{\mathbf{p}}_e^{(K)})}{\delta \check{\mathbf{p}}_e^{(K)}} \right|_{\frac{D\mathbf{a}_m^{(l)}}{D\check{\mathbf{p}}_e^{(K)}} = \mathbf{0}, \forall l \in \mathbf{G}_K \wedge \forall m} \quad \text{in} \quad \mathbf{K}_g^{(K)} = \frac{\delta \mathbf{R}_g^{(K)}}{\delta \check{\mathbf{p}}_e^{(K)}}, \quad (2.38)$$

iz česar sledi, da ima,  $\mathbf{R}_g^{(K)}$  dimenzijo  $n_p^{(K)}$  in  $\mathbf{K}_g^{(K)}$  dimenzijo  $n_p^{(K)} \times \check{n}_p^{(K)}$ . Posledično  $\mathbf{K}_g^{(K)}$  ni nujno kvadratna matrika. Algoritem za izpeljavo  $K$ -te izvorne kode je dan na sliki 2.4.

Ker smo povezan problem aditivno razdelili na posamezne podprobleme  $\mathbf{G}_K$ , je za pravilen opis celo-

---

```

Re(K) = 0, Ke(K) = 0;
for g := 1 to ng step 1 do ;                                     // Zanka po integracijskih točkah elementa

    Jg := det (  $\frac{\delta X}{\delta \Xi}$  );                                     // Izračun Jacobijeve determinante
    for each l ∈ GK do ;                                         // Zanka po poljih GK

        WgP,i := ∑m { Wmi(pe) if Wmi exists ; // Definicija delnih psevdopotencialov
                       ami(pe) · bmi(pe) else           // oz. potencialov

    end for
    Wg(K) = ∑l ∈ GK WgP,i; // Definicija celotnega K-tega psevdopotenciala.
    Rg(K) =  $\frac{\delta W_g^{(K)}(p_e)}{\delta p_e^{(K)}} \Big|_{\frac{D b_m^i}{D p_e^{(K)}} = 0, \forall l \in G_K \wedge \forall m}$  ; // Odvajamo po vseh primarnih spremenljivkah pe(K)
    // K-te skupine ob ustreznih izjemah odvajanja
    Kg(K) =  $\frac{\delta R_g^{(K)}}{\delta p_e^{(K)}}$  ; // Odvajamo po vseh povezanih spremenljivkah
    // pe(K) K-te skupine povezanega problema
    Re(K) += wgJgRg(K), Ke(K) += wgJgKg(K) ; // Prispevek Gaussove točke
    // k matrikam elementa

end for

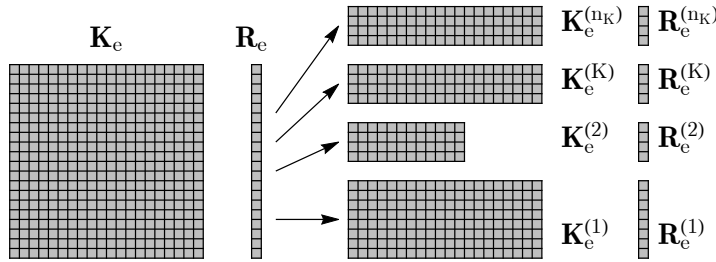
```

---

Slika 2.4: Formulacija ADB K-tega elementa  
Figure 2.4: ADB formulation of K-th element

---

tnega povezanega problem potrebno izpeljati  $n_K$  izvornih kod končnih elementov  $K$ . Shema vseh matrik aditivnega razcepa je dana na sliki 2.5. Po enačbi (2.15) sta celoten rezidual in tangentna matrika pove-



Slika 2.5: Shema strukture matrik  $R_e^{(K)}$  in  $K_e^{(K)}$  vseh  $n_K$  podproblemov  
Figure 2.5: Schematic structure of matrices  $R_e^{(K)}$  and  $K_e^{(K)}$  of all  $n_K$  subproblems

zanega problema definirana s sestavljanjem matrik vseh  $n_e$  elementov, pri čemer sta  $R_e$  in  $K_e$  matriki določeni z numerično integracijo matrik (2.38) po enačbah (2.11) in (2.13).

$$n_e = \sum_{K=1}^{n_K} n_e^{(K)}, \quad \mathbf{R} = \mathbf{A}_{e=1}^{n_e} \mathbf{R}_e^{(K)}, \quad \mathbf{K} = \mathbf{A}_{e=1}^{n_e} \mathbf{K}_e^{(K)} \quad (2.39)$$

Število vseh končnih elementov  $n_e$  je vsota števil končnih elementov  $n_e^{(K)}$  definiranih z izvorno kodo  $K$ . Dimenzija reziduala  $\mathbf{R}$  je enaka številu vseh neznank problema  $n_{tp}$  in dimenzija tangentne matrike je  $\mathbf{K}$  enaka  $n_{tp} \times n_{tp}$ . Število vseh neznank problema  $n_{tp}$  in število vseh vozlišč  $n_{tn}$  sta definirana kot:

$$n_{tn} = \sum \left( \bigcup_{K=1}^{n_K} n_{tn}^{(K)} \right), \quad n_{tp} = \sum \left( \bigcup_{K=1}^{n_K} n_{tp}^{(K)} \right), \quad (2.40)$$

kjer smo dopustili tudi možnost, da so enaka neznana polja lahko primarna polja znotraj različnih podproblemov, t.j. pogoj  $\phi^{(K)} \cap \phi^{(k)} = \{\}$ ,  $k \neq K$  ni nujno izpolnjen.

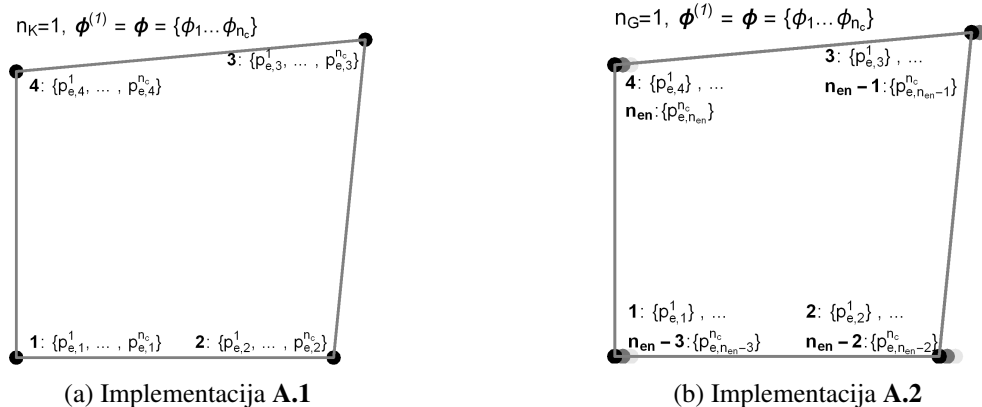
## 2.2.4 Implementacije kode končnih elementov

Na splošno lahko formulacije razdelimo na tiste z vsemi enačbami znotraj enega elementa  $n_K = 1$  in na tiste, kjer se enačbe za vsako polje formulirajo v ločenih elementih  $n_K = n_c$ , sicer pa so možne vse kombinacije  $1 \leq n_K \leq n_c$ , kjer formuliramo skupine polj v svojem elementu. Število vozlišč elementa polja  $K$  je odvisno od izbrane implementacije kode končnega elementa in obravnavanega povezanega problema. Tudi z izbiro  $n_K > 1$  je možno enačbe izpeljati znotraj enega končnega elementa. Nekaj tipičnih implementacij kode je opisano spodaj, v poglavju 2.2.4 bodo omenjene implementacije prikazane na primeru termo-hidro-mehanskega povezanega problema.

**A.1)** je standardni enovit pristop, kjer so vse enačbe povezanega problema izpeljane znotraj ene kode končnega elementa. Izbrana je ena  $n_K = 1$  podmnožica  $\mathbf{G}_1$ , ki definira množico skalarnih polj  $\check{\phi}^{(1)} = \phi^{(1)} = \phi$ . Vektor strukturiranih vozliščnih neznank končnega elementa ima naslednjo strukturo

$$\hat{\mathbf{p}}_e^{(1)} = \{\mathbf{p}_{eI}^{(1)} : I = 1, \dots, n_{en}^{(1)}\} = \{\mathbf{p}_{e1}^{(1)}, \dots, \mathbf{p}_{en}^{(1)}\}, \quad \mathbf{p}_e^{(1)} = \check{\mathbf{p}}_e^{(1)} = \bigcup \hat{\mathbf{p}}_e^{(1)}. \quad (2.41)$$

Izbira  $n_K = 1$  narekuje izpeljavo celotnega reziduala  $\mathbf{R}_g = \mathbf{R}_g^{(1)}$  in ene polne tangentne matrike  $\mathbf{K}_g = \mathbf{K}_g^{(1)}$  znotraj ene kode končnega elementa. Matriki sledita iz skupnega potenciala  $W_g^P = W_g^{(1)} = \sum_{i=1}^{n_c} W_g^i(\mathbf{p}_e)$  in celotnega vektorja spremenljivk elementa  $\mathbf{p}_e = \mathbf{p}_e^{(1)}$  po enačbi (2.38). Izpeljan končni element ima  $n_{en} = n_{en}^{(1)}$  vozlišč z  $n_{pI} = n_{pI}^{(1)} = n_c$  prostostnimi stopnjami, glej sliko 2.6a.



Slika 2.6: Celovit pristop k implementaciji povezanih problemov -2D štirikotnik  
Figure 2.6: Unified approach to implementation of coupled problems -2D Quadrilateral

**A.2)** je enovit pristop, kjer so vse enačbe povezanega problema izpeljane znotraj ene kode končnega elementa, kjer za vsako izbrano skupino polj  $\phi^{(K)}$  definiramo svoje vozlišče. Posledično se implementacija **A.2** razlikuje od implementacije **A.1** le v organizaciji prostostnih stopenj in vozlišč elementa (glej sliko 2.6). Pri tej implementaciji izberemo  $n_K$  podmnožic. Podmnožica  $\phi^{(K)}$  ima pripadajoč vektor neznank definiran v svojem vozlišču, posledično je potrebno v končnem elementu definirati  $n_{en} = \sum_{K=1}^{n_K} n_{en}^{(K)}$  vozlišč. Veljati mora pogoj  $\sum_{K=1}^{n_K} n_G^{(K)} = n_c$ , kar pomeni, da so podmnožice tuje  $\phi^{(K)}$  t.j.  $\phi^{(K)} \cap \phi^{(k)} = \{\}, k \neq K$ . Strukturirana množica vozliščnih

neznank  $\hat{\mathbf{p}}_e$  je unija  $n_K$  strukturiranih množica  $\hat{\mathbf{p}}_e^K$ :

$$\hat{\mathbf{p}}_e = \bigcup_K \hat{\mathbf{p}}_e^{(K)} = \bigcup_K \{\mathbf{p}_{eI}^{(K)} : I = 1, \dots, n_{en}^{(K)}\}, \quad \mathbf{p}_e = \check{\mathbf{p}}_e = \bigcup_K \hat{\mathbf{p}}_e. \quad (2.42)$$

Implementacija **A.2** omogoča s praktičnega stališča enostavnejšo zasnovo inženirskih problemov glede na **A.1**, saj omogoča veliko večjo fleksibilnost glede izbire elementov, na račun večjega števila vozlišč. Zato lahko elemente z različnimi izvornimi kodami, ki imajo enako strukturo neznank vozlišča  $\mathbf{p}_{eI}^{(K)}$  in enako ključno besedo poimenovanja vozlišča t.i. "NodeID" (več je opisano v poglavju 4.1.2), avtomatsko povežemo med seboj ne glede na število ostalih skupin polj znotraj elementov. "NodeID" je unikaten za vsako polje. Na primer: za pomik je definiran kot "D" (preglednica (4.1) v poglavju 4.1). Rezultat implementacije **A.2** sta en rezidual  $\mathbf{R}_e$  in ena polna tangenta matrika  $\mathbf{K}_e$  elementa s strukturo po poljih:

$$\mathbf{R}_e = \left\{ \begin{array}{c} \mathbf{R}_e^{(1)} \\ \vdots \\ \mathbf{R}_e^{(K)} \end{array} \right\} \text{ in } \mathbf{K}_e = \left[ \begin{array}{c} \mathbf{K}_e^{(1)} \\ \vdots \\ \mathbf{K}_e^{(K)} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{ccc} \mathbf{K}_e^{(1,1)} & \dots & \mathbf{K}_e^{(1,K)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{K}_e^{(K,1)} & \dots & \mathbf{K}_e^{(K,K)} \end{array} \right]. \quad (2.43)$$

**B)** je ločena implementacija, kjer enačbe skupin polj izpeljemo v  $n_K$  ločenih končnih elementih, glej sliko 2.7. Strukturirana množica primarnih spremenljivk po vozliščih elementov je organizirana takole:

$$\hat{\mathbf{p}}_e^{(K)} = \{\mathbf{p}_{eI}^{(K)} : I = 1, \dots, n_{en}^{(K)}\}, \quad K = 1, \dots, n_K. \quad (2.44)$$

Dolžina vektorja  $\hat{\mathbf{p}}_e^{(K)}$  je enaka  $n_{en}^{(K)}$ , ki je številu vozlišč elementa  $K$ . Vektorji primarnih  $\mathbf{p}_e^{(K)}$  in vseh spremenljivk  $\check{\mathbf{p}}_e^{(K)}$  v elementu  $K$  so unija vektorjev (2.44) po ustrezni množici:

$$\mathbf{p}_e^{(K)} = \bigcup_K \hat{\mathbf{p}}_e^{(K)}, \quad \check{\mathbf{p}}_e^{(K)} = \bigcup_K \hat{\mathbf{p}}_e^{(K)}, \quad K = 1, \dots, n_K. \quad (2.45)$$

Dolžina vektorja primarnih neznank  $K$ -tega polja je  $n_p^{(K)}$  in vektorja vseh neznank  $\check{n}_p^{(K)}$ .  $K$ -ti element ima dostop do sekundarnih spremenljivk  $\check{\mathbf{p}}_e^{(K)} \setminus \mathbf{p}_e^{(K)}$ , ki pripadajo poljem, katerih enačbe so poračunane v ločenem elementu. Ob predpostavki, da so vsa polja med seboj dvosmerno povezana, je strukturirana množica vseh vozlišč, do katerih ima element  $K$  dostop, enaka uniji vseh :

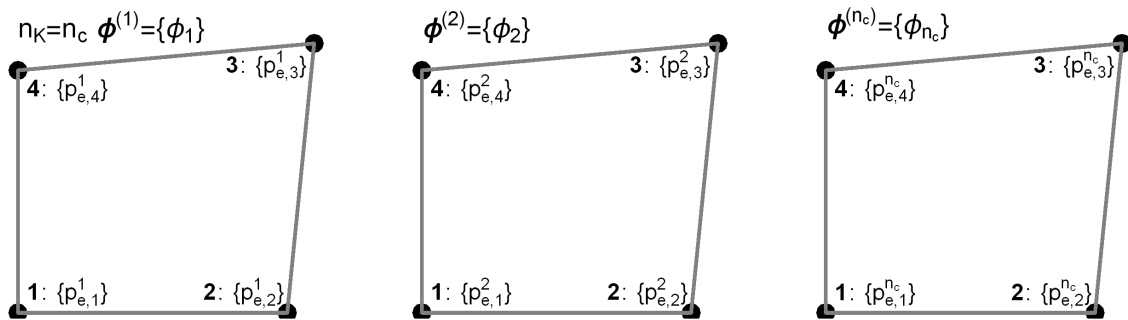
$$\hat{\mathbf{p}}_e^{(K)} = \bigcup_{K=1}^{n_K} \hat{\mathbf{p}}_e^{(K)}, \quad \bigcup_K \hat{\mathbf{p}}_e^{(K)} \equiv \bigcup_K \hat{\mathbf{p}}_e^{(k)}, \quad k = 1, \dots, n_K, \quad K = 1, \dots, n_K. \quad (2.46)$$

Osnova za izpeljavo matrik je  $n_K$  psevdopotencialov  $W_g^{(K)}$ . Pri ločeni implementaciji je v  $K$ -tem elementu potrebno definirati  $\check{n}_{en}^{(K)}$  vozlišč. Z unijo vozlišč  $n_K$  elementov dobimo skupaj  $n_{en} = \sum_{K \in (\cup_{k=1}^{n_K} \mathbf{G}_k)} n_{en}^{(K)}$  vozlišč, kar je enako kot pri enoviti implementaciji **A.2**. Unija polj je tu potrebna, ker pogoj  $\phi^{(K)} \cap \phi^{(k)} = \{\}, k \neq K$  ni zahtevan. Ker imamo  $n_K$  rezidualov in  $n_K$  tangentskih matrik moramo v vseh elementih skupaj izpeljati najmanj  $2 \times n_K$  splošnih formul za izračun reziduala  $R_{g_i}^{(K)}$  in tangentske matrike  $K_{g_i,j}^{(K)}$ , ki izračunajo  $2 \times n_K$  lokalnih matrik  $\mathbf{R}_e^{(K)}$  in  $\mathbf{K}_e^{(K)}$ . Dimenzija reziduala  $\mathbf{R}_e^{(K)}$  je enaka dimenziji vseh primarnih spremenljivk  $n_p^{(K)}$ , tangentska matrika  $\mathbf{R}_e^{(K)}$  je lahko nekvadratna in ima  $n_p^{(K)} \times \check{n}_p^{(K)}$ . Struktura matrik vseh  $n_K$  izvornih kod je

enaka strukturi, ki je rezultat enovite implementacije **A.2** (glej sliko 2.5):

$$\mathbf{R}_e^{\mathbf{A}.2} \equiv \sum \left\{ \begin{array}{c} \mathbf{R}_e^{(1)} \\ \vdots \\ \mathbf{R}_e^{(n_K)} \end{array} \right\} \quad \mathbf{K}_e^{\mathbf{A}.2} \equiv \sum \left[ \begin{array}{c} \mathbf{K}_e^{(1)} \\ \vdots \\ \mathbf{K}_e^{(n_K)} \end{array} \right] = \sum \left[ \begin{array}{ccc} \mathbf{K}_e^{(1,1)} & \dots & \mathbf{K}_e^{(1,n_K)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{K}_e^{(n_K,1)} & \dots & \mathbf{K}_e^{(n_K,n_K)} \end{array} \right]. \quad (2.47)$$

Pri tem so lahko posamezni povezani deli  $K^{(K,k)}$ ,  $K \neq k$  tangentnih matrik enaki  $\mathbf{0}$ . Operator  $\sum$  v enačbi (2.47) pomeni vsoto komponent enakih prostostnih stopenj. Splošne formule  $R_{g,i}^{(K)}$  in  $K_{g,i,j}^{(K)}$  so lahko enostavnejše od splošnih formul  $R_{g,j}$  in  $K_{g,i,j}$  enovitih implementacij, hkrati je izpeljava formul hitrejša. Izračun matrik posameznega elementa je hitrejši kot za formulaciji **A**, vendar pa, ker je potrebno nekatere količine večkrat izračunati za vsako  $K$ -to kodo (t.j. skupaj  $n_K$ -krat več elementov kot za implementaciji **A**), lahko pričakujemo daljši čas izračuna matrik celotnega problema.



Slika 2.7: Ločen in sekvenčni pristop k implementaciji povezanih problemov -2D štirikotnik  
Figure 2.7: Separate and staggered approach to implementation of coupled problems -2D Quadrilateral

- C) implementacija je analogna ločeni implementaciji **B** (slika 2.7), s to razliko, da ne izpeljemo polne tangentne matrike, temveč le dele brez mešanih odvodov po enačbi (2.38), ki jih dobimo, če v enačbi upoštevamo  $\check{\mathbf{p}}_e^{(K)} = \mathbf{p}_e^{(K)}$ .

$$\mathbf{K}_e^{(K,K)} = \mathbf{K}_g^{(K)} = \frac{\hat{\delta} \mathbf{R}_g^{(K)}}{\hat{\delta} \mathbf{p}_e^{(K)}}. \quad (2.48)$$

Implementacija narekuje izpeljavo  $n_K$  rezidualov  $\mathbf{R}_e^{(K)}$  in kvadratnih tangentnih matrik  $\mathbf{K}_e^{(K)}$  dimenzije  $n_p^{(K)} \times n_p^{(K)}$ . Primerjava strukture matrik vseh  $n_K$  izvornih kod implementacije **C** s strukturo enovite implementacije **A.2** je:

$$\mathbf{R}_e^{\mathbf{A}.2} \equiv \sum \left\{ \begin{array}{c} \mathbf{R}_e^{(1)} \\ \vdots \\ \mathbf{R}_e^{(n_K)} \end{array} \right\} \quad \mathbf{K}_e^{\mathbf{A}.2} \neq \sum \left[ \begin{array}{ccc} \mathbf{K}_e^{(1,1)} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \ddots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_e^{(n_K,n_K)} \end{array} \right]. \quad (2.49)$$

Splošne formule  $K_{g,i,j}^{(K,K)}$  so enostavnejše od splošnih formul ostalih implementacij, hkrati je izpeljava formul hitrejša. Izračun matrik posameznega elementa je hitrejši kot za formulacijo **B**. Ker pa rezultat ni polna matrika, lahko pričakujemo večje skupno število iteracij.



### 2.2.5 Reševanje povezanih problemov

K reševanju povezanih problemov lahko pristopimo na več načinov. Najbolj neposreden pristop je enovit (angl. *unified*) pristop. Ta narekuje reševanje celotnega sistema  $\mathbf{K}\Delta\mathbf{p} + \mathbf{R} = \mathbf{0}$ , kjer morata biti rezidual  $\mathbf{R}$  in tangentna matrika sistema  $\mathbf{K}$  konsistentno linearizirana z vsemi potrebnimi mešanimi oz. povezanimi deli. S tem je omogočena kvadratična konvergenca rešitve  $\mathbf{p}$  v standardni iteracijski proceduri (algoritem na sliki 2.1). Taki matriki dobimo z enovitimi implementacijami  $\mathbf{A}$  in ločeno  $\mathbf{B}$ , s to razliko, da enoviti implementaciji zahtevata izpeljavo polnega reziduala in tangentne matrike v enem končnem elementu  $\mathbf{R}_e$ ,  $\mathbf{K}_e$ , medtem ko ločena formulacija  $\mathbf{B}$  zahteva izpeljavo  $n_K$  delnih rezidualov in ne kvadratnih tangentnih matrik  $\mathbf{R}_e^{(K)}$ ,  $\mathbf{K}_e^{(K)}$  v  $n_K$  elementih.

Alternativa enovitemu je sekvenčni (angl. *staggered*) pristop, kjer rešujemo  $n_K$  sistemov enačb:

$$\mathbf{K}^{(K)}\Delta\mathbf{p}^{(K)} + \mathbf{R}^{(K)} = \mathbf{0}. \quad (2.50)$$

V tem primeru matriki  $\mathbf{R}^{(K)}$  in  $\mathbf{K}^{(K)}$  dobimo s sestavljanjem matrik  $\mathbf{R}_e^{(K)}$  in  $\mathbf{K}_e^{(K)}$  za vsak  $K$ -ti podproblem ločeno. Potrebne matrike izračunajo vse implementacije, kjer se nepotrebni povezani deli zane-marijo, ločena implementacija  $\mathbf{C}$  pa izračuna zgolj potrebne kvadratne matrike, brez povezanih členov. Konvergirana rešitev posameznega sistema enačb je vrednost primarnih spremenljivk polja  $\mathbf{p}^{(K)}$ , ki je vhodni podatek za reševanje sistema enačb naslednjega polja  $K + 1$ . Okviren algoritem je enak kot na sliki 2.1 za poln sistem, s to razliko, da iterativna shema za en korak zahteva še dodatno zanko po vseh poljih in iterativno shemo za konvergenco posameznega polja. Sekvenčna shema za en korak je opisana na sliki 2.8. Različni avtorji (Lewis in Schrefler, 1998, Šuštar, 2002, Matthies in Steindorf, 2002, 2003, Lewis in sod., 2004, Wang in sod., 2009) podajajo različne načine sekvenčnega pristopa. Najbolj osnovna je Gauss–Seidelova metoda, katere shema je opisana na sliki 2.8, obstajajo še druge variante te metode in druge metode, ki izboljšujejo hitrost konvergence in stabilnost procedure.

---

$t \leftarrow t_n + \Delta t$ ;  $\Delta\lambda \leftarrow \lambda(t) - \lambda(t_n)$ ;  $\mathbf{R}^{ext} \leftarrow \mathbf{R}^{ext} - \Delta\lambda\mathbf{R}^{ref}$ ;  $n_{it} \leftarrow 0$ ;

**begin** začni iterativno shemo za en korak

```

 $\mathbf{p}^{(K)} \leftarrow \mathbf{p}_n^{(K)}$ ; // začetni približek je rešitev prejšnjega  $\mathbf{p}_n^{(K)}$  koraka
 $\|\mathbf{R}\| \leftarrow 0$ ;  $\|\Delta\mathbf{p}\| \leftarrow 0$ ;
repeat
  for  $K := 1$  to  $n_K$  do
    repeat
      Pri konstantnih vrednostih sekundarnih neznanek  $\mathbf{p} \setminus \mathbf{p}^{(K)}$  izračunaj  $\mathbf{R}^{(K)}$  in  $\mathbf{K}^{(K)}$  po metodi
      končnih elementov in reši sistem  $\mathbf{K}^{(K)}\Delta\mathbf{p}^{(K)} + \mathbf{R}^{(K)} = \mathbf{R}^{ext,(K)}$  za neznan  $\Delta\mathbf{p}^{(K)}$ ;
       $\mathbf{p}^{(K)} \leftarrow \mathbf{p}^{(K)} + \Delta\mathbf{p}^{(K)}$ ;  $n_{it,l} \leftarrow n_{it,l} + 1$ ;
      if  $n_{it,l} = 1$  then
         $\|\mathbf{R}\| \leftarrow \|\mathbf{R}\| + \|\mathbf{R}^{(K)}\|$ ;  $\|\Delta\mathbf{p}\| \leftarrow \|\Delta\mathbf{p}\| + \|\Delta\mathbf{p}^{(K)}\|$ ;
      end if
      until  $\|\mathbf{R}^{(K)}\| < \varepsilon \wedge \|\Delta\mathbf{p}^{(K)}\| < \varepsilon \vee n_{it,l} > n_{max,l}$ ;
    end for
     $n_{it} \leftarrow n_{it} + 1$ ;
  until  $\|\mathbf{R}\| < \varepsilon \wedge \|\Delta\mathbf{p}\| < \varepsilon \vee n_{it} > n_{max}$ ;

```

Slika 2.8: Gnezdena iterativna shema sekvenčnega reševanja za en korak  
Figure 2.8: Nested iteration scheme for staggered solution for single step

---



### 3 ENAČBE VEČFAZNIH POVEZANIH PROBLEMOV

Analitičnih rešitev diferencialnih enačb ni možno določiti za poljuben problem. V prejšnjem poglavju smo pokazali, da lahko avtomatizirano numerično rešitev poljubnega povezanega problema, če poznamo šibko obliko diferencialnih enačb ali ustrezen potencial. Osnova za izpeljavo šibkih oblik so diferencialne enačbe povezanega problema. Osredotočili se bomo na povezane termo-hidro-mehanske probleme, natančno na deformiranje neizotermične hiperelastične porozne trdnine, zasičene s kapljevino in plinom (THGM). V naslednjih poglavjih bomo zapisali osnovne enačbe kinematike, konstitutivnih in ravnotežnih enačb, ki jih potrebujemo za določitev diferencialnih enačb THGM. Potrebni so zakon o ohranitvi mase, ravnotežju sil, ter zakona o ohranitvi energije in entalpije, z upoštevanjem ustreznih konstitutivnih zakonov za obravnavan povezan primer, kot sta Darcyjev in Fourierjev zakon ipd. Močne oblike bomo nato pretvorili v šibke oblike diferencialnih enačb. V poglavju 4 bo prikazana transformacija šibkih oblik v pseudo-potencial s primeri kode končnih elementov. Kinematične enačbe in ravnotežne enačbe enofaznega sistema so povzete po avtorjih [Wriggers \(2008\)](#) in [de Boer \(1996, 1998\)](#) ter dopolnjene z ravnotežnimi enačbami in konstitutivnimi zakoni večfaznega sistema kot so jih podali [de Boer \(1996, 1998\)](#), [Lewis in Schrefler \(1998\)](#), [Coussy \(2004\)](#) in [Moran in Shapiro \(2009\)](#).

#### 3.1 Opis večfaznega sistema

V nadaljevanju bo obravnavan večfazni sistem, t.j. zmes trdne matrice, katere povezane pore so zapolnjene s tekočinami. Osnove večfaznega sistema so podali [de Boer \(1996, 1998\)](#) in [Lewis in Schrefler \(1998\)](#). V splošnem se v porah lahko nahaja poljubno število različnih tekočin. Komponente oziroma faze sistema bodo označene s  $\pi \in \{1, \dots, n_\pi\}$ . Infinitezimalni delci komponent sistema v trenutku opazovanja imajo maso  $m_\pi$  zavzemajo celoten volumen  $dv_\pi$  in mejijo na površino  $da_\pi$ , pri čemer velja  $dv = \sum_{i=1}^{n_\pi} dv_\pi$  in  $dm = \sum_{\pi=1}^{n_\pi} dm_\pi$ , kjer sta  $dv$  in  $dm$  masa in volumen infinitezimalnega delca sistema. Masa posamezne komponente je  $dm_\pi = \rho_\pi dv_\pi$ , kjer je  $\rho_\pi$  gostota komponente oz faze  $\pi$ . Volumski delež posamezne komponente je definiran kot

$$\phi_\pi = \frac{dv_\pi}{dv}, \quad \sum_{\pi=1}^{n_\pi} \phi_\pi = 1. \quad (3.1)$$

Komponente sistema lahko razdelimo na trdne snovi in tekočine. Za zmes trdnih snovi velja, da imajo odpornost proti strižnim in volumskim deformacijam, ter posledično vsaka točka trdne snovi ohranja lego v matrici glede na sosednje točke. Tekočine razdelimo na kapljevine in pline, pri čemer lahko kapljevine obravnavamo kot zmes različnih kapljev, ki se lahko mešajo ali ne, kot na primer olje in voda. Tekočinam je omogočeno prosto gibanje znotraj por, ki je lahko posledica temperaturnih, kemijskih in/ali mehanskih procesov. Hkrati bo v enačbah opisana tudi sprememba faze tekočine in sicer kondenzacija ali utekočinjanje in izparevanje. Z upoštevanjem tega lahko volumski delež razdelimo glede na delež por in delež trdne faze. Od sedaj naprej bo obravnavan večfazni sistem s trdno fazo označeno z indeksom  $s$ . Znotraj por se nahaja tekočina, ki je zmes kapljev in plinov  $g$ . V splošnem se lahko v porah nahaja poljubno število kapljev in plinov. Plin se lahko razdeli na parno fazo kapljevine  $v$  in na suh zrak  $a$ .

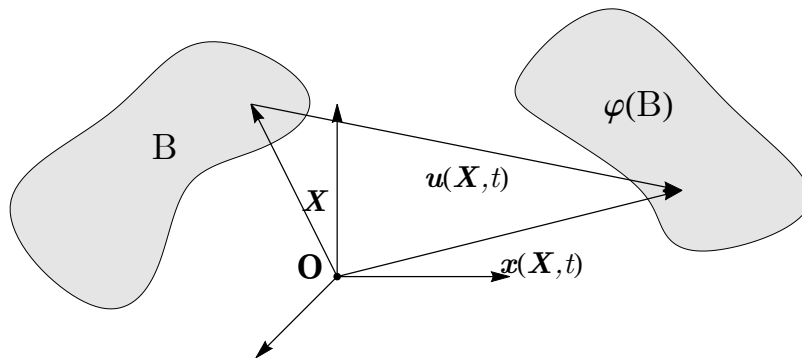
Volumski delež tekočin  $n$  predstavlja delež por oziroma poroznost sistema

$$n = \sum_{\pi \setminus s} \phi_{\pi} = \frac{dv - dv_s}{dv}. \quad (3.2)$$

Iz enačb (3.1) in (3.2) sledi, da je volumski delež trdne snovi  $\phi_s = 1 - n$ . Razmerje volumskih deležev tekočin  $\phi_l$  in  $\phi_g$  določa količina  $S_{\pi} = \frac{\phi_{\pi}}{n}$ .  $S_{\pi}$  je nivo zasičenosti medija s tekočino  $\pi$  in predstavlja volumski delež tekočine  $\pi$  v porah, in velja  $\sum_{\pi \setminus s} S_{\pi} = 1$ . Za dvofazno tekočino velja  $\phi_l = S_l n$  in  $\phi_g = (1 - S_l)n$ . V primeru s kapljevino popolnoma zasičenega medija je  $S_l = 1$ ,  $\phi_l = n$  in  $\phi_g = 0$ , ter v primeru nezasičenega medija je  $S_l = 0$ ,  $\phi_l = 0$  in  $\phi_g = n$ .

### 3.2 Kinematične enačbe

V tem poglavju so predstavljene odvisnosti deformiranja in gibanja večfaznega medija. Enačbe trdne snovi je podal [Wriggers \(2008\)](#), kjer so tudi podrobneje izpeljane. Kinematične enačbe za večfazni medij za reprezentativno fazo  $\pi$ , ki so nadgradnja enačb trdne snovi, sta navedla [de Boer \(1998\)](#) in [Coussy \(2004\)](#). V splošnem se telo  $B$  lahko opiše z mrežo enakomerno porazdeljenih delcev oz. materialnih točk  $X \in B$ , ki zavzemajo območje znotraj Evklidskega prostora točk  $\mathbb{E}^3$ . Obravnavan bo večfazni medij, kjer predpostavimo da je telo  $B$  superpozicija vseh njegovih faz  $B^{\pi}$ , kjer je  $\pi \in \{1, \dots, n_{\pi}\}$ ,  $B = \cup_{\pi=1}^{n_{\pi}} B^{\pi}$ , delci posameznih faz  $X^{\pi}$  pa se sočasno nahajajo na istem mestu. Njihovo gibanje ni neodvisno, zato bo v nadaljevanju prikazana kinematika telesa  $B$ , kot če bi imel eno trdno fazo, saj ta določa obliko deformiranja telesa, ostale faze pa izkazujejo le dodatne volumske deformacije in se gibljejo relativno na trdno telo.



Slika 3.1: Začetna in trenutna konfiguracija telesa  $B$   
Figure 3.1: Initial and current configuration of body  $B$

#### 3.2.1 Gibanje in deformacijski gradient

Konfiguracija telesa  $B$  je preslikava  $\phi: B \rightarrow \mathbb{E}^3$ , ki preslika delce iz  $B$  v konfiguracijo  $\mathbb{E}^3$ . Lega delca  $X$  iz  $B$  je za konfiguracijo  $\varphi$  dana kot  $x = \varphi(X)$ . S tem je lokacija telesa  $B$  opisana z  $\varphi(B) = \{\varphi(X) \mid X \in B\}$  in imenovana konfiguracija  $\varphi(B)$  telesa  $B$ . Gibanje telesa  $B$  se zapiše z dodatno preslikavo konfiguracije po času  $t$   $\varphi_t: B \rightarrow \mathbb{E}^3$ .

$$x = \varphi_t(X) = \varphi(X, t). \quad (3.3)$$

Enačba opisuje pot v  $\mathbb{E}^3$  delca  $X$  po času  $t$ . Enačba  $\mathbf{X} = \varphi_0(X)$  je referenčna konfiguracija telesa  $B$ , kjer je  $X$  lega delca  $X$  v začetni konfiguraciji, vendar pa običajno razlikovanje med delcem  $X$  in njegovo lokacijo  $\mathbf{X}$  ni potrebno. Referenčna konfiguracija je lahko izbrana pri poljubnem času, vendar se običajno zaradi praktičnih razlogov izbere, da je referenčna konfiguracija enaka začetni nedeformirani konfiguraciji. Enačbo (3.3) lahko prepisemo v

$$\mathbf{x} = \varphi(\varphi_0^{-1}(X), t), \quad \text{sledi} \quad \mathbf{x} = \varphi(X, t). \quad (3.4)$$

Legi  $\mathbf{x}$  in  $\mathbf{X}$  smatramo kot krajevna vektorja v prostoru  $\mathbb{E}^3$  in izvorom  $\mathbf{O}$ . Točka  $X$  je definirana v referenčni konfiguraciji z vektorjem  $\mathbf{X} = X_a \mathbf{E}_a$ .  $\mathbf{E}_a$  je ortogonalna baza v referenčni konfiguraciji z izhodiščem  $\mathbf{O}$ . Če gibanje opišemo z vektorjem materialnih koordinat  $\{X_1, X_2, X_3\}$  je to materialni oz. referenčni opis, pogosto ga imenujemo tudi Lagrangeov, kjer sledimo gibanju delca telesa  $B$  po času. Oznake z velikimi tiskanimi črkami se bodo nanašale na opis v bazi  $\mathbf{E}_a$  referenčne konfiguracije, kjer so  $X_a$  Lagrangejeve koordinate delca  $X$ . Alternativa za opis gibanja telesa  $B$  je uporaba vektorja prostorskih koordinat  $\{x_1, x_2, x_3\}$ . V tem primeru se osredotočimo na točko v prostoru in spremembi gibanja po času  $t$  v tej fiksni točki. Ta opis se imenuje trenutni, prostorski ali Eulerjev opis. Oznake z malimi tiskanimi črkami se bodo nanašale na opis v bazi  $\mathbf{e}_i$  prostorske konfiguracije, kjer so  $x_i$  prostorske koordinate delca  $X$ . Enačbe mehanike kontinuuma se lahko zapišejo v materialni ali prostorski konfiguraciji, saj teoretično ni med njima nobene razlike, zato je izbira prosta, vendar pa v nekaterih primerih fizikalni zakoni lahko vplivajo na izbiro računsko ugodnejše konfiguracije.

Za opis lokalnega deformiranja telesa  $B$  je vpeljan tenzor  $\mathbf{F}$ , ki preslika infinitezimalen vektor  $d\mathbf{X}$ , tangenten na materialno vlakno v točki  $X$ , iz začetne konfiguracije  $B$  v infinitezimalen vektor  $d\mathbf{x}$ , pripadajoč istemu materialnemu vlaknu v trenutni konfiguraciji  $\varphi(B)$ .

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F} d\mathbf{X} \quad \text{ali} \quad dx_i = F_{ia} dX_a. \quad (3.5)$$

Iz strukture enačbe sledi, da  $\mathbf{F}$  predstavlja gradient, zato tudi ime deformacijski gradient. V simbolni obliki se ga zapiše kot  $\mathbf{F} = \partial \mathbf{x} / \partial \mathbf{X}$ , komponente tenzorja sledijo kot parcialni odvodi  $\partial x_i / \partial X_a = x_{i,a}$ . Po enačbi (3.4) dobimo:

$$\mathbf{F} = \text{GRAD} \varphi(\mathbf{X}, t) = F_{ia} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{E}_a = \frac{\partial x_i}{\partial X_a} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{E}_a. \quad (3.6)$$

Ker je gradient (3.6) linearni operator je tudi lokalna transformacija linearna. Da lahko ohranjamo povezavo med  $B$  in  $\varphi(B)$  tekom deformiranja, mora biti preslikava injektivna, kar pomeni, da preslikava vsakemu različnemu delcu  $X$  priredi različen delec  $\mathbf{x}$ . Da to velja, mora biti  $\mathbf{F}$  brez singularnosti, kar pomeni da mora veljati:

$$J_{\mathbf{F}} = \det \mathbf{F} \neq 0, \quad (3.7)$$

kjer je  $J_{\mathbf{F}}$  determinanta. Praktično ta pogoj pomeni, da se delec  $X$  in njegova okolica ne more nikoli preslikati v točko, in ker je preslikava  $\varphi_t$  zvezna, sledi tudi pogoj  $J_{\mathbf{F}} > 0$ , ki pomeni, da se okolica ne more preslikati v okolico z negativnim volumnom ali negativno dolžino vlakna. Ker je  $\mathbf{F}$  nesingularna in je vsak delec iz  $\varphi(B)$  slika delca iz  $B$ , je preslikava tudi surjektivna, torej obstaja obrat ali inverz funkcije  $\mathbf{F}$  in je preslikava bijektivna. Obrat enačbe (3.5) je:

$$d\mathbf{X} = \mathbf{F}^{-1} d\mathbf{x}. \quad (3.8)$$

Ker je  $\mathbf{F}$  znan se lahko zapiše dodatne preslikave, ki povezujejo infinitezimalen površinski element  $d\mathbf{A} =$

$\mathbf{N} dA$  na površini telesa  $B$  in infinitezimalen površinski element  $\mathbf{d}\mathbf{a} = \mathbf{n} da$  na površini telesa  $\varphi(B)$ . To odvisnost določa Nansonova formula (Wriggers, 2008, Ogden, 1997):

$$\mathbf{d}\mathbf{a} = \mathbf{n} da = J_F \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N} dA = J_F \mathbf{F}^{-T} \mathbf{d}\mathbf{A}. \quad (3.9)$$

$\mathbf{N}$  in  $\mathbf{n}$  sta vektorja normale delca  $X$  na površini nedeformiranega  $B$  in deformiranega telesa  $\varphi(B)$ , ter  $da$  in  $dA$  infinitezimalne površine. Determinanta  $J_F$  (3.7) hkrati nudi relacijo med infinitezimalnim volumnom  $dV$  delca  $X$  v referenčni konfiguraciji  $B$  in volumnom  $dv$  v trenutni konfiguraciji  $\varphi(B)$

$$dv = J_F dV. \quad (3.10)$$

Z vpeljavo vektorja pomikov  $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t)$ , ki je razlika med legama delcev trenutne in začetne konfiguracije

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) = \varphi(\mathbf{X}, t) - \mathbf{X} = \mathbf{x} - \mathbf{X}, \quad (3.11)$$

se deformacijski gradient (3.12) prepíše kot

$$\mathbf{F} = \text{GRAD} [\mathbf{X} + \mathbf{u}(\mathbf{X}, t)] = \mathbf{I} + \text{GRAD} \mathbf{u} = \mathbf{I} + \mathbf{H}, \quad (3.12)$$

kjer je  $\mathbf{H}$  gradient pomikov,  $\mathbf{I}$  pa enotska matrika dimenzije  $3 \times 3$ . Ker je telo  $B$  superponirano iz faz  $B^\pi$  je v splošnem premik telesa delca faze  $B^\pi$  preslikan v ustrezno referenčno konfiguracijo  $\varphi^\pi(B^\pi)$ . Ker je definirana odvisnost med volumnom referenčne in trenutne konfiguracije, lahko enačbo volumskih deležev (3.2), z upoštevanjem spremembe razmerja volumskega deleža trdne snovi in por, izrazimo s poroznostjo referenčne konfiguracije  $n_0$ :

$$n_0 = \sum_{\pi \setminus s} \phi_\pi^0 = \frac{dV - dV_s}{dV}, \quad (3.13)$$

$$n = \frac{dv - dv_s}{dv} = \frac{J_F dV - J_{F,s} dV_s}{J_F dV} = \frac{J_F dV - J_{F,s} (1 - n_0) dV}{J_F dV} = 1 - (1 - n_0) \frac{J_{F,s}}{J_F}. \quad (3.14)$$

$J_{F,s}$  je sprememba volumna trdne faze  $s$ . Ta odvisnost se zelo pogosto zanemari, saj se običajno upošteva, da so zrna nestisljiva  $J_{F,s} = 1$ , ali pa se predpostavi linearna odvisnost. Področje je zelo slabo raziskano in splošne povezave med  $J_F$  in  $J_{F,s}$  avtorji ne podajajo, veliko avtorjev pa problem rešuje na svoj neodvisen način (Danielsson in sod., 2004, Lewis in Rangaswamy, 2011, 2013, Nedjar, 2013a,b, 2014, Chapelle in Moireau, 2014).

Preglednica 3.1: Transformacija vektorjev, tenzorjev in operatorjev

Table 3.1: Transformation of vectors, tensors and operators

Operacija	Začetna	Trenutna
divergenca vektorja $\mathbf{a}$	$\text{DIV} \mathbf{a} = J_F \text{div} \mathbf{a}$	$\text{div} \mathbf{a} = \frac{1}{J_F} \text{DIV} \mathbf{a}$
gradient skalarja $a$	$\text{GRAD} a = \mathbf{F}^T \text{grad} a$	$\text{grad} a = \mathbf{F}^{-T} \text{GRAD} a$
gradient vektorja $\mathbf{a}$	$\text{GRAD} \mathbf{a} = \text{grad} \mathbf{a} \mathbf{F}$	$\text{grad} \mathbf{a} = \text{GRAD} \mathbf{a} \mathbf{F}^{-1}$

### 3.2.2 Mere deformacij

V tem poglavju bodo iz deformacijskega gradienta izpeljane različne mere deformiranja trdnega telesa, ki se bodo uporabile v nadaljevanju. Deformacijski gradient  $\mathbf{F}$  se lahko razcepi na produkt dveh tenzorjev, in sicer produkt ustreznega ortogonalnega rotacijskega tenzorja  $\mathbf{R}$  (velja  $\mathbf{R}^{-1} = \mathbf{R}^T$ ) in desnega  $\mathbf{U}$  ali

levega  $V$  simetričnega tenzorja raztezkov, glej npr. (Ogden, 1997, Wriggers, 2008). Polarni razcep  $F$  sledi:

$$F = RU = VR. \quad (3.15)$$

Tenzorja  $U$  ali  $V$  je možno zapisati v spektralnem razcepu:

$$U = \sum_{i=1}^3 \lambda_i N_i \otimes N_i \quad V = \sum_{i=1}^3 \lambda_i n_i \otimes n_i, \quad (3.16)$$

kjer so  $\lambda_i$  lastne vrednosti tenzorjev raztezkov, imenovani tudi glavni raztezki.  $N_i$  so pripadajoči lastni vektorji v referenčni konfiguraciji in  $n_i$  so pripadajoči lastni vektorji v trenutni konfiguraciji. Po enačbah (3.15) in (3.16) lahko zapišemo  $F$  v spektralnem razcepu, z upoštevanjem  $n_i = RN_i$  in  $N_i = R^T n_i = n_i R$ :

$$F = R \left( \sum_{i=1}^3 \lambda_i N_i \otimes N_i \right) = \left( \sum_{i=1}^3 \lambda_i n_i \otimes n_i \right) R = \sum_{i=1}^3 \lambda_i n_i \otimes N_i. \quad (3.17)$$

Zaradi ortogonalnosti  $R$  se lahko zapiše simetrični desni Cauchy-Greenov tenzor deformacij:

$$C = F^T F = U^T R^T R U = U^T U = U^2. \quad (3.18)$$

Zadnji korak sledi iz simetrije tenzorja  $U = U^T$ . Podobno lahko zapišemo levi Cauchy-Greenov tenzor:

$$b = F F^T = V R R^T V^T = V^2. \quad (3.19)$$

$b$  se nanaša na prostorski opis.  $U$  in  $V$  povezujeta spremembo vlakna  $dx$  iz  $\varphi(B)'$  in vlakna  $dX$  iz  $B$ :  $R^T dX = U dX$  in  $R^T dX = U dX$  in  $dx = V R dX$ .  $C$  in  $b$  povezujeta kvadrate teh vlaken:  $dx \cdot dx = dX \cdot (C dX)$  in  $dx \cdot dx = (R dX) \cdot (b R dX)$ . Levi in desni Cauchy-Greenov tenzor deformacij se v spektralnem razcepu zapišeta kot:

$$C = F^T F = \sum_{i=1}^3 \lambda_i^2 N_i \otimes N_i, \quad b = F F^T = \sum_{i=1}^3 \lambda_i^2 n_i \otimes n_i. \quad (3.20)$$

Iz opisanih tenzorjev lahko sedaj definiramo simetričen Green-Lagrangeov deformacijski tenzor, ki se nanaša na začetno konfiguracijo  $B$ :

$$E = \frac{1}{2}(U^2 - I) = \frac{1}{2}(F^T F - I) = \frac{1}{2}(C - I). \quad (3.21)$$

Tenzor se običajno uporablja za opis problemov z velikimi pomiki in majhnimi deformacijami.  $E$  opisuje spremembo kvadrata dolžine iz  $B$  v  $\varphi(B)$ . Posplošitev tenzorja  $E$  (3.21) je prvi podal Seth (1961) in kasneje še Hill (1968a,b), s tem sta se ukvarjala tudi Doyle in Ericksen (1956). Posplošitev desnih deformacijskih tenzorjev, imenovana tudi Seth-Hillova oz. Doyle-Ericksenova družina tenzorjev (Ogden, 1997, Wriggers, 2008), ki se nanašajo na referenčno konfiguracijo  $B$ , se zapiše:

$$E^{(\alpha)} = \frac{1}{\alpha}(U^\alpha - I) = \frac{1}{\alpha}(C^{\frac{\alpha}{2}} - I), \quad \alpha \in \mathbb{R}. \quad (3.22)$$

Z izbiro  $\alpha = 2$  v enačbi (3.22) dobimo Green-Lagrangeov deformacijski tenzor  $E^{(2)} = E$ .

Naslednji pogosto uporabljen tenzor je Almansijev deformacijski tenzor

$$\mathbf{e} = \frac{1}{2} (\mathbf{I} - \mathbf{V}^{-2}) = \frac{1}{2} (\mathbf{I} - \mathbf{b}^{-1}) = \frac{1}{2} (\mathbf{I} - \mathbf{F}^{-\text{T}} \mathbf{F}^{-1}), \quad (3.23)$$

ta se nanaša na prostorsko konfiguracijo in analogno  $\mathbf{E}$  opisuje spremembo kvadrata dolžine iz  $\varphi(B)$  v  $B$ . Podobno kot družino desnih tenzorjev (3.22) je možna tudi posplošitev družine levih deformacijskih tenzorjev, ki se nanašajo na trenutno konfiguracijo  $\varphi(B)$ :

$$\mathbf{e}^\alpha = \frac{1}{\alpha} (\mathbf{V}^\alpha - \mathbf{I}) = \frac{1}{\alpha} (\mathbf{b}^{\frac{\alpha}{2}} - \mathbf{I}), \quad \alpha \in \mathbb{R}. \quad (3.24)$$

Z izbiro  $\alpha = -2$  v enačbi (3.24) dobimo Almansijev deformacijski tenzor  $\mathbf{e}^{(-2)} = \mathbf{e}$ . Če v enačbah (3.22) in (3.24) izberemo vrednost  $\alpha = 0$ , enačbi sta v limiti enaki desnemu in levemu logaritmičnemu tenzorju. Slednji je znan tudi kot Henckyjev deformacijski tenzor:

$$\text{za } \alpha = 0 \rightarrow \mathbf{E}^{(0)} = \ln \mathbf{U} \quad \text{in} \quad \mathbf{e}^{(0)} = \ln \mathbf{V}. \quad (3.25)$$

Kot zadnjega se lahko zapiše deformacijski tenzor majhnih deformacij  $\boldsymbol{\varepsilon}$ , ki se običajno uporablja v poenostavljenih linearnih teorijah, kjer so deformacije in pomiki majhni:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\mathbf{F} + \mathbf{F}^{\text{T}}) - \mathbf{I} = \frac{1}{2} (\mathbf{H} + \mathbf{H}^{\text{T}}), \quad (3.26)$$

kjer je  $\mathbf{H}$  gradient pomikov (3.12). V poglavju 5 bomo pokazali metode kako enostavno natančno in učinkovito izračunati poljubno potenco in logaritem deformacijskega tenzorja neposredno z uporabo zaprtih oblik matričnih funkcij.

### Nestisljivost

V nekaterih primerih je pri gibanju potrebno upoštevati dodatne omejitve, ki jih je možno vključiti neposredno v kinematične odvisnosti. En tak primer je nestisljivost telesa, ki igra pomembno vlogo v primeru plastifikacije in modelih gum, kjer imamo omejitve  $\det \mathbf{F} = J_F = 1$ . Flory (1961) je predlagal razcep tenzorja  $\mathbf{F}$  na izohorični oz. deviatorični del  $\hat{\mathbf{F}}$ , katerega volumen se ohranja ( $\det \hat{\mathbf{F}} \equiv 1$ ) in predstavlja izohorično gibanje, ter volumetrični del, ki predstavlja zgolj spremembo volumna, in ga lahko zapišemo s skalarjem  $J_F^{\frac{1}{3}}$

$$\mathbf{F} = J_F^{\frac{1}{3}} \hat{\mathbf{F}}, \quad \hat{\mathbf{F}} = J_F^{-\frac{1}{3}} \mathbf{F}, \quad (3.27)$$

Z upoštevanjem enačb (3.27) in (3.20) je možno zapisati tudi relacijo med izohoričnim oz. deviatoričnim desnega in levega Cauchy-Greenovega deformacijskega tenzorja  $\hat{\mathbf{C}}, \hat{\mathbf{b}}$  in tenzorjema  $\mathbf{C}$  in  $\mathbf{b}$

$$\hat{\mathbf{C}} = \hat{\mathbf{F}}^{\text{T}} \hat{\mathbf{F}} = J_F^{-\frac{2}{3}} \mathbf{F}^{\text{T}} \mathbf{F} = J_F^{-\frac{2}{3}} \mathbf{C}, \quad \hat{\mathbf{b}} = \hat{\mathbf{F}} \hat{\mathbf{F}}^{\text{T}} = J_F^{-\frac{2}{3}} \mathbf{F} \mathbf{F}^{\text{T}} = J_F^{-\frac{2}{3}} \mathbf{b}. \quad (3.28)$$

Multiplikativen razcep  $\mathbf{F}$  na volumski del ( $J_F$ ) in izohorični del ( $\hat{\mathbf{F}}$ ) v nelinearni teoriji ustreza aditivnem razcepu deformacijskega tenzorja majhnih deformacij v geometrijsko linearni teoriji na deviator  $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$  in volumski del  $\varepsilon_V$ :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} + \frac{\varepsilon_V}{3} \mathbf{I}, \quad I_\varepsilon = \varepsilon_V = \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}). \quad (3.29)$$

### 3.2.3 Časovni odvodi

Ker je preslikava  $\varphi(\mathbf{X}, t)$  funkcija začetne lege  $\mathbf{X}$  in časa  $t$ , je potrebno pri nelinearnih problemih, kjer so konstitutivni zakoni odvisni od zgodovine  $\varphi(\mathbf{X}, t_n)$ , ali pa ko je problem dinamičen, pozornost posvetiti tudi časovni odvisnosti problema. Taki primeri so na primer visko-plastičnost, visko-elastičnost, nestacionarni tok temperature in tekočine. V teh primerih je potrebno poznati tudi odvode kinematičnih količin po času. Hitrost materialne točke glede na referenčno konfiguracijo je definirana z materialnim odvodom po času (Wriggers, 2008, Lewis in Schrefler, 1998)

$$\mathbf{v}(\mathbf{X}, t) = \frac{D\varphi}{Dt} = \frac{\partial\varphi(\mathbf{X}, t)}{\partial t} = \dot{\varphi}(\mathbf{X}, t). \quad (3.30)$$

V trenutni konfiguraciji je hitrost  $\hat{\mathbf{v}}$  delca  $X$ , ki se nahaja na legi  $\mathbf{x}$  pri času  $t$  v  $\varphi(B)$ .

$$\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t) = \hat{\mathbf{v}}(\varphi(\mathbf{X}, t), t) = \mathbf{v}(\mathbf{X}, t). \quad (3.31)$$

Pospešek je definiran analogno kot odvod hitrosti po času oz. drugi odvod pomikov po času.

$$\mathbf{a} = \ddot{\varphi}(\mathbf{X}, t) = \dot{\mathbf{v}}(\mathbf{X}, t). \quad (3.32)$$

Z upoštevanjem enačbe (3.31) in verižnega pravila zapišemo pospešek  $\hat{\mathbf{a}}$  v trenutni konfiguraciji:

$$\hat{\mathbf{a}} = \dot{\hat{\mathbf{v}}} = \frac{\partial}{\partial t} [\hat{\mathbf{v}}(\varphi(\mathbf{X}, t), t)] = \frac{\partial\hat{\mathbf{v}}}{\partial t} + \text{grad } \hat{\mathbf{v}} \hat{\mathbf{v}}. \quad (3.33)$$

Prvi člen je lokalni časovni odvod, drugi pa konvekcijski del, pri čemer je potrebno pri lokalnem odvodu trenutno lego  $\mathbf{x} = \varphi(\mathbf{X}, t)$  obravnavati kot konstanto. Enačba se lahko posploši na poljubno odvedljivo funkcijo faze  $\pi$   $\hat{f}_\pi(\varphi(\mathbf{X}, t), t)$ , dane v prostorskem opisu glede na gibanje delca faze  $\alpha$  po času:

$$\dot{f}_\pi^\alpha = \frac{D_\alpha f_\pi}{Dt} = \frac{\partial f_\pi}{\partial t} + \text{grad } f_\pi \hat{\mathbf{v}}_\alpha, \quad \dot{f}_\pi^\pi = \dot{f}_\pi. \quad (3.34)$$

Sprememba funkcije  $f_\pi$  faze  $\pi$  glede na fazo  $\alpha$  se lahko določi z razliko enačbe (3.34) z  $\pi \neq \alpha$  in z  $\pi = \alpha$ , pri čemer dobimo

$$\dot{f}_\pi^\alpha = \frac{D_\alpha f_\pi}{Dt} = \dot{f}_\pi + \text{grad } f_\pi \hat{\mathbf{v}}_{\alpha,\pi} = \frac{\partial f_\pi}{\partial t} + \text{grad } f_\pi \hat{\mathbf{v}}_\pi + \text{grad } f_\pi \hat{\mathbf{v}}_{\alpha,\pi}. \quad (3.35)$$

$$\hat{\mathbf{v}}_{\alpha,\pi} = \hat{\mathbf{v}}^\alpha - \hat{\mathbf{v}}^\pi, \quad (3.36)$$

kjer je  $\hat{\mathbf{v}}_{\alpha,\pi}$  hitrost gibanja delca faze  $\alpha$  glede na  $\pi$ , in se imenuje difuzijska hitrost. Časovni odvod deformacijskega gradienta  $\mathbf{F}$  se z upoštevanjem enačb (3.30) in (3.6) zapiše kot:

$$\dot{\mathbf{F}} = \text{GRAD } \dot{\varphi}(\mathbf{X}, t) = \text{GRAD } \mathbf{v} = \text{grad } \hat{\mathbf{v}} \mathbf{F} = \mathbf{I} \mathbf{F}. \quad (3.37)$$

Izraz  $\text{grad } \hat{\mathbf{v}}$  je trenutni gradient hitrosti in se običajno izrazi z  $\mathbf{I}$ :

$$\mathbf{I} = \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1}. \quad (3.38)$$

Podobno se lahko zapiše časovni odvod Green-Lagrangeovega tenzorja deformacij (3.21):

$$\dot{\mathbf{E}} = \frac{1}{2} (\dot{\mathbf{F}}^T \mathbf{F} + \mathbf{F}^T \dot{\mathbf{F}}) = \mathbf{F}^T \frac{1}{2} (\mathbf{I} + \mathbf{I}^T) \mathbf{F} = \mathbf{F}^T \mathbf{d} \mathbf{F}. \quad (3.39)$$



Zadnja enačba pomeni, da je  $\dot{\mathbf{E}}$  transformacija simetričnega tenzorja  $\mathbf{d} = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \mathbf{I}^T)$  iz prostorske v referenčno konfiguracijo (angl. *pull back*). Različne mere deformacij so povzete v preglednici 3.2.

Preglednica 3.2: Izvleček nelinearnih mer deformacij  
Table 3.2: Summary of nonlinear strain measures

Deformacijski gradient / gr. pomikov	$\mathbf{F} = \text{GRAD } \mathbf{x}$	$\mathbf{H} = \text{GRAD } \mathbf{u}$
polarna dekompozicija	$\mathbf{F} = \mathbf{R} \mathbf{U}$	$\mathbf{F} = \mathbf{V} \mathbf{R}$
desni / levi Cauchy-Greenov t.d.	$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} = \mathbf{U}^2$	$\mathbf{b} = \mathbf{F} \mathbf{F}^T = \mathbf{V}^2$
Green Lagrangeov / Almansihev t.d.	$\mathbf{E}^{(2)} = \mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{1})$	$\mathbf{e}^{(-2)} = \mathbf{e} = \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \mathbf{b}^{-1})$
desni / levi logaritmični oz. Henckyjev t.d.	$\mathbf{E}^{(0)} = \ln \mathbf{U} = \frac{1}{2} \ln \mathbf{C}$	$\mathbf{e}^{(0)} = \ln \mathbf{V} = \frac{1}{2} \ln \mathbf{b}$
volumetrični / deviatorični razcep	$\mathbf{F} = J_F^{\frac{1}{3}} \hat{\mathbf{F}}$	$\mathbf{C} = J_F^{\frac{2}{3}} \hat{\mathbf{C}}$
gradient hitrosti	$\mathbf{l} = \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1}$	$\mathbf{d} = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \mathbf{I}^T)$
hitrost deformiranja	$\dot{\mathbf{E}} = \frac{1}{2}(\dot{\mathbf{F}}^T \mathbf{F} + \mathbf{F}^T \dot{\mathbf{F}})$	$\dot{\mathbf{E}} = \mathbf{F}^T \mathbf{d} \mathbf{F}$
t.d. – tenzor deformacij		

### 3.3 Konstitutivni zakoni

Poleg kinematičnega opisa telesa, ki opisuje gibanje telesa, je za formulacijo povezanega problema potrebno opisati tudi konstitutivne enačbe in zakone, kot so toplotni tok, tok tekočin, plinske enačbe in drugi. Najsplošnejše ravnotežne enačbe večfaznega medija so podali [de Boer \(1998\)](#) in [Lewis in Schrefler \(1998\)](#), medtem ko so osnovne enačbe za poln material brez por običajno na voljo v večini virov, kjer obravnavajo mehanske probleme ali njihovo reševanje podali [Wriggers \(2008\)](#), [Ibrahimbegović \(2009\)](#) in [Zienkiewicz in Taylor \(2000a\)](#). Enačbe delno zasičenega in zasičenega poroznega medija za konkreten povezan primer so podali med drugimi tudi avtorji [Schrefler in Xiaoyong \(1993\)](#), [Schrefler \(1995\)](#), [Schrefler in Scotta \(2001\)](#), [Uzuoka in Borja \(2012\)](#), [de Boer \(1998\)](#), [Karrech in sod. \(2012\)](#), [Gajo \(2011\)](#), [Mroginski in sod. \(2010\)](#), [Li in sod. \(2004\)](#), [Borja in sod. \(2013\)](#) in [Krabbenhoft \(2007\)](#).

#### 3.3.1 Plinasta faza – mešanica suhega zraka in vodne pare

Plin v porah medija je običajno vlažen zrak. Ta se obravnava kot zmes dveh idealnih plinov, običajno suhega zraka in vodne pare. Prva faza je označena z  $a$ , druga pa z  $v$ , zmes obeh je plinasta faza oz. vlažen zrak  $g$ . Posledično se lahko uporabi zakon o idealnem plinu, ki povezuje delne pritiske  $p_\pi$ , masno koncentracijo oz. gostoto  $\rho_\pi$ , omenjenih faz z absolutno temperaturo  $T_A = T_0 + T$  z ničlo pri 0 K,  $T$  je spremenljivka problema in se lahko smatra kot sprememba temperature glede na referenčno oz. začetno temperaturo  $T_0$ . Enačbe stanja idealnega plina s fazama  $a$  in  $v$  ter mešanico  $g$  (nekateri avtorji ([Lewis in Schrefler, 1998](#), [Schrefler, 1995](#)) označujejo faze tudi z  $ga$ ,  $gv$  in  $g$ ) so ([Lewis in Schrefler, 1998](#), [Schrefler, 1995](#), [Moran in Shapiro, 2009](#)):

$$p_\pi = \frac{\rho_\pi T_A R}{M_\pi} \quad \text{za } \pi = g, a, v, \quad (3.40)$$

$$\rho_g = \sum_{\pi \in \{a,v\}} \rho_\pi = \rho_a + \rho_v = \frac{1}{RT_A} (p_a M_a + p_v M_v), \quad (3.41)$$

$$p_g = \sum_{\pi \in \{a,v\}} p_\pi = p_a + p_v, \quad (3.42)$$



Zgornje enačbe lahko zapišemo ob predpostavki, da vse plinaste faze  $g$ ,  $a$  in  $v$  zavzemajo enak volumski delež  $\phi_g = \phi_v = \phi_a$ . Iz enačb sledi Daltonov zakon za zmes plinov

$$M_g = \left( \sum_{\pi \in \{a,v\}} \frac{\rho_\pi}{\rho_g M_\pi} \right)^{-1} = \left( \frac{\rho_v}{\rho_g M_l} + \frac{\rho_a}{\rho_g M_a} \right)^{-1}, \quad (3.43)$$

kjer je  $M_\pi$  molska masa posamezne faze  $\pi$ ,  $R$  pa je splošna plinska konstanta  $R = 8.314 \frac{\text{J}}{\text{K mol}}$ . Pri tem smo upoštevali, da je molska masa vlage enaka masi kapljevine  $M_l = M_v$ , saj gre za isto tekočino v različnih fazah.

### 3.3.2 Sorpcija

Če popolnoma suh medij izpostavimo vlažnemu zraku, se vlaga iz zraka absorbira na notranjih površinah por. V primeru, da medij ni suh, se v njem nahaja tekočina v kondenzirani obliki (kapilarna voda), zaradi njene površinske napetosti se ustvarijo konkavne membrane med tekočino in vlažnim plinom. V tem primeru obstaja povezava med relativno vlažnostjo, zasičenostjo in kapilarnim pritiskom v porah. Slednji je definiran kot razlika pritiskov tekočine in plina (Lewis in Schrefler, 1998, Coussy, 2004, Moran in Shapiro, 2009):

$$p_c = p_g - p_l, \quad (3.44)$$

kjer je  $p_l$  pritisk tekoče faze (vode) in  $p_g$  pritisk plina, ki sta običajno spremenljivki problema. Kelvin-Laplaceova enačba povezuje kapilarni pritisk in relativno vlažnost, ki je razmerje med delnim pritiskom vlage  $p_v$  in pritiskom zasičenosti vlage  $p_v^s$ :

$$R_H = \frac{p_v}{p_v^s} = \exp \left( \frac{p_c M_l}{\rho_l T_A R} \right). \quad (3.45)$$

Pritisk zasičenosti vodne pare, ki je funkcija temperature, se lahko določi po Clausius- Clapeyronovi enačbi:

$$p_v^s(T_A) = p_v^{s,0}(T_A) \exp \left( -\frac{M_l \Delta h_v}{R} \left( \frac{1}{T_A} - \frac{1}{T_0} \right) \right). \quad (3.46)$$

$T_0$  je referenčna temperatura in  $p_v^{s,0}$  pritisk zasičenosti vodne pare pri referenčni temperaturi. Za vodo pri temperaturi  $T_0 = 100 \text{ }^\circ\text{C} = 373.15 \text{ K}$  je pritisk zasičenosti vodne pare  $p_v^{s,0} = 1 \text{ atm} = 101.32 \text{ kPa}$ .  $\Delta h_v$  je specifična entalpija izhlapevanja, oz latentna toplota izparevanja oz. toplota izhlapevanja. Določi se kot razlika med specifično entalpijo faze  $l$  in faze  $v$   $\Delta h_v = h_v - h_l$ . Za vodo je latentna toplota izhlapevanja enaka  $\Delta h_v = 2260 \frac{\text{kJ}}{\text{kg}}$ . Hkrati se kapilarni pritisk lahko določi po Laplaceovi enačbi, ki je  $p_c = \frac{2\sigma_s}{r}$ , kjer je  $\sigma_s$  površinska napetost in  $r$  radij por. Če upoštevamo enačbe zakona o idealnem plinu (3.40) do (3.43) se časovni odvod gostot plina določi kot:

$$\dot{\rho}_v = \left( \frac{M_l \dot{p}_v}{T_A R} \right) = \frac{M_l}{T_A R} \frac{\partial p_v}{\partial p_c} (\dot{p}_g - \dot{p}_l) + \frac{M_l}{T_A R} \left( \frac{\partial p_v}{\partial T} - \frac{p_v}{T_A} \right) \dot{T}, \quad (3.47)$$

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_a &= \left( \frac{M_a \dot{p}_a}{T_A R} \right) = \left( \frac{M_a (p_g - p_v)}{T_A R} \right) = \frac{M_a}{T_A R} \dot{p}_g - \frac{M_a}{T_A^2 R} \dot{T} \\ &\quad - \frac{M_l}{T_A R} \frac{\partial p_v}{\partial p_c} (\dot{p}_g - \dot{p}_l) - \frac{M_l}{T_A R} \left( \frac{\partial p_v}{\partial T} - \frac{p_v}{T_A} \right) \dot{T}. \end{aligned} \quad (3.48)$$

### 3.3.3 Darcyjev zakon

Povezavo med hitrostjo tekočin in pritiskov je podal Darcy konec 19. stoletja. Posplošen Darcyjev zakon (Lewis in Schrefler, 1998, Li in sod., 2004, Uzuoka in Borja, 2012, Coussy, 2004), razširjen s pospeškom trdne snovi, se zapiše kot:

$$\mathbf{q}_\pi = \phi_\pi \rho_\pi \mathbf{v}_{\pi,s} = -\rho_\pi \frac{\mathbf{k}k_{r,\pi}}{\mu_\pi} (\text{grad } p_\pi + \rho_\pi (\mathbf{a}_s + \mathbf{a}_{\pi s} - \bar{\mathbf{b}})), \quad (3.49)$$

kjer je  $\mathbf{a}_{\pi s}$  relativni pospešek faze  $\pi$  glede na trdno fazo  $s$  in se določi po enačbi (3.34) kot

$$\mathbf{a}_{\pi s} = \frac{\partial \mathbf{v}_{\pi,s}}{\partial t} + \text{grad} \mathbf{v}_{\pi,s} \cdot \mathbf{v}_s. \quad (3.50)$$

Enačba (3.49) se lahko zapiše tudi na referenčni konfiguraciji s transformacijo  $\mathbf{Q} = J_F \mathbf{F}^{-1} \mathbf{q}$  in upoštevanjem odvisnosti iz preglednice 3.1:

$$\mathbf{Q}_\pi = -\rho_\pi \frac{\mathbf{K}k_{r,\pi}}{\mu_\pi} (\text{GRAD } p_\pi + \rho_\pi \mathbf{F}^\top (\mathbf{a}_s + \mathbf{a}_{\pi s} - \bar{\mathbf{b}})), \quad (3.51)$$

kjer je  $\mu_\pi$  je dinamična viskoznost faze  $\pi$ . Tenzor  $\mathbf{k}$  in  $\mathbf{K} = J_F \mathbf{F}^{-1} \mathbf{k} \mathbf{F}^{-\top}$  sta tenzorja notranje prepustnosti medija na tekočino in plin v trenutni in začetni konfiguraciji. Hkrati je tenzor lastnost medija in ne tekočin. Pogosto se uporablja tudi hidravlična prepustnost  $\mathbf{k}_l = \frac{\mathbf{k}g\rho_l}{\mu_l}$ , ki določa opravljeno pot tekočine  $l$  po času.  $k_{r,\pi}$  je brez dimenzijska količina med 0 in 1 imenovana relativna prepustnost tekoče faze  $\pi$ . Celotna prepustnost faze  $\pi$  pa se določi po enačbi  $\mathbf{k}_\pi = \mathbf{k}k_{r,\pi}$ . Prepustnost je odvisna od poroznosti medija in od zasičenosti medija. Brooks in Corey (1964) sta podala odvisnost med kapilarnim pritiskom, relativno prepustnostjo in zasičenostjo s faz  $l$  in  $g$ :

$$k_{r,l} = S_e^{(2+3\lambda)/\lambda}, \quad (3.52)$$

$$k_{r,g} = (1 - S_e)^2 (1 - S_e^{(2+\lambda)/\lambda}), \quad (3.53)$$

$$p_c = \frac{p_b}{S_e^\lambda}, \quad (3.54)$$

$$S_e = \frac{S_l - S_{l,ir}}{1 - S_{l,ir}}, \quad (3.55)$$

kjer je  $S_e$  efektivna zasičenost,  $S_{l,ir}$  je ireverzibilna zasičenost tekočine  $l$ .  $\lambda$  je razporeditev por in  $p_b$  površinska napetost tekočine s stikom z plinom. Kasneje je bilo predstavljenih več enačb, ena izmed najbolj poznanih je podal Van Genuchten (1980), ki so jo nato dopolnili Vogel in sod. (2000) z dodatnim parametrom. Obstaja pa še mnogo modifikacij modela (Schaap in Van Genuchten, 2006, Krabbenhoft, 2007, Réthoré in sod., 2008, Uzuoka in Borja, 2012). Podana je ena izmed novejših (Uzuoka in Borja, 2012), ki je uporabljena tudi v računskih primerih v poglavju 6:

$$S_l = \begin{cases} \frac{1 - S_{g,ir} - S_{l,ir}}{(1 + (p_c/p_{sat})^{n_{VG}})^{m_{VG}}} & \text{if } p_c > 0, \\ 1 - S_{g,ir} & \text{if } p_c \leq 0. \end{cases}, \quad (3.56)$$

$$k_{r,l} = S_e^{\iota_{VG}} (1 - (1 - S_e^{\frac{1}{m_{VG}}})^{m_{VG}})^2, \quad (3.57)$$

$$k_{r,g} = (1 - S_e)^{\iota_{VG}} (1 - S_e^{\frac{1}{m_{VG}}})^{2m_{VG}}. \quad (3.58)$$

$p_{sat}$  je pritisk na meji zasičenosti medija.  $p_{sat}$ ,  $n_{VG}$ ,  $m_{VG}$  in  $\iota_{VG}$  so empirični parametri in so določeni

iz eksperimentov.  $m_{VG}$  se običajno določi kot  $m_{VG} = 1 - \frac{1}{n_{VG}}$ . Kapilarni pritisk  $p_c$  je določen v poglavju 3.3.2. Ker je zasičenost  $S_l$  funkcija kapilarnega tlaka  $p_c$  in temperature  $T_A$ , lahko upoštevamo naslednje odvisnost za določitev odvoda zasičenosti po času:

$$\dot{S}_l = \frac{\partial S_l}{\partial p_c} \dot{p}_c + \frac{\partial S_l}{\partial T} \dot{T} = \frac{\partial S_l}{\partial p_c} \dot{p}_g - \frac{\partial S_l}{\partial p_c} \dot{p}_l + \frac{\partial S_l}{\partial T} \dot{T}. \quad (3.59)$$

### 3.3.4 Fourierjev zakon

Za opis celotnega toplotnega toka se lahko uporabi naslednja posplošena verzija Fourierjevega zakona (Lewis in Schrefler, 1998, Simo in Miehe, 1992):

$$\mathbf{q}_{T,\pi} = -\mathbf{k}_{T,\pi} \text{grad } T_\pi. \quad (3.60)$$

$\mathbf{k}_{T,\pi}$  je tenzor termalnih prevodnosti v trenutni konfiguraciji,  $\mathbf{q}_{T,\pi}$  pa je toplotni tok faze v trenutni konfiguraciji.

### 3.3.5 Fickov zakon

Masni tok, ki je posledica difuzno disperznih procesov je opisan s Fickovim zakonom (Lewis in Schrefler, 1998):

$$\mathbf{J}_\alpha^\pi = -\rho_\alpha \mathbf{D}_\alpha^\pi \text{grad} \left( \frac{\rho_\pi}{\rho_\alpha} \right), \quad (3.61)$$

kjer je  $\mathbf{D}_\alpha^\pi$  efektivni disperzni tenzor.  $\pi$  je difuzna faza in  $\alpha$  faza v kateri pride do difuzije. Z upoštevanjem enačbe (3.41) sledi odvisnost

$$\text{grad} \left( \frac{\rho_a}{\rho_g} \right) = \text{grad} \left( \frac{\rho_g - \rho_v}{\rho_g} \right) = -\text{grad} \left( \frac{\rho_v}{\rho_g} \right), \quad (3.62)$$

in iz (3.61) in (3.62) sledi enakost disperznega tenzorja  $\mathbf{D}_g^a = \mathbf{D}_g^v = \mathbf{D}_g$ . Z upoštevanjem gornjih enačb in (3.43) sledi fickov zakon za plin z dvema fazama:

$$\mathbf{J}_g^a = -\rho_g \frac{M_a M_v}{M_g^2} \mathbf{D}_g \text{grad} \left( \frac{p_a}{p_g} \right) = \rho_g \frac{M_a M_v}{M_g^2} \mathbf{D}_g \text{grad} \left( \frac{p_v}{p_g} \right) = -\mathbf{J}_g^v, \quad (3.63)$$

Gradient razmerja gostot se z upoštevanjem enačbe (3.42) lahko zapiše kot:

$$\text{grad} \left( \frac{p_v}{p_g} \right) = \frac{\text{grad } p_v}{p_g} - \frac{p_v}{p_g^2} \text{grad } p_g = \frac{1}{p_g} \frac{\partial p_v}{\partial p_c} (\text{grad } p_g - \text{grad } p_l) - \frac{p_v}{p_g^2} \text{grad } p_g, \quad (3.64)$$

## 3.4 Ravnotežne enačbe

V tem poglavju bodo zapisane ravnotežne enačbe mehanike kontinuuma, ki opisujejo stanje faze  $\pi$ . Za pravičen opis obnašanja ne-izotermalnega delno zasičenega poroznega materiala je enačbe problema potrebno izpeljati iz lokalnih enačb ravnotežja mase, gibalne količine, vrtilne količine in energije in entalpije. Za podrobnejšo izpeljavo glej (Lewis in Schrefler, 1998), kjer so izpeljane enačbe pri upoštevanju majhnih deformacij, za dopolnitev za velike deformacije, pa so enačbe za posamezne povezane probleme

podali tudi [Uzuoka in Borja \(2012\)](#), [Li in sod. \(2004\)](#), [Simo in Mieke \(1992\)](#) in [Čanađija in Brnić \(2004\)](#). Enačbe je povzel tudi [de Boer \(1998\)](#).

Za opis problema je potrebno upoštevati kondukcijo toplote, difuzijo pare, konvekcijo, tok tekočine zaradi razlik v pritisku in kapilarnih sil, spremembo toplote zaradi spremembe faze (izhlapevanja in kondenzacije) kapljevine v porah, enačbe so dane v prejšnjem poglavju 3.3. Poleg tega pa je potrebno upoštevati da je medij deformabilen (poglavje 3.2), kar rezultira v močno povezanem polju toka tekočin in toplote ter mehanike trdnin. Predpostavimo, da se faze razen zraka in vlage ne mešajo in kemijsko med seboj ne reagirajo (primer kemijskega potenciala in transport polutantov so podali [Schrefler \(1995\)](#), [Mroginski in sod. \(2010\)](#)). Predpostavka je tudi, da je temperatura vseh različnih faz  $\pi$  v posameznem skupnem delcu enaka.

### 3.4.1 Zakon o ohranitvi mase

V tem poglavju bo obravnavano ravnotežje mase posamezne faze. Pri tem bo upoštevano, da je možen prehod mase iz ene faze v drugo, tako da bo ohranitvi mase zadoščeno v celoti, in ne posamezni fazi  $\pi$ . Sprememba mase celotnega medija mora biti enaka 0 ( $\dot{m} = 0$ ):

$$\dot{M}_\pi = \frac{D}{Dt} \left( \int_{\varphi(B)} \hat{\rho}_\pi(\mathbf{x}, t) dv \right) = \int_{\varphi(B)} \dot{m}_\pi(\mathbf{x}, t) dv. \quad (3.65)$$

Iz enačbe sledi lokalni izraz

$$\frac{\partial \hat{\rho}_\pi}{\partial t} + \text{div}(\hat{\rho}_\pi \mathbf{v}_\pi) = \dot{m}_\pi. \quad (3.66)$$

Po enačbi (3.34) sledi  $\dot{\hat{\rho}}_\pi = \frac{\partial \hat{\rho}_\pi}{\partial t} + \text{grad} \hat{\rho}_\pi \cdot \mathbf{v}_\pi$ , poleg tega je

$$\text{div}(\hat{\rho}_\pi \mathbf{v}_\pi) = \hat{\rho}_\pi \text{div} \mathbf{v}_\pi + \text{grad} \hat{\rho}_\pi \cdot \mathbf{v}_\pi, \quad (3.67)$$

s čimer lahko prepisemo enačbo (3.66) v:

$$\dot{\hat{\rho}}_\pi + \hat{\rho}_\pi \text{div} \mathbf{v}_\pi = \dot{m}_\pi. \quad (3.68)$$

Z vsoto lokalnih ravnotežnih enačb (3.66) ali (3.68) po vseh fazah dobimo enačbo celotnega sestavljenega telesa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \mathbf{l}_m = 0 \quad \text{ali} \quad \dot{\rho} + \sum_{\pi} \hat{\rho}_\pi \text{div} \mathbf{v}_\pi = 0, \quad \rho = \sum_{\pi=1}^{n_\pi} \phi_\pi \rho_\pi = \sum_{\pi=1}^{n_\pi} \hat{\rho}_\pi. \quad (3.69)$$

Pri tem je bilo upoštevano, da velja ohranitev mase celotnega sistema  $\sum_{\pi} \dot{m}_\pi = \dot{m} = 0$ .  $\mathbf{l}_m$  je lokalna gibalna količina

$$\mathbf{l}_m = \sum_{\pi} \mathbf{l}_{m\pi} = \sum_{\pi} \hat{\rho}_\pi \mathbf{v}_\pi. \quad (3.70)$$

### Trdna snov

Za trdno snov  $\pi = s$ , lahko predpostavimo da se masa ohranja, t.j. sprememba mase mora biti 0 ( $\dot{m}_s = 0$ ), torej sta infinitezimalna masna elementa začetne konfiguracije in trenutne konfiguracije trdnine enaka

in posledično velja:

$$\rho_s^0 dV_s = \rho_s dv_s. \quad (3.71)$$

kjer sta  $\rho_s^0$  in  $\rho_s$  notranje gostote trdnine začetne in trenutne konfiguracije. Po enačbi (3.10), ki povezuje volumna trdne snovi  $dV_s$  in  $dv_s$ , sledi odvisnost med gostotama:

$$\rho_s^0 = J_{F,s} \rho_s, \quad (3.72)$$

kjer je  $J_{F,s}$  volumska sprememba trdnega materiala brez por. Zakon o ohranitvi mase trdne snovi sledi iz enačbe (3.68):

$$\dot{\hat{\rho}}_s + \hat{\rho}_s \operatorname{div} \mathbf{v}_s = 0. \quad (3.73)$$

Gostota trdne snovi  $\hat{\rho}_s$  se lahko izrazi z notranjo gostoto  $\rho_s$  povprečeno po fazi  $s$  namesto celotnem volumnu preko poroznosti  $n$ :  $\hat{\rho}_s = \phi_s \rho_s = (1 - n) \rho_s$ . Z upoštevanjem  $\dot{\hat{\rho}}_s = -\dot{n} \rho_s + (1 - n) \dot{\rho}_s$  se lokalna enačba (3.73) prepíše v:

$$(1 - n) \dot{\rho}_s - \rho_s \dot{n} + (1 - n) \rho_s \operatorname{div} \mathbf{v}_s = 0. \quad (3.74)$$

### Tekočina

Ravnotežje mase tekočine  $l$  se lahko zapiše podobno kot za trdno snov:

$$\dot{\hat{\rho}}_l + \hat{\rho}_l \operatorname{div} \mathbf{v}_l = \hat{\rho}_l e_l(\rho), \quad (3.75)$$

kjer za razliko od (3.73) desna stran ni 0, temveč je  $e_l(\rho)$  koeficient izmenjave snovi z ostalimi fazami, kar je posledica utekočinjenja oz. izparevanja tekočine. Sprememba mase tekočine je torej nasprotna spremembi mase plina  $\hat{\rho}_l e_l(\rho) = \dot{m}_v = \dot{m}_l = -\dot{m}_g$ . Od sedaj naprej bo  $\dot{m}_v$  označeval spremembo mase iz tekoče  $l$  v parno fazo  $v$ . Povprečna gostoto tekočine je definirana kot  $\hat{\rho}_l = \phi_l \rho_l = n S_w \rho_l$ . Hitrost tekočine v enačbi (3.75) se lahko izrazi s hitrostjo trdne snovi in relativne hitrosti (3.36):

$$\dot{\hat{\rho}}_l + \mathbf{v}_{l,s} \operatorname{grad} \hat{\rho}_l + \hat{\rho}_l \operatorname{div} (\mathbf{v}_l - \mathbf{v}_{l,s}) = -\dot{m}_v. \quad (3.76)$$

Časovni odvodi zgornje enačbe, se sedaj nanašajo na trdno fazo, t.j.  $\dot{f}_l = \dot{f}_l^s = \frac{D_s f_l}{Dt}$ . Odvodi gostote po času so  $\dot{\hat{\rho}}_\pi = (\phi_\pi \dot{\rho})_\pi = \dot{\phi}_\pi \rho_\pi + \phi_\pi \dot{\rho}_\pi$  in  $\dot{\hat{\rho}}_l = \dot{n} \rho_l + n \dot{S}_l \rho_l + n S_l \dot{\rho}_l$ . Z vpeljavo trenutne gostote tekočine  $\rho_l$  v enačbo (3.67) ter vsoto te enačbe normirane z gostoto  $\rho_l$  z ravnotežno enačbo za trdno snov (3.74), normirano z gostoto  $\rho_s$  sledi:

$$\frac{S_l(1 - n)}{\rho_s} \dot{\rho}_s + S_l \operatorname{div} \mathbf{v}_s + \frac{S_l n}{\rho_l} \dot{\rho}_l + n \dot{S}_l + \frac{1}{\rho_l} \operatorname{div} (n S_l \rho_l \mathbf{v}_{l,s}) = -\frac{\dot{m}_v}{\rho_l}. \quad (3.77)$$

Pri vsoti enačb odpade odvod  $\dot{n}$ . Za nadaljevanje so potrebni konstitutivni zakoni za določitev časovnih odvodov gostot  $\dot{\rho}_l$  in  $\dot{\rho}_s$ . Gostota tekočine, na primer vode, je določena z eksponentno enačbo in njeno poenostavljeno varianto prvega reda:

$$\rho_l = \rho_l^0 \exp \left( -\beta_l T + \frac{1}{\kappa_l} (p_l - p_l^0) \right), \quad (3.78)$$

$$\rho_l = \rho_l^0 \left( 1 - \beta_l T + \frac{1}{\kappa_l} (p_l - p_l^0) \right). \quad (3.79)$$

Normiran odvod po času pripelje do izraza:

$$\frac{\dot{\rho}_l}{\rho_l} = \frac{\rho_l^0}{\rho_l} \exp\left(-\beta_l T + \frac{p_l}{\kappa_l} (p_l - p_l^0)\right) \left(\frac{\dot{p}_l}{\kappa_l} - \beta_l \dot{T}\right) = \frac{\dot{p}_l}{\kappa_l} - \beta_l \dot{T}. \quad (3.80)$$

Normiran časovni odvod spremembe gostote trdne matrice  $\rho_s$  se po avtorjih [Lewis in Schrefler \(1998\)](#) zapiše ob predpostavki, da je gostota funkcija pornih tlakov  $p_s = \sum_{\pi \in \mathcal{S}} S_\pi p_\pi$  (glej poglavje 3.4.2), temperature  $T$  ter prve invariante efektivnih napetosti  $\sigma_E$ :

$$\frac{\dot{\rho}_s}{\rho_s} = -\frac{\dot{V}_s}{V_s} = \frac{\dot{p}_s}{\kappa_s} - \beta_s \dot{T} - \frac{\dot{I}_{\sigma_E}}{3(n-1)\kappa_s}, \text{ sledi} \quad (3.81)$$

$$\frac{\dot{\rho}_s}{\rho_s} = \frac{1}{1-n} \left( (\alpha_b - n) \frac{\dot{p}_s}{\kappa_s} - (\alpha_b - n) \beta_s \dot{T} - (1 - \alpha_b) \operatorname{div} \mathbf{v}_s \right), \quad (3.82)$$

kjer je upoštevano, da je odvod invariante enak ([Lewis in Schrefler, 1998](#)):

$$\dot{I}_{\sigma_E} = 3\kappa \left( \operatorname{div} \mathbf{v}_s + \frac{\dot{p}_s}{\kappa_s} - \beta_s \dot{T} \right). \quad (3.83)$$

Z upoštevanjem odvodov gostot (3.80) in (3.82) in  $\dot{S}_l = -\dot{S}_g$  prepišemo enačbo (3.77), da dobimo zakon o ohranitvi mase kapljevine s stisljivimi trdnimi zrni:

$$\begin{aligned} & \left( \frac{(\alpha_b - n)}{\kappa_s} S_l^2 + \frac{n S_l}{\kappa_l} \right) \dot{p}_l + \frac{(\alpha_b - n)}{\kappa_s} S_l S_g \dot{p}_g + \alpha_b S_l \operatorname{div} \mathbf{v}_s \\ & - \beta_{sl}^T \dot{T} + \left( \frac{(\alpha_b - n)}{\kappa_s} p_l S_l - \frac{(\alpha_b - n)}{\kappa_s} p_g S_l + n \right) \dot{S}_l + \frac{1}{\rho_l} \operatorname{div} \mathbf{q}_l = -\frac{\dot{m}_v}{\rho_l}. \end{aligned} \quad (3.84)$$

Zakon o ohranitvi mase kapljevine z nestisljivimi trdnimi zrni dobimo, če v zgornji enačbi (3.84) togost zrn limitiramo proti neskončnosti  $\kappa_s \rightarrow \infty$ , posledično so vsi členi oblike  $\frac{(\ )}{\kappa_s}$  enaki 0, ter  $\alpha_b = 1$ , kar ne pomeni, da ni deformacij medija, ampak, da se deformacije trdne snovi izvedejo na račun zapiranja por:

$$\frac{n S_l}{\kappa_l} \dot{p}_l + \alpha_b S_l \operatorname{div} \mathbf{v}_s - \beta_{sl}^T \dot{T} + n \dot{S}_l + \frac{1}{\rho_l} \operatorname{div} \mathbf{q}_l = -\frac{\dot{m}_v}{\rho_l}, \quad (3.85)$$

kjer je  $\beta_{sl}^T = S_l ((\alpha_b - n) \beta_s^T + n \beta_l^T)$ .

### Plin in para

Za plinasto fazo  $g$  privzamemo, da je dvokomponentni material sestavljen iz dveh različnih plinov, in sicer suhega zraka  $a$  in pare  $v$ , ki se mešata in zavzemata hkrati enak volumen. Zato velja  $\rho_g = \rho_a + \rho_v$  (glej poglavje 3.3.1) in se posledično lahko zapiše gostota plinov povprečena po volumnu izražena z notranjimi gostotami kot  $\hat{\rho}_\pi = \phi_g \rho_\pi = n S_g \rho_\pi$  za  $\pi \in (g, a, v)$ . Hkrati je privzeta sprememba mase suhega plina enaka 0, faza pare, pa se lahko kondenzira v tekočino in je sprememba mase enaka spremembi mase  $\dot{m}_v$ . Opisane enačbe vodijo do enačbe ravnotežja za suh zrak  $a$  in parno fazo  $v$ :

$$\frac{\partial \hat{\rho}_a}{\partial t} + \operatorname{div} (\hat{\rho}_a \mathbf{v}_a) = 0, \quad (3.86)$$

$$\frac{\partial \hat{\rho}_v}{\partial t} + \operatorname{div} (\hat{\rho}_v \mathbf{v}_v) = \dot{m}_v. \quad (3.87)$$

Z vsoto enačb (3.86) in (3.87) sledi po postopku prikazanem za splošen opis lokalna masna enačba zmesi

plinov:

$$\hat{\rho}_g + \hat{\rho}_g \operatorname{div} \mathbf{v}_g = \dot{m}_v, \quad \mathbf{v}_g = c_a \mathbf{v}_a + c_v \mathbf{v}_v, \quad c_\pi = \frac{\rho_\pi}{\rho_g}, \quad \sum_{\pi \in (a,v)} c_\pi = 1. \quad (3.88)$$

Hitrost plina  $\mathbf{v}_g$  je sestavljena iz hitrosti obeh komponent plina  $\mathbf{v}_a$  in  $\mathbf{v}_v$ , kjer je  $c_\pi$ , masni delež komponente  $\pi$ . Podobno izpeljemo enačbo posameznih komponent plina  $a$  in  $v$ , s to razliko, da hitrost komponente  $\mathbf{v}_\pi$  izrazimo s hitrostjo mešanice plina  $\mathbf{v}_g$ , tako da pridobimo dodatni člen z difuzno hitrostjo. Lokalna masna enačba faze  $v$  in  $a$ :

$$\hat{\rho}_v + \operatorname{div} \mathbf{J}_g^v + \hat{\rho}_v \operatorname{div} \mathbf{v}_g = \dot{m}_v, \quad (3.89)$$

$$\hat{\rho}_g + \operatorname{div} \mathbf{J}_g^a + \hat{\rho}_a \operatorname{div} \mathbf{v}_g = 0, \quad (3.90)$$

kjer je  $\mathbf{J}_g^\pi = \hat{\rho}_\pi \mathbf{v}_{\pi,g}$  difuzno-disperzivni masni tok komponente  $\pi$  (glej 3.3.5) in  $\mathbf{v}_{\pi,g} = \mathbf{v}_\pi - \mathbf{v}_g$  difuzno-disperzivna hitrost (3.36). Enako kot v enačbi kapljevine (3.76) se lahko hitrost plinov v enačbi (3.88) izrazi s hitrostjo trdne snovi in relativne hitrosti:

$$\hat{\rho}_g + \mathbf{v}_{l,s} \operatorname{grad} \hat{\rho}_g + \hat{\rho}_g \operatorname{div} (\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_{l,s}) = \dot{m}_v. \quad (3.91)$$

Časovni odvodi zgornje enačbe, se sedaj nanašajo na trdno fazo, t.j.  $\dot{f}_g = \dot{f}_g^s = \frac{D_s f_g}{Dt}$ . Odvod gostote plina je analogen kot za tekočino  $\hat{\rho}_g = \dot{n} \rho_g + n \dot{S}_g \rho_g + n S_g \dot{\rho}_g$ :

$$\frac{S_g(1-n)}{\rho_s} \dot{\rho}_s + S_g \operatorname{div} \mathbf{v}_s + \frac{S_g n}{\rho_g} \dot{\rho}_g + n \dot{S}_g + \frac{1}{\rho_g} \operatorname{div} (n S_g \rho_g \mathbf{v}_{g,s}) = \frac{\dot{m}_v}{\rho_g}. \quad (3.92)$$

Z vnosom časovnih odvodov gostote trdnine, sledi zakon o ohranitvi mase plina s stisljivimi trdnimi zrnji:

$$\begin{aligned} & \frac{(\alpha_b - n)}{\kappa_s} S_l S_g \dot{\rho}_l + \frac{(\alpha_b - n)}{\kappa_s} S_g^2 \dot{\rho}_g - \left( n + \frac{(\alpha_b - n)}{\kappa_s} p_c S_g \right) \dot{S}_l \\ & + \alpha_b S_g \operatorname{div} \mathbf{v}_s - \beta_s^T (\alpha_b - n) S_g \dot{T} + \frac{n S_g}{\rho_g} \dot{\rho}_g + \frac{1}{\rho_g} \operatorname{div} \mathbf{q}_g = - \frac{\dot{m}_v}{\rho_g}. \end{aligned} \quad (3.93)$$

Enačbe je ugodneje zapisati ločeno za suh zrak  $a$  ter vlažen zrak  $v$ . Z vsoto ravnotežne enačbe za kapljevine  $l$  in parne faze  $v$  se izognemo členu  $\dot{m}_v$ . Evolucijska enačba za  $\dot{m}_v$  je v opisu problema še vedno potrebna v energijski enačbi, ki bo izpeljana kasneje v poglavju 3.4.4. Po enakem postopku kot za mešanico plina izpeljemo enačbo suhe faze iz enačbe (3.90). Zakon o ohranitvi mase suhega zraka s stisljivimi trdnimi zrnji sledi po podobnem postopku kot za mešanico plina in kapljevine:

$$\begin{aligned} & \frac{(\alpha_b - n)}{\kappa_s} S_l S_g \dot{\rho}_l + \frac{(\alpha_b - n)}{\kappa_s} S_g^2 \dot{\rho}_g - \left( n + \frac{(\alpha_b - n)}{\kappa_s} p_c S_g \right) \dot{S}_l \\ & + \alpha_b S_g \operatorname{div} \mathbf{v}_s - \beta_s^T (\alpha_b - n) S_g \dot{T} + \frac{n S_g}{\rho_a} \dot{\rho}_a + \frac{1}{\rho_a} \operatorname{div} \mathbf{J}_g^a + \frac{1}{\rho_a} \operatorname{div} \mathbf{q}_a = 0. \end{aligned} \quad (3.94)$$

Analogno sledi enačba parne faze iz (3.89):

$$\begin{aligned} & \frac{(\alpha_b - n)}{\kappa_s} S_l S_g \dot{\rho}_l + \frac{(\alpha_b - n)}{\kappa_s} S_g^2 \dot{\rho}_g - \left( n + \frac{(\alpha_b - n)}{\kappa_s} p_c S_g \right) \dot{S}_l \\ & + \alpha_b S_g \operatorname{div} \mathbf{v}_s - \beta_s^T (\alpha_b - n) S_g \dot{T} + \frac{n S_g}{\rho_v} \dot{\rho}_v + \frac{1}{\rho_v} \operatorname{div} \mathbf{J}_g^v + \frac{1}{\rho_v} \operatorname{div} \mathbf{q}_v = \frac{\dot{m}_v}{\rho_v}. \end{aligned} \quad (3.95)$$

pri tem je masni pretok  $\mathbf{q}_\pi$  določen po enačbi (3.49)  $\mathbf{q}_\pi = n S_g \rho_\pi \mathbf{v}_{a,s} = -\rho_\pi \frac{\mathbf{k}^{kr,g}}{\mu_g} (\operatorname{grad} p_g + \rho_g (\mathbf{a}_s +$

$\mathbf{a}_{as} - \bar{\mathbf{b}})$  za  $a$  in  $v$ . Zakon o ohranitvi mase tekočine in njene plinaste faze (pare) s stisljivimi trdnimi zrnji se lahko dobi z vsoto lokalnih enačb parne faze (3.84) pomnožene z  $\rho_v$  in kapljevine (3.95) pomnožene z  $\rho_l$ , pri tem  $\dot{m}_v$  izgine:

$$\begin{aligned} & \left( \frac{(\alpha_b - n)}{\kappa_s} S_l (\rho_v S_g + \rho_l S_l) + \rho_l \frac{n S_l}{\kappa_l} \right) \dot{p}_l + \frac{(\alpha_b - n)}{\kappa_s} S_l (\rho_v S_g + \rho_l S_l) \dot{p}_g + \\ & \left( \frac{(\alpha_b - n)}{\kappa_s} (\rho_v S_g p_c + \rho_v S_l p_l - \rho_l S_l p_c) + n (\rho_g - \rho_v) \right) \dot{S}_l \\ & + (\rho_v S_g + \rho_l S_l) \alpha_b S_l \operatorname{div} \mathbf{v}_s - \beta_{slg}^T \dot{T} + n S_g \dot{\rho}_v + \operatorname{div} \mathbf{J}_g^v + \operatorname{div} \mathbf{q}_g + \operatorname{div} \mathbf{q}_l = 0, \end{aligned} \quad (3.96)$$

kjer je  $\beta_{slg}^T = \beta_s^T (\alpha_b - n) (S_g \rho_v + S_l \rho_l) + n \beta_l^T S_l \rho_l$  povprečena temperaturna volumska razteznostna koeficienta telesa,  $\beta_\pi^T = 3\alpha_\pi^T$  pa je koeficient posamezne faze  $\pi$  in je trikratnik linijskega koeficienta  $\alpha_\pi^T$ .  $\alpha_b$  je Biotov koeficient, glej enačbo (3.107).

### 3.4.2 Zakon o ohranitvi gibalne količine

Zakon o ohranitvi gibalne količine pravi, da je sprememba gibalne količine  $\mathbf{L}$  po času enaka vsoti vseh zunanjih sil  $\bar{\mathbf{f}}$ , ki delujejo na telo  $B$  ali njegovo površino  $\partial B$ . Zakon lahko zapišemo za vsako fazo  $\pi$ :

$$\dot{\mathbf{L}}_\pi = \bar{\mathbf{f}}_\pi. \quad (3.97)$$

Posledično potrebujemo zapisati enačbo gibalne količine telesa, ki je integral hitrosti, ki deluje na masni delec telesa, za vsako fazo  $\pi$  posebej (de Boer, 1998, Lewis in Schrefler, 1998). Gibalna količina za trenutno in začetno konfiguracijo posamezne faze je dana z integracijo lokalne gibalne količine  $\mathbf{l}_{m\pi}$  (3.70) za referenčno in trenutno konfiguracijo:

$$\mathbf{L}_\pi = \int_{\varphi(B)} \mathbf{l}_{m\pi} dv = \int_{\varphi(B)} \hat{\rho}_\pi \mathbf{v}_\pi dv = \int_B J_F \hat{\rho}_\pi \mathbf{v}_\pi dV. \quad (3.98)$$

Sile, ki delujejo na posamezno fazo so zunanje vztrajnostne sile  $\bar{\mathbf{b}}_\pi$ , ki delujejo na masni delec telesa in posledično povzroči volumsko obtežbo na telo (npr. gravitacija), in površinske obtežbe  $\mathbf{t}_\pi$ , ki delujejo na površino telesa, hkrati pa so prisotne tudi interakcijske sile med fazami  $\bar{\mathbf{p}}_\pi$ :

$$\bar{\mathbf{f}}_\pi = \int_{\varphi(B)} \hat{\rho}_\pi \bar{\mathbf{b}}_\pi + \bar{\mathbf{p}}_\pi dv + \int_{\varphi(\partial B)} \mathbf{t}_\pi da. \quad (3.99)$$

Cauchyjev teorem, ki povezuje obtežbo na površini z napetostjo v smeri normale na robu telesa  $\varphi(\partial B)$  se zapiše

$$\mathbf{t}_\pi = \boldsymbol{\sigma}_\pi \mathbf{n}, \quad (3.100)$$

kjer sta  $\boldsymbol{\sigma}_\pi$  Cauchyjev napetostni tenzor faze  $\pi$  ter  $\mathbf{n}$  normala na površino telesa. Z upoštevanjem Cauchyjevega teorema, zakona o divergenci ter masnih ravnotežnih enačb (3.73) ali (3.75), se  $\dot{\mathbf{L}}_\pi = \dot{\bar{\mathbf{f}}}_\pi$  zapiše za trenutno stanje  $\varphi(B)$  kot:

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_\pi + \hat{\rho}_\pi \bar{\mathbf{b}}_\pi + \bar{\mathbf{p}}_\pi = \hat{\rho}_\pi \dot{\mathbf{v}}_\pi + \dot{m}_\pi \mathbf{v}_\pi. \quad (3.101)$$

$\hat{\rho}_\pi \dot{\mathbf{v}}_\pi$  predstavlja notranjo vztrajnostno silo zaradi gibanja faze  $\pi$ ,  $\dot{m}_\pi \mathbf{v}_\pi$  pa predstavlja izmenjavo gibalne



količine preko spremembe gostote. Če enačbo (3.101) seštejemo po  $\pi$ , in upoštevamo, da mora biti volumska obtežba enaka za vsako fazo  $\bar{\mathbf{b}} = \bar{\mathbf{b}}_\pi$ , in da je vsota interakcijskih sil glede na celotno telo enaka  $\sum_\pi \bar{\mathbf{p}}_\pi = 0$ , dobimo:

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \rho \bar{\mathbf{b}} = \sum_\pi (\hat{\rho}_\pi \dot{\mathbf{v}}_\pi + \dot{m}_\pi \mathbf{v}_\pi), \quad \rho = \rho_s(1 - n) + n \sum_{\pi \setminus s} S_\pi \rho_\pi. \quad (3.102)$$

$\rho$  je povprečna gostota medija. Desno stran enačbe se lahko, če pospeške tekočin zapišemo relativno na trdno snov  $\dot{\mathbf{v}}_\pi = \mathbf{a}_\pi = \dot{\mathbf{v}}_s + \dot{\mathbf{v}}_{\pi,s} + \operatorname{grad} \mathbf{v}_\pi \cdot \mathbf{v}_{\pi,s}$ . Če se upošteva že definiran  $\mathbf{a}_{\pi s}$  (3.50) in če upoštevamo  $\mathbf{v}_{\pi,s} = \mathbf{v}_\pi - \mathbf{v}_s$  (glej pogl. 3.2.3) sledijo pospeški tekočih faz:

$$\bar{\mathbf{a}}_\pi = \mathbf{a}_{\pi,s} + \operatorname{grad} \mathbf{v}_\pi \cdot \mathbf{v}_{\pi,s} = \frac{\partial \mathbf{v}_{\pi,s}}{\partial t} + \operatorname{grad} \mathbf{v}_\pi \cdot \mathbf{v}_\pi - \operatorname{grad} \mathbf{v}_s \cdot \mathbf{v}_s, \quad (3.103)$$

$$\mathbf{a}_\pi = \mathbf{a}_s + \bar{\mathbf{a}}_\pi. \quad (3.104)$$

Z upoštevanjem zgornje enačbe se enačba (3.102) prepíše v bolj znano obliko za trdno telo, z upoštevanjem dodatnih faz  $\pi$  v porah:

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \rho \bar{\mathbf{b}} = \rho \mathbf{a}_s + \sum_{\pi=l,g} (\hat{\rho}_\pi \bar{\mathbf{a}}_\pi + \dot{m}_\pi \mathbf{v}_\pi). \quad (3.105)$$

Iz enačb (3.102) in (3.105) lahko prepoznamo totalni Cauchyjev napetostni tenzor, ta se lahko zapiše kot prispevek napetosti vsake od faz  $\pi$ :

$$\boldsymbol{\sigma} = \sum_\pi \boldsymbol{\sigma}_\pi = \boldsymbol{\sigma}_s - \sum_{\pi \setminus s} \phi_\pi p_\pi \mathbf{I} = \boldsymbol{\sigma}_s - n \sum_{\pi \setminus s} S_\pi p_\pi \mathbf{I} = \boldsymbol{\sigma}_s - p_s \mathbf{I} n, \quad (3.106)$$

kjer upoštevamo, da tekoče in plinaste faze nudijo le volumski odpor, zato se njihova strižna togost lahko zanemari, posledično njihov prispevek predstavlja zgolj volumsko napetost, ki jo opiše pritisk faze  $\boldsymbol{\sigma}_\pi = -\phi_\pi p_\pi \mathbf{I}$ , kjer je  $p_s$  porni tlak  $p_s = \sum_{\pi \setminus s} S_\pi p_\pi$ . Napetost trde faze  $\boldsymbol{\sigma}_s$  zajema poleg napetosti v zrnih tudi prispevek pornih tlakov, in se lahko zapiše tudi kot:

$$\boldsymbol{\sigma}_s = \boldsymbol{\sigma}_E + \frac{\phi_s}{n} \sum_{\pi \setminus s} \boldsymbol{\sigma}_\pi = \boldsymbol{\sigma}_E - \phi_s \sum_{\pi \setminus s} S_\pi p_\pi \mathbf{I} = \boldsymbol{\sigma}_E - \phi_s p_s \mathbf{I}, \quad (3.107)$$

kjer je  $\boldsymbol{\sigma}_E$  efektivna napetost v trdne snovi. Celotno napetost (3.106) prepíšemo z upoštevanjem enačbe (3.107) in  $\phi_s = 1 - n$  pridemo do klasične enačbe:

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_E - (1 - n) \mathbf{I} p_s - n \mathbf{I} p_s = \boldsymbol{\sigma}_E - p_s \mathbf{I}. \quad (3.108)$$

Biot in Willis (1957), de Boer (1998), Lewis in Schrefler (1998), Uzuoka in Borja (2012) in drugi podajajo splošnejše izraze. Najpogosteje navajajo uporabo Biotovega koeficienta:

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_E - \alpha_b \mathbf{I} p_s, \quad \alpha_b = 1 - \frac{\kappa}{\kappa_s}, \quad (3.109)$$

kjer je  $\alpha_b$  Biotov koeficient, ki določa razmerje med togostjo trdne matrice  $\kappa_s$  in togostjo celotnega poroznega medija  $\kappa$ . V primeru absolutno togih zrn  $\kappa_s \rightarrow \infty$ , je  $\alpha_b = 1$ .

### 3.4.3 Zakon o ohranitvi vrtilne količine

Zakon o ohranitvi vrtilne količine je analogen zakonu o ohranitvi gibalne in pravi, da je sprememba vrtilne količine  $\mathbf{J}$  po času enaka vsoti vseh zunanjih navorov oz. momentov  $\bar{\mathbf{m}}$ , ki so posledica sil, ki delujejo na telo  $B$  ali njegovo površino  $\partial B$ :

$$\dot{\mathbf{J}}_\pi = \bar{\mathbf{m}}_\pi. \quad (3.110)$$

Vrtilna količina  $\mathbf{J}$  je integral hitrosti v masnem delcu faze  $\pi$  vektorsko pomnožene z ročico  $\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_O$ , ki povezuje referenčno točko  $O$ , dano s koordinato  $\mathbf{x}_O$ , z vsako točko telesa  $\mathbf{x}$  (de Boer, 1998, Lewis in Schrefler, 1998). Vrtilna količina za trenutno in začetno konfiguracijo faze  $\pi$  je dana z enačbo:

$$\mathbf{J}_\pi = \int_{\varphi(B)} \mathbf{r} \times \mathbf{l}_{m\pi} dv = \int_{\varphi(B)} \mathbf{r} \times \hat{\rho}_\pi \mathbf{v}_\pi dv = \int_B \mathbf{r} \times J_F \hat{\rho}_\pi \mathbf{v}_\pi dV. \quad (3.111)$$

Navori, ki delujejo na različne faze so posledica zunanjih vztrajnostnih sil  $\bar{\mathbf{b}}_\pi$ , ki delujejo na masni delec telesa, površinskih obtežb  $\mathbf{t}_\pi$  in momentov, ki jih povzročijo interakcijske sile med fazami  $\bar{\mathbf{p}}_\pi$ :

$$\bar{\mathbf{m}}_\pi = \int_{\varphi(B)} \mathbf{r} \times (\hat{\rho}_\pi \bar{\mathbf{b}}_\pi + \bar{\mathbf{p}}_\pi) dv + \int_{\varphi(\partial B)} \mathbf{r} \times \mathbf{t}_\pi da + \int_{\varphi(B)} \hat{\mathbf{m}}_\pi dv, \quad (3.112)$$

kjer je  $\hat{\mathbf{m}}_\pi$  izmenjava navorov faze  $\pi$  z ostalimi fazami. Enačba  $\dot{\mathbf{J}}_\pi = \bar{\mathbf{m}}_\pi$  sledi:

$$\int_{\varphi(B)} \mathbf{r} \times (\hat{\rho}_\pi \dot{\mathbf{v}}_\pi + \dot{\hat{\rho}}_\pi \mathbf{v}_\pi) dv = \bar{\mathbf{m}}_\pi. \quad (3.113)$$

Na podoben način kot gibalno količino, transformiramo zgornjo enačbo v lokalno ravnotežje vrtilnega momenta za vsako od faz:

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\mathbf{r} \times \boldsymbol{\sigma}_\pi) + \mathbf{r} \times (\hat{\rho}_\pi \bar{\mathbf{b}}_\pi + \bar{\mathbf{p}}_\pi) + \hat{\mathbf{m}}_\pi &= \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{r} \times (\hat{\rho}_\pi \dot{\mathbf{v}}_\pi + \dot{m}_\pi \mathbf{v}_\pi) \\ + \operatorname{div}((\mathbf{r} \times (\hat{\rho}_\pi \dot{\mathbf{v}}_\pi + \dot{m}_\pi \mathbf{v}_\pi)) \otimes (\hat{\rho}_\pi \dot{\mathbf{v}}_\pi + \dot{m}_\pi \mathbf{v}_\pi)) &dv. \end{aligned} \quad (3.114)$$

od tu naprej je potrebno nekaj matematične manipulacije gradientov, divergence in tenzorskega produkta, ki pripelje do vsote, kjer nastopajo masna ravnotežna enačba in enačba ravnotežja gibalne količine, ki sta enaki  $\mathbf{0}$ , tako da na koncu ostane le enačba:

$$\mathbf{I} \times \boldsymbol{\sigma}_\pi = -\hat{\mathbf{m}}_\pi. \quad (3.115)$$

Z vsoto (3.115) po  $\pi$  in upoštevanjem, da je vsota izmenjanih navorov nič ( $\sum_\pi \hat{\mathbf{m}}_\pi = \mathbf{0}$ ) dobimo

$$\mathbf{I} \times \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}. \quad (3.116)$$

Iz enačbe (3.116) sledi poznano dejstvo, da mora biti skupen Cauchyjev tenzor napetosti simetričen:

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^\top, \quad \sigma_{ik} = \sigma_{ki}, \quad (3.117)$$

vendar pa za delne tenzorje  $\boldsymbol{\sigma}_\pi$  to ne velja nujno (de Boer, 1998), saj so lahko nediagonalni deli tenzorjev antisimetrični, saj velja  $\boldsymbol{\sigma}_\pi - \boldsymbol{\sigma}_\pi^\top = \boldsymbol{\sigma}_\pi^m$ , kjer je tenzor  $\boldsymbol{\sigma}_\pi^m$  antisimetričen, kar zajema tudi primer, ko je  $\boldsymbol{\sigma}_\pi$  simetričen, če je  $\boldsymbol{\sigma}_\pi^m = \mathbf{0}$ . V obravnavanem primeru so vsi tenzorji simetrični  $\boldsymbol{\sigma}_\pi$ .

### 3.4.4 Zakon o ohranitvi energije

Zakon o ohranitvi energije je znan tudi kot prvi zakon termodinamike. Zakon se glasi, da je sprememba celotne notranje energije  $U$  in kinetične energije  $K$  po času enaka mehanskemu delu vseh zunanjih sil  $P$  ter dovodu toplote  $Q$ . Ustrezno enačbo zakona zapišemo za fazo  $\pi$ :

$$\dot{E}_\pi = \dot{U}_\pi + \dot{K}_\pi = P_\pi + Q_\pi + \int_{\varphi(B)} \bar{e}_\pi dv, \quad (3.118)$$

kjer je  $\bar{e}_\pi$  dovod energije, ki je posledica ostalih faz. Celotna energija telesa  $E$  je vsota kinetične in notranje energije telesa, ki sta definirani z enačbama:

$$K_\pi = \int_{\varphi(B)} \frac{1}{2} \hat{\rho}_\pi \mathbf{v}_\pi \cdot \mathbf{v}_\pi dv, \quad (3.119)$$

$$U_\pi = \int_{\varphi(B)} \hat{\rho}_\pi u_\pi dv, \quad (3.120)$$

kjer je  $u_\pi = u_\pi(\mathbf{x}, t)$  specifična notranja energija. Zunanja dejavniki, ki vplivajo na spremembo energije telesa  $E$  sta mehanska moč, ki je posledica volumskih  $\bar{\mathbf{b}}_\pi$  in površinskih obtežb  $\mathbf{t}_\pi$

$$P_\pi = \int_{\varphi(B)} \rho \bar{\mathbf{b}}_\pi \cdot \mathbf{v}_\pi dv + \int_{\varphi(\partial B)} \mathbf{t}_\pi \cdot \mathbf{v}_\pi da \quad (3.121)$$

in dotok toplote

$$Q_\pi = \int_{\varphi(B)} \hat{\rho}_\pi r_\pi dv - \int_{\varphi(\partial B)} \mathbf{q}_{T,\pi} \cdot \mathbf{n} da, \quad (3.122)$$

ki je sestavljen iz kondukcije preko površine telesa, in je opisan z vektorjem delnega toplotnega toka  $\mathbf{q}_{T,\pi}$  (glej poglavje 3.3.4) v smeri normale  $\mathbf{n}$ , ter iz notranjega vira toplote (specifični dotok toplote)  $r_\pi$ .

Če v enačbo (3.118) vstavimo enačbe (3.119), (3.120), (3.121) in (3.122) z upoštevanjem lokalne enačbe ravnotežja mase (3.68) pridemo do lokalne ravnotežne enačbe:

$$\hat{\rho}_\pi \dot{u}_\pi + \hat{\rho}_\pi \left( u_\pi - \frac{1}{2} \mathbf{v}_\pi \cdot \mathbf{v}_\pi \right) = \boldsymbol{\sigma}_\pi \cdot \mathbf{d}_\pi + \hat{\rho}_\pi r_\pi - \operatorname{div} \mathbf{q}_{T,\pi} - \bar{\mathbf{p}}_\pi \cdot \mathbf{v}_\pi + \bar{e}_\pi. \quad (3.123)$$

Celotna energija se lahko določi z vsoto zgornje enačbe po vseh fazah. V tem primeru členu  $\sum_\pi \bar{\mathbf{p}}_\pi \cdot \mathbf{v}_\pi = 0$  in  $\sum_\pi \bar{e}_\pi = 0$  odpadeta, saj predstavljata izmenjavo energije med posameznimi fazami. Z dodatnimi predpostavkami se enačba zapiše kot sledi:

$$\sum_\pi (\hat{\rho}_\pi \dot{u}_\pi) = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{d} + \sum_\pi (\hat{\rho}_\pi r_\pi) - \operatorname{div} \mathbf{q}_T, \quad \mathbf{q}_T = \sum_\pi \mathbf{q}_{T,\pi}. \quad (3.124)$$

Pri tem zanemarimo spremembo gostote po času in hitrosti.  $\boldsymbol{\sigma}$  je totalni oz. skupni tenzor napetosti (3.109),  $\mathbf{d}$  pa je simetrični del gradienta hitrosti (preglednica (3.2)), določen iz celotnega deformacijskega gradienta medija. Izraz  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{d}$  se imenuje tudi specifična napetostna moč. Celotni temperaturni tok je določen po Fourierjevem zakonu (3.60) ob predpostavki, da so temperature vseh faz v točki enake  $T = T_\pi = T_\alpha$ :

$$\mathbf{q}_T = \operatorname{grad} T \sum_\pi \mathbf{k}_T, \quad (3.125)$$

$$\mathbf{k}_T = \sum_{\pi} \mathbf{k}_{T,\pi}, \quad (3.126)$$

kjer je  $\mathbf{k}_T$  efektivni tenzor toplotne prevodnosti in  $\mathbf{k}_{T,\pi}$  tenzorji toplotnih prevodnosti posamezne faze. Po [Simo in Miehe \(1992\)](#) in [Čanađija in Brnić \(2004\)](#) se  $\mathbf{k}$  lahko pri izotropičnem materialu zreducira na skalar  $k \mathbf{I}$ .

Ker se bo obravnavana tudi sprememba faze, je ugodno notranjo energijo izraziti z entalpijo  $h_{\pi} = u_{\pi} + p_{\pi}/\rho_{\pi}$ . Pri tem upoštevamo  $\dot{u}_{\pi} = \dot{h}_{\pi} + \frac{\dot{p}_{\pi}}{\rho_{\pi}} - \frac{p_{\pi}\dot{\rho}_{\pi}}{\rho_{\pi}^2}$ . Ker je entalpija funkcija pritiskov in temperatur  $h_{\pi}(p_{\pi}, T_{A,\pi})$ . Hkrati je možno entalpijo razdeliti na prispevek temperature in prispevek pritiskov.  $\dot{h}_{\pi} = \left(\frac{\partial h_{\pi}}{\partial T_{A,\pi}}\right)_{p_{\pi}} \dot{T}_{A,\pi} + \left(\frac{\partial h_{\pi}}{\partial p_{\pi}}\right)_{T_{A,\pi}} \dot{p}_{\pi}$ . Sedaj vpeljemo specifično toploto  $c_p^{\pi} = \left(\frac{\partial h_{\pi}}{\partial T_{A,\pi}}\right)_{p_{\pi}}$  in določimo  $\left(\frac{\partial h_{\pi}}{\partial p_{\pi}}\right)_{T_{A,\pi}} = \frac{1}{\rho_{\pi}} - T_{A,\pi} \left(\frac{\partial}{\partial T_{A,\pi}} \left(\frac{1}{\rho_{\pi}}\right)\right)_{p_{\pi}} = \frac{1}{\rho_{\pi}} \left(1 - \frac{T_{A,\pi}}{\rho_{\pi}} \left(\frac{\partial \rho_{\pi}}{\partial T_{A,\pi}}\right)\right)_{p_{\pi}}$ . Z upoštevanjem zgornjega v enačbi (3.123) in nekaj dodatnih poenostavitvev, pridemo enačbe:

$$\hat{\rho}_{\pi} c_p^{\pi} \dot{T}_{\pi} = \boldsymbol{\sigma}_{\pi} \cdot \mathbf{d}_{\pi} + \hat{\rho}_{\pi} r_{\pi} - \operatorname{div} \mathbf{q}_{T,\pi} - \bar{\mathbf{p}}_{\pi} \cdot \mathbf{v}_{\pi} + \bar{e}_{\pi} - \dot{m}_{\pi} h_{\pi}. \quad (3.127)$$

Enačba ravnotežja energije celotnega medija se zapiše z vsoto enačb (3.127), kjer upoštevamo  $T_{\pi} = T$ ,  $T_A = T_0 + T$  in enačbo (3.34)  $\dot{T}_{\pi} = \frac{\partial T_{\pi}}{\partial t} + \operatorname{grad} T_{\pi} \cdot \hat{\mathbf{v}}_{\pi}$ . Pri tem konvekcijski tok v trdni snovi ( $\hat{\rho}_s c_p^s \mathbf{v}_s = \mathbf{0}$ ) zanemarimo:

$$(\rho c_p)_E \frac{\partial T}{\partial t} + \sum_{\pi=l,g} \hat{\rho}_{\pi} c_p^{\pi} \mathbf{v}_{\pi} \cdot \operatorname{grad} T - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{d} - (\rho r)_E + \operatorname{div} \mathbf{q}_T = -\dot{m}_v \Delta h_v, \quad (3.128)$$

kjer je

$$(\rho c_p)_E = \sum_{\pi} \hat{\rho}_{\pi} c_p^{\pi}, \quad (3.129)$$

$$(\rho r)_E = \sum_{\pi} \hat{\rho}_{\pi} r_{\pi}. \quad (3.130)$$

$c_p^{\pi}$  so specifične toplotne kapacitete posamezne faze.  $\dot{m}_v$  sledi iz enačb (3.76) ali (3.77). V enačbi (3.128) je upoštevano le izparevanje/utekočinjanje pare, pri čemer se porabi oz sprosti latentna toplota  $\Delta h_v = h_v - h_l$  (poglavje 3.3.2).

### 3.4.5 Zakon o ohranitvi entropije

Zakon o ohranitvi entropije je znan tudi kot drugi zakon termodinamike. Zakon še ni popolnoma dorečen, še posebno za stanja ko faze med seboj niso v ravnovesju ([de Boer, 1998](#)). Potreben in hkrati zadosten pogoj je, da mora biti izpolnjena spodnja neenakost (glej (3.122)) za vse faze hkrati:

$$\sum_{\pi} \dot{S}_{\pi} \geq \sum_{\pi} \left( \int_{\varphi(B)} \frac{1}{T_{A,\pi}} \hat{\rho}_{\pi} r_{\pi} dv - \int_{\varphi(\partial B)} \frac{1}{T_{A,\pi}} \mathbf{q}_{T,\pi} \cdot \mathbf{n} da \right), \quad (3.131)$$

kjer je  $S_{\pi} = \int_{\varphi(B)} \hat{\rho}_{\pi} \eta_{\pi} dv$  entropija faze in  $\eta_{\pi}$  specifična entropija faze.  $T_{A,\pi}$  je absolutna temperatura posamezne faze. Z upoštevanjem masne ravnotežne enačbe (3.66):

$$\sum_{\pi} \dot{S}_{\pi} = \int_{\varphi(B)} \left( \dot{\hat{\rho}}_{\pi} \eta_{\pi} + \hat{\rho}_{\pi} \dot{\eta}_{\pi} \right) dv \geq \sum_{\pi} \int_{\varphi(B)} \frac{1}{T_{A,\pi}} \hat{\rho}_{\pi} r_{\pi} - \operatorname{div} \left( \frac{1}{T_{A,\pi}} \mathbf{q}_{T,\pi} \right) dv, \quad (3.132)$$

Z izreka o divergenci sledi lokalna oblika neenakosti entropije:

$$\sum_{\pi} \left( \dot{\hat{\rho}}_{\pi} \eta_{\pi} + \hat{\rho}_{\pi} \dot{\eta}_{\pi} - \frac{1}{T_{A,\pi}} \hat{\rho}_{\pi} r_{\pi} + \operatorname{div} \left( \frac{1}{T_{A,\pi}} \mathbf{q}_{T,\pi} \right) \right) \geq 0, \quad (3.133)$$

Če se navežemo na enačbo ravnotežja energije (3.123) in zapišemo prosto Helmholtz-evo energijo  $\psi$  v obliki

$$\psi_{\pi} = u_{\pi} - \eta_{\pi} T_{A,\pi}. \quad (3.134)$$

Iz enačbe (3.132) sledi:

$$\begin{aligned} \sum_{\pi} \frac{1}{T_{A,\pi}} \left( -\hat{\rho}_{\pi} \left( \dot{\psi}_{\pi} + \dot{T}_{A,\pi} \eta_{\pi} \right) - \bar{\mathbf{p}}_{\pi} \cdot \mathbf{v}_{\pi} - \dot{\hat{\rho}}_{\pi} \left( \psi_{\pi} - \frac{1}{2} \mathbf{v}_{\pi} \cdot \mathbf{v}_{\pi} \right) \right. \\ \left. + \boldsymbol{\sigma}_{\pi} \cdot \mathbf{d}_{\pi} - \frac{1}{T_{A,\pi}} \mathbf{q}_{T,\pi} \operatorname{grad} T_{A,\pi} + \bar{e}_{\pi} \right) \geq 0, \end{aligned} \quad (3.135)$$

$$\begin{aligned} \sum_{\pi} \left( -\hat{\rho}_{\pi} \left( \dot{\psi}_{\pi} + \dot{T}_A \eta_{\pi} \right) - \bar{\mathbf{p}}_{\pi} \cdot \mathbf{v}_{\pi} - \dot{\hat{\rho}}_{\pi} \left( \psi_{\pi} - \frac{1}{2} \mathbf{v}_{\pi} \cdot \mathbf{v}_{\pi} \right) \right. \\ \left. + \boldsymbol{\sigma}_{\pi} \cdot \mathbf{d}_{\pi} - \frac{1}{T_A} \mathbf{q}_{T,\pi} \operatorname{grad} T_A \right) \geq 0, \end{aligned} \quad (3.136)$$

pri tem je v drugi enačbi (3.136) predpostavljena temperatura enaka za vse faze.

### 3.4.6 Mere napetosti

Do sedaj smo v enačbah zasledili zgolj Cauchyjev tenzor napetosti  $\boldsymbol{\sigma}$ . Podobno kot deformacije je možno napetosti zapisati na različne načine in sicer glede na območje  $B$  ali  $\varphi(B)$  in smer delovanja sile  $\mathbf{N}$  ali  $\mathbf{n}$ . Izbira tenzorja napetosti je običajno odvisna od namena uporabe in samega problema, ki ga rešujemo. Z upoštevanjem Nansonove formule (3.9) za površinski element ravnotežne enačbe sil (3.99) zapišemo:

$$\int_{\partial\varphi(B)} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \, da = \int_{\partial B} \boldsymbol{\sigma} J_F \mathbf{F}^{-\mathrm{T}} \mathbf{N} \, dA = \int_{\partial B} \mathbf{P} \mathbf{N} \, dA, \quad (3.137)$$

enačba definira prvi Piola-Kirchhoffov tenzor napetosti  $\mathbf{P}$ . Ta se lahko zapiše z Cauchyjevim tenzorjem kot:

$$\mathbf{P} = J_F \boldsymbol{\sigma} \mathbf{F}^{-\mathrm{T}}. \quad (3.138)$$

Ker je simetrični  $\boldsymbol{\sigma}$  pomnožen le z desne strani, se simetrija pri  $\mathbf{P}$  ne ohrani, in se z eno bazo nanaša na referenčne in z drugo na trenutne koordinate. Običajno je ugodneje računati s simetričnim tenzorjem, ki se nanaša na referenčno konfiguracijo. Tak tenzor je drugi Piola-Kirchhoffov napetostni tenzor:

$$\mathbf{S} = \mathbf{F}^{-1} \mathbf{P} = J_F \mathbf{F}^{-1} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{F}^{-\mathrm{T}} \Leftrightarrow \boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{J_F} \mathbf{F} \mathbf{S} \mathbf{F}^{\mathrm{T}}. \quad (3.139)$$

Če izvedemo transformacijo  $\mathbf{S}$  iz začetne v končno konfiguracijo (angl. *push forward*) dobimo Kirchhoffov tenzor napetosti  $\boldsymbol{\tau}$

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{F} \mathbf{S} \mathbf{F}^{\mathrm{T}} = J_F \boldsymbol{\sigma}. \quad (3.140)$$

Preglednica 3.3: Povzetek tenzorjev napetosti z njihovimi konjugiranimi stopnjami deformacij  
Table 3.3: Summary of stress tensors and their work conjugated strain rates

	Napetostni tenzorji	stopnje/hitrosti deformacij	Konstitutivni zakon*
Cauchy	$\boldsymbol{\sigma}$	$\mathbf{d}$	$\frac{1}{J_F} \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} \mathbf{F}^T$
1. Piola-Kirchhoff	$\mathbf{P} = J_F \boldsymbol{\sigma} \mathbf{F}^{-T}$	$\dot{\mathbf{F}}$	$\frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}}$
2. Piola-Kirchhoff	$\mathbf{S} = J_F \mathbf{F}^{-1} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{F}^{-T}$	$\dot{\mathbf{E}} = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{C}}$	$\mathbf{F}^{-1} \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{E}} = 2 \frac{\partial W}{\partial \mathbf{C}}$
Kirchhoff	$\boldsymbol{\tau} = J_F \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{F} \mathbf{S} \mathbf{F}^T$	$\mathbf{d}$	$\frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} \mathbf{F}^T$

\*W ne obstaja za vse materiale, alternativne formulacije vseh so možne kot za  $\mathbf{P}$ .

### 3.4.7 Izbrane ravnotežne enačbe glede na začetno konfiguracijo

S prvim Piola-Kirchhoffovim napetostnim tenzorjem se lahko lokalna ravnotežna enačba sil (3.105) prepiše (Borja, 2004, Wriggers, 2008):

$$\text{DIV } \mathbf{P} + \rho_0 \bar{\mathbf{b}} = \rho_0 \mathbf{a}_s + \sum_{\pi=l,g} J_F \hat{\rho}_\pi \bar{\mathbf{a}}_\pi. \quad (3.141)$$

Kjer je DIV operator divergence glede na začetno konfiguracijo in  $\rho_0 = J_F \rho$  povprečna gostota v referenčni konfiguraciji. Z upoštevanjem odvisnosti (3.138) v enačbi vrtilne količine (poglavje (3.4.3)) lahko dobimo spodnjo odvisnost, ki kaže, da je  $\mathbf{P}$  res nesimetričen. Na enak način pa lahko pokažemo, da je tenzor  $\mathbf{S}$  simetričen:

$$\mathbf{P} \mathbf{F}^T = \mathbf{F} \mathbf{P}^T \quad \mathbf{S} = \mathbf{S}^T. \quad (3.142)$$

Prvi zakon termodinamike (3.124) lahko preoblikujemo v referenčno konfiguracijo s preoblikovanjem moči napetosti  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{d}$  v trenutni konfiguraciji v referenčno, z upoštevanjem enačb (3.39) in (3.10):

$$J_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{d} = \mathbf{F} \mathbf{S} \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F}^{-T} \dot{\mathbf{E}} \mathbf{F}^{-1} = \mathbf{S} \cdot \dot{\mathbf{E}}. \quad (3.143)$$

Zakon termodinamike v referenčni konfiguraciji je:

$$\rho_0 \dot{u} = \mathbf{S} \cdot \dot{\mathbf{E}} - \text{DIV } \mathbf{Q} + \rho_0 R. \quad (3.144)$$

Vir toplote  $R$  in toplotni tok  $\mathbf{Q}$  se nanašata na referenčno konfiguracijo. Enačba (3.143) se lahko z upoštevanjem odvisnosti (3.21) in (3.140) nadaljnjo zapiše kot

$$\mathbf{S} \cdot \dot{\mathbf{E}} = \frac{1}{2} \mathbf{S} \cdot \dot{\mathbf{C}} = \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{d}. \quad (3.145)$$

Prva dva dela enačbe se nanašata na referenčno konfuiguracijo, zadnji del pa na trenutno.

### 3.5 Šibke oblike diferencialnih enačb obravnavanih povezanih problemov

Analitična rešitev sistema nelinearnih parcialnih diferencialnih enačb je z orodji na voljo možna zgolj za enostavne primere s pravilno geometrijo. Iz teh razlogov se je potrebno za reševanje sistema enačb

poslužiti približnih numeričnih metod, kot sta metoda končnih diferenc ali metoda končnih elementov. Problem se nato iz iskanja enolične rešitve močnega sistema pretvori v iskanje rešitve sistema šibke formulacije s poljubno testno funkcijo, ki je približek želene rešitve, s čim manjšo napako napake te rešitve (Wriggers, 2008). Z uporabo metode končnih elementov, ki temelji na variacijski formulaciji enačb, se lahko reševanje problemov aplicira na širok spekter problemov. V naslednjih poglavjih bo prikazana transformacija močnih oblik, ki so dane v predhodnem poglavju 3.4 v šibke oblike povezanih problemov.

### 3.5.1 Šibka oblika zakona o ohranitvi gibalne količine v začetni konfiguraciji

Če ravnotežno enačbo (3.141) izpeljemo iz približnih količin  $\square_h$ , ki so količine poračunane s približki pomikov  $\mathbf{u}_h$  namesto točnih pomikov  $\mathbf{u}$  je enačbi zgolj približno zadoščeno:

$$\text{DIV } \mathbf{P} + \rho_0 \bar{\mathbf{b}} - \rho_0 \mathbf{a}_s - \sum_{\pi=l,g} J_F \hat{\rho}_\pi \bar{\mathbf{a}}_\pi = \mathbf{R}_h. \quad (3.146)$$

Desna stran enačbe (3.146) je rezidual  $\mathbf{R}_h$ , ki določa napako, za koliko  $\mathbf{u}_h$  ne zadosti enačbi. Enačba se sedaj pomnoži z virtualnimi pomiki oz. testno funkcijo  $\boldsymbol{\eta}_u$ , ki mora biti na robu telesa enaka  $\mathbf{0}$  t.j.  $\boldsymbol{\eta}_u = \{\boldsymbol{\eta}_u \mid \boldsymbol{\eta}_u = \mathbf{0} \text{ na } \partial B_u\}$ , hkrati pa bo nova enačba integrirana po celotni referenčni domeni telesa. Zaradi preglednosti bodo od sedaj naprej izpuščeni členi s pospeški telesa in faz, kar pomeni, da zanemarimo vztrajnostne sile, ki pridejo do izraza pri dinamičnih pojavih medija in tekočine. Ta predpostavka je smiselna za procese, ki se odvijajo relativno počasi, enačba pa se lahko povrne, če dodamo manjkajoče dele k členu z  $\bar{\mathbf{b}}$ :

$$\int_B \mathbf{R}_h \cdot \boldsymbol{\eta}_u \, dV = 0 \implies \int_B \text{DIV } \mathbf{P}(\mathbf{u}_h) \cdot \boldsymbol{\eta}_u \, dV + \int_B \rho_0 \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\eta}_u \, dV = 0. \quad (3.147)$$

Zgornja enačba mora biti zadoščena tudi v primeru, ko so količine točne:

$$\int_B \text{DIV } \mathbf{P}(\mathbf{u}) \cdot \boldsymbol{\eta}_u \, dV + \int_B \rho_0 \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\eta}_u \, dV = 0. \quad (3.148)$$

Enačba je v inženirstvu znana tudi kot princip virtualnega dela. Z integriranjem prvega člena in uporabe izreka o divergenci, ob pogoju pogoj da je  $\boldsymbol{\eta}_u$  na robu 0 in z dodanim robnim pogojem predpisane površinske obtežbe  $\bar{\mathbf{t}}$  se šibka oblika zapiše:

$$\int_B \mathbf{P} \cdot \text{GRAD } \boldsymbol{\eta}_u \, dV - \int_B \rho_0 \bar{\mathbf{b}} \cdot \boldsymbol{\eta}_u \, dV - \int_{\partial B_\sigma} \bar{\mathbf{t}} \cdot \boldsymbol{\eta}_u \, dA = 0. \quad (3.149)$$

Gradient testne funkcije  $\boldsymbol{\eta}_u$  se lahko tolmači tudi kot smerni odvod deformacijskega gradienta  $D\mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\eta}_u$  oziroma variacija  $\delta\mathbf{F}$  deformacijskega gradienta. Z zamenjavo nesimetričnega Piola-Kirchhoffovega tenzorja  $\mathbf{P}$  z drugim Piola-Kirchhoffovim tenzorjem preko enačbe  $\mathbf{P} = \mathbf{F}\mathbf{S}$  lahko prepišemo variacijo divergence napetosti kot:

$$\mathbf{P} \cdot \text{GRAD } \boldsymbol{\eta}_u = \mathbf{S} \cdot \mathbf{F}^T \text{GRAD } \boldsymbol{\eta}_u = \mathbf{S} \cdot \frac{1}{2} (\mathbf{F}^T \text{GRAD } \boldsymbol{\eta}_u + \text{GRAD}^T \boldsymbol{\eta}_u \mathbf{F}) = \mathbf{S} \cdot \delta\mathbf{E}. \quad (3.150)$$

$\delta\mathbf{E}$  je variacija Green-Lagrangeovega tenzorja. Z upoštevanjem zgornje enačbe, se (3.149) lahko

prepiše s tenzorjem  $\mathbf{S}$  in  $\delta \mathbf{E}$ :

$$\int_B \mathbf{S} \cdot \delta \mathbf{E} dV - \int_B \rho_0 \bar{\mathbf{b}} \cdot \boldsymbol{\eta}_u dV - \int_{\partial B_\sigma} \bar{\mathbf{t}} \cdot \boldsymbol{\eta}_u dA = 0. \quad (3.151)$$

Zgornja enačba je osnova za zapis mehanskega problema po metodi končnih elementov. Prvi člen se nanaša na notranje delo, kjer so zajeti vplivi napetostnega stanja vseh faz in temperaturnega raztezka. Člen je možno zapisati na veliko načinov za vsak konjugiran par (preglednica 3.3) na ustrezni konfiguraciji. Drugi člen se nanaša na vztrajnostne sile, ki delujejo na masni delec telesa, na primer gravitacija, tako da običajno velja  $\mathbf{b} = \{0, 0, -g\}$ , zadnji pa se nanaša na površinsko obtežbo telesa.

Prvi člen enačbe (3.149) je možno zapisati tudi drugače in sicer ga lahko zapišemo z uporabo skalarne funkcije, t.j. elastične deformacijske energije  $W$ , če ta obstaja. Kot je bilo prikazano v poglavjih 2.1.1 in 2.1.2 je tak zapis bolj učinkovit. Divergenco napetosti lahko prepišemo kot  $\mathbf{P} \cdot \text{GRAD} \boldsymbol{\eta}_u = \mathbf{P} \cdot \delta \mathbf{F} = \mathbf{P} \cdot \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \boldsymbol{\varphi}} \delta \boldsymbol{\varphi}$ . Če upoštevamo hiperelastični konstitutivni zakon, napetost sledi kot odvod  $W$  po ustrezni meri deformacij  $\mathbf{P} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}}$  (preglednica 3.3) iz česar sledi ekvivalentna enačba divergence napetosti:

$$\mathbf{P} \cdot \text{GRAD} \boldsymbol{\eta}_u = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} \cdot \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \boldsymbol{\varphi}} \delta \boldsymbol{\varphi} = \frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{\varphi}} \cdot \delta \boldsymbol{\varphi} = \frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{\varphi}} \cdot \boldsymbol{\eta}_u. \quad (3.152)$$

Šibka oblika (3.149) se z upoštevanjem zgornjega lahko zapiše z deformacijsko energijo  $W$

$$\int_B \frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{\varphi}} \cdot \boldsymbol{\eta}_u dV - \int_B \rho_0 \bar{\mathbf{b}} \cdot \boldsymbol{\eta}_u dV - \int_{\partial B_\sigma} \bar{\mathbf{t}} \cdot \boldsymbol{\eta}_u dA = 0. \quad (3.153)$$

Ta enačba poenostavi proceduro avtomatskega odvajanja in posledično avtomatizacijo končnih elementov, saj je potreben le en klic avtomatskega odvajanja po vseh neznanih pomikih, namesto dveh klicev odvajanja, prvega da dobimo napetostni tenzor  $\mathbf{P}$  in drugega, da določimo variacijo deformacijskega gradienta  $\text{GRAD} \boldsymbol{\eta}_u$ .

### 3.5.2 Šibka oblika zakona o ohranitvi gibalne količine v trenutni konfiguraciji

Transformacija šibke oblike (3.149) se izvede z ustreznimi kinematičnimi transformacijami, kjer se nad baznimi vektorji izvede operacija potiska naprej iz konfiguracije  $B$  v  $\varphi(B)$ . Z upoštevanjem odvisnosti  $\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{J_F} \mathbf{P} \mathbf{F}^T$  ki povezuje tenzorja  $\mathbf{P}$  v referenčni in tenzor  $\boldsymbol{\sigma}$  v trenutni konfiguraciji (glej (3.138)), se enačba (3.150) prepiše  $\mathbf{P} \cdot \text{GRAD} \boldsymbol{\eta}_u = J_F \boldsymbol{\sigma} \mathbf{F}^{-T} \cdot \text{GRAD} \boldsymbol{\eta}_u = J_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \text{GRAD} \boldsymbol{\eta}_u \mathbf{F}^{-1} = J_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \text{grad} \boldsymbol{\eta}_u$ . Dodatno po enačbi (3.10) sledi  $dv = J_F dV$  s čimer sta povezani tudi gostoti  $\rho = \rho_0 J_F$ . Simetrija  $\boldsymbol{\sigma}$  zahteva zamenjavo nesimetričnega prostorskega gradienta testne funkcije  $\boldsymbol{\eta}_u$  z njenim simetričnim delom:

$$\nabla^S \boldsymbol{\eta}_u = \frac{1}{2} (\text{grad} \boldsymbol{\eta}_u + \text{grad}^T \boldsymbol{\eta}_u). \quad (3.154)$$

Šibka oblika (3.149) prepisana v trenutni konfiguraciji je:

$$\int_{\varphi(B)} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla^S \boldsymbol{\eta}_u dv - \int_{\varphi(B)} \rho \bar{\mathbf{b}} \cdot \boldsymbol{\eta}_u dv - \int_{\varphi(\partial B_\sigma)} \hat{\mathbf{t}} \cdot \boldsymbol{\eta}_u da = 0. \quad (3.155)$$

Pr tej transformaciji je uporabljena tudi Nansonova formula (3.9) za transformacijo vektorja površinske obtežbe  $\bar{\mathbf{t}}$  v  $\hat{\mathbf{t}}$  na  $\varphi(B)$ .



### 3.5.3 Materialni modeli

V tem poglavju bo predstavljeno nekaj najpogosteje uporabljenih hiperelastičnih materialnih modelov. Hiperelastični modeli so predvsem uporabni za materiale, ki so izpostavljeni velikim deformacijam, kot so gume in pene, vsi hiperelastični modeli pa se pri majhnih deformacijah poenostavijo v Saint-Venantov in ob majhnih pomikih v klasični Hookov model. Konstitutivne enačbe za izračun napetosti hiperelastičnih modelov, sledijo neposredno iz elastične deformacijske energije  $W$  (3.152) (Wriggers, 2008, Ogden, 1997), glej preglednico 3.3.

V primeru, da je material neodvisen od smeri v kateri je obremenjen (je izotropičen, kot so npr. kovine, beton, guma, idr.), se energija  $W$  lahko izrazi kot funkcija invariant simetričnih deformacijskih tenzorjev  $W(\mathbf{C}) = W(I_C, II_C, III_C)$ . Invariante  $I_A$ ,  $II_A$  in  $III_A$  poljubnega tenzorja drugega reda  $\mathbf{A}$  z lastnimi vrednostmi  $a_1$ ,  $a_2$  in  $a_3$  so definirane kot:

$$I_A = \text{tr}(\mathbf{A}) = a_1 + a_2 + a_3, \quad (3.156)$$

$$II_A = \frac{1}{2} (I_A^2 - \text{tr}(\mathbf{A}\mathbf{A})) = a_1a_2 + a_2a_3 + a_3a_1, \quad (3.157)$$

$$III_A = \det(\mathbf{A}) = a_1a_2a_3, \quad (3.158)$$

pri čemer s  $\text{tr}(\mathbf{A})$  označimo sled (ang. *trace*) matrike in z  $\det(\mathbf{A})$  determinanto matrike  $\mathbf{A}$ . Ker imata  $\mathbf{C}$  in  $\mathbf{b}$  enake lastne vrednosti  $\lambda_i^2$  (3.20) so njune invariante enake, enako velja tudi za invariante izohoričnih delov tenzorjev:

$$I_C = \text{tr}(\mathbf{C}) = \text{tr}(\mathbf{b}) = I_b, \quad \widehat{I}_C = \text{tr}(\widehat{\mathbf{C}}) = \text{tr}(\widehat{\mathbf{b}}), \quad (3.159)$$

$$II_C = 1/2(I_C^2 - \text{tr}(\mathbf{C}\mathbf{C})) = II_b, \quad \widehat{II}_C = 1/2(\widehat{I}_C^2 - \text{tr}(\widehat{\mathbf{C}}\widehat{\mathbf{C}})), \quad (3.160)$$

$$III_C = \det(\mathbf{C}) = \det(\mathbf{b}) = III_b, \quad \widehat{III}_C = \widehat{III}_b = 1, \quad (3.161)$$

Energija je tako enaka za oba izbrana tenzorja  $\mathbf{C}$  in  $\mathbf{b}$   $W(\mathbf{C}) = W(\mathbf{b}) = W(I_C, II_C, III_C) = W(I_b, II_b, III_b)$ , podobno velja za invariante tenzorjev  $\mathbf{U}$  in  $\mathbf{V}$ . Nekateri nelinearni modeli imajo deformacijsko energijo izraženo z glavnimi raztezki  $W(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$  oz. deviatoričnimi deli raztezkov  $W(\widehat{\lambda}_1, \widehat{\lambda}_2, \widehat{\lambda}_3, J_F)$ .

V nekaterih primerih je dobro deformacijsko energijo zapisati kot vsoto izohoričnega in volumetričnega dela (glej poglavje 3.2.2). Prvi del zajema deformacije, kjer so volumske spremembe enake 0, t.j.  $\widehat{III}_C = 1$ , drugi del pa zajema zgolj volumske spremembe  $III_C$ . Izohorični del je funkcija izohoričnega dela deformacijskega tenzorja, oziroma njegove prve in druge invariante, volumetrični del pa je funkcija  $J_F$  oz tretje invariante, energija se zapiše aditivno  $W = \widehat{W}(\widehat{I}_C, \widehat{II}_C) + U(III_C)$ . Taka formulacija je uporabna kadar modeliramo skoraj nestisljive oz. nestisljive materiale. Drug razlog pa je, da temperaturni odziv materiala običajno izhaja iz volumetričnega odziva  $U$ .

Ker obravnavamo povezane termo in hidro mehanske probleme, je potrebno zajeti deformiranje tako zrn porozne trdnine, kot tudi tekočine v njej, ki je lahko posledica bodisi zunanje obtežbe bodisi temperaturnih sprememb. Po principu učinkovitih napetosti se posamezni prispevki seštevajo, podobno lahko sklepamo za vpliv temperature. Celotna napetost se, če privzamemo linearno odvisnost med napetostjo in temperaturnim raztežkom, lahko zapiše kot vsota prispevkov vseh faz glej (3.106):

$$\boldsymbol{\sigma} = \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \mathbf{I}p - U''\Delta T\alpha_T\mathbf{I} - \alpha_b\mathbf{I}p_s, \quad p_s = \sum_i \phi_i/np_i = S_l p_l + (1 - S_l)p_g, \quad (3.162)$$

kjer je  $p_s$  vsota delnih pornih pritiskov tekočin in plinov. Člen  $U'' \Delta T \alpha_T \mathbf{I}$  je napetost zaradi spremembe temperature.

Mehanski odziv je določen s členom  $\mathbf{P} \cdot \delta \mathbf{F}$ ,  $\mathbf{S} \cdot \delta \mathbf{E}$  oz. drugim ustreznim konjugiranim parom. Člene je ugodneje zapisati z ustrezno deformacijsko energijo  $W$ , ta določa količino elastične energije shranjene v trdni snovi, ki je posledica deformiranja trdne snovi, ter energije, ki je posledica notranjih pornih pritiskov in temperaturnih raztezkov. Konstitutivni model termo-mehanike je povzet po avtorjih [Simo in Mieke \(1992\)](#), [Mieke \(1995\)](#), [Čanađija in Brnić \(2004\)](#), ki so podali povezan termo-mehanski potencial  $U_T$ , ta pa je dopolnjen s povezanim hidro-mehanski potencialom  $P$ , ki so ga podali [Levenston in sod. \(1998\)](#), za prispevek pritiska enofazne tekočine k energiji, ki se lahko posploši na več faz. Celotna elastična deformacijska energija je prispevek efektivne elastične deformacijske energije  $\hat{W}(\mathbf{C}) + U(J_F)$  ter povezanih členov:

$$\begin{aligned} W &= \hat{W}(\mathbf{C}) + U(J_F) - 3\alpha_T \Delta T U'(J_F) - \alpha_b p_s (J_F - 1) \\ &= \hat{W}(\mathbf{C}) + U(J_F) - U_T(J_F, T) - P(J_F, p_s). \end{aligned} \quad (3.163)$$

[Simo in Mieke \(1992\)](#) navajata, da je funkcija, ki opisuje odziv medija glede na temperaturno spremembo lahko poljubna in predlagata da je odziv odvod potenciala po volumetrični meri  $U' = \frac{\partial U(J_F)}{\partial J_F}$  in  $U_T(J_F, T) = 3\alpha_T \Delta T U'(J_F)$ , kar je analogno izpeljavi temperaturnega odziva pri majhnih deformacijah. [Levenston in sod. \(1998\)](#) so podali enačbo  $P(J_F, p_s) = \alpha_b p_s (J_F - 1)$ . Cauchyjev tenzor napetosti, ki je izpeljan iz potenciala (3.163) je enak (3.162).

Čeprav sta  $U$  in posledično  $U'$  poljubna, morata funkciji imeti nekatere lastnosti, kot sta jih navedla [Doll in Schweizerhof \(1999\)](#) za celoten potencial. V primeru, da ni zadoščeno vsem pogojem, je model omejen, na primer na majhne deformacije, pomike, določen nivo volumske deformacije, itd. Nekaj pomembnih zahtev, ki jih mora potencial zadostiti:

$$\begin{aligned} \hat{W}(\hat{\lambda}_i = 1) &= 0, & U(J_F = 1) &= 0, \\ \left. \frac{\partial U}{\partial J_F} \right|_{J_F=1} &= 0, \\ \hat{W}(\hat{\lambda}_1 \neq 1, \hat{\lambda}_2 \neq 1, \hat{\lambda}_3 = \hat{\lambda}_1^{-1} \hat{\lambda}_2^{-1}) &\neq 0, & U(J_F \neq 1) &\neq 0, \\ \hat{W}(\hat{\lambda}_1 \rightarrow 1, \hat{\lambda}_2 \rightarrow 1, \hat{\lambda}_3 = \hat{\lambda}_1^{-1} \hat{\lambda}_2^{-1}) &+ U(J_F \neq 1) \rightarrow W_{SaintVenant}, \\ U(J_F \rightarrow +0) &\rightarrow +\infty, & \left. \frac{\partial U}{\partial J_F} \right|_{J_F \rightarrow +0} &\rightarrow -\infty, \\ U(J_F \rightarrow +\infty) &\rightarrow +\infty, & \left. \frac{\partial U}{\partial J_F} \right|_{J_F \rightarrow +\infty} &\rightarrow +\infty, \\ \frac{\partial^2 U}{\partial J_F^2} &> 0. \end{aligned} \quad (3.164)$$

Ena izmed najpogosteje uporabljenih volumskih funkcij, ki zadosti vsem zahtevam je,

$$U(J_F) = \frac{\kappa}{\beta_k^2} \left( J_F^{-\beta_k} + \beta_k \log(J_F) - 1 \right), \quad (3.165)$$

kjer je  $\beta_k < -1$ , običajno pa je izbran  $\beta_k = -2$ , [Doll in Schweizerhof \(1999\)](#) pa sta predlagala tudi nekaj drugih. Posledično je pripadajoč  $U_T$ :

$$U_T(J_F, T) = 3\alpha_T \Delta T U'(J_F), \quad U' = \frac{\partial U(J_F)}{\partial J_F} = \frac{\kappa}{\beta_k J_F} (1 - J_F^{-\beta_k}). \quad (3.166)$$

Poleg hiperelastične deformacijske energije  $W$ , ki je dovolj za opis povezanega problema pri hiperelastičnem odzivu, je potrebno v primeru elasto-plastičnega odziva te enačbe dopolniti z dodatnimi nelinearnimi povezanimi enačbami, ki povezujejo časovno odvisne notranje plastične spremenljivke  $\mathbf{h}$  in konstitutivni zakon. Dodatne enačbe bodo podane v poglavju 4.3.

### Hookov materialni model

Prvi materialni model je osnovni Hookov model primeren za majhne deformacije in pomike. Ta model opisuje idealno linearno elastično deformabilno telo, brez upoštevanja geometrijskih nelinearnosti. Vsak hiperelastični model, bi se moral pri majhnih deformacijah in pomikih približati rezultatom Hookovega modela:

$$W_{\text{Hooke}}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \mu \|\boldsymbol{\varepsilon}\| + \frac{\lambda}{2} I_{\boldsymbol{\varepsilon}}^2, \quad (3.167)$$

kjer sta  $\mu$  in  $\lambda$  Lamjevi konstanti. Z upoštevanjem odvisnosti  $\lambda = \kappa - \mu \frac{2}{3}$  in aditivnega razcepa  $\boldsymbol{\varepsilon}$  (3.29), lahko zapišemo potencial kot vsoto volumskega in izohoričnega dela:

$$W_{\text{Hooke}}(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}, I_{\boldsymbol{\varepsilon}}) = \hat{W}_{\text{Hooke}}(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) + U_{\text{Hooke}}(I_{\boldsymbol{\varepsilon}}) = \mu \|\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\| + \frac{\kappa}{2} I_{\boldsymbol{\varepsilon}}^2. \quad (3.168)$$

Potencialu  $W_{\text{Hooke}}$  bosta sedaj dodana ustrezna povezana potenciala  $U_T$  in  $P$ . Enačba (3.163) velja tudi za Hookov model, ob predpostavki, majhnih deformacij, saj je limita determinante deformacijskega gradienta enaka sledi deformacij ( $I_{\boldsymbol{\varepsilon}}$ ) pri majhnih deformacijah  $J_F \approx 1 + I_{\boldsymbol{\varepsilon}}$ , posledično je  $U'(I_{\boldsymbol{\varepsilon}}) = \kappa I_{\boldsymbol{\varepsilon}}$ :

$$W_{\text{Hooke}} = \mu \|\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\| + \frac{\kappa}{2} I_{\boldsymbol{\varepsilon}}^2 - 3\alpha_T \Delta T \kappa I_{\boldsymbol{\varepsilon}} - \alpha_b p_s \cdot I_{\boldsymbol{\varepsilon}}. \quad (3.169)$$

Odvajanje  $\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial W_{\text{Hooke}}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}$  vrne ustrezno že znano totalno napetost majhnih deformacij:

$$\boldsymbol{\sigma}_{\text{Hooke}} = 2\mu \boldsymbol{\varepsilon} + \lambda I_{\boldsymbol{\varepsilon}} \mathbf{I} - \Delta T \alpha_T \kappa \mathbf{I} - \alpha_b \mathbf{I} p_s = 2\mu \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} + \kappa I_{\boldsymbol{\varepsilon}} \mathbf{I} - \Delta T \alpha_T \kappa \mathbf{I} - \alpha_b \mathbf{I} p_s. \quad (3.170)$$

### Saint Venantov materialni model

Saint Venantov materialni model je razširitev Hookovega materialnega modela. Model je ustrezen za velike pomike in velike rotacije, vendar ni primeren za velike deformacije, saj so deformacije in napetosti linearno odvisne in  $W_{\text{Saint Venant}}$  ne zadosti pogojem v limitah  $J_F \rightarrow 0$  in  $J_F \rightarrow \infty$  (3.164). Vsak hiperelastični model, bi se moral pri majhnih deformacijah približati rezultatom Saint Venantovega modela. Model je analogen Hookovemu:

$$\begin{aligned} W_{\text{Saint Venant}} &= \mu \|\mathbf{E}\| + \frac{\lambda}{2} I_E^2 - 3\alpha_T \Delta T \kappa I_E - \alpha_b p_s I_E \\ &= \mu \|\hat{\mathbf{E}}\| + \frac{\kappa}{2} I_E^2 - 3\alpha_T \Delta T \kappa I_E - \alpha_b p_s I_E. \end{aligned} \quad (3.171)$$

Odvajanje potenciala  $\mathbf{S} = \frac{\partial W_{\text{Saint Venant}}}{\partial \mathbf{E}}$  vrne drugi Piola-Kirchhoffov napetostni tenzor:

$$\mathbf{S}_{\text{Saint Venant}} = 2\mu \mathbf{E} + \lambda I_E \mathbf{I} - \Delta T \alpha_T \kappa \mathbf{I} - \alpha_b \mathbf{I} p_s = 2\mu \hat{\mathbf{E}} + \kappa I_E \mathbf{I} - \Delta T \alpha_T \kappa \mathbf{I} - \alpha_b \mathbf{I} p_s. \quad (3.172)$$

Za večje deformacije napetosti pritiska in temperature niso pravilne, ker so po (3.139) Cauchyjeve porne napetosti  $\boldsymbol{\sigma}_p = \frac{1}{J_F} \mathbf{F} \mathbf{S}_p \mathbf{F}^T = \frac{1}{J_F} \mathbf{F} (\alpha_b \mathbf{I} p_s) \mathbf{F}^T = \frac{1}{J_F} \alpha_b p_s \mathbf{F} \mathbf{F}^T = \frac{1}{J_F} \alpha_b p_s \mathbf{b}$ , podobno velja za temperaturo. Prava odvisnost sledi, če zamenjamo  $I_E$  z  $J_F - 1$ , vendar pa za izračun napetosti  $\mathbf{S}$  potrebujemo

povezavo med  $J_F$  in  $\mathbf{E}$ .

$$W_{\text{SaintVenant}} = \mu \|\mathbf{E}\| + \frac{\lambda}{2} I_E^2 - 3\alpha_T \Delta T \kappa(J_F - 1) - \alpha_b p_s (J_F - 1). \quad (3.173)$$

### Ogdenov materialni model

Ogdenov materialni model je eden izmed splošnejših hiper-elastičnih materialnih modelov in izhaja iz invariante tenzorja raztezkov Seth-Hillove družine  $U^\alpha$  (3.22). Materialni model je predstavil Ogden (1972). Z ustrežno izbiro materialnih parametrov (števila členov in potenc) je s tem modelom možno opisati različne modele, kot sta Neo-Hookov, Mooney-Rivlinov in Ogden-Stočkarsov materialni model za gume in pene (Storåkers, 1986). Ogdenov model je možno zapisati v različnih variantah. Splošna oblika elastične deformacijske energije stisljivega Ogdenovega modela je dana v deviatoričnem volumskem razcepu, kot vsota vsot potenc lastnih vrednosti deviatoričnega dela tenzorja deformacij in prispevka volumskega dela:

$$W_{\text{Ogden}} = \widehat{W}_{\text{Ogden}} + U - U_T - P = \sum_{k=1}^m \frac{\mu_k}{\alpha_k} (\widehat{\lambda}_1^{\alpha_k} + \widehat{\lambda}_2^{\alpha_k} + \widehat{\lambda}_3^{\alpha_k} - 3) + U - U_T - P, \quad (3.174)$$

kjer so  $\boldsymbol{\mu} = \{\mu_k : k = 1 \dots m\}$  delni strižni moduli in  $\boldsymbol{\alpha} = \{\alpha_k : k = 1 \dots m\}$  potence deviatoričnih glavnih raztezkov  $\widehat{\lambda}_i = J_F^{-1/3} \lambda_i$ . Celotni strižni modul se določi po enačbi  $\mu = \sum_{k=1}^m \frac{1}{2} \mu_k \alpha_k$ . V nekaterih variantah Ogdenovega modela je tudi  $U(J_F)$  podan kot vsota potenc  $J_F$ , kot je na primer Ogden-Storakers model (Storåkers, 1986). Ker je bil Ogdenov model (Ogden, 1972) primarno predstavljen z namenom, da opiše obnašanje materialnega modela za gumo, se pogosto predpostavi nestisljivost modela, kjer mora biti izpolnjen pogoj  $\prod_{i=1}^3 \lambda_i = J_F = 1$ , posledično sledi tudi  $\widehat{\lambda}_i = \lambda_i$  in  $U(J_F) = 0$ . Vendar pa se tu ne bomo osredotočili na gume, tako da je volumski odziv neomejen.

### Mooney-Rivlinov materialni model

Deformacijska energija stisljivega Mooney-Rivlinovega modela (Mooney, 1940, Rivlin, 1948) je bila prvotno dana za nestisljive materiale gume in se v splošnem zapiše

$$W_{\text{MooneyRivlin}} = c_1 (\widehat{I}_C - 3) + c_2 (\widehat{II}_C - 3) + U - U_T - P, \quad (3.175)$$

kjer sta  $c_1$  in  $c_2$  materialni konstanti modela. Ugotovimo lahko, da je enačba (3.175) redukcija enačbe (3.174) z izbiro standardnih koeficientov  $c_1 = \mu_1/2$  in  $c_2 = -\mu_2/2$  ter  $m = 2$  in  $\alpha_1 = 2$   $\alpha_2 = -2$ . Elastična deformacijska energija Mooney-Rivlinovega modela

$$W_{\text{MooneyRivlin}} = \frac{\mu_1}{2} (\widehat{I}_C - 3) - \frac{\mu_2}{2} (\widehat{II}_C - 3) + U - U_T - P, \quad (3.176)$$

kjer sta  $\mu_1$  in  $\mu_2$  delna strižna modula.  $\widehat{I}_C$  in  $\widehat{II}_C$  sta prva in druga invariante deviatoričnega dela desnega Cauchy-Greenov tenzorja deformacij  $\widehat{\mathbf{C}}$ .

### Neo-Hookov materialni model

Izbira  $c_2 = 0$  v enačbi (3.175) vodi do splošne elastične deformacijske energije Neo-Hookovega modela

$$W_{\text{NeoHooke}} = c_1 (\widehat{I}_C - 3) + U - U_T - P. \quad (3.177)$$

Z Izbiro standardnega koeficienta  $c_1 = \mu/2$  lahko opazimo, da je enačba (3.177) redukcija enačbe Ogdenovega modela (3.174), če so izbrani  $m = 1$  in  $\alpha_1 = 2$ . Sledita elastična deformacijska energija stisljivega Neo-Hookevega modela v volumetrično-izohorični razcepni obliki:

$$W_{\text{NeoHooke}} = \frac{\mu}{2} (\hat{I}_C - 3) + U - U_T - P, \quad (3.178)$$

kjer je  $\mu$  strižni modul. Alternativno se lahko hiper-elastično deformacijsko energijo Neo-Hookevega materialnega modela zapiše tudi kot:

$$W_{\text{NeoHooke}} = \frac{\lambda}{2} (J_F - 1)^2 + \mu \left( \frac{1}{2} (\text{tr } I_C - 3) - \log J_F \right) - U_T - P, \quad (3.179)$$

kjer sta  $\lambda$  in  $\mu$  Lamjevi konstanti.

### Henckyjev materialni model

Izotropični Henckyjev materialni model ima elastično deformacijsko energijo izraženo z logaritmom raztezkov. Model je predstavil Hencky (1928, 1931, 1933), najprej za nestisljivo varianto, nato še za stisljivo (Hencky, 1933, Anand, 1979), ki je dana kot sledi:

$$W_{\text{Hencky}} = \frac{\kappa}{2} \left( \sum_{i=1}^3 \log(\lambda_i) \right)^2 + \mu \sum_{i=1}^3 (\log \hat{\lambda}_i)^2 - U_T - P. \quad (3.180)$$

$\kappa$  in  $\mu$  sta stisljivostni in strižni modul. Kasneje so se pojavile tudi splošnejše različice, katerih elastična deformacijska energija je izražena z logaritmom tenzorja raztezkov  $\mathbf{V}$ , imenovan tudi levi ali Eulerijski Henckyjev deformacijski tenzor. Henckyjev model je okrnjen razvoj Taylorjeve vrste po logaritmičnih raztezkih, zato za zelo velike deformacije ne daje nujno pravih rezultatov. Model je analogen Saint-Venantovemu modelu, s tem da so mere deformacij logaritmične. Model se zadnje čase pogosto pojavlja v literaturi (Horgan in Murphy, 2009, Xiao in Chen, 2002, Xiao, 2005, Callari in sod., 1998, Ortiz in sod., 2001, Ortiz in Pandolfi, 2004, Rouainia in Muir Wood, 2000), saj je Anand (1979) pokazal, da ta model opiše širok spekter materialov od kovin do elastomerov in zemljin. Horgan in Murphy (2009) obravnavata dodatno tudi posplošen Henckyjev model. Elastična deformacijska energija izotropičnega stisljivega Henckyjevega modela se zapiše kot:

$$W_{\text{Hencky}} = \frac{\kappa}{2} \theta^2 + \mu \|\hat{\mathbf{h}}\|^2 - U_T - P, \quad (3.181)$$

kjer je  $\theta = \log(J_F)$  logaritem determinante deformacijskega gradienta.  $\hat{\mathbf{h}}$  je deviatorični del levega logaritmičnega deformacijskega gradienta  $\mathbf{h} = \mathbf{e}^{(0)}$  (preglednica 3.2). Za logaritem matrike veljajo analogna pravila kot za logaritem skalarja (Higham, 2008), t.j. velja  $\log(\mathbf{AB}) = \log \mathbf{B} + \log \mathbf{A}$  in posledično  $\log \mathbf{A} = 2 \log \mathbf{A}^{1/2}$ . To velja za vsak par pozitivno definitnih in pozitivnih matrik  $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{C}^{n \times n}$  in  $\mathbf{AB} = \mathbf{BA}$ . Zato logaritmične deformacije zapišemo neposredno  $\mathbf{h} = 1/2 \log(\mathbf{b})$ .  $\hat{\mathbf{h}}$  se lahko zapiše na več alternativnih načinov (Ortiz in Pandolfi, 2004, Rouainia in Muir Wood, 2000) in sicer:

$$\hat{\mathbf{h}} = \frac{1}{2} \log(\hat{\mathbf{b}}) = \frac{1}{2} \log(J_F^{-\frac{2}{3}} \mathbf{b}) = \log(J_F^{-\frac{1}{3}} \hat{\mathbf{V}}) = \log(\hat{\mathbf{V}}) - \frac{1}{3} \text{tr}(\log(\hat{\mathbf{V}})). \quad (3.182)$$

Logaritem tenzorja  $\hat{\mathbf{b}}$  se izračuna neposredno iz izpeljane zaprte reprezentacije matričnega logaritma (poglavje 5). Tudi v primeru Henckyjevega modela temperaturni odziv sledi iz odvoda  $U' = \frac{DU}{D\theta} = \kappa\theta$  in je  $U_T = 3\alpha_T \Delta T \kappa \theta$ . Ortiz in Pandolfi (2004) pa podajata podobno definicijo in sta združila  $U$  in  $U_T$ :  $\frac{\kappa}{2} (\theta - 3\alpha_T \Delta T)^2 = \frac{\kappa}{2} \theta^2 - 3\alpha_T \Delta T \kappa \theta + \frac{\kappa}{2} (3\alpha_T \Delta T)^2$ , vendar ta enačba v splošnem ne zadosti pogoju

$W = 0$  pri ničelnih deformacijah, hkrati je  $1 \gg \alpha_T \gg \alpha_T^2$ . Ker je model izotropen, se lahko alternativno zapiše tudi

$$W_{\text{Hencky}} = \frac{\kappa}{2} \theta^2 + \mu \|\hat{\mathbf{H}}\|^2 - U_T - P, \quad (3.183)$$

kjer je  $\hat{\mathbf{H}} = \frac{1}{2} \log(\hat{\mathbf{C}})$  desni Henckyjev deformacijski tenzor, saj velja  $\hat{I}_H = \hat{I}_h = \|\hat{\mathbf{H}}\| = \|\hat{\mathbf{h}}\|$ .

### 3.5.4 Šibke oblike zakona o ohranitvi energije

Transformacija močnih oblik zakona o ohranitvi energije večfaznega medija (glej poglavje 3.4.4) v šibke oblike, se lahko izvede na podoben način kot je bilo pokazano v poglavju 3.5.1 za zakon o ohranitvi globalne tekočine iz katerega je sledil opis mehanskega odziva. Virtualno delo energijske enačbe zapišemo z integracijo močnih enačb pomnoženih s testno funkcijo po referenčni domeni telesa in z uporabo Greenovega izreka. Testna funkcija je variacija temperature  $\delta T$  oz.  $\eta_T$ , za katero veljajo enaki pogoji kot za  $\eta_u$ , torej mora biti na robu telesa enaka 0 t.j.  $\eta_T = \{\eta_T \mid \eta_T = 0 \text{ na } \partial B_T\}$ . Za razliko od  $\eta_u$  je variacija temperature skalar  $\eta_T$ . Iz opisanega postopka sledijo ustrezne šibke oblike, ki opisujejo toplotni tok medija (Lewis in Schrefler, 1998, Schrefler, 1995). Prva enačba ravnotežje energije je dana za primer kondukcije toplote po mediju z dvema tekočinama  $l$  in  $g$ , vendar pa zanemarimo izmenjavanje mase med fazama  $l$  in  $g$  (izhlapevanje in kondenzacija)  $\dot{m}_v = 0$ , ta sledi iz močne oblike (3.128):

$$\begin{aligned} & \int_B \eta_T (\rho c)_E \dot{T} + \eta_T (c_l \mathbf{q}_l + c_g \mathbf{q}_g) \text{grad } T + \eta_T (-\mathcal{D}_{\text{mech}} + \mathcal{H}) dV \\ & - \int_B \text{grad}(\eta_T) \cdot \mathbf{q}_T dV + \int_{\partial B_{q_T}} \eta_T (\bar{q}_T + \alpha_c^T (T - T_\infty)) dA = 0. \end{aligned} \quad (3.184)$$

Zadnji člen opisuje naravni (Neumanov) robni pogoj na površini, in sicer je  $\bar{q}_T$  površinski toplotni tok, člen  $\alpha_c^T (T - T_\infty)$  pa predstavlja konvekcijski robni pogoj.  $T_\infty$  je temperatura okolja,  $\alpha_c^T$  pa psevdokonvekcijski koeficient. Preoblikovanje mehanskega dela v toploto je zajeto z mehansko disipacijo  $\mathcal{D}_{\text{mech}}$  in elastično strukturno gretje s členom  $\mathcal{H}$  (Simo in Miehe, 1992).

$$\mathcal{D}_{\text{mech}} = \chi \hat{y}(T) \dot{\gamma}, \quad (3.185)$$

$$\mathcal{H} = -T \frac{\partial \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{d}}{\partial T} = T \frac{\partial^2 U_T}{\partial J_F \partial T} \dot{J}_F. \quad (3.186)$$

$\hat{y}(T)$  je napetost tečenja,  $\chi$  je faktor disipacije toplote, ki pove kolikšen procent mehanskega dela se pretvori v toploto,  $\gamma$  je akumulirana plastična deformacija.  $\mathcal{D}_{\text{mech}}$  in  $\mathcal{H}$  se običajno zanemarita, saj vpliv členov pride do izraza pri kovinah.

Če členu  $\dot{m}_v \Delta h_v$  v enačbi (3.128) ne zanemarimo dobimo razširjeno energijsko enačbo, ki zajemo spremembo entalpije zaradi masnega toka pare med fazama  $v$  in  $l$ .  $\dot{m}_v$  je določen iz enačb (3.84) ali (3.95). Spodaj je šibka oblika z  $\dot{m}_v$  določenim iz prve enačbe (3.84):

$$\begin{aligned} & \int_B \eta_T (\rho c)_E \dot{T} + \eta_T (\phi_l c_l \mathbf{q}_l + \phi_g c_g \mathbf{q}_g) \text{grad } T + \eta_T (-\mathcal{D}_{\text{mech}} + \mathcal{H}) dV \\ & - \int_B \eta_T \Delta h_v \left( \rho_l \left( \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} S_l^2 + \frac{n S_l}{\kappa_l} \right) \dot{p}_l + \rho_g \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} S_l S_g \dot{p}_g + \alpha_b S_l \text{div } \mathbf{v} \right) dV \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \int_B \eta_T \Delta h_v \left( 3\rho_l \alpha_{s,l}^T \dot{T} - \rho_l \left( \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} S_l p_l - \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} S_l p_g + n \right) \dot{S}_l \right) dV \\
 & + \int_B \text{grad}(\eta_T) \Delta h_v \mathbf{q}_l - \text{grad}(\eta_T) \cdot \mathbf{q}_T dV + \int_{\partial B_{q_T}} \eta_T (\bar{q}_T + \alpha_c^T (T - T_\infty)) dA = 0. \quad (3.187)
 \end{aligned}$$

### 3.5.5 Šibke oblike zakona o ohranitvi mase

Transformacija močnih oblik masne ravnotežne enačbe tekočin in plinov (glej poglavje 3.4.1) v šibke oblike, se izvede na podoben način kot je bilo pokazano v poglavjih 3.5.1 in 3.5.4. Testna funkcija faze  $\pi$  je variacija pritiska  $\delta p_\pi$ , ki pripadajo tej fazi označena  $\eta_\pi$ , za katero veljajo enaki pogoji kot za  $\eta_u$  in  $\eta_T$ , t.j.  $\eta_\pi = \{\eta_\pi \mid \eta_\pi = 0 \text{ na } \partial B_\pi\}$ . Prva enačba bo dana za enofazni tok tekočine  $l$  v zasičenem mediju, ta sledi iz močne oblike (3.77), s predpostavko, da je  $S_l = 1$  konstanten, posledično je  $k_{r,l} = 1$ :

$$\int_B \eta_l \alpha_b \text{div } \mathbf{v} + \eta_l \left( \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} + \frac{n}{\kappa_l} \right) \dot{p}_l - \eta_l \beta_{sl}^T \dot{T} dV - \int_B \text{grad}(\eta_l) \frac{\mathbf{q}_l}{\rho_l} dV + \int_{\partial B_{q_l}} \eta_l \frac{\bar{q}_l}{\rho_l} dA = 0. \quad (3.188)$$

Podobno enačbo pa so za nestisljiva zrna podali Li in sod. (2004). Temperaturni vpliv na tok tekočine je v tem primeru zajet z členom  $\eta_l \beta_{sl}^T \dot{T}$ .

Enačba (3.188) se lahko razširi na enofazni tok tekočine  $l$  v delno zasičenem mediju, kjer potrebujemo določiti zasičenost tekočine  $S_l$  pri konstantnem  $p_g = 0$  (glej poglavje 3.3.3), hkrati upoštevamo, da je  $n \dot{S}_l = n \frac{\partial S_l}{\partial p_c} \dot{p}_c = C_s (\dot{p}_g - \dot{p}_l)$ :

$$\begin{aligned}
 & \int_B \eta_l \alpha_b S_l \text{div } \mathbf{v} + \eta_l \left( \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} S_l \left( S_l - \frac{C_s}{n} p_l \right) + \frac{n S_l}{\kappa_l} - C_s \right) \dot{p}_l - \eta_l \beta_{sl}^T \dot{T} dV \\
 & - \int_B \text{grad}(\eta_l) \frac{\mathbf{q}_l}{\rho_l} dV + \int_{\partial B_{q_l}} \eta_l \frac{\bar{q}_l}{\rho_l} dA = 0, \quad (3.189)
 \end{aligned}$$

kjer je  $C_s = \frac{\partial S_l}{\partial p_c}$  specifična vsebnost vlage. Ker nastopa v problemu le delni pritisk tekočine  $p_l$ , se lahko zapiše tudi  $C_s = -\frac{\partial S_l}{\partial p_l}$ . Podobno enačbo sta za nestisljiva zrna podala Uzuoka in Borja (2012).

V naslednjem koraku lahko sprostimo  $p_g$ , kar pomeni, da potrebujemo dodatno šibko obliko, ki opisuje povezan problem dvofaznega toka. Šibka oblika masnega ravnotežja za tekočino (3.85):

$$\begin{aligned}
 & \int_B \eta_l \alpha_b S_l \text{div } \mathbf{v} + \eta_l \left( \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} S_l \left( S_l - \frac{C_s}{n} p_l + \frac{C_s}{n} p_g \right) + \frac{n S_l}{\kappa_l} - C_s \right) \dot{p}_l dV \\
 & + \int_B \eta_l \left( \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} S_l \left( S_g + \frac{C_s}{n} p_l - \frac{C_s}{n} p_g \right) + C_s \right) \dot{p}_g - \eta_l \beta_{slg}^T \dot{T} dV \\
 & - \int_B \text{grad}(\eta_l) \frac{\mathbf{q}_l}{\rho_l} dV + \int_{\partial B_{q_l}} \eta_l \frac{\bar{q}_l}{\rho_l} dA = 0. \quad (3.190)
 \end{aligned}$$

Šibka oblika masnega ravnotežja za plin sledi iz močne oblike (3.92):

$$\int_B \eta_g \alpha_b S_g \text{div } \mathbf{v} + \eta_g \left( \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} S_g \left( S_g + \frac{C_s}{n} p_l - \frac{C_s}{n} p_g \right) + \frac{n S_g}{\rho_g} \frac{M_g}{T_{AR}} - C_s \right) \dot{p}_g dV$$



$$\begin{aligned}
& + \int_B \eta_g \left( \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} S_g \left( S_l - \frac{C_s}{n} p_l + \frac{C_s}{n} p_g \right) + C_s \right) \dot{p}_l - \eta_g \left( \beta_{sg}^T + \frac{n S_g}{T_A} \right) \dot{T} dV \\
& - \int_B \mathbf{grad}(\eta_g) \frac{\mathbf{q}_g}{\rho_g} dV + \int_{\partial B_{qg}} \eta_g \frac{\bar{q}_g}{\rho_g} dA = 0. \tag{3.191}
\end{aligned}$$

Enačba se po strukturi razlikuje od (3.190) zgolj po evoluciji gostote, saj je potrebno pri slednji enačbi upoštevati plinsko enačbo  $\dot{\rho}_g = \left( \frac{M_g p_g}{T_A R} \right) = \frac{M_g}{T_A R} \dot{p}_g - \frac{M_g p_g}{T_A^2 R} \dot{T} = \frac{M_g}{T_A R} \dot{p}_g - \frac{\rho_g}{T_A} \dot{T}$ .

Kot zadnji korak bo upoštevana tudi prehajanje mase med fazama  $l$  in  $v$ . Enačba tekočine in pare sledi iz močne oblike (3.96):

$$\begin{aligned}
& \int_B \eta_l \left( \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} S_l (\rho_v S_g + \rho_l S_l) + \frac{n S_l \rho_l}{\kappa_l} \right) \dot{p}_l + \eta_l \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} S_g (\rho_v S_g + \rho_l S_l) \dot{p}_g dV \\
& + \int_B \eta_l \left( \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} (\rho_v S_g p_c + \rho_l S_l p_l - \rho_l S_l p_c) + n (\rho_l - \rho_v) \right) \dot{S}_l + \eta_l S_g n \dot{\rho}_v dV \\
& + \int_B \eta_l \alpha_b (\rho_v S_g + \rho_l S_l) \mathbf{div} \mathbf{v} - \eta_l S_l \beta_{slg}^T \dot{T} dV - \int_B \mathbf{grad}(\eta_l) (\mathbf{J}_g^v + \mathbf{q}_v + \mathbf{q}_l) dV \\
& + \int_{\partial B_{ql}} \eta_l \bar{q}_l + \bar{q}_v + \beta_c^v (\rho_v - \rho_v^\infty) dA = 0. \tag{3.192}
\end{aligned}$$

Konvekcijski robni pogoj je možno zapisati po (Obeid in sod., 2001) tudi  $\beta_c^v (\rho_v - \rho_v^\infty) = \alpha_c^v (p_v - p_v^\infty)$ , kjer se odvisnost med masnima konvekcijskima koeficientoma lahko določi po enačbi (3.42). Šibka oblika masnega ravnotežja za plin sledi iz (3.94):

$$\begin{aligned}
& \int_B \eta_g \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} S_l \rho_a S_g \dot{p}_l + \eta_g \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} S_g^2 \rho_a \dot{p}_g - \left( \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} S_g p_c + n \right) \rho_a \dot{S}_l dV \\
& + \int_B \eta_g \alpha_b \rho_a S_g \mathbf{div} \mathbf{v} - \eta_g \rho_a \beta_{sg}^T \dot{T} dV - \int_B \mathbf{grad}(\eta_g) (-\mathbf{J}_g^v + \mathbf{q}_a) dV \\
& + \int_{\partial B_{qg}} \eta_g \bar{q}_a dA = 0. \tag{3.193}
\end{aligned}$$

Časovni odvod zasičenosti je določen z enačbo (3.59). Variante za opis nestisljivih zrn se lahko določijo iz zgornjih enačb, kjer so vsi členi s  $\kappa_s$  v imenovalcu enaki 0. Gostote, pritiski plinov in njihovi odvodi po času so določeni v poglavju 3.3.1, difuzni tok  $\mathbf{J}_g^\pi$  v poglavju 3.3.5 in fazni tok  $\mathbf{q}_\pi$  v 3.3.3. Efektivni temperaturni razteznostni koeficienti so določeni po enačbah:

$$\beta_{slg}^T = \beta_s^T (\alpha_b - n) (S_g \rho_v + S_l \rho_l) + n \beta_l^T S_l \rho_l, \tag{3.194}$$

$$\beta_{sl}^T = (\beta_s^T (\alpha_b - n) + n \beta_l^T) S_l, \tag{3.195}$$

$$\beta_{sg}^T = \beta_s^T (\alpha_b - n) S_g. \tag{3.196}$$



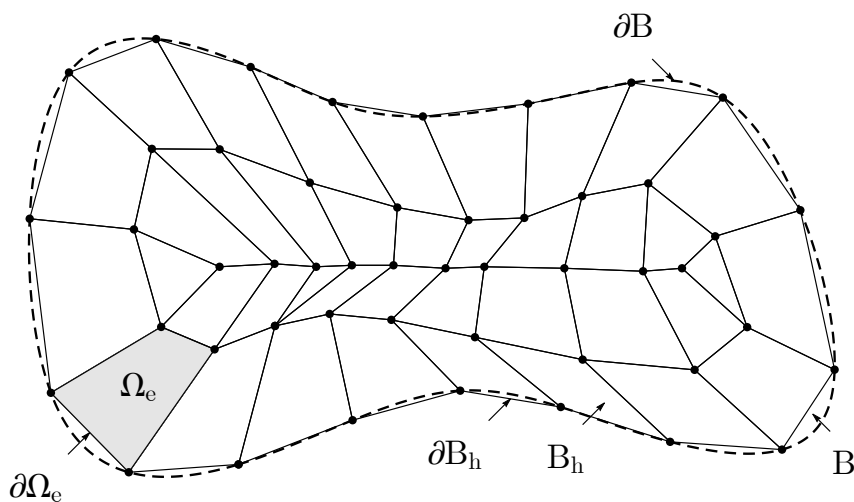
## 4 AVTOMATIZACIJA FORMULACIJE POVEZANIH PROBLEMOV

V tem poglavju je prikazan pristop k avtomatizaciji rešitve povezanih sistemov diferencialnih enačb z uporabo metode končnih elementov. Šibke oblike diferencialnih enačb je potrebno transformirati v skalarne psevdo-potenciale, ki so osnova za izpeljavo ravnotežnih enačb  $\mathbf{R}_e$  in tangentnih matrik  $\mathbf{K}_e$ . Ob tem so ob vsakem koraku prikazani tudi izvlečki iz simbolnih kod, iz katerih orodje *AceGen* avtomatsko kreira učinkovito in optimalno izvorno kodo končnega elementa v izbranem nizko-nivojskem programskem jeziku. Standardno literatura o MKE podajajo [Zienkiewicz in Taylor \(2000a,b,c\)](#), [Wriggers \(2008\)](#), [Oñate \(2009\)](#) in [Hughes \(2012\)](#).

Prvi korak je diskretizacija geometrije telesa  $B$  z mrežo  $B_h$ :

$$B \approx B_h = \bigcup_{e=1}^{n_{te}} \Omega_e, \quad (4.1)$$

Postopek zahteva delitev  $B$  na mrežo  $n_{te}$  končnih elementov, katerih konfiguracija je opisana s topološkimi elementi  $\Omega_e \subset B_h$ , glej sliko 4.1 za dvodimenzionalni primer.

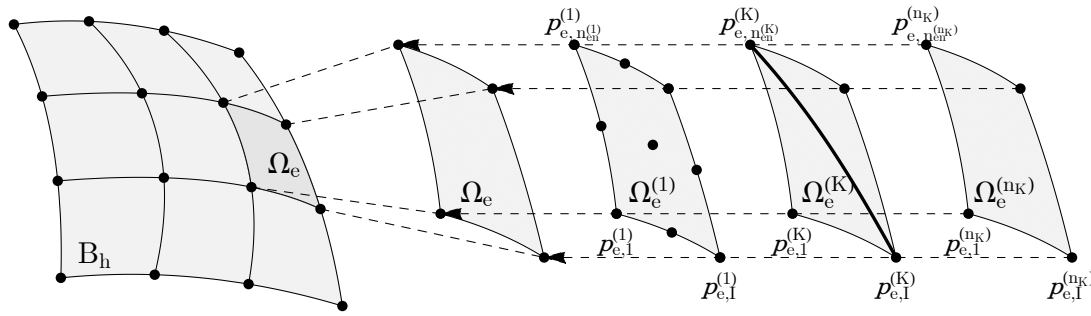


Slika 4.1: Diskretizacija telesa  $B$   
Figure 4.1: Discretization of body  $B$

Ker smo razdelili povezan problem na  $n_K$  podproblemov, katerih izvorna koda je podana v  $n_K$  fizično ločenih kodah končnih elementov (glej poglavje 2.2.3), je za pravilno formulacijo povezanega problema potrebno za vsako  $K$ -to izvorno kodo elementa definirati mrežo  $n_e^{(K)}$  končnih elementov, ki morajo popolnoma prekriti diskretizirano telo  $B_h$ :

$$B_h = \bigcup_{e=1}^{n_e^{(K)}} \Omega_e^{(K)}, \quad \forall K \in 1, \dots, n_K. \quad (4.2)$$

Posledično to pomeni, da je potrebno definirati najmanj  $n_K$  končnih elementov na mestu enega topološkega elementa  $\Omega_e$ , glej sliko 4.2. Rob območja končnih elementov je označen z  $\partial B_h$  in je sestavljen



Slika 4.2: Topološki končni element  $\Omega_e$  z  $n_K$  elementi  $\Omega_e^{(K)}$   $K$ -te izvorne kode  
Figure 4.2: Topological finite element  $\Omega_e$  with  $n_K$  elements  $\Omega_e^{(K)}$  of  $K$ -th source code

z robovi posameznega topološkega elementa  $\partial\Omega_e$ , tako da velja

$$\partial B_h = \bigcup_{e=1}^{n_{te}} (\partial\Omega_e \setminus \partial\Omega_e^{\text{int}}) = \bigcup_{e=1}^{n_e^{(K)}} (\partial\Omega_e^{(K)} \setminus \partial\Omega_e^{(K),\text{int}}) \quad \forall K \in 1, \dots, n_K, \quad (4.3)$$

kjer sta  $\partial\Omega_e^{\text{int}}$  in  $\partial\Omega_e^{(K),\text{int}}$  množici notranjih robov elementa  $\Omega_e$  in  $\Omega_e^{(K)}$ . Rob območja končnih elementov s  $K$ -to izvorno kodo mora popolnoma prekriti diskretiziran rob  $\partial B_h$  za vsak  $K$ . V splošnem postopek predstavlja približek prave geometrije telesa  $B$ . Mreža mora biti zvezna na vsem območju  $B$ , zato prekrivanje ali prekinjanje elementov znotraj mreže ni dovoljeno.

Ker je interpolacija  $K$ -tega vektorskega polja  $\phi^{(K)}$  neodvisna od interpolacije ostalih vektorskih polj, je v splošnem izbrana topologija elementa  $\Omega_e^{(K)}$  lahko poljubna (glej sliko 4.2). Možna je kombinacija trikotnih in štirikotnih elementov, ter elementov z večjim številom vozlišč, z interpolacijo višjega reda. Pogoj je le, da mora biti izbran tip elementa sposoben opisati diskretizirano telo  $B_h$ . Posledično to pomeni, da izvorna koda elementa z linearno interpolacijo koordinat (1. red) znotraj elementa ni sposobna opisati topologije diskretizirane s končnimi elementi s kvadratično interpolacijo (2. red).

#### 4.1 Splošen izoparametrični koncept

Osnovne količine in geometrijo je potrebno znotraj vsakega končnega elementa interpolirati z izbrano oblikovno funkcijo. Znotraj posameznega končnega elementa se osnovne količine  $\phi^{(K)}$  po  $K$ -tem elementu interpolirajo po enačbi (2.25),

$$\phi^i(\mathbf{X}) \approx \phi_h^i(\mathbf{X}) = \sum_{I=1}^{n_{en}^i} N_I^i(\mathbf{X}) p_{eI}^i = \mathbf{N}^i \cdot \mathbf{p}_e^i, \quad i \in \mathbf{G}_K, \phi^i \in \phi^{(K)}. \quad (4.4)$$

Potrebni vektorji  $\mathbf{p}_e^i$  in oblike interpolacijske funkcije  $\mathbf{N}^i$  so definirani v poglavju 2.2. Vozlišča fizikalno smiselno identificiramo z enolično standardno oznako "NodeID" (poglavje 4.1.2). V vozlišču  $I$  je definiran vektor neznank  $\mathbf{p}_{eI}^{(K)}$  dolžine  $n_{pI}^{(K)}$  elementa  $K$ , vozliščne neznanke so uporabljene za interpolacijo polj  $\phi^{(K)}$ . Nabor standardnih fizikalnih količin z ustrežno oznako vozlišča in številom prostostnih stopenj na vozlišče je dan v preglednici 4.1. Za polno povezan termo-hidro-mehanski problem je izbran vektor neznanih skalarnih polj  $\phi = \{ u, v, w, T, p_w, p_g \}$ . Število vseh polj je tako  $n_c = 6$ .

Točna rešitev diferencialne enačbe problema je v splošnem neznan in se ji po metodi končnih elementov lahko le približamo. Posledično se bomo indeksu  $h$ , ki označuje aproksimacijo neznanih polj v

nadaljevanju izognili.

Preglednica 4.1: Standardne fizikalne količine  
Table 4.1: Standard physical quantities

ime količine	oznaka polja - $\phi^{(K)}$	množica $\hat{\mathbf{p}}_e^{(K)}$	oznaka vozlišča - "NodeID"	Št. prostostnih stopenj - $n_{pI}^{(K)}$
pomik	$\mathbf{u} = \{u, v, w\}$	$\mathbf{u}$	"D"	$n_{pI}^{\mathbf{u}} = n_{dim} \leq 3$
zasuk	$\phi = \{\phi_1, \phi_2, \phi_3\}$	$\phi$	"Fi"	$n_{pI}^{\phi} \leq n_{dim}$
temperatura	$T$	$\mathbf{T}$	"T"	1
pritisk kapljevine	$p_l$	$\mathbf{p}_l$	"W"	1
pritisk plina	$p_g$	$\mathbf{p}_g$	"G"	1
magnetni potencial	$\mathbf{A} = \{A_{Re}, A_{Im}\}$	$\mathbf{A}$	"M"	2

Strukturirana množica vseh spremenljivk, primarnih in sekundarnih, je v simbolni kodi elementa  $K$  označena z  $\mathbb{p}eIO \equiv \hat{\mathbf{p}}_e^{(K)}$ . Unija strukturirane množice je vektor vseh vozliščnih nenank  $K$ -tega elementa  $\mathbb{p}e \equiv \check{\mathbf{p}}_e^{(K)} = \cup \hat{\mathbf{p}}_e^{(K)}$  (2.35). Vektor je potreben za izpeljavo polne tangentne matrike  $K$ -te kode. Definicija omenjenih množic v okolju *AceGen* se izvede z ukazom:

$$\begin{array}{l} \mathbb{p}eIO = \text{SMSReal}[\text{Table}[\text{nd}\$\$[i, "at", j], \{i, nten\}, \{j, \text{SMSDOFGlobal}[\mathbb{I}]\}]]; \\ \mathbb{p}e = \text{Flatten}[\mathbb{p}eIO]; \end{array} \quad (4.5)$$

Množice osnovnih vozliščnih neznank znotraj  $K$ -tega elementa povezanega problema se lahko razberejo iz strukture  $\mathbb{p}eIO \equiv \hat{\mathbf{p}}_e^{(K)}$ , ki je odvisna od uporabljene implementacije (glej poglavji 2.2 in 2.2.4), smiselne izbire posamezne skupine pa so dane v preglednici (4.1).

Fizikalno in s strani implementacije kode je polje pomikov nesmiselno ločevati na tri ločena fizikalna polja  $u$ ,  $v$  in  $w$ , ampak jih vedno obravnavamo kot vektor pomikov  $\mathbf{u}$ . V primeru dvodimenzionalnega modela tretja komponenta  $w$  ni neznanca, ampak v primeru ravninskega napetostnega stanja sledi iz odziva materiala v prečni smeri in je odvisna od komponent  $u$  in  $v$ , v primeru ravninskega deformacijskega stanja pa je  $w = 0$ . Kot primer definirajmo pomike kot podmnožico  $\phi^{(1)} = \mathbf{u} = \{u, v, w\}$ , ki določa vektorsko polje dolžine  $n_{pI}^{(1)} = 3$ . Pri tem je strukturirana množica vozliščnih neznank enaka  $\hat{\mathbf{p}}_e^{(1)} = \mathbf{u} = \{\mathbf{u}_c, \mathbf{v}_c, \mathbf{w}_c\}^T \equiv \mathbf{u}IO = \{\mathbf{u}c, \mathbf{v}c, \mathbf{w}c\}^T$ . Podobno lahko definiramo množice ostalih vozliščnih neznank in sicer za temperature  $n_{pI}^{(2)} = 1$ ,  $\hat{\mathbf{p}}_e^{(2)} = \mathbf{T} \equiv \mathbf{T}IO$ , pritiske tekočine  $n_{pI}^{(3)} = 1$ ,  $\hat{\mathbf{p}}_e^{(3)} = \mathbf{p}_l \equiv \mathbf{p}lIO$  ter plinov  $n_{pI}^{(4)} = 1$ ,  $\hat{\mathbf{p}}_e^{(4)} = \mathbf{p}_g \equiv \mathbf{p}gIO$ . V splošnem je lahko vsaka fizikalna količina interpolirana s poljubno interpolacijsko funkcijo. Spodaj je primer kode z eno množico oblikovnih funkcij  $\mathbb{N}h \equiv \mathbf{N}^i = \mathbf{N}$ , ki je enaka za vsa skalarna polja  $\phi^i \in bgr\phi$ .

$$\begin{array}{l} \mathbf{u} = \mathbb{N}h . \mathbf{u}IO; \quad \mathbf{T} = \mathbb{N}h . \mathbf{T}IO; \quad \mathbf{p}l = \mathbb{N}h . \mathbf{p}lIO; \quad \mathbf{p}g = \mathbb{N}h . \mathbf{p}gIO; \end{array} \quad (4.6)$$

Zaradi splošnosti se v inženirskih problemih običajno uporabi izoparametrični koncept, znotraj katerega se za interpolacijo osnovnih količin ter geometrije uporabijo enake oblikovne funkcije. Izoparametrični elementi predstavljajo preslikavo poljubne geometrije v mrežo končnih elementov. Ta koncept je še posebno ugoden s stališča prostorskega opisa, saj se ga da enostavno zapisati. V zapisu enačb ni bistvene razlike, če se preslikava na referenčni element  $\Omega_{\square}$  izvede iz materialnega ali prostorskega opisa (glej sliko 4.3). Dodatna prednost izoparametričnega koncepta izhaja iz ortogonalnosti referenčnega koordinatnega sistema  $\Omega_{\square}$  (Wriggers, 2008), kar pomeni da se lahko izognemo računu ko- in kontravariantnim odvodov baznih vektorjev, tudi če obravnavana telesa izkazujejo ukrivljeno geometrijo (lupine, krivulje...). Ta

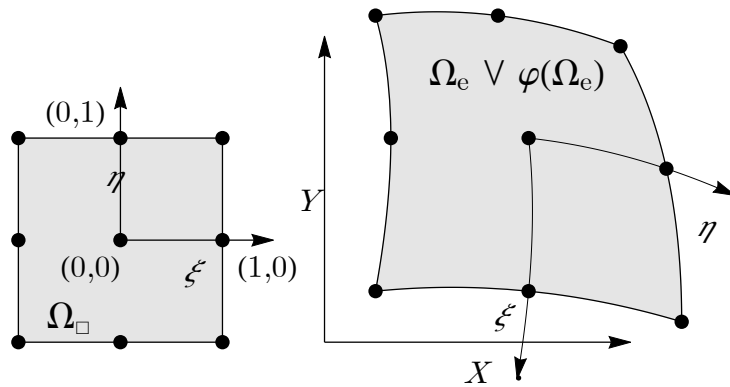
izoparametrični koncept se matematično znotraj posameznega končnega elementa  $\Omega_e$  (glej sliko 4.3) lahko zapiše z interpolacijo materialnih koordinat:

$$\mathbf{X} = \{X, Y, Z\}^T = \sum_{I=1}^{n_{en}} N_I(\Xi) \mathbf{X}_I = (\mathbf{N}(\Xi) \mathbf{X})^T. \quad (4.7)$$

$\mathbf{X}$  je vektor vozliščnih materialnih koordinat

$$\mathbf{X} = \{\mathbf{X}_I : I \in \{1, \dots, n_{en}\}\}, \quad \mathbf{X}_I = \{X_I, Y_I, Z_I\} \quad (4.8)$$

dimenzije  $n_{ten} \times n_{dim}$  kjer so  $\mathbf{X}_I$  materialne koordinate vozlišča  $I$  končnega elementa z  $n_{en}$  vozlišči. Oblikovne funkcije  $\mathbf{N}(\Xi)$  morajo biti določene glede na izbrano interpolacijo znotraj končnega elementa in topologijo elementa.



Slika 4.3: Izoparametrična preslikava na referenčno konfiguracijo  
Figure 4.3: Isoparametric mapping onto reference configuration

Vektor materialnih koordinat vozlišč  $\mathbb{X}IO \equiv \mathbf{X}$  se v *AceGen* -u definira z ukazom:

$$\mathbb{X}IO = \text{Table}[\text{SMSReal}[\text{nd}\$\{i, "X", j\}], \{i, n_{ten}\}, \{j, n_{dim}\}]; \quad (4.9)$$

Interpolacija koordinat sledi, z vsoto koordinat in pomikov pa sledijo prostorske koordinate:

$$\mathbb{X} = \text{Nh} . \mathbb{X}IO; \quad \mathbf{x} = \mathbf{X} + \mathbf{u}; \quad (4.10)$$

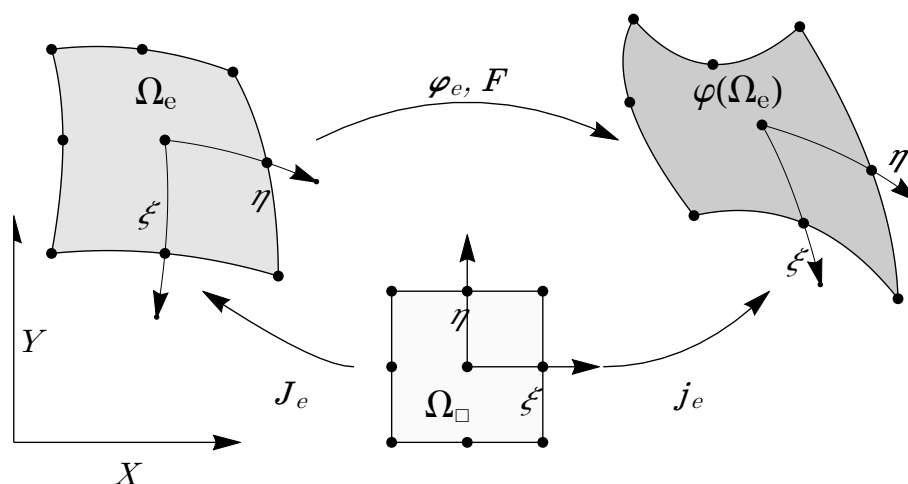
Ker so interpolacijske funkcije v enačbi (4.7) definirane na referenčnem elementu  $\Omega_{\square}$  namesto končnem elementu  $\Omega_e$ , mora biti v vsakem elementu  $\Omega_e$  izvedena transformacija, ki povezuje začetne  $\mathbf{X} = \mathbf{X}(\Xi)$  koordinate z referenčnimi koordinatami

$$\Xi = \{\Xi_1, \Xi_2, \Xi_3\}^T = \{\xi, \eta, \zeta\}^T \quad (4.11)$$

referenčnega končnega elementa  $\Omega_{\square}$ . Transformacija mora zadostiti naslednjim zahtevam, ki so analogne zahtevam v poglavju 3.2 za obstoj inverza deformacijskega gradienta  $\mathbf{F}$ :

- Za vsako točko referenčnega elementa  $\Omega_{\square}$  obstaja natanko ena točka v elementu  $\Omega_e$ .
- Geometrijske vozliščne točke  $\mathbf{X}_I$  elementa  $\Omega_{\square}$  so povezane z točkami elementov  $\Omega_e$ .
- Vsak del roba elementa  $\Omega_{\square}$ , definiran z vozliščnimi točkami  $\mathbf{X}_I$  pripada ustreznemu delu roba elementov  $\Omega_e$ .

S temi predpostavkami izoparametrična preslikava ohranja tip topologije elementa (trikotni element  $\Omega_{\square}$  je pravilni lik in distorziran trikotnik v  $\Omega_e$  in  $\varphi(\Omega_e)$ ) v začetni ali trenutni konfiguraciji. Čeprav se geometrijske karakteristike topološko podobnih elementov  $\Omega_{\square}$  in  $\Omega_e$  ali  $\varphi(\Omega_e)$  razlikujejo, je v splošnem operiranje z geometrijsko pravilnim likom ali telesom  $\Omega_{\square}$  enostavnejše. Različne operacije, kot je integracija, se namreč izvršijo na pravilni topologiji, npr. kocki, kvadratu, enakokrakem pravokotnem trikotniku ..., z ortogonalno bazo.



Slika 4.4: Izoparametrična preslikava deformiranja končnega elementa  $\Omega_e$   
Figure 4.4: Isoparametric mapping of the deformation of a finite element  $\Omega_e$

Preslikava iz začetne  $\Omega_e$  v trenutno  $\varphi(\Omega_e)$  konfiguracijo se izvede z aproksimacijo deformacijske preslikave  $\varphi_h$ , ki je označena z  $\varphi_e$  na elementu  $\Omega_e$ . Preslikavo lahko opišemo z deformacijskim gradientom  $\mathbf{F}$ . Transformacija iz  $\Omega_{\square}$  v  $\Omega_e$  ali  $\varphi(\Omega_e)$  je predstavljena na sliki 4.4. Ta preslikava je diskretizirana varianta preslikave gibanja telesa  $\varphi(B)$ , kot je dana v sliki 3.1, s tem da je dodana še preslikava iz referenčne konfiguracije  $\Omega_{\square}$ . Iz slike 4.4 sledijo odvisnosti, ki veljajo za posamezen končni element:

$$\mathbf{F} = \mathbf{j}_e \mathbf{J}_e^{-1} \quad \text{in} \quad J_F = \det \mathbf{F} = \frac{\det \mathbf{j}_e}{\det \mathbf{J}_e}. \quad (4.12)$$

Iz tega sledi, da je deformacijski gradient izoparametrična preslikava iz referenčne konfiguracije  $\Omega_{\square}$  v začetno  $\Omega_e$  in iz začetne trenutno  $\varphi(\Omega_e)$  konfiguracijo. Pri tem sta preslikavi  $\mathbf{j}_e$  in  $\mathbf{J}_e$  definirani kot:

$$\mathbf{J}_e = \text{GRAD}_{\Xi} \mathbf{X} = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \Xi}, \quad (4.13)$$

$$\mathbf{j}_e = \text{GRAD}_{\Xi} \mathbf{x} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \Xi}. \quad (4.14)$$

Simbolna koda *AceGen* za izračun zgornjih Jacobijevih matrik in njunih determinant je

$\mathbf{J}_e = \text{SMSD}[\mathbf{X}, \Xi];$	$J_e = \text{Det}[\mathbf{J}_e];$
$\mathbf{j}_e = \text{SMSD}[\mathbf{x}, \Xi];$	$j_e = \text{Det}[\mathbf{j}_e];$

(4.15)

Alternativno se Jacobijeva matrika, ki povezuje referenčno konfiguracijo s prostorsko lahko določi tudi iz enačbe (4.12):  $\mathbf{j}_e = \mathbf{F} \cdot \mathbf{J}_e$ . S pomočjo teh tenzorjev je relativno enostavno določiti gradiente fizikalnih količin glede na začetno  $\text{GRAD} \phi^{(K)}$  ali trenutno konfiguracijo  $\text{grad} \phi^{(K)}$ . Ti gradienti se z uporabo

Jacobijevih matrik  $\mathbf{j}_e$  in  $\mathbf{J}_e$  glede na konfiguracijo  $\Omega_\square$  zapišejo kot:

$$\text{GRAD } \phi^{(K)} = \frac{\partial \phi^{(K)}}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \phi^{(K)}}{\partial \Xi} \frac{\partial \Xi}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \phi^{(K)}}{\partial \Xi} \mathbf{J}_e^{-1}, \quad (4.16)$$

$$\text{grad } \phi^{(K)} = \frac{\partial \phi^{(K)}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \phi^{(K)}}{\partial \Xi} \frac{\partial \Xi}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \phi^{(K)}}{\partial \Xi} \mathbf{j}_e^{-1}. \quad (4.17)$$

Gradient vektorskega polja pomikov  $\mathbf{u} = \{u, v, w\}$ , je definiran kot sledi:

$$\text{GRAD } \mathbf{u} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \Xi} \frac{\partial \Xi}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \Xi} \mathbf{J}_e^{-1}, \quad (4.18)$$

$$\text{grad } \mathbf{u} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \Xi} \frac{\partial \Xi}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \Xi} \mathbf{j}_e^{-1}. \quad (4.19)$$

Razlika v formulaciji obeh gradientov je le v izbrani Jacobijevi matriki transformacije, kar omogoča veliko fleksibilnost reševanja nelinearnih problemov.

Na analogen način se lahko zapiše gradient poljubnega skalarnega polja  $\phi^{(K)}$  glede na  $\mathbf{X}$  in  $\mathbf{x}$ , z upoštevanjem ustrezne transformacije gradienta skalarja (glej preglednico 3.1):

$$\text{GRAD } \phi = \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \phi}{\partial \Xi} \frac{\partial \Xi}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{J}_e^{-T} \frac{\partial \phi}{\partial \Xi}, \quad (4.20)$$

$$\text{grad } \phi = \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \phi}{\partial \Xi} \frac{\partial \Xi}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{j}_e^{-T} \frac{\partial \phi}{\partial \Xi}. \quad (4.21)$$

Znotraj avtomatizacijskega procesa za generacijo kode končnih elementov, se detajlnemu opisu teh operacij lahko izognemo, saj je gradient poljubne količine  $\phi^{(K)}$  možno določiti neposredno s proceduro avtomatskega odvajanja:

$$\nabla_{\mathbf{x}} \phi^{(K)} = \text{GRAD } \phi^{(K)} = \left. \frac{\hat{\delta} \phi^{(K)}}{\hat{\delta} \mathbf{X}} \right|_{\frac{D\Xi}{D\mathbf{X}} = \mathbf{J}_e^{-1}}. \quad (4.22)$$

Odvida  $\frac{\partial \Xi}{\partial \mathbf{X}}$  algoritmično ne moremo neposredno določiti, saj so vse količine v osnovi funkcije  $\Xi$ , poznan pa je inverz tega odvida, ki je kar Jacobijeva matrika transformacije  $\mathbf{J}_e$ , zato manjkajočo odvisnost  $\frac{\partial \Xi}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{J}_e^{-1}$  definiramo pri odvajanju. Zapis enačbe (4.22) v kodi *AceGen* na primeru deformacijskega gradienta  $\mathbf{F}$  je:

```

X+SMSFreeze [Nh.XIO];
Je=SMSD [X,E];
H=SMSD [u,X,"Dependency"->{E,X,SMSInverse [Je] }];
F=IdentityMatrix [3]+H;
JF=Det [F];

```

(4.23)

in na primeru materialnih gradientov temperature in pritiskov:

```

GRADT=SMSD [T,X,"Dependency"->{E,X,SMSInverse [Je] }];
GRADp1=SMSD [p1,X,"Dependency"->{E,X,SMSInverse [Je] }];
GRADpg=SMSD [pg,X,"Dependency"->{E,X,SMSInverse [Je] }];

```

(4.24)

Podobno sledi za prostorski gradient, kjer je definirana izjema  $\frac{\partial \Xi}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{j}_e^{-1}$ :

$$\nabla_{\mathbf{x}} \phi^{(K)} = \text{grad } \phi^{(K)} = \left. \frac{\hat{\delta} \phi^{(K)}}{\hat{\delta} \mathbf{x}} \right|_{\frac{D\Xi}{D\mathbf{x}} = \mathbf{j}_e^{-1}}. \quad (4.25)$$

in pripadajoča koda *AceGen* prostorskega gradienta osnovnih količin:

$$\begin{array}{l}
 \mathbf{x} \vdash \text{SMSFreeze} [\mathbf{X} + \mathbf{u}] ; \\
 \mathbf{je} = \mathbf{F} . \mathbf{Je} ; \\
 \text{grad}\mathbf{u} = \text{SMSD} [\mathbf{u}, \mathbf{x}, \text{"Dependency"} \rightarrow \{\mathbf{\Xi}, \mathbf{x}, \text{SMSInverse} [\mathbf{je}] \}] ; \\
 \text{grad}\mathbf{T} = \text{SMSD} [\mathbf{T}, \mathbf{x}, \text{"Dependency"} \rightarrow \{\mathbf{\Xi}, \mathbf{x}, \text{SMSInverse} [\mathbf{je}] \}] ; \\
 \text{grad}\mathbf{pl} = \text{SMSD} [\mathbf{pl}, \mathbf{x}, \text{"Dependency"} \rightarrow \{\mathbf{\Xi}, \mathbf{x}, \text{SMSInverse} [\mathbf{je}] \}] ; \\
 \text{grad}\mathbf{pg} = \text{SMSD} [\mathbf{pg}, \mathbf{x}, \text{"Dependency"} \rightarrow \{\mathbf{\Xi}, \mathbf{x}, \text{SMSInverse} [\mathbf{je}] \}] ;
 \end{array} . \quad (4.26)$$

Divergenca vektorskega polja  $\phi$  je definirana z enačbo:

$$\nabla_{\mathbf{X}} \cdot \phi = \text{DIV } \phi = \text{GRAD } \phi \cdot \mathbf{I} = \text{tr}(\text{GRAD } \phi) . \quad (4.27)$$

Implementacija divergenca je za materialni in prostorski opis dana spodaj:

$$\begin{array}{l}
 \mathbf{X} \vdash \text{SMSFreeze} [\mathbf{N}h . \mathbf{XIO}] ; \\
 \mathbf{Je} = \text{SMSD} [\mathbf{X}, \mathbf{\Xi}] ; \\
 \text{DIV}\mathbf{u} = \text{Tr} [\mathbf{H}] ;
 \end{array} , \quad (4.28)$$

$$\begin{array}{l}
 \mathbf{x} \vdash \text{SMSFreeze} [\mathbf{X} + \mathbf{u}] ; \\
 \mathbf{je} = \mathbf{F} . \mathbf{Je} ; \\
 \text{div}\mathbf{u} = \text{Tr} [\text{SMSD} [\mathbf{u}, \mathbf{x}, \text{"Dependency"} \rightarrow \{\mathbf{\Xi}, \mathbf{x}, \text{SMSInverse} [\mathbf{je}] \}]] ;
 \end{array} . \quad (4.29)$$

V kodi *AceGen* je potrebno spremenljivke, po katerih se bo odvajalo, definirati kot pomožne spremenljivke. To dosežemo med drugim z ukazom `SMSFreeze` (Korelc, 2011) (poglavje 2.1.2). Uporaba ukaza je razvidna npr. v enačbah (4.23), (4.26), (4.28) in (4.29), kjer sta vektorja materialnih  $\mathbf{X}$  v prvi in tretji in prostorskih  $\mathbf{x}$  koordinat v drugi in četrti enačbi definirana z uporabo ukaza `SMSFreeze`. Ukaz je uporabljen tudi pri definiciji pomožnih spremenljivk  $\mathbf{b}$  v kodi *AceGen* v poglavju 4.2. Podobno funkcijo ima ukaz `SMSReal` v enačbah 4.5 in 4.9, s katerim definiramo osnovne vozliščne količine (4.5) kot znane realne vrednosti v kodi, hkrati pa med izpeljavo enačb ohranjajo lastnost spremenljivk.

Rezidual je definiran kot integral diskretiziranih šibkih oblik ali gradienta psevdo potencialnih oblik po telesu  $B$  2.1. Telo  $B$  je razdeljeno na  $n_{te}$  končnih elementov  $\Omega_e$ , ki skupaj tvorijo diskretizirano telo  $B_h$  (4.1). Integracija psevdo potenciala  $W^P$  po elementu se izvede v vsakem končnem elementu, ki pripada izvorni kodi  $K$ . Z uporabo izoparametričnega koncepta se integracija lahko izvrši nad geometrijsko pravilnim referenčnim elementom  $\Omega_{\square}$  (kocka, tetraeder, kvadrat, trikotnik, itd.) namesto nad nepravilno geometrijo  $\Omega_e$ , z ustrežno Jacobijevo matriko transformacije  $J_e = \det \mathbf{J}_e$ . Primer integracije po elementu  $K$ -te izvorne kode s tri dimenzionalno topologijo končnega elementa:

$$\int_{(\Omega_e^{(K)})} W^P(\mathbf{X}) dV = \int_{(\Omega_{\square}^{(K)})} W^P(\mathbf{\Xi}) J_e(\mathbf{\Xi}) d\Omega = \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} W^P(\xi, \eta, \zeta) J_e d\xi d\eta d\zeta . \quad (4.30)$$

Integracijo po  $\Omega_{\square}$  lahko izvedemo analitično za enostavne primere. Učinkovitejša pa je numerična integracija (glej poglavje 2.1.1) z vsoto potencialov  $W^P(\mathbf{\Xi}_g)$  izračunanih v Gaussovih točkah  $g$  elementa pomnoženih z Gaussovo utežjo  $w_{gp}$ . Referenčne koordinate vsake točke so znane  $\mathbf{\Xi}_g = \{\xi_g, \eta_g, \zeta_g\}$ . Integral (4.30) se z upoštevanjem numerične integracije prepiše v:

$$\int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} W^P(\xi, \eta, \zeta) \det \mathbf{J}_e d\xi d\eta d\zeta \approx \sum_{g=1}^{n_g} W^P(\xi_g, \eta_g, \zeta_g) \det \mathbf{J}_e(\xi_g, \eta_g, \zeta_g) w_{gp} . \quad (4.31)$$



#### 4.1.1 Izbira interpolacijske funkcije

Ena izmed osnovnih zahtev izbire približka fizikalnega polja  $\phi^{(K)}$  je konvergenca rezultatov metode končnih elementov proti pravih rezultatom parcialne diferencialne enačbe. Različne možnosti za izbiro interpolacijskih funkcij količin in geometrije obstajajo, zahteva pa je, da so izpolnjene vsaj do reda približka (npr. polinom s členi  $1, x, y, z, x^2, y^2, z^2, xy, yz, zx$  je izpolnjen do drugega reda).

Za metodo končnih elementov je zahtevan pogoj za interpolacijsko funkcijo  $N_I(\Xi)$  zveznost reda vsaj  $C^0$ , kar pomeni zveznost osnovnih količin polja po vsem telesu  $B_h$ . Ker imajo  $i$ -ti odvodi zveznost  $C^{N-i}$ , kjer je  $n$  zveznost osnovne količine, sledi da pri  $C^0$  zveznosti, zveznost odvodov osnovnih količin po domeni ni zagotovljena. Za obravnavane diferencialne enačbe (glej poglavje 3.5), kjer nastopajo gradienti osnovnih količin (odvodi prvega reda po ustreznih koordinatah), je  $C^0$  zveznost dovolj. V primeru odvodov višjega reda v osnovnih enačbah (Kirchhoffova teorija lupin, teorije nosilcev, idr.) je potrebna zveznost višjega reda  $C^N$ ,  $N > 0$ . Za zveznost višjega reda klasičen izoparametrični koncept interpolacije, kjer je količina interpolirana znotraj končnega elementa neodvisno od sosednjih elementov ni ustrezen in se je potrebno poslužiti drugih funkcij, kot so izogeometrični končni elementi, ki so vgrajeni v okolje *AceGen* (Stadler in sod. (2003), Hudobivnik in sod. (2014)), katerih interpolacijske funkcije so NURBS oziroma "neuniformne racionalne bazne krivulje" (angl. *Non Uniform Rational Basis Splines*). To delo teh primerov ne bo zajemalo, več o  $C^N$  zveznosti pa se lahko prebere v delih Hughes in sod. (2005), Stadler in sod. (2003).

Za definicijo interpolacijskih funkcij zveznosti  $C^0$  obstajajo različne možnosti. Oblikovne funkcije, ki zadoščajo zahtevam isoparametričnega koncepta, so Lagrangejeve interpolacijske funkcije (Zienkiewicz in Taylor, 2000b, Wriggers, 2008). Za skalarno polje je Lagrangeov polinom reda  $n$  z referenčno koordinato  $\xi_I$  za  $I$ -to vozlišče enak:

$$N_I(\xi) = \prod_{\substack{J=1 \\ J \neq I}}^{n+1} \frac{(\xi_J - \xi)}{(\xi_J - \xi_I)}, \quad N_I(\xi_J) = \begin{cases} 1 & \text{če } I = J \\ 0 & \text{če } I \neq J \end{cases}. \quad (4.32)$$

Za dvo- in tri-dimenzionalne probleme je funkcija vozlišča  $N_I(\Xi)$  zgolj produkt interpolacijskih funkcij  $N_I(\square)$  v vseh dimenzijah, t.j.

$$N_J(\xi, \eta) = N_I(\xi) N_K(\eta) \quad \text{ali} \quad N_J(\xi, \eta, \zeta) = N_I(\xi) N_K(\eta) N_L(\zeta). \quad (4.33)$$

Z  $J = 1, \dots, n_{\text{dim}}$  in  $I, K, L = 1, \dots, n$ . Ker so oblikovne funkcije definirane v lokalnem koordinatnem sistemu  $\Xi = \{\Xi_1, \Xi_2, \Xi_3\}^T = \{\xi, \eta, \zeta\}^T$ , je potrebna transformacija v fizikalne koordinate  $X_i$  ali  $x_i$  (glej sliko 4.4), kar definira problem v fizikalnem prostoru. Transformacijo opišeta matriki  $\mathbf{J}_e$  (4.14) ali  $\mathbf{j}_e$  (4.14). V splošnem lahko vsako polje  $\phi^i$  interpoliramo s poljubno interpolacijsko funkcijo, običajno pa je za pomike  $u, v$  in  $w$  izbrana enaka interpolacijska funkcija. Obstajajo tudi izjeme kot so lupine, kjer so prečni pomiki v smeri normale na lupino interpolirani neodvisno od osnih pomikov, vendar te primeri ne bodo obravnavani. Podobno je smiselno pritiske tekočin in plinov interpolirati z enako funkcijo.

Interpolacijska funkcija  $N_I(\xi, \eta, \zeta)$  prvega reda za telo se določi po enačbi (4.33), posamezni faktorji  $N_I(\xi)$ ,  $N_I(\eta)$  in  $N_I(\zeta)$  pa so določeni po enačbi (4.32). S tem dobimo  $n_{en}$  enačb za vsako vozlišče  $I$ :

$$N_I(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{2^3} (1 + \xi_I \xi) (1 + \eta_I \eta) (1 + \zeta_I \zeta). \quad (4.34)$$

Pri tem so  $\xi_I, \eta_I$  in  $\zeta_I$  referenčne koordinate vozlišča  $I$ . Te pri interpolaciji prvega reda zavzemajo le vrednosti -1 ali 1. Na sliki 4.5 je dan izsek kode *AceGen* za izračun interpolacijske funkcije  $\mathbb{N}_h \equiv \mathbb{N}$  in



Jacobijeve matrike  $\mathbb{J}_e \equiv \mathbf{J}_e$  osem-vozliščnega heksahedra, z referenčnimi vozlišči  $\Xi_n$ .

```
XIO=Table[SMSReal[nd$$[i,"X",j]},{i,8},{j,3}];
En={{-1,-1,-1},{1,-1,-1},{1,1,-1},{-1,1,-1},
     {-1,-1,1},{1,-1,1},{1,1,1},{-1,1,1}};
Nh=Table[1/8(1+xi En[[i,1]])(1+eta En[[i,2]])(1+xi En[[i,3]]),{i,1,8}];
X=SMSFreeze[Nh.XIO];
Je=SMSD[X,E];
```

Slika 4.5: Izsek kode *AceGen* za izračun začetnih koordinat heksahedra

Figure 4.5: *AceGen* input segment for the computation of the initial coordinates of heksahedron

Interpolacijska funkcija prvega reda za štirikotnik se določi podobno in je:

$$N_I(\xi, \eta) = \frac{1}{2^2} (1 + \xi_I \xi) (1 + \eta_I \eta) . \quad (4.35)$$

Pripadajoč izsek iz kode *AceGen* je dan na sliki 4.6.

```
XIO=Table[SMSReal[nd$$[i,"X",j]},{i,4},{j,2}];
En={{-1,-1},{1,-1},{1,1},{-1,1}};
Nh=Table[1/4(1+xi En[[i,1]])(1+eta En[[i,2]]),{i,1,4}];
X=SMSFreeze[Nh.XIO];
Je=SMSD[X,E];
```

Slika 4.6: Izsek kode *AceGen* za izračun začetnih koordinat za štirikotnik

Figure 4.6: *AceGen* input segment for the computation of the initial coordinates of štirikotnik

V primeru tri-linearne heksahedra (glej izsek kode slika 4.5) je referenčni element kocka z vozlišči v mreži  $2 \times 2 \times 2$  in je potrebnih 8 Gaussovih točk. V primeru izbire tri-kvadratične interpolacije heksahedra je potrebno  $3 \times 3 \times 3 = 27$  Gaussovih točk, možne pa sta hitrejši alternative z 6 in 14 točkami, kar sorazmerno skrajša računski čas za 25% in 50%. Podobno je za dvo-linearne in kvadratične elemente potrebno  $2 \times 2 = 4$  in  $3 \times 3 = 9$  točk. Več se lahko prebere v osnovnih virih za MKE (Zienkiewicz in Taylor, 2000a, Irons, 1971, Dhatt in sod., 1985).

#### 4.1.2 Identifikacija vozlišč

Orodje AceFEM omogoča identifikacijo skupin vozlišč na podlagi oznake tipa vozlišča (angl. *Node Identification - "NodeID"*), ki je enolična ključna beseda. Vsa vozlišča z enako oznako lahko interpolirajo enako fizikalno količino v vseh elementih v katerih se pojavljajo, pri tem pa morajo imeti vsa enako označena vozlišča enako število prostostnih stopenj ( $n_{pI}^{(K)}$ ). Glej preglednico 4.1. Vozlišča z enako oznako in enakimi koordinatami se pri sestavljanju mreže končnih elementov avtomatsko združijo, če ni zahtevano drugače. Na ta način je možno avtomatsko ustvariti mreže končnih elementov z elementi z različnimi konstitutivnimi zakoni, kot tudi združevati elemente z različnimi topologijami, kot so telesa, lupine in krivulje. Hkrati je na ta način možno povezovati elemente, ki pripadajo različnim poljem ločenih implementacij (**B** in **C**).

V primeru analize povezanih problemov po MKE z enovito implementacijo elementov in enim vozliščem v vsaki topološki točki (**A.1**) so v vsakem vozlišču vozliščne neznanke vseh polj, kar pomeni, da vozliščem ne moremo predpisati standardne oznake, ki bi bila vezana na eno fizikalno polje. Posledično izgubimo fleksibilnost reševanja povezanih problemov, saj smo omejeni na točno določeno zaporedje

prostostnih stopenj v vsakem vozlišču. To pomanjkljivost odpravi ločena implementacija **A.2**, ki za vsako fizikalno smiselno skupino polj definira svoje vozlišče s standardno oznako "NodeID" (glej preglednico 4.1 v poglavju 4). Pri tem se definira skupaj  $n_K$  vozlišč v vsaki topološki točki. V primeru ločenih implementacij **B** in **C** ima element dostop do sekundarnih vozlišč polj  $\check{\mathbf{p}}_e^{(K)} \setminus \mathbf{p}_e^{(K)}$  le v primeru, da so sekundarna vozlišča aktivirana, kar pomeni, da mora biti tudi koda končnega elementa polj  $\check{\phi}^{(K)} \setminus \phi^{(K)}$  definirana pri analizi, v nasprotnem primeru se za nedefinirana sekundarna polja avtomatsko ustvarijo navidezna vozlišča (angl. *Dummy*) s konstantnimi vrednostmi količin po telesu, do katerih ima  $K$ -ti element dostop, v globalnem vektorju vseh spremenljivk problema  $\mathbf{p}$  pa te navidezne količine ne nastopajo.

## 4.2 Psevdo potenciali povezanih termo-hidro-mehanskih problemov

Šibka oblika diferencialnih enačb povezanega termo-hidro-plino-mehanskega problema je definirana v poglavju 3.5 za vsak podproblem. Polno povezan problem zahteva reševanje kombinacije šibkih oblik diferencialnih enačb vseh polj povezanega problema, medtem ko za nepovezan problem zadostuje zgolj reševanje šibke oblike diferencialnih enačb izbranega polja, možne pa so vse vmesne kombinacije polj. Šibke oblike diferencialnih enačb vsakega polja, izpeljane v poglavju 3.5 je potrebno diskretizirati po metodi končnih elementov. Povzetek izpeljanih šibkih oblik je dan v preglednici 4.2, kjer je oznaka  $W_i^{(K)}$  oznaka pripadajočega psevdo-potenciala, ki sledi iz dane šibke oblike. Možne kombinacije teh enačb so dane v preglednici 4.3, pri čemer za posamezno polje lahko izberemo le eno enačbo.

Preglednica 4.2: Povzetek psevdo-potencialov in pripadajočih šibkih oblik  
Table 4.2: The summary of pseudo-potential and corresponding weak forms

komponenta	$W_i^{(K)}$	št. enačbe	opis
Mehansko delo	$W_W^u$	(3.153)	$\delta W$ v začetni k. (izraženo z el. def. energijo)
	$W_S^u$	(3.151)	$\mathbf{S} \cdot \delta \mathbf{E}$ v začetni k.
	$W_\sigma^u$	(3.155)	$\boldsymbol{\sigma} \cdot \delta \mathbf{F}$ v trenutni k.
Toplotni tok	$W_\alpha^T$	(3.184)	energijska enačba
	$W_{\alpha,h}^T$	(3.187)	energijska enačba z entalpijo faznega prehoda
Tok tekočine	$W_{s=1}^{pl}$	(3.188)	enofazni zasičen tok
	$W_{s \neq 1}^{pl}$	(3.189)	enofazni nezasičen tok
	$W_2^{pl}$	(3.190)	dvofazni tok
	$W_{2,h}^{pl}$	(3.192)	dvofazni tok s faznim prehodom
Tok plina	$W_2^{pg}$	(3.191)	dvofazni tok
	$W_{2,h}^{pg}$	(3.193)	dvofazni tok s faznim prehodom

Za vsako šibko obliko iz preglednice 4.2 oz. iz poglavja 3.5 se lahko zapiše ustrezen psevdo-potencial  $W^{(K)} = \sum_K^{n_K} \sum_i \mathbf{a}_i^{(K)} \cdot \mathbf{b}_i^{(K)}$ , kjer so  $\mathbf{a}_i^{(K)}$  funkcije in  $\mathbf{b}_i^{(K)}$  pomožne funkcije z ustrežno izjemo pri odvajanju, če pravi potencial problema ne obstaja (glej poglavje 2.1.2). V nadaljevanju bo prikazana transformacija šibkih oblik v preglednici 4.2 v psevdo-potencial, hkrati bodo zapisane ustrezne formulacije ADB rezidualov z ustreznimi izjemami pri odvajanju. Teoretična osnova je dana v poglavjih 2.1.1 in 2.1.2. Hkrati bodo podani pripadajoči primeri iz kode *AceGen*.

Materialni in prostorski gradienti poljubne količine  $\phi$  se zapišejo kot  $\text{GRAD}(\phi) = \nabla_X(\phi)$  in  $\text{grad}(\phi) = \nabla_x(\phi)$ , definirani z formulacijo ADB po enačbah (4.22) in (4.25). Prikaz implementacije gradientov je podan v izsekih kode (4.23), (4.24) in (4.26).

Ker so problemi časovno odvisni je za ustrežno časovno integracijo problema potrebno poznati tudi časovne odvode  $\frac{\partial \phi}{\partial t}$  količin. Standardni pristop k reševanju problemov je iteracijska procedura, ki teče

Preglednica 4.3: Možne kombinacije enačb povezanih problemov THGM  
Table 4.3: Possible combinations of equations of THGM coupled problems

oznaka potencial	Trdnina	Toplota		Tekočina				Plin	
	$W^u$	$W^T$		$W^{pl}$				$W^{pg}$	
	$W_{\square}^u$	$W_{\alpha}^T$	$W_{\alpha h}^T$	$W_{s=1}^{pl}$	$W_{s \neq 1}^{pl}$	$W_2^{pl}$	$W_{2,h}^{pl}$	$W_2^{pg}$	$W_{2,h}^{pg}$
$W_{\alpha}^T$	✓			✓	✓	✓	×	✓	×
$W_{\alpha h}^T$	✓			×	×	×	✓	×	✓
$W_{s=1}^{pl}$	✓	✓	×					×	×
$W_{s \neq 1}^{pl}$	✓	✓	×					×	×
$W_2^{pl}$	✓	✓	×					✓	×
$W_{2,h}^{pl}$	✓	×	✓					×	✓
$W_2^{pg}$	✓	✓	×	×	×	✓	×		
$W_{2,h}^{pg}$	✓	×	✓	×	×	×	✓		

od začetnega stanja pri  $t = 0$  do končnega časa  $t = \bar{t}$  v končnem številu časovnih korakov  $n_{step}$ , v vsakem koraku je časovni prirastek  $\Delta t = t_n - t$ , kjer je  $t_n$  čas zadnjega uspešno skonvergirane koraka.  $\Delta t$  je lahko konstanten tekom iterativnega procesa, ali pa prilagodljiv, glede na uspešnost konvergence. Iterativna procedura z adaptivnimi časovnimi koraki je dana v algoritmu na sliki 2.1 v poglavju 2. Časovni odvod količine se lahko diskretizira po enačbi za končne diference (Wriggers, 2008):

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} \approx \frac{1}{\Delta t} (\alpha \phi_{n-1} + \beta \phi_n + \gamma \phi_{n+1}). \quad (4.36)$$

$\alpha$ ,  $\beta$  in  $\gamma$  so konstante, ki se določijo glede na red natančnosti. Najenostavnejša izbira je prvi red natančnosti kjer izberemo  $\alpha = 0$ ,  $\beta = -1$  in  $\gamma = 1$ . Izbira vodi do enačbe  $\frac{\partial \phi}{\partial t} \approx \frac{1}{\Delta t} (\phi_{n+1} - \phi_n)$ . Slednja bo uporabljena tudi v računskih primerih. Primer časovnih odvodov v *AceGen* -u je dan v izseku kode na sliki 4.13.

#### 4.2.1 Formulacija ADB pseudo-potenciala mehanskega problema

Potencial mehanskega problema sledi neposredno iz šibke oblike (3.153). Z izbiro testne funkcije  $\eta_u$  v enačbi kot variacije pomikov in z upoštevanjem enačbe (2.8), lahko po ugotovitvah v poglavjih 2.1.1 in 2.1.2 šibko obliko transformiramo v pseudo-potencial:

$$\mathbb{W}u \equiv W^u = W - \mathbf{b}_b^u \cdot \mathbf{u} = \widehat{W} + U - U_T - P - \mathbf{b}_b^u \cdot \mathbf{u} = \widehat{W} + U - b_T^u U' - b_l^u (J_F - 1) - \mathbf{b}_b^u \cdot \mathbf{u}, \quad (4.37)$$

kjer je  $W$  elastična deformacijska energija (3.163) dana v poglavju 3.5.3, ki zajema prispevke efektivnih napetosti, temperaturnih raztezkov in pornih tlakov. Vpliv temperature in pornih pritiskov je zajet s členi  $U_T$  in  $P$ . V primeru nepovezanega hiperelastičnega odziva mehanskega problema je  $W$  hkrati potencial problema, medtem ko zadnji člen predstavlja pseudo-potencial.

$$\mathbb{b}ub \equiv \mathbf{b}_1^u = J_F \rho \bar{\mathbf{b}}, \quad (4.38)$$

$$\mathbb{b}uT \equiv b_T^u = 3\alpha_T (T - T_0) \text{ in} \quad (4.39)$$

$$\mathbb{b}up \equiv b_p^u = \alpha_b p_s \quad (4.40)$$

so pomožne spremenljivke, ki morajo biti konstantne pri odvajanju. Izsek kode *AceGen* za definicijo potrebnih konstant je dan na sliki 4.8. Povprečna gostota je funkcija poroznosti, zasičenosti in trenutnih gostot posameznega polja  $\rho = (1 - n)\rho_s + S_l n \rho_l + S_g n \rho_g$ . Začetno gostoto se lahko določi po enačbi

$\rho_0 = J_F \rho$ . Izseki kode *AceGen* implementacij različnih enostavnih materialnih modelov (glej poglavje 3.5.3) so dani v enačbah (4.41) do (4.44). Prav tako so v izseku kode *AceGen* na sliki 4.7 dane potrebne konstitutivne enačbe, kjer so dane enačbe za poroznost, gostoto in zasičenost. Gradienta pomikov in deformacij sta podana v enačbi (4.23).

```
(*poroznost/porosity*)
n=1-(1-ng)/JF;

(*gostota tekočine/liquid density*)
rho_l=rho_g Exp[-atlg (Tc-T0g)+ 1/(Klg) (plc-p0g)];

(*Zasičenost/Saturation*)
mVGg=1-1/nVGg;
SMSFreeze[pcap,pAbsg+pg-pl];
SlT=SMSIf[Tc-T0g>0,Exp[dsG (Tc-T0g)],1];
Slp=SMSIf[pcap>0,Slirg+(1-Sgirg-Slirg) SMSPower[1+SMSPower[pcap asatg,nVGg,2,2],-mVGg,2,2],
(1-Sgirg)];
Sl=Slp SlT;
```

Slika 4.7: Izsek kode *AceGen* za izračun poroznosti  $n$ , gostote  $\rho_l$  in zasičenosti  $S_l$   
Figure 4.7: *AceGen* input segment for the computation porosity  $n$ , density  $\rho_l$  and saturation  $S_l$

```
lb={bXg,bYg,bZg};
rho=rho_s (1-n)+Sl n rho_l;
ps=Sl pl+Sg pg;

SMSFreeze[lbub,rho lb];
SMSFreeze[bup,ab (ps-p0)];
SMSFreeze[buT,3 atsg (T-T0)];
AppendTo[constant,{buT,bup,lbub}];
```

Slika 4.8: Izsek kode *AceGen* za izračun pomožnih spremenljivk (4.38) do (4.40) mehanskega problema  
Figure 4.8: *AceGen* input segment for the computation of auxiliary variables (4.38) to (4.40) of mechanical problem

Izsek kode *AceGen* za izračun Hookovega modela (3.169):

```
epsilon=SMSFreeze[1/2 (H+H^T),"Symmetric"→True];
Wu= lambda/2 Tr[epsilon]^2+mu_g Tr[epsilon . epsilon]-buT Tr[epsilon]-bup Tr[epsilon]-u.lubub; (4.41)
```

Izsek kode *AceGen* za izračun Saint-Venantovega modela (3.171):

```
C=F^T.F;E=SMSFreeze[1/2 (C-IdentityMatrix[3]),"Symmetric"→True];
Wu= lambda/2 Tr[E]^2+mu_g Tr[E . E]-buT Tr[E]-bup Tr[E]-u.lubub; (4.42)
```

Izsek kode *AceGen* za izračun Neo-Hookovega modela (3.177):

```
C=SMSFreeze[F^T.F,"Symmetric"→True];JF=SMSSqrt[Det[C]];CISO=JF^-2/3 C;ICISO=Tr[CISO];
Wu= mu_g/2 (ICISO-3)+U- buT DUDJF-bup (JF-1)-u.lubub; (4.43)
```

Izsek kode *AceGen* za izračun Mooney-Rivlinovega modela (3.176):

$$\begin{aligned} IICISO &= 1/2 (ICISO^2 - Tr[CISO, CISO]); \\ Wu &= \frac{\mu 1g}{2} (ICISO-3) - \frac{\mu 2g}{2} (IICISO-3) + U - buT DUDJF - bup (JF-1) - u \cdot bub; \end{aligned} \quad (4.44)$$

Izsek kode *AceGen* za izračun volumskega odziva (3.165) in njegovega odvoda po  $J_F$  (3.166):

$$U = \frac{Kg}{\beta g^2} (JF^{-\beta g} - 1 + \beta g \text{Log}[JF]); \quad DUDJF = \frac{Kg}{\beta g JF} (1 - JF^{-\beta g}); \quad (4.45)$$

Alternativno se lahko notranja defomracijska energija izrazi s poljubnim konjugiranim parom,  $S : E$ , da dobimo ustrezno šibko obliko v obliki  $S : \delta E$ , bi moral algoritem odvajanja napetostni tenzor  $S$  obravnavati kot konstanto pri odvajanju potenciala.

#### 4.2.2 Formulacija ADB pseudo-potenciala energijske enačbe

Podobno kot za mehanski problem, definiramo psevdo-potencial ne stacionarnega toka toplote po delno zasičenem poroznem mediju v posamezni Gaussovi točki elementa po enačbi (3.187):

$$WT \equiv W^T = W_\alpha^T + W_{\mathcal{H}}^T, \quad WT\alpha \equiv W_\alpha^T = \nabla_x T \cdot \mathbf{b}_{\nabla}^T + T b^T, \quad WT\mathcal{H} \equiv W_{\mathcal{H}}^T = T b_{\mathcal{H}}^T. \quad (4.46)$$

Pri tem sta  $\mathbf{b}_{\nabla}^T$  in  $b^T$  pomožni spremenljivki, ki sledita iz enačbe (3.187) kot:

$$\mathbf{b}_{\text{grad}T} \equiv \mathbf{b}_{\nabla}^T = \Delta h_v \mathbf{q}_l - \mathbf{q}_T, \quad (4.47)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{b}^T \equiv b^T &= (\rho c)_E \dot{T} + (\phi_l c_l \mathbf{q}_l + \phi_g c_g \mathbf{q}_g) \text{grad } T \\ &- \Delta h_v \left( \rho_l \left( \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} S_l^2 + \frac{n S_l}{\kappa_l} \right) \dot{p}_l + \rho_g \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} S_l S_g \dot{p}_g + \alpha_b S_l \text{div } \mathbf{v} \right) \\ &+ \Delta h_v \left( 3 \rho_l \alpha_{s,l}^T \dot{T} - \rho_l \left( \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} S_l p_l - \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} S_l p_g + n \right) \dot{S}_l \right) - Q \end{aligned} \quad (4.48)$$

$$b_{\mathcal{H}}^T = \mathcal{D}_{mech} - \mathcal{H}. \quad (4.49)$$

Koda *AceGen* konstitutivnih zakonov z evolucijo časovnih odvodov, viskoznostjo, relativno zasičenostjo in Darcyjevimi tokovi faz je dana na v izseku kode sliki 4.13. Koda za izračun potenciala  $W_\alpha^T$  (4.46) je dana na sliki 4.9, poleg enačb na sliki 4.7 so potrebne dodatne materialne in konstitutivne enačbe, prikazane v izsekih na slikah 4.13 in 4.14.

Izračun potenciala  $W_{\mathcal{H}}^T$  (4.46) je podan v izseku kode *AceGen* na sliki 4.10. Za določitev mehanske disipacije  $\mathcal{D}_{mech}$  (3.185) in elastičnega strukturnega gretja  $\mathcal{H}$  (3.186), ki nastopata v potencialu  $W_{\mathcal{H}}^T$  (4.46), je potrebno poznati tudi toplotni odziv materiala t.j. člen  $U_T(J_F^e, T)$  (poglavje 3.5.3), ki izhaja iz volumskega dela mehanske deformacijske energije, ter napetost plastičnega tečenja in plastične spremenljivke  $\mathbf{h}_g$ , zato je smiselno, da se ta člena toplotnega potenciala poračunata v tistem elementu, kjer je definiran mehanski odziv in kjer imamo tudi notranjo iteracijsko proceduro za določitev plastičnih spremenljivk  $\mathbf{h}_g$ . Izsek kode *AceGen* je dan na sliki 4.10. Spremenljivke potrebne za izračun člena  $\mathcal{D}_{mech}$  bodo podane v poglavju 4.3.3.

Za popoln opis šibke oblike je potrebno formulirati tudi naravne robne pogoje, v tem primeru dovod toplote na površini in konveksijski robni pogoj. Izsek pripadajoča kode *AceGen* je dan na sliki 4.11.

```

(*efektivna toplotna kondukcija/effective thermal conduction*)
kT=ns kTsg+n Sl kTlg+n Sg kTgg;
kT=kT IdentityMatrix[3];

(*Fourierjev zakon/Fourier law*)
qT=-kT.gradT;

bDTρ=n (Sl clg ql+Sg cgg qg).gradT;

bTDv=-dhvg abg ρl Sl divv;

(*effektivna toplotna kapaciteta/effective heat capacity*)
ρC=ns ρsg csg+Sl n ρl clg+Sg n ρg cgg;
bTρ=ρC DTDt;

βTsl=3 Sl (ns αTsg+n αTlg);
bTH=-dhvg ρl Sl ( ( (abg-n) / Ksg) Sl + (n / Klg) ) DplDt + (abg-n) / Ksg Sg DpgDt + dhvg ( βTsl DTDt - ρl ( (abg-n) / Ksg) Sl (pl-pg) + n ) DSldt );

(*konstante/constants*)
SMSFreeze[lgradT, -qT+dhvg ql];
SMSFreeze[bT, bTρ+bDTρ+bTH+bTDv-QTg];
constant=Join[constant, {lgradT, bT}];

(*potencial toplote/heat potential*)
WTα=lgradT.gradT+T bT;

```

Slika 4.9: Izsek kode *AceGen* za izračun pseudo-potenciala  $W_{\alpha}^T$  (4.46)Figure 4.9: *AceGen* input segment for the computation of pseudo-potential  $W_{\alpha}^T$  (4.46)

```

Dmech=χg oy Δyg/Δt; (*mehanska disipacija/mechanical disipation*)
H=buT (DUDJF-DUDJFn)/Δt ; (*elastično gretje/elastical heating*)
(*konstante/constants*)
SMSFreeze[bTu, -Dmech+H];
constant=Join[constant, {bTu}];

(*potencial toplote/heat potential*)
WTℋ=T bTu;

```

Slika 4.10: Izsek kode *AceGen* za izračun pseudo-potenciala  $W_{\mathcal{H}}^T$  (4.46)Figure 4.10: *AceGen* input segment for the computation of pseudo-potential  $W_{\mathcal{H}}^T$  (4.46)

Pri tem je potrebno opisati topologijo lupine in Jacobijevo matriko transformacije z dvema referenčnima koordinatama  $\xi$  in  $\eta$ . Za klasičen lupinski element je determinanta transformacije  $J_{ed} = \|\mathbf{n}_{\zeta}\|$ , kjer je  $\mathbf{n}_{\zeta} = \frac{\delta \mathbf{X}}{\delta \xi} \times \frac{\delta \mathbf{X}}{\delta \eta}$  normala na površino. Izsek kode *AceGen* površinskega elementa je dan na sliki 4.12.

```

(*Naravni robni pogoj/Natural boundary condition*)
SMSFreeze[bT, αTg (T-Tinfg)+qTg];
constant={bT};
W=bT T ;

```

Slika 4.11: Izsek kode *AceGen* za izračun naravnih robnih pogojev  $W^T$  (3.187)Figure 4.11: *AceGen* input segment for the computation of natural boundary conditions of  $W^T$  (3.187)

```

{gξ, gη}=SMSD[X, {ξ, η}]T;
mξ=Cross[gξ, gη];
Jed=SMSSqrt[mξ.nξ];

```

Slika 4.12: Izsek kode *AceGen* za izračun Jacobijeve determinante lupinskega elementa  
 Figure 4.12: *AceGen* input segment for the computation of Jacobi determinant of shell element

```

(*časovni odvodi/time derivatives*)
DTDt=(T-Tn)/Δt;
DplDt=(pl-pln)/Δt;
DpgDt=(pg-pgn)/Δt;

(*časovni odvod zasičenosti/Saturation time derivative*)
DSlDpc= SMSIf[pcap>0, SlT mVGg nVGg (-1+Sgirc+Slirg) SMSPower[pcap, -1+nVGg, 2, 2] SMSPower[αsatg, nVGg, 2, 2]
  SMSPower[(1+SMSPower[pcap αsatg, nVGg, 2, 2]), -1-mVGg, 2, 2], 0];
DSlDT=SMSIf[Tc-T0g>0, dsg Exp[dsg (Tc-T0g)] Slp, 0];
DSlDt=DSlDpc (DpgDt-DplDt)+DSlDT DTDt;

(*divergenca hitrosti/velocity divergence*)
v=(u-un)/Δt;
divv=SMSD[v, x, "Dependency"→ {E, x, SMSInverse[je]}];

(*viskoznost/viscosity*)
μl=
  μlg Exp[μlag (plc-p0g)+(Eaclg-μlbg (plc-p0g)) SMSPower[Rg (TAbs-μlTg-μlcg (plc-p0g)), -1, 2, 2]-
  Eaclg/(Rg (Tμlg-μlTg))];
μg=μgg (Tμgg+μgag) SMSPower[TAbs+μgag, -1, 2, 2] SMSPower[TAbs/Tμgg, 3/2, 2, 2];

(*Relativna prepustnost/Relative permeability*)
Se=(Slp-Slirg) SMSPower[(1-Slirg-Sgirc), -1, 2, 2];
krl=SlT^3 SMSPower[Se, μg, 2, 2] SMSPower[1-SMSPower[1-SMSPower[Se, 1/mVGg, 2, 2], mVGg, 2, 2], 2, 2, 2];
krn=SlT^3 SMSPower[1-Se, μg, 2, 2] SMSPower[1-SMSPower[Se, 1/mVGg, 2, 2], 2 mVGg, 2, 2];

(*Darcyjev tok/Darcy flow*)
k=klg IdentityMatrix[3]; (*Also possible: k=F.(klg IdentityMatrix[3]).FT/JF;*)
ql=-ρl krl/μl k.(gradpl-ρl bb);
qg=-ρg krn/μg k.(gradpg-ρg bb);
qv=-ρv krn/μg k.(gradpg-ρg bb);
qd=-ρd krn/μg k.(gradpg-ρg bb);

```

Slika 4.13: Izsek kode *AceGen* za izračun časovnih odvodov, temperaturno odvisnih viskoznosti, relativne prepustnosti in Darcyjevega tok

Figure 4.13: *AceGen* input segment for the computation of time derivatives, time dependent viscosities, relative permeability and Darcy flow

### 4.2.3 Formulacija ADB pseudo-potenciala masne enačbe tekočine

Pseudo-potencial, ki opisuje tok tekočine sledi neposredno iz šibke oblike zakona o ohranitvi mase (3.192) je podobne oblike kot za energijsko enačbo:

$$Wp1 \equiv W^{pl} = \mathbf{b}_{\nabla}^l \cdot \nabla_x (p_l) + b_2^l p_l. \quad (4.50)$$

Pomožni spremenljivki  $\mathbf{b}_{\nabla}^l$  in  $b^l$  sta definirani kot:

$$\begin{aligned} bDp1 \equiv \mathbf{b}_{\nabla}^l &= -(\mathbf{J}_g^v + \mathbf{q}_v + \mathbf{q}_l), \\ bp1 \equiv b^l &= \left( \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} S_l (\rho_v S_g + \rho_l S_l) + \frac{n S_l \rho_l}{\kappa_l} \right) \dot{p}_l + \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} S_g (\rho_v S_g + \rho_l S_l) \dot{p}_g \end{aligned} \quad (4.51)$$

$$\begin{aligned}
& + \left( \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} (\rho_v S_g p_c + \rho_l S_l p_l - \rho_l S_l p_c) + n (\rho_l - \rho_v) \right) \dot{S}_l \\
& + S_g n \dot{\rho}_v + \alpha_b (\rho_v S_g + \rho_l S_l) \operatorname{div} \mathbf{v} - S_l \beta_{slg}^T \dot{T}.
\end{aligned} \tag{4.52}$$

Koda *AceGen* je dana na sliki 4.15, poleg tega pa so potrebne še konstitutivne enačbe na slikah 4.7, 4.14, 4.13 in dodatno 4.16. Naravni robni pogoj k enačbi je dan na sliki 4.17.

```

(*Delni pritisk/Partial pressures*)
TAbsi=SMSPower[TAbs,-1,2,2];

(*pritisk zasičenosti vodne pare/water vapor saturation pressure-Clausius-Clapeyron*)
pvs=pvsgb Exp[ $\frac{Mlg}{Rg} \left( \frac{1}{Tlbg} - TAbsi \right)$ ];

(*Relativna vlažnost/Relative Humidity*)
RH=SMSIf[pcap>0,Exp[ $\frac{-pcap Mlg}{\rho lg Rg} TAbsi$ ],1];

(*para/vapour*)pv=pvs RH;

SMSTagIf[FreeQ[ConstitutiveModel,"CO"|"Fl"],
  DpvDpc=-pv Mlg TAbsi/( $\rho lg Rg$ );
  DpvDT=pv Mlg (pcap+dHvg  $\rho lg$ ) SMSPower[TAbs,-2,2,2]/( $Rg \rho lg$ );
];

(*suh zrak/dry air*)pd=(pAbsg+pg)-pv;

(*gostote plinov/gas densities*)
 $\rho v$ =pv Mlg TAbsi/Rg;
 $\rho d$ =pd Mdg TAbsi/Rg ;
 $\rho g$ = $\rho d$ + $\rho v$ ;
Mg=SMSPower[ $\left( \frac{\rho v}{\rho g Mlg} + \frac{\rho d}{\rho g Mdg} \right)$ ,-1,2,2];

(*difuzija/diffusion*)
Dg=Dgg Exp[ $\frac{Eaclg}{Rg} \left( \frac{1}{TDgg} - TAbsi \right)$ ];

```

Slika 4.14: Izsek kode *AceGen* za izračun plinskih konstitutivnih enačb  
Figure 4.14: *AceGen* input segment for the computation of gas constitutive equations

#### 4.2.4 Formulacija ADB pseudo-potenciala masne enačbe plina

Pseudo-potencial, ki opisuje tok plina sledi neposredno iz šibke oblike zakona o ohranitvi mase (3.193) je:

$$Wpg \equiv W^{pg} = \mathbf{b}_{\nabla}^g \cdot \nabla_x (p_g) + b_2^g p_g. \tag{4.53}$$

Pomožni spremenljivki  $\mathbf{b}_{\nabla}^g$  in  $b^g$  sta definirani kot:

$$\begin{aligned}
\mathbf{b}Dpg \equiv \mathbf{b}_{\nabla}^g &= \mathbf{J}_g^v - \mathbf{q}_a, \\
bpg \equiv b^g &= \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} S_l \rho_a S_g \dot{p}_l + \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} S_g^2 \rho_a \dot{p}_g - \left( \frac{\alpha_b - n}{\kappa_s} S_g p_c + n \right) \rho_a \dot{S}_l dV
\end{aligned} \tag{4.54}$$



$$+ \alpha_b \rho_a S_g \operatorname{div} \mathbf{v} - \rho_a \beta_{sg}^T \dot{T}. \quad (4.55)$$

```
(*časovni odvodi/time derivatives*)
DpvDt=Mlg TAbsi/Rg (DpvDpc (DpgDt-DplDt)+(DpvDT-pv TAbsi) DTDt);
bplT=Sg n DpvDt;

bplK=( (abg-n
        /Ksg S1 (pv Sg+ pl S1)+pl S1 n
        /Klg ) DplDt+ (abg-n
        /Ksg Sg (pv Sg+ pl S1) DpgDt+
        ( (abg-n
        /Ksg (pv Sg pcap+ pl S1 pl-pl S1 pcap)+n (pl-pv) ) DS1Dt);

(*divergenca hitrosti/velocity divergence*)
bplDv=abg (pv Sg+pl S1) divv;

(*temperaturni raztezek/temperature expansion*)
BTslg=3 (atsg (abg-n) (pv Sg +pl S1)+n atlg pl S1);
bplA=-S1 BTslg DTDt ;

(*konstante/constants*)
SMSFreeze [bDpl, -(Jgv+ql+qv)];
SMSFreeze [bpl, bplT+bplDv+bplK+bplA];
AppendTo [constant, {bDpl, bpl}];

(*potencial toka tekočine/liquid flow potential*)
Wpl=gradpl.bDpl+pl bpl;
```

Slika 4.15: Izsek kode *AceGen* za izračun psevdo-potenciala  $W^l$  (4.50)

Figure 4.15: *AceGen* input segment for the computation of pseudo-potential  $W^l$  (4.50)

```
(*Fickov tok/Fick flow*)
Dpvpg=SMSPower [pg, -1, 2, 2] DpvDpc (gradpg-gradpl)-SMSPower [pg, -2, 2, 2] pv gradpg;
Dg=Dgg IdentityMatrix [3];
Mdg Mlg
Jgv=-pg ----- Dg.Dvpvg;
Mg^2
```

Slika 4.16: Izsek kode *AceGen* za izračun Fickove enačbe (3.61)

Figure 4.16: *AceGen* input segment for the computation of Fick equation (3.61)

```
(*Naravni robni pogoj/Natural boundary condition*)
bpl+SMSFreeze [avg (pv-pvinfg)+qlg+qvq];
constant={bpl};
W=bpl pl;
```

Slika 4.17: Izsek kode *AceGen* za izračun naravnih robnih pogojev  $W^l$  (3.192)

Figure 4.17: *AceGen* input segment for the computation of natural boundary conditions  $W^l$  (3.192)

```
(*Naravni robni pogoj/Natural boundary condition*)
bpg+SMSFreeze [qdg];
constant={bpg};
W=bpg pg;
```

Slika 4.18: Izsek kode *AceGen* za izračun naravnih robnih pogojev  $W^g$  (3.193)

Figure 4.18: *AceGen* input segment for the computation of natural boundary conditions of  $W^g$  (3.193)

Koda *AceGen* enačbe (4.53) je dana na sliki 4.19, poleg tega pa so potrebne še konstitutivne enačbe na slikah 4.7, 4.14, 4.13 in 4.16. Naravni robni pogoj k enačbi je dan na sliki 4.18.

```
(*časovni odvodi/time derivatives*)
DpdDt=Mdg TABsi/Rg (DpgDt-DTdt TABsi)-DovDt Mdg/Mwg;
bpgT=Sg n DpdDt;

bpgK=frac{abg-n}{Kg} S1 Sg rho DplDt+frac{abg-n}{Kg} Sg^2 rho DpgDt-frac{abg-n}{Kg} Sg pcp+n rho DS1Dt;

(*divergenca hitrosti/velocity divergence*)
bpgDv=abg Sg rho divv;

(*temperaturni raztezek/temperature expansion*)
betaTsg=3 atsg (abg-n) Sg;
bpgalpha=-rho betaTsg DTdt ;

(*konstante/constants*)
SMSFreeze [lbDpg, Jgv-qd] ;
SMSFreeze [bpg, bpgT+bpgDv+bpgK+bpgalpha] ;
AppendTo [constant, {lbDpg, bpg}] ;

(*potencial toka tekočine/liquid flow potential*)
Wpg=gradpg.lbDpg+pg bpg;
```

Slika 4.19: Izsek kode *AceGen* za izračun pseudo-potenciala  $W^g$  (4.53)

Figure 4.19: *AceGen* input segment for the computation of pseudo-potential  $W^g$  (4.53)

### 4.3 Formulacija ADB reziduala in tangentne matrike povezanega problema

Elastične konstitutivne enačbe moramo (glej poglavje 3.5.3), če želimo obravnavati primer elasto-plastičnega odziva, dopolniti z dodatnimi ne-linearnimi enačbami, ki povezujejo odvisnost med časovno odvisnimi notranjimi spremenljivkami  $\mathbf{h}$  in konstitutivnimi enačbami. To vodi do naslednje množice povezanih nelinearnih enačb v trenutnem časovnem koraku:

$$\mathbf{R}(\mathbf{p}, \mathbf{h}, \mathbf{h}_n) = 0, \quad (4.56)$$

$$\mathbf{Q}_g(\mathbf{F}(\mathbf{p}_u), \mathbf{p}_T, \mathbf{p}_{p_w}, \mathbf{h}_g, \mathbf{h}_{g_n}) = 0. \quad (4.57)$$

Prva enačba je globalni rezidual, sestavljen iz prispevkov rezidualov posameznih končnih elementov (2.15) ali (2.39). Njegova izpeljava je odvisna od uporabljene implementacije, v splošnem pa izhaja iz avtomatskega odvajanja pseudo-potenciala  $W_e^{(K)}$  po vseh primarnih spremenljivkah elementa  $\mathbf{p}_e^{(K)}$ , pri tem je potrebno definirati ustrezne izjeme pri odvajanju.

Druga enačba (4.57) predstavlja skupino inkrementalnih konstitutivnih enačb v vsaki Gaussovi točki  $g$ , ki jih je potrebno rešiti v vsaki Gaussovi točki pri konstantnih vrednostih  $\mathbf{p}_e$  z uporabo notranje Newton-Rhaphsonove iteracijske procedure. Rezultat iteracij so nove vrednosti notranjih spremenljivk  $\mathbf{h}_g$ , ki jih potrebujemo, da lahko zapišemo pravi potencial  $W_g^{(K)}$  in iz njega  $\mathbf{R}_g^{(K)}$  in  $\mathbf{K}_g^{(K)}$ . Za pravi opis termo-elasto-plastičnega obnašanja materiala je potreben nabor dodatnih konstitutivnih enačb, ki opisujejo razvoj plastičnega tečenja. Ta nabor je potreben za formulacijo potenciala z elastično deformacijsko energijo  $W^u$  in potenciala z mehansko toploto  $W_{\mathcal{H}}^T$ .

Ker je sistem enačb  $\mathbf{R}$  in  $\mathbf{K}$  prav tako rešen z Newton-Rhaphsonovo iteracijsko proceduro na globalnem nivoju, gre v tem primeru za gnezdeno iterativno-subiterativno shemo reševanja sistema. Ta narekuje

poleg matrik  $\mathbf{R}$  in  $\mathbf{K}$  izračun tudi lokalnih matrik  $\mathbf{Q}_g$  in  $\mathbf{A}_g$  v vseh Gaussovih točkah. Izračun lokalne tangentne matrike se izvrši neposredno z avtomatskim odvajanjem enačb  $\mathbf{Q}_g$  po notranjih spremenljivkah  $\mathbf{h}_g$ , kar vodi do naslednje formulacije:

$$\mathbf{A}_g = \frac{\partial \mathbf{Q}_g}{\partial \mathbf{h}_g} = \frac{\hat{\delta} \mathbf{Q}_g}{\hat{\delta} \mathbf{h}_g}. \quad (4.58)$$

Poleg vrednosti  $\mathbf{h}_g$  lokalna iteracijska shema vrne implicitne odvisnosti količin  $\mathbf{h}_g$  glede na implicitne spremenljivke  $\mathbf{r}_g = \cup\{\mathbf{F}(\mathbf{u}), T, p_s\}$ , ki jih je potrebno poznati za določitev reziduala  $\mathbf{R}_g$  in tangentne matrike  $\mathbf{K}_g$  v vsaki Gaussovi točki.

```
(*Implicitne spremenljivke/Implicit variables*)
ImplicitVariables=Join[SMSVariables[F], {T,ps}];
```

(4.59)

Prispevek Gaussove točke k rezidualu bo (poglavje 2.2.4) prikazan na dva načina, in sicer za implementaciji **A**, kjer bo izpeljan en rezidual, ter za implementaciji **B** in **C**, kjer so izpeljani ločeni rezidual za vsako fizikalno polje, ki se na koncu sestavijo skupaj v celoto.

### 4.3.1 Formulacija ADB matrik enovitih implementacij

Pri enovitih implementacijah **A.1** in **A.2** (poglavje 2.2.4) so vse enačbe povezanega problema izpeljane znotraj enega končnega elementa. Razlika med implementacijama **A.1** in **A.2** je v številu vozlišč znotraj elementa. Pri implementaciji **A.1** je izbran  $n_K = 1$ . Strukturirana množica vozliščnih neznank elementa termo-hidro-mehanskega problema je za **A.1** dana kot

$$\text{peIO} \equiv \hat{\mathbf{p}}_e = \{\{u_1, v_1, w_1, T_1, p_{l,1}, p_{g,1}\}, \dots, \{u_{n_{en}}, v_{n_{en}}, w_{n_{en}}, T_{n_{en}}, p_{l,n_{en}}, p_{g,n_{en}}\}\} \quad (4.60)$$

dolžine  $n_{en} = n_{ten}$  (št. topoloških vozlišč). Neznanke posameznih polj, ki so osnova za interpolacijo polj (4.6) se razberejo iz  $\text{peIO}$  z ukazom v kodi *AceGen*:

```
uIO=peIO[;;,1;ndim]; TIO=peIO[;;,ndim+1]; pLIO=peIO[;;,ndim+2]; pgIO=peIO[;;,ndim+3];
```

(4.61)

Pri implementaciji **A.2** so definirane  $n_K = 4$  podmnožice  $\phi^{(K)}$ :  $\phi^{(1)} = \mathbf{u} = \{u, v, w\}$ ,  $\phi^{(2)} = \{T\}$ ,  $\phi^{(3)} = \{p_l\}$  in  $\phi^{(4)} = \{p_g\}$ , torej je potrebno v enem elementu skupaj definirati  $n_{en} = \sum_{K=1}^4 n_{en}^{(K)}$  vozlišč. Strukturirana množica vseh vozliščnih neznank implementacije **A.2** je

$$\text{peIO} \equiv \hat{\mathbf{p}}_e = \{\{u_1, v_1, w_1\}, \dots, \{u_{n_{en}^{(1)}}, v_{n_{en}^{(1)}}, w_{n_{en}^{(1)}}\}, \{T_1\}, \dots, \{T_{n_{en}^{(2)}}\}, \{p_{l,1}\}, \dots, \{p_{l,n_{en}^{(3)}}\}, \{p_{g,1}\}, \dots, \{p_{g,n_{en}^{(4)}}\}\}. \quad (4.62)$$

Neznanke posameznih polj se, za primer ko je število vozlišč vsakega polja enako številu topoloških vozlišč končnega elementa t.j.  $n_{en}^{(K)} \equiv n_{ten}$ , v kodi *AceGen* zapišejo z ukazom

```
uIO=peIO[1;nten,1;ndim]; TIO=peIO[nten+1;;2nten,1];
pLIO=peIO[2nten+1;;3nten]; pgIO=peIO[3nten+1;;4nten,1];
```

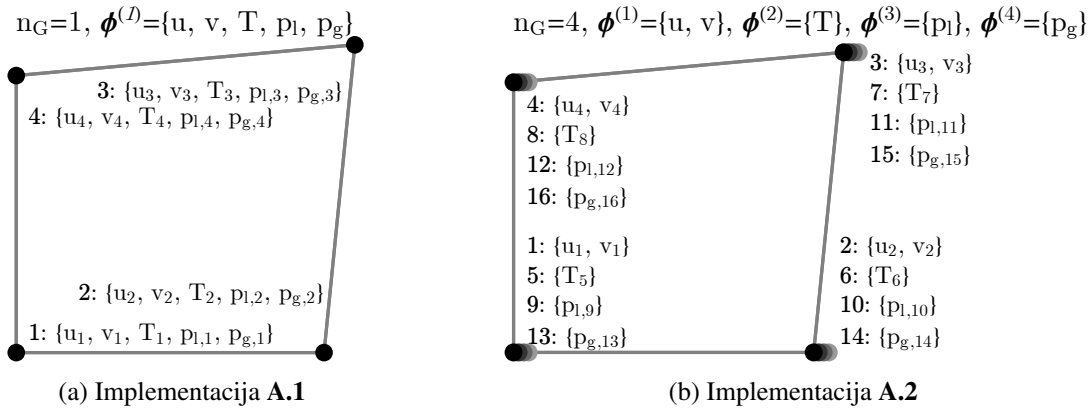
(4.63)

Rezultat unije strukturirane množice je vektor vseh spremenljivk elementa, ki je potreben za izpeljavo

reziduala in tangentna matrike:

$$\mathbb{p}_e \equiv \mathbf{p}_e = \bigcup \hat{\mathbf{p}}_e. \quad (4.64)$$

Izsek kode *AceGen* za določitev  $\mathbb{p}_e \in \mathbb{I}$  in  $\mathbb{p}_e$  je dan v enačbi (4.5). Na sliki 4.20 je prikazana organizacija (4.62) (slika 4.20a) in (4.64) (slika 4.20b) po vozliščih elementa na primeru 2D štiri vozliščnega končnega elementa. Pri tem se razlika implementacij konča in je izpeljava matrik obeh implementacij enaka. Ker so vse enačbe definirane znotraj enega elementa, je vektor vseh spremenljivk elementa enak vektorju primarnih spremenljivk  $\check{\mathbf{p}}_e \equiv \mathbf{p}_e$ .



Slika 4.20: Enoviti implementaciji na primeru štirivozliščnega elementa problema THGM  
Figure 4.20: Unified implementations on an example of quadrilateral element of THGM problem

Psevdo-potencial problema je definiran kot vsota vseh psevdo-potencialov izbranih fizikalnih polj. Za polno povezan termo-hidro mehanskega problem z dvema tekočinama (THGM) je psevdo potencial

$$W \equiv W^P = \sum_{i=1}^{n_c} W^i = W^u + W^T + W^{p_l} + W^{p_g}. \quad (4.65)$$

Psevdo potenciali posameznih polj so podani v preglednici 4.3. Rezidual v integracijski točki sledi z odvajanjem celotnega potenciala izračunanega v integracijski točki  $W_g^P = W^P(\Xi_g)$  po ADB (poglavje 2) formulaciji:

$$\mathbf{R}_g = J_{ed} \frac{\hat{\delta} W_g^P}{\hat{\delta} \mathbf{p}_e} \bigg|_{\substack{Dc_i = \mathbf{0}: c_i \in c, \\ D\mathbf{r}_g = \mathbf{0}}}, \quad \mathbf{c} = \cup \{ \mathbf{b}_1^u, b_T^u, b_p^u, \mathbf{b}_\nabla^T, b^T, b_{\mathcal{H}}^T, \mathbf{b}_\nabla^l, b^l, \mathbf{b}_\nabla^g, b^g, \mathbf{j}_e \}. \quad (4.66)$$

V rezidualu je potrebno za pravilno izpeljavo elasto-plastičnega odziva,  $\mathbf{h}_g$  definirati kot konstante glede na  $\mathbf{r}_g$ . Ker so v šibkih enačbah diferencialnih enačb potrebne variacije prostorskih gradientov, ki so funkcija  $\mathbf{F}$  in posledično pomikov  $\mathbf{u}$ , je potrebno  $\mathbf{j}_e$ , ki nastopa v zapisu gradientov (4.25) in kodi (4.26), obravnavati kot konstanto, zato mora biti v tem primeru znotraj kode definiran z ukazom `SMSFreeze [j_e, SMSD [x, Xi]]`, veljati mora namreč:

$$\frac{\hat{\delta} W_g^{(i)}}{\hat{\delta} \mathbf{p}_e^{(j)}} \bigg|_{(i)} = \begin{cases} \mathbf{R}_g^{(i)} & \text{če } i = j \\ \mathbf{0} & \text{če } i \neq j \end{cases}, \quad \mathbf{R}_g = \bigcup_{i=1}^{n_K} \mathbf{R}_g^{(i)}, \quad (4.67)$$

kjer  $W_g^{(i)}$  predstavlja potencial posameznih polj (mehansko, toplotno, tekočinsko, ...) in  $\mathbf{p}_e^{(j)}$  primarne spremenljivke odvisnih skupin polj (neznani pomiki  $\mathbf{u}$ , temperature  $\mathbf{T}$ , pritiski  $\mathbf{p}_\pi$ ).

Pri izračunu prispevka tangentne matrike integracijske točke k matriki elementa je potrebno pravilno upoštevati tudi implicitne odvisnosti  $\mathbf{h}_g(\mathbf{F}(\mathbf{u}), T, p_s)$ , ki se pojavijo preko lokalne iterativne sheme, kar vodi do konsistentne tangentne matrike (Korelc in Stupkiewicz, 2014):

$$\mathbf{K}_g = \frac{D\mathbf{R}_g}{D\mathbf{p}_e} = \frac{\partial\mathbf{R}_g}{\partial\mathbf{p}_e} + \frac{\partial\mathbf{R}_g}{\partial\mathbf{h}_g} \frac{D\mathbf{h}_g}{D\mathbf{r}_g} \frac{\partial\mathbf{r}_g}{\partial\mathbf{p}_e} = \frac{\partial\mathbf{R}_g}{\partial\mathbf{p}_e} + \frac{\partial\mathbf{R}_g}{\partial\mathbf{h}_g} \left( -\mathbf{A}_g^{-1} \frac{\partial\mathbf{Q}_g}{\partial\mathbf{r}_g} \right) \frac{\partial\mathbf{r}_g}{\partial\mathbf{p}_e}. \quad (4.68)$$

Z zamenjavo parcialnih odvodov v enačbi (4.68) z računskim odvodom in in vnosom manjkajočih implicitnih odvisnosti  $\widehat{D_{\mathbf{r}_g} \mathbf{h}_g} = \frac{D\mathbf{h}_g}{D\mathbf{r}_g} = -\mathbf{A}_g^{-1} \frac{\partial\mathbf{Q}_g}{\partial\mathbf{r}_g}$  kot izjeme avtomatskega odvajanja, sledi formulacija ADB konsistentne tangentne matrike neizotermnega elasto-plastičnega medija zasičenega z dvema tekočinama (tekočo in plinasto fazo):

$$\mathbf{K}_g = \frac{\hat{\delta}\mathbf{R}_g}{\hat{\delta}\mathbf{p}_e} \bigg|_{\frac{D\mathbf{h}_g}{D\mathbf{r}_g} = \widehat{D_{\mathbf{r}_g} \mathbf{h}_g}}, \quad \text{alternativno } \mathbf{h}_g \leftarrow \mathbf{h}_g \bigg|_{\frac{D\mathbf{h}_g}{D\mathbf{r}_g} = \widehat{D_{\mathbf{r}_g} \mathbf{h}_g}}, \quad \mathbf{K}_g = \frac{\hat{\delta}\mathbf{R}_g}{\hat{\delta}\mathbf{p}_e}. \quad (4.69)$$

Alternativno lahko notranje spremenljivke definiramo z implicitnimi odvisnostmi  $\mathbf{h}_g$  predpisanimi pri definiciji spremenljivke  $\mathbf{h}_g$ , kjer je  $D\mathbf{h}_g D\mathbf{r} \equiv \widehat{D_{\mathbf{r}_g} \mathbf{h}_g}$ .

(\*Notranje spremenljivke/Internal variables\*)  
`hW+SMSFreeze[hgj, "Dependency"→{ImplicitVariables, DhDr}];`

(4.70)

Pri odvajanju tangentne matrike se te odvisnosti avtomatsko upoštevajo, s tem je formulacija reziduala in tangentne matrike popolnoma avtomatizirana. Ker so vse enačbe problema izpeljane znotraj enega končnega elementa, imajo vsa polja dostop do vseh količin, vključno z implicitno odvisnostjo  $\widehat{D_{\mathbf{r}_g} \mathbf{h}_g}$ .

Izsek poenostavljene kode *AceGen* za izračun eksplicitne enačbe tangentne matrike  $\mathbf{K}_g \equiv \mathbb{K}g$  in reziduala  $\mathbf{R}_g \equiv \mathbb{R}g$  v Gaussovi točki, ki sledita iz pseudo potenciala  $W^P \equiv W$ :

```
Rg=Jed SMSD[W,pe,"Constant"→constant];
SMSExport[wgp Rg,p$$,"AddIn"→True];
Kg=SMSD[Rg,pe];
SMSExport[wgp Kg,s$$,"AddIn"→True];
```

(4.71)

Z zgornjim ukazom izpeljemo  $n_p + n_p^2$  karakterističnih formul za vse komponente matrik  $\mathbb{R}g$  in  $\mathbb{K}g$  (glej preglednico 2.1). Izsek kode *AceGen* za izračun dveh karakterističnih formul za vsako komponento reziduala  $R_{gi}$  in tangentne matrike  $K_{gij}$ , ki predstavljajo splošno  $i$ -to in  $j$ -to komponento  $\mathbf{K}_g$  in  $\mathbf{R}_g$ :

```
SMSDo[i,1,np];
Rgi=Jed SMSD[W,pe,i,"Constant"→constant];
SMSExport[wgp Rgi,p$$[i],"AddIn"→True];
SMSDo[j,i,np];
Kgij=SMSD[Rgi,pe,j];
SMSExport[wgp Kgij,s$$[i,j],"AddIn"→True];
SMSEndDo[];
SMSEndDo[];
```

(4.72)

Pri tem je  $J_e \equiv J_e$  determinanta transformacije (4.14), (4.15) in  $w_{gp} \equiv w_{gp}$  integracijska oz. Gaussova utež. Če tangentno matriko in rezidual določimo z zanko po  $n_K$  poljih, dobimo v primeru implementacije

**A.2** strukturo matrik po poljih:

$$\mathbf{R}_g \equiv \begin{Bmatrix} \mathbf{R}_g^u \\ \mathbf{R}_g^T \\ \mathbf{R}_g^{p_l} \\ \mathbf{R}_g^{p_g} \end{Bmatrix} \text{ in } \mathbf{K}_g \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{K}_g^{u,u} & \mathbf{K}_g^{u,T} & \mathbf{K}_g^{u,p_l} & \mathbf{K}_g^{u,p_g} \\ \mathbf{K}_g^{T,u} & \mathbf{K}_g^{T,T} & \mathbf{K}_g^{T,p_l} & \mathbf{K}_g^{T,p_g} \\ \mathbf{K}_g^{p_l,u} & \mathbf{K}_g^{p_l,p_l} & \mathbf{K}_g^{p_l,T} & \mathbf{K}_g^{p_l,p_g} \\ \mathbf{K}_g^{p_g,u} & \mathbf{K}_g^{p_g,T} & \mathbf{K}_g^{p_g,p_l} & \mathbf{K}_g^{p_g,p_g} \end{bmatrix}, \quad (4.73)$$

kjer sta  $\mathbf{K}_g^{i,j} = \frac{\delta \mathbf{R}_g^i}{\delta \mathbf{p}_e^j}$  in  $\mathbf{R}_g^i = \frac{\delta \mathbf{W}_g^i}{\delta \mathbf{p}_e^i} \Big|_{()}$ . Koda *AceGen*, ki vrne  $n_K + n_K \times n_K$  karakterističnih formul za komponenti  $\mathbf{R}_g$  in  $\mathbf{K}_g$  in ustreza strukturi (4.73) je

```

pU={Flatten[uIO],Flatten[TIO],Flatten[p_lIO],Flatten[p_gIO]};
men=Length[#]&/@pU;
Table[
  SMSDo[i,1,men[[K]];
  RgiK=Jed SMSD[W,pU[[K],i,"Constant"→constant];
  SMSExport[wgp RgiK,p$$[Total[men[;;K-1]]+i],"AddIn"→True];
  SMSDo[j,i,men[[k]];
  KgijKk=SMSD[RgiK,pU[[k],j];
  SMSExport[wgp KgijKk,s$$[men[;;K-1],men[;;k-1]],
  "AddIn"→True];
  SMSEndDo[]];
SMSEndDo[]];
,{K,1,Length[pU]}
,{k,1,Length[pU]};

```

(4.74)

Implementacija **A.1** vrne drugačno strukturo matrik, kjer prostostne stopnje niso razvrščene po poljih ampak po voziščih. Velikost kode, čas izpeljave in učinkovitost kode je odvisna od uporabljene implementacije.

### 4.3.2 Formulacija ADB matrik ločenih implementacij

V primeru izbire ločenih implementacij **B** in **C** (poglavje 2.2.4) polno povezanega termo-hidro mehanskega problema z dvema fazama (THGM) je potrebno enačbe matrik vsake podmnožice polj izpeljati v ločeni kodi končnega elementa. V tem primeru definiramo  $n_K = 4$  podmnožice  $\phi^{(K)}$ :  $\phi^{(1)} = \mathbf{u} = \{u, v, w\}$ ,  $\phi^{(2)} = \{T\}$ ,  $\phi^{(3)} = \{p_l\}$  in  $\phi^{(4)} = \{p_g\}$ . Strukturirane množice voziščnih neznank  $\hat{\mathbf{p}}_e^{(K)}$  problema THGM za vsak element so

$$\begin{aligned} \mathbf{uIO} \equiv \mathbf{u} &= \hat{\mathbf{p}}_e^{(1)} = \{\{u_1, v_1, w_1\}, \dots, \{u_{n_{en}^{(1)}}, v_{n_{en}^{(1)}}, w_{n_{en}^{(1)}}\}\}, \\ \mathbf{TIO} \equiv \mathbf{T} &= \hat{\mathbf{p}}_e^{(2)} = \{T_1, \dots, T_{n_{en}^{(2)}}\}, \\ \mathbf{p_lIO} \equiv \mathbf{p}_l &= \hat{\mathbf{p}}_e^{(3)} = \{p_{l,1}, \dots, p_{l,n_{en}^{(3)}}\}, \\ \mathbf{p_gIO} \equiv \mathbf{p}_g &= \hat{\mathbf{p}}_e^{(4)} = \{p_{g,1}, \dots, p_{g,n_{en}^{(4)}}\}. \end{aligned} \quad (4.75)$$

Unija strukturirane množice  $\hat{\mathbf{p}}_e^{(K)}$  je vektor primarnih neznank elementa  $K$ , ki je potreben za izpeljavo reziduala:

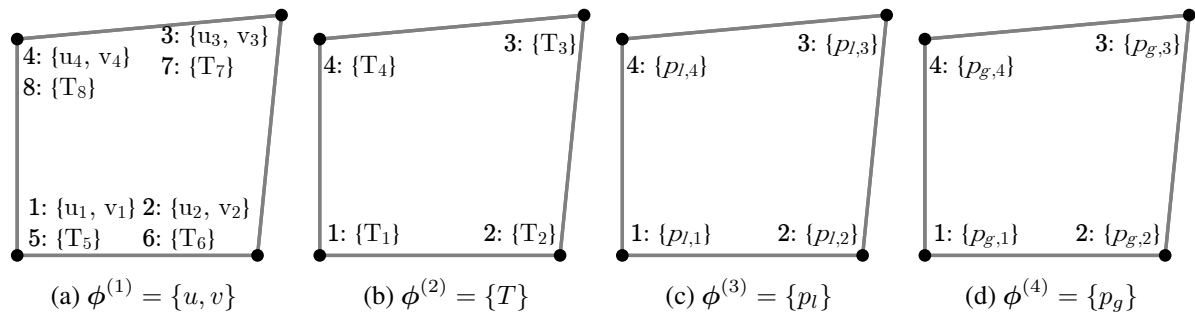
$$\mathbf{pp} \equiv \mathbf{p}_e^{(K)} = \bigcup \hat{\mathbf{p}}_e^{(K)}, \quad (4.76)$$

Za izpeljavo tangentne matrike je potrebno definirati vektor vseh neznank elementa  $K$ . Ob predpostavki, da so vsa polja povezana, je ta v vsakem elementu enak (vrstni red je lahko različen):

$$\mathbf{pe} \equiv \check{\mathbf{p}}_e^{(K)} = \mathbf{u} \cup \mathbf{T} \cup \mathbf{p}_l \cup \mathbf{p}_g. \quad (4.77)$$

V splošnem vektor vseh spremenljivk  $\check{\mathbf{p}}_e^{(K)}$  elementa  $K$  ni nujno enak za vsak element, temveč je sestavljen zgolj iz neznank potrebnih za formulacijo enačb  $K$ -tega končnega elementa.

Neznanke posameznih polj (4.75), ki so osnova za interpolacijo polj (4.6) se razberejo iz  $\mathbf{peIO}$  z ukazom v kodi *AceGen* (4.63), kot za implementacijo A.2.



Slika 4.21: Ločene implementacije na primeru štirivozliščnega elementa problema THGM  
Figure 4.21: Separate implementations on an example of quadrilateral element of THGM problem

Na sliki 4.21 so prikazani štirje končni elementi ločene implementacije na primeru 2D štiri vozliščnih končnih elementov.

V vsakemu od elementov definiramo svoj psevdo-potencial:

$$W^{(1)} = W^u + W_{\mathcal{H}}^T, \quad W^{(2)} = W_{\alpha}^T, \quad W^{(3)} = W^{p_l}, \quad W^{(4)} = W^{p_g}. \quad (4.78)$$

Psevdo-Potenciali vsake skupine polj  $K$  so dani v poglavjih 4.2.1 do 4.2.4. Za vsak potencial iz preglednice 4.2 lahko izpeljemo ločeno kodo končnega elementa. Različne izvorne kode lahko nato kombiniramo med sabo. Različne možne kombinacije povezanih problemov so dane v preglednici 4.3. Konstitutivne enačbe polja temperature  $\phi^{(2)}$ , natančneje člen  $W_{\mathcal{H}}^T$  (4.46), zahtevajo tudi dostop do elastične deformacijske energije ter plastičnih spremenljivk, kar pomeni da so potrebne tudi implicitne odvisnosti  $\widehat{D}_{\mathbf{r}_g} \mathbf{h}_g$  (4.68) za pravilno avtomatizacijo procedure. Te količine bi bilo potrebno ali prenesti iz elementa polja  $\phi^{(1)}$  v element polja  $\phi^{(2)}$ , ali pa da se količine poračunajo znotraj elementa  $\phi^{(2)}$  v vsaki integracijski točki, kar bi bilo zelo neugodno s stališča učinkovitosti in velikosti kode. Učinkoviteje pa je, če ta del toplotnih enačb ( $W_{\mathcal{H}}^T$ ) in posledično pripadajoč del reziduala in tangentne matrike izračunamo znotraj kode mehanskega elementa  $K = 1$ . Formulacija ADB ločenih rezidualov v integracijski točki  $g$  je:

$$\mathbf{R}_g^u \cup \mathbf{R}_{g,\mathcal{H}}^T = J_g \frac{\hat{\delta}(W_g^u + W_{g,\mathcal{H}}^T)}{\hat{\delta}(\mathbf{u} \cup \mathbf{T})} \Bigg|_{\frac{Dc_i}{D\mathbf{p}_e} = \mathbf{0}: c_i \in \mathbf{c}}, \quad \mathbf{c} = \cup \{\mathbf{b}_1^u, b_T^u, b_p^u, \mathbf{h}_g, b_{\mathcal{H}}^T\}, \quad (4.79)$$

$$\mathbf{R}_{g,\alpha}^T = J_g \frac{\hat{\delta}W_{g,\alpha}^T}{\hat{\delta}\mathbf{T}} \Bigg|_{\frac{Dc_i}{D\mathbf{p}_e} = \mathbf{0}: c_i \in \mathbf{c}}, \quad \mathbf{c} = \cup \{\mathbf{b}_{\nabla}^T, b^T\}, \quad (4.80)$$

$$\mathbf{R}_g^{p_l} = J_g \frac{\hat{\delta}W_{g,2}^{p_l}}{\hat{\delta}\mathbf{p}_l} \Bigg|_{\frac{Dc_i}{D\mathbf{p}_e} = \mathbf{0}: c_i \in \mathbf{c}}, \quad \mathbf{c} = \cup \{\mathbf{b}_{\nabla}^l, b^l\}, \quad (4.81)$$

$$\mathbf{R}_g^{p_g} = J_g \frac{\delta W_{g,2}^{p_g}}{\delta \mathbf{p}_g} \Big|_{\substack{Dc_i=0: c_i \in \mathbf{c} \\ D\mathbf{p}_e}}, \quad \mathbf{c} = \cup \{\mathbf{b}_\nabla^g, b^g\}. \quad (4.82)$$

$\mathbf{c}$  je množica konstant pri odvajanju ( $\text{constant} \equiv \mathbf{c}$ ). Tenzor  $\mathbf{j}_e$  je izvzet iz odvajanja glede na enovite implementacije, saj odvod prostorskega gradienta količin po pomikih  $\frac{\delta \nabla_x}{\delta \mathbf{u}}$  ni del verižnega pravila pri odvajanju potencialov v nobenem od elementov. Notranje spremenljivke  $\mathbf{h}_g$  so izračunane in potrebne le znotraj mehanskega elementa, t.j. izvorne kode  $K = 1$ , kjer je potrebno definirati tudi implicitno odvisnost (4.70).

Tangentne matrice integracijski točki ločene implementacije  $\mathbf{B}$  so izpeljane z odvajanjem rezidualov (4.82) po vseh spremenljivkah problema  $\mathbf{p}_e \check{\mathbf{p}}_e^{(K)}$  (4.77):

$$\mathbf{K}_g^u \cup \mathbf{K}_{g,\mathcal{H}}^T = \frac{\delta \mathbf{R}_g^u \cup \mathbf{R}_{g,\mathcal{H}}^T}{\delta \mathbf{p}_e}, \quad \mathbf{K}_{g,\alpha}^T = \frac{\delta \mathbf{R}_{g,\alpha}^T}{\delta \mathbf{p}_e}, \quad \mathbf{K}_g^{p_l} = \frac{\delta \mathbf{R}_g^{p_l}}{\delta \mathbf{p}_e}, \quad \mathbf{K}_g^{p_g} = \frac{\delta \mathbf{R}_g^{p_g}}{\delta \mathbf{p}_e}. \quad (4.83)$$

Prispevka obeh rezidualov in tangentnih matrik toplotnega polja se nato pri sestavljanju globalnih matrik (2.39) seštejeta:

$$\mathbf{R}_g^T = \mathbf{R}_{g,\alpha}^T + \mathbf{R}_{g,\mathcal{H}}^T, \quad \mathbf{K}_g^T = \mathbf{K}_{g,\alpha}^T + \mathbf{K}_{g,\mathcal{H}}^T. \quad (4.84)$$

Tangentna matrika ima implementacije  $\mathbf{B}$  naslednjo strukturo

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_g^u \\ \mathbf{K}_{g,\mathcal{H}}^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_g^{u,u} & \mathbf{K}_g^{u,T} & \mathbf{K}_g^{u,p_l} & \mathbf{K}_g^{u,p_g} \\ \mathbf{K}_{g,\mathcal{H}}^{T,u} & \mathbf{K}_{g,\mathcal{H}}^{T,T} & \mathbf{K}_{g,\mathcal{H}}^{T,p_l} & \mathbf{K}_{g,\mathcal{H}}^{T,p_g} \end{bmatrix}, \quad (4.85)$$

$$\mathbf{K}_{g,\alpha}^T = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{g,\alpha}^{T,u} & \mathbf{K}_{g,\alpha}^{T,T} & \mathbf{K}_{g,\alpha}^{T,p_l} & \mathbf{K}_{g,\alpha}^{T,p_g} \end{bmatrix}, \quad (4.86)$$

$$\mathbf{K}_g^{p_l} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_g^{p_l,u} & \mathbf{K}_g^{p_l,p_l} & \mathbf{K}_g^{p_l,T} & \mathbf{K}_g^{p_l,p_g} \end{bmatrix}, \quad (4.87)$$

$$\mathbf{K}_g^{p_g} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_g^{p_g,u} & \mathbf{K}_g^{p_g,T} & \mathbf{K}_g^{p_g,p_l} & \mathbf{K}_g^{p_g,p_g} \end{bmatrix}. \quad (4.88)$$

V primeru, da obravnavamo primere, kjer disipacija in mehansko gretje nista pomembna je  $W_{g,\mathcal{H}}^T = 0$  in izračun matrik toplote v kodi elementa  $K = 1$  ni potreben. Koda *AceGen*, ki vrne eksplicitno enačbo tangentne matrice in reziduala v Gaussovi točki elementa:

```
Rg=Jed SMSD[W,pp,"Constant"→constant];
SMSExport[wgp Rg,p$$,"AddIn"→True];
Kg=SMSD[Rg,pe];
SMSExport[wgp Kg,s$$,"AddIn"→True];
```

(4.89)

Eksplicitne enačbe za eno karakteristično formulo  $R_{gi}$  in tangentne matrice  $K_{gij}$  vrne enačba kode *AceGen* (4.90) za  $K$ -to izvorno kodo:

```
SMSDo[i,1,Length[pp]];
Rgi=Jed SMSD[W,pp,i,"Constant"→constant];
SMSExport[wgp Rgi,p$$[i],"AddIn"→True];
SMSDo[j,i,np];
Kgij=SMSD[Rgi,pe,j];
SMSExport[wgp Kgij,s$$[i,j],"AddIn"→True];
SMSEndDo[];
SMSEndDo[];
```

(4.90)

Za ločeno implementacijo  $\mathbf{C}$ , ki se uporablja za sekvenčno reševanje, je potreben le diagonalni del matrik,



te dobimo z odvajanjem rezidualov (4.82) po primarnih spremenljivkah  $\mathbf{p}_e^{(K)}$  (4.76).

$$\mathbf{K}_g^u = \frac{\hat{\delta}\mathbf{R}_g^u}{\hat{\delta}\mathbf{u}}, \mathbf{K}_{g,\mathcal{H}}^T = \frac{\hat{\delta}\mathbf{R}_{g,\mathcal{H}}^T}{\hat{\delta}\mathbf{T}}, \mathbf{K}_{g,\alpha}^T = \frac{\hat{\delta}\mathbf{R}_{g,\alpha}^T}{\hat{\delta}\mathbf{T}}, \mathbf{K}_g^{p_l} = \frac{\hat{\delta}\mathbf{R}_g^{p_l}}{\hat{\delta}\mathbf{p}_l}, \mathbf{K}_g^{p_g} = \frac{\hat{\delta}\mathbf{R}_g^{p_g}}{\hat{\delta}\mathbf{p}_g}. \quad (4.91)$$

Tangentna matrika je kvadratna z dimenzijo  $n_p^{(K)} \times n_p^{(K)}$ . Enostavna koda *AceGen* brez zank po parametrih  $\mathbb{p}$  za izračun eksplicitne enačbe tangentne matrike in reziduala, ki vrne kvadratne matrike brez povezanih komponent:

```
Rg=Jed SMSD[W,pp,"Constant"→constant];
SMSExport[wgp Rg,p$$,"AddIn"→True];
Kg=SMSD[Rg,pp];
SMSExport[wgp Kg,s$$,"AddIn"→True];
```

(4.92)

### 4.3.3 Formulacija ADB lokalnih matrik

Za opis plastičnega odziva materiala je potreben dodaten nabor konstitutivnih enačb, ki je dan v tem poglavju. Poslužili se bomo ogrodja za formulacijo standardnih multiplikativnih modelov za elasto-plastičnost končnih deformacij (glej [Simo in Hughes \(1998\)](#)). Konstitutivne enačbe pripeljejo do lokalnega sistema enačb v vsaki Gaussovi točki elementa:

$$\mathbf{A}_g \Delta \mathbf{h}_g = \mathbf{Q}_g. \quad (4.93)$$

Ta sistem je potrebno v vsaki Gaussovi točki rešiti z notranjo Newton-Rhaphsonovo iterativno proceduro, katere algoritem je prikazan na sliki 4.23. Rezultat notranjega sistema linearnih enačb so prirastki  $\Delta \mathbf{h}_g$ ,  $\mathbf{h}_g$  je dovolj natančen, ko  $\|\Delta \mathbf{h}_g\| = \sqrt{\Delta \mathbf{h}_g \cdot \Delta \mathbf{h}_g}$  doseže določeno predpisano toleranco  $\varepsilon_h$ . Rešitev procedure so notranje spremenljivke  $\mathbf{h}_g$  in implicitne odvisnosti  $\widehat{D_{r_g} \mathbf{h}_g}$ .  $\mathbf{h}_g$  v tem primeru predstavljajo plastične deformacije in akumulirano plastičnost. [Korelc in Stupkiewicz \(2014\)](#) sta podala možne izbire formulacije plastičnosti. Izseki kode znotraj ene notranje iteracije je podan na sliki 4.22.

```
(*Lokalna matrika/Local matrix*)
Ag=SMSD[Qg,hgj];
(*LU Razcep lokalne matrike/LU (Lower/Upper) decomposition of local matrix*)
LU=SMSLUFactor[Ag];

(*Odводи notranjih spremenljivk so rešitev linearnega sistema Ag.DhDr=DQgDr/
Derivatives of internal variables are solution of linear system Ag.DhDr=DQgDr*)
DhDr=SMSLUSolve[LU,-SMSD[Qg,ImplicitVariables,"Constant"→hgj,"Dependency"→{hs,ImplicitVariables,dhs}]];

(*Prirastek spremenljivk so rešitev linearnega sistema Ag.Δhgj=Qg/
internal variables are solution of linear system Ag.Δhgj=Qg*)
Δhgj=SMSLUSolve[LU,-Qg];
(*Nova vrednost notranjih spremenljivk*)
hgj+hgj+Δhgj;

(*Rezultat je skonvergiralo ko ΔhΔh<tolerance/The result has converged when ΔhΔh<tolerance*)
ΔhΔh=SMSSqrt[Δhgj.Δhgj/Length[Δhgj]];
```

Slika 4.22: Reprezentativna koda *AceGen* notranje iteracije  
Figure 4.22: Representative *AceGen* code of internal iteration

Elastična deformacijska energija v enačbi (4.37) je dana za hiperelastični materialni model z elastičnim odzivom (poglavje 3.5.3). Formulacija plastifikacije zahteva, da je elastična deformacijska energija

izražena z elastičnimi količinami. Elastično energijo  $W_{g,W}^u$  za elasto-plastični material zapišemo tako, da vse deformacijske gradiente in izpeljane tenzorje in mere deformacij v elastični deformacijski energiji  $W_{g,W}^u$  izrazimo z elastičnimi merami  $\mathbf{F} \rightarrow \mathbf{F}_e$ , saj velja  $\mathbf{F} = \mathbf{F}_e \mathbf{F}_p$  in  $J_F = J_F^e J_F^p$ . V primeru elasto-plastičnosti je  $\mathbf{F}_p \neq \mathbf{I}$  in  $J_F^p \neq 1$ , slednji je za primere kjer je plastifikacija posledica zgolj strižnih napetosti (von Misesov kriterij) enak 1.

```

for g := 1 to n_g step 1 do ; // Zanka po integracijskih točkah
    F_trial ← F(p_e, p_en, h_g, n); // funkcija stanja, npr. pogoj tečenja
    // določa stanje materiala el./pl.
    if F_trial < 0 then
        | h_g ← h_g, n
    else
        while true do ; // notranja zanka
            Q_g ← Q_g(r_g(p_e), h_g, p_en, h_g, n);
            A_g ← ∂Q_g / ∂h_g;
            Δh_g ← -A_g-1 Q_g;
            h_g ← h_g + Δh_g;
            if ||Δh_g|| ≤ ε_h then
                | reši A_g D_r_g h_g + ∂Q_g / ∂r_g = 0 za neznanke D_r_g h_g izvozi h_g v h podatkovno strukturo;
                | break; // prekini notranjo zanko
            end if
            h_g ← h_g | D_r_g = D_r_g h_g;
        end while
    end if
    W_g(K) ← ∑_{i ∈ G(K)} W_gi(p_e, h_g, p_en, h_g, n); // celotni pseudo-potencial v Gaussovi točki
    // K-tega elementa definiran v poglavju 4.2.
    for i := 1 to n_p(K) = ∑_{i ∈ G_K} n_pi do ; // Zanka po vektorju primarnih spremenljivk p_e(K)
        (R_g(K))_i ← w_g J_g ∂W_g / ∂(p_e(K))_i | D_c_i = 0 ; // Rezidual z izjemami c definiranimi v enačbi (4.79)
        for j := 1 to n_p(K) do ; // Zanka po vektorju vseh spremenljivk p_e(K) polja K
            (K_g(K))_{i,j} ← ∂(R_g(K))_i / ∂(p_e(K))_j
        end for
    end for
    R_e+ = R_g; K_e+ = K_g;
end for

```

Slika 4.23: Formulacija ADB splošnega elementa povezanega problema z noranjo zanko

Figure 4.23: ADB formulation of generic element of coupled problem with internal loop

Ker bomo obravnavali le izotropne modele je elastična deformacijska energija lahko izražena tako z  $C_e$  kot tudi z  $b_e$ . Izbira plastičnega in elastičnega tenzorja pa ni poljubna. Izkaže se, da je ugodno če so plastične spremenljivke  $h_g$  komponente plastičnega tenzorja  $C_p^{-1}$ , saj levi Cauchy-Greenov deformacijski tenzor  $b_e$  dobimo s transformacijo plastičnega tenzorja  $C_p^{-1}$  iz začetne v trenutno konfiguracijo (angl. *push-forward*). Deformacijska energija mora biti posledično izražena z invariantami  $b_e$  namesto invariantami celotnega tenzorja  $C$ . Vektor  $h_g$  je tako  $h_g = \{C_{p,11}^{-1} - 1, C_{p,22}^{-1} - 1, C_{p,33}^{-1} - 1, C_{p,12}^{-1}, C_{p,13}^{-1}, C_{p,23}^{-1}, \gamma\}$ . Korelc in Stupkiewicz (2014) podajata več možnih izbir za  $h_g$ . Inverz plastičnega desnega

Cauchy-Greenovega deformacijskega tenzorja  $\mathbf{C}_p^{-1}$  se lahko neposredno prebere iz  $\mathbf{h}_g$ , kjer je shranjen:

$$\mathbf{C}_{pg}^{-1} = \begin{bmatrix} h_{g1} & h_{g4} & h_{g5} \\ h_{g4} & h_{g2} & h_{g6} \\ h_{g5} & h_{g6} & h_{g3} \end{bmatrix} + \mathbf{I}. \quad (4.94)$$

Pomembno dejstvo je tudi to, da ko je material v Gaussovi točki v elastičnem stanju tenzor  $\mathbf{C}_p$  ohrani vrednost identitete  $\mathbf{I}$ . Ker je  $\mathbf{C}_p^{-1}$  znan lahko v tem primeru elastični Levi Cauchy-Greenov deformacijski tenzor  $\mathbf{b}_e$  izrazimo neposredno z enačbo:

$$\mathbf{b}^e = \mathbf{F}_e \mathbf{F}_e^T = \mathbf{F} \mathbf{C}_p^{-1} \mathbf{F}^T, \quad (4.95)$$

$$J_F^e = J_F / J_F^p = \det(\mathbf{b}^e)^{\frac{1}{2}}. \quad (4.96)$$

$J_F^e$  je elastični del Jacobijeve determinante, ki mora za biti v tem primeru definirana kot funkcija tenzorja  $\mathbf{b}^e$ . Ker je  $\mathbf{b}^e$  funkcija celotnih in plastičnih deformacij, je potencial  $W_g^u$  posledično funkcija tako notranjih Gaussovih spremenljivk  $\mathbf{h}_g$  kot tudi spremenljivk  $\mathbf{u}$ ,  $T$ ,  $p_l$  in  $p_g$ :  $W_g^u(\mathbf{u}, \mathbf{h}_g, T, p_l, p_g)$ .

Manjka še formulacija lokalnega reziduala  $\mathbf{Q}_g$ , ta je odvisen od izbranega kriterija tečenja  $\mathcal{F}$  in evolucijske enačbe tečenja, za obravnavan 3D mehanski problem ima  $\mathbf{Q}_g$  strukturo

$$\mathbf{Q}_g = \{Z_{11}, Z_{22}, Z_{33}, Z_{12}, Z_{13}, Z_{23}, \mathcal{F}\}. \quad (4.97)$$

Zadnji element je kriterij tečenja  $\mathcal{F}(\boldsymbol{\sigma}, \gamma, T)$ , ki določa, ali je material v elastičnem ( $\mathcal{F} \leq 0$ ) ali plastičnem ( $\mathcal{F} > 0$ ) stanju. Evolucijske enačbe za  $\mathbf{C}_p^{-1}$  so dane kot  $-\frac{1}{2} \mathcal{L}_v \mathbf{b}_e = \Delta \dot{\gamma} \mathbf{n} \mathbf{b}_e$ , kjer je  $\mathcal{L}_v \mathbf{b}_e$  Oldroydov odvod tenzorja  $\mathbf{b}_e$ ,  $\mathbf{n}$  je smer tečenja, ki se določi kot odvod funkcije tečenja po efektivnih napetostih  $\mathbf{n} = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \boldsymbol{\tau}_{eff}}$ . Evolucijske enačbe se lahko zapišejo v diskretizirani obliki na dva načina kot:

$$\mathbf{Z} = \mathbf{b}_e - \exp\left(-2(\gamma - \gamma_n) \frac{\mathbf{n}}{n_f}\right) \mathbf{F} \mathbf{C}_{p,n}^{-1} \mathbf{F}^T = \mathbf{0}, \quad (4.98)$$

$$\mathbf{Z} = \mathbf{F} \mathbf{C}_p^{-1} - \exp\left(-2(\gamma - \gamma_n) \frac{\mathbf{n}}{n_f}\right) \mathbf{F} \mathbf{C}_{p,n}^{-1} = \mathbf{0}. \quad (4.99)$$

Alternativno se lahko evolucijska enačba prepiše brez eksponenta matrike z uporabo časovne integracije po implicitni Eulerjevi metodi (Simo in Hughes, 1998, Hudobivnik in Korelc, 2016):

$$\mathbf{F} (\mathbf{C}_p^{-1} - \mathbf{C}_{p,n}^{-1}) \mathbf{F}^T + \left(2(\gamma - \gamma_n) \frac{\mathbf{n}}{n_f}\right) \mathbf{b}_e = \mathbf{0}. \quad (4.100)$$

$\gamma$  je plastični množitelj oz. akumulirana plastična deformacija in  $n_f$  faktor za normiranje normale na ploskev tečenja  $\mathbf{n}$  (Ortiz in Stainier, 1999, Ortiz in Pandolfi, 2004). Ta je v primeru klasične plastifikacije, ki ohranja volumen, enak 1. Indeks  $(\ )_n$  se nanaša na znano količino iz prejšnjega koraka. Formulaciji (4.98) ali (4.99) z eksponentom smeri tečenja opišeta točno časovno integracijo evolucijske enačbe (Ortiz in Stainier, 1999, Korelc in Stupkiewicz, 2014, Simo in Miehe, 1992). Eksponent matrike je izračunan neposredno z uporabo zaprte reprezentacije matričnega eksponenta. Eksponent matrike je elementarna funkcija v *AceGen*, izpeljavi in implementaciji zaprtih reprezentacij matričnih funkcij, vključno z eksponentom, v okolju *AceGen* pa je posvečeno poglavje 5.

V računskih primerih bosta kot primer dani dve funkciji tečenja, in sicer Huber-von Misesov in modificiran pogoj tečenja Cam-Clay, ki bosta predstavljeni v naslednjih poglavjih. Kriteriji tečenja je funkcija

napetosti, zato je te potrebno najprej izračunati. Napetosti se določijo neposredno z avtomatskim odvajanjem elastične deformacijske energije  $W$  (enačba (3.163) poglavje 3.5.3). Ker imamo  $W$  izražen z  $\mathbf{b}_e$  sledi totalni Kirchoffov tenzor napetosti (preglednica 3.3):

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mathbf{b}_e \frac{\partial W}{\partial \mathbf{b}_e} + J_F p_0. \quad (4.101)$$

Zadnji člen je prispevek začetnih napetosti, običajno jih predpišemo pri zemljinah in primerih kjer so količine odvisne od nivoja napetosti, saj je začetno stanje lahko nestabilno (npr. model Cam-Clay). Totalne napetosti zajemajo tako napetosti v materialu kot tudi v porah, v elasto-plastičnem odzivu je običajno potrebno obravnavati zgolj efektivne napetosti v materialu. Te se lahko določi z odvajanjem po elastični deformacijski energiji brez člena pornih pritiskov  $P$ , tako da ostaneta le efektivni  $W_E$  in temperaturni  $U_T$  del. Alternativno se lahko efektivne določijo iz totalnih napetosti, kjer odvezamo prispevek pornih tlakov

$$\boldsymbol{\tau}_E = \boldsymbol{\tau} + \alpha_b(p_s - p_0)J_F^e \equiv 2\mathbf{b}_e \frac{\hat{\delta}(W + P)}{\hat{\delta}\mathbf{b}_e} + J_F p_0. \quad (4.102)$$

Prispevek pornih tlakov se mora ujemati s konstitutivnim zakonom, t.j.  $\alpha_b(p_s - p_0) = \frac{\partial P}{\partial J_F}$ .

### Huber-von Misesov kriterij tečenja

Standardni Huber-von Misesov kriterij tečenja se zapiše kot

$$\mathcal{F}_{\text{Mises}} = \sqrt{\frac{2}{3}} \|\boldsymbol{\tau}'_E\| - \sigma_y(\gamma), \quad \boldsymbol{\tau}' = \boldsymbol{\tau} - \text{tr}(\boldsymbol{\tau})\mathbf{I}/3, \quad (4.103)$$

kjer je  $\boldsymbol{\tau}'$  deviatorični del Kirchoffovega napetostnega tenzorja  $\boldsymbol{\tau}$  in  $\sigma_y(\gamma)$  Misesova napetost tečenja. Za primer Huber-von Misesovega kriterija tečenja velja  $n_f = 1$  in  $J_F^p \equiv 1$ . Izotropični eksponentni zakon utrjevanja (glej npr. [Simo in Hughes \(1998\)](#)) se lahko zapiše kot

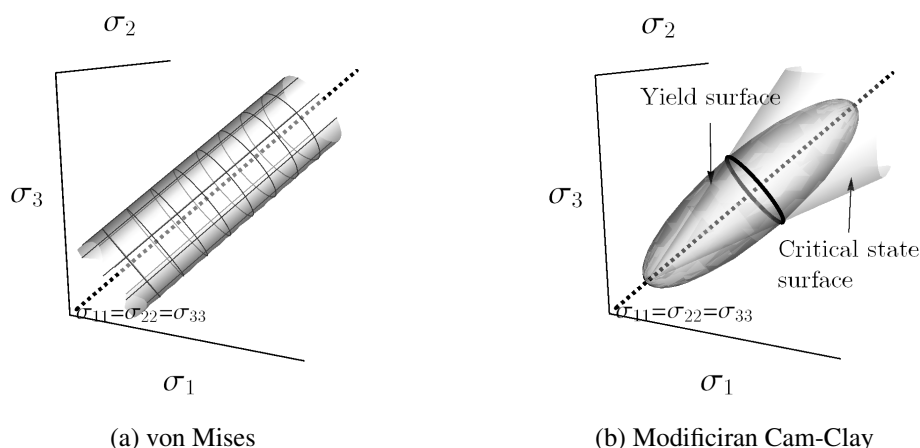
$$\sigma_y(\gamma) = \sigma_{y0}(1 - \omega_0 T) + K_h(1 - \omega_K T)\gamma + R_\infty(1 - \omega_K T)(1 - \exp(-\delta\gamma)), \quad (4.104)$$

kjer so  $\sigma_{y0}$ ,  $K_h$ ,  $R_\infty$ ,  $\delta$ ,  $\omega_0$  in  $\omega_K$  materialne konstante.  $\sigma_{y0}$  je začetna in  $\sigma_{y\infty} = \sigma_{y0} + R_\infty$  zaostala napetost tečenja.  $K_h$  je modul utrjevanja in  $\delta$  eksponent zasičenosti.  $\omega_0$  in  $\omega_K$  sta faktorja mehčanja napetosti tečenja in utrjevanja. V glavnem prostoru napetosti ima von Misesov pogoj obliko cilindra slika 4.24a.

Izveček kode za izračun elastične deformacijske energije Neo-Hookovega modela in plastičnih konstitutivnih enačb Von-Misesovega pogoja tečenja je prikazan na sliki 4.25.

### Modificirani model Cam-Clay

Poleg von Misesovega elasto-plastični modela je kot praktični primer izbran še zahtevnejši modificirani elasto-plastični model Cam-Clay za končne deformacije. Razlog za izbiro tega modela je, da elastični odziv modela zahteva uporabo logaritma matrike in njegovega prvega in drugega odvoda, evolucija plastičnega tečenja pa zahteva eksponent matrike ter njegov prvi odvod. Model Cam-Clay je eden izmed osnovnih modelov za zemljine. Osnovno različico so predstavili [Roscoe in sod. \(1958\)](#) v Cambridgeu, zato tudi izraz Cam-Clay, ki je okrajšava za angleški izraz *Cambridge Clay* (Cambredgeška glina). Kasneje je bila predstavljena modificirana različica ([Roscoe in Burland, 1968](#)), katere površina začetka plastičnega tečenja je, za razliko od prvotnega modela, gladek zvezen elipsoid v prostoru glavnih nape-



Slika 4.24: Von Misesov in Cam-Clay kriterij plastičnega tečenja v prostoru glavnih napetosti  
Figure 4.24: Von Mises and Cam-Clay yield surface in the space of principal stresses

tosti, z glavno osjo v smeri volumetričnih napetosti slika 4.24b. Radij elipse je odvisen od predhodnega napetostnega stanja in se spreminja v povezavi z volumsko spremembo materiala, posledično za razliko od Von-Misesovega kriterija, kriterij Cam-Clay ne ohranja volumna pri plastifikaciji materiala, t.j.  $J_F^p \neq 1$ . Elastična deformacijska energija modela je izražena z logaritmom raztezkov in je enaka že dani energiji Henckyjevega modela po enačbi (3.181), izraženi z ustreznimi elastičnimi količinami  $\mathbf{b}_e$  and  $J_F^e$  namesto  $\mathbf{b}$  in  $J_F$ . Model bo povzet po formulaciji, ki sta jo podala Ortiz in Pandolfi (2004), alternativne formulacije so dane v delih (Callari in sod., 1998, Borja in Alarcón, 1995, Borja in Tamagnini, 1998, Borja in sod., 2001, Borja, 2004). Meja tečenja modificiranega modela Cam-Clay je določena po enačbi

$$\mathcal{F}_{\text{CamClay}} = q^2 + \alpha^2 p(p - p_{\text{con}}), \quad p = \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}), \quad q = \sqrt{\frac{2}{3}} \|\boldsymbol{\sigma}'\|, \quad \boldsymbol{\sigma}' = \boldsymbol{\sigma} - p\mathbf{I}, \quad (4.105)$$

kjer je  $p_{\text{con}}$  konsolidacijski pritisk,  $p$  je Cauchyjev hidrostatski pritisk,  $q$  je deviatorična napetost, je  $\boldsymbol{\sigma}'$  deviatorični tenzor napetosti in  $\alpha$  je faktor, ki določa naklon kritične linije stanja (angl. *critical state line*). Cauchyjev tenzor napetosti je  $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\tau}/J_F$ . Evolucijsko enačba modela je podal tudi Callari in sod. (1998). Razlika glede na klasično isotropično plastičnost, ki ohranja volumen, je v dodatnem pogoju, ki ga mora zadovoljiti  $\mathbf{n}$ . Ortiz in Pandolfi (2004) navajata, da mora  $\mathbf{n}$  zadovoljiti enačbi  $\frac{1}{\alpha^2} \text{tr}(\mathbf{n})^2 + \frac{2}{3} \|\mathbf{n}'\| = 1$ . Zaradi te zahteve je potrebno vpeljati normo  $n_f = \sqrt{\frac{1}{\alpha^2} \text{tr}(\mathbf{n})^2 + \frac{2}{3} \|\mathbf{n}'\|}$ , da bo normiran tenzor  $\mathbf{n}/n_f$  zadostil enačbi. Enačba utrjevanja je povzeta po (Ortiz in Pandolfi, 2004, Callari in sod., 1998)

$$p_{\text{con}} = p_{\text{ref}} \exp\left(\frac{\theta^p}{\theta_{\text{ref}}^p}\right). \quad (4.106)$$

$p_{\text{ref}}$  je referenčni konsolidacijski pritisk in  $\theta_{\text{ref}}^p$  referenčna logaritmična volumetrična deformacija, ta se lahko oceni po enačbi  $\theta_{\text{ref}}^p = -\frac{\lambda}{v_{\text{ref}}}$ , kjer  $\lambda$  je deviški stisljivostni modul zemljine in  $v_{\text{ref}}$  referenčni specifični volumen. Implementacija modificiranega modela Cam-Clay je z uporabo avtomatizacijskih procedur, avtomatskega odvajanja in implementiranih zaprtih reprezentacij matričnih funkcij direktna.

#### 4.4 Formulacija splošnega končnega elementa

V nadaljevanju bo prikazana formulacija enostavnega končnega elementa termo-mehanskega problema. Problem bo implementiran v enem elementu z dvema vozliščema v vsakem topološkem vozlišču in v

```

I=IdentityMatrix[3];
(*Inverz plastičnega desnega Cauchy-Greenovega tenzorja/
Inverse of Plastic right Cauchy-Green tensor*)
Cpi=I+


|         |         |         |
|---------|---------|---------|
| hW[[1]] | hW[[4]] | hW[[5]] |
| hW[[4]] | hW[[2]] | hW[[6]] |
| hW[[5]] | hW[[6]] | hW[[3]] |

;
Cpin=I+


|          |          |          |
|----------|----------|----------|
| hWp[[1]] | hWp[[4]] | hWp[[5]] |
| hWp[[4]] | hWp[[2]] | hWp[[6]] |
| hWp[[5]] | hWp[[6]] | hWp[[3]] |

;
yg=hW[[7]];ygp=hWp[[7]];
Δyg=(yg-ygp);

(*Elastični levi Cauchy-Greenov tenzor/Elastic left Cauchy-Green tensor*)
SMSFreeze[be,F.Cpi.F^T,"Ignore"→(##===0&),"Symmetric"→True];
Jbe=Det[be];
JFe=SMSSqrt[Jbe];
beISO=Jbe^-1/3 Tr[be];

(*Neo-Hooke -Elastična deformacijska energija/Elastic strain energy*)
U=


|                 |                         |    |
|-----------------|-------------------------|----|
| Kg              |                         | Kg |
| βg <sup>2</sup> | (JFe^-βg-1+βg Log[JFe]) | βg |

;
DUDJF=


|    |                    |    |
|----|--------------------|----|
| Kg |                    | Kg |
| βg | (JFe^-1-JFe^-1-βg) | βg |

;
AppendTo[constant,{hW,buT,bup,bub}];
Wu=


|    |
|----|
| μg |
| 2  |


(beISO-3)+U-buT DUDJF-bup (JFe-1)-u.bub;

(*Kirchoffov tenzor napetosti/Kirchoff stress tensor*)
τ =SMSFreeze[Simplify[2 be.SMSD[Wu,be,"Ignore"→NumberQ,"Symmetric"→True]],"Ignore"→(##===0&),"Symmetric"→True];
teff=τ+JF IdentityMatrix[3] αbg (ps-p0g);

(*Misesova kriterij tečenja/Mises yield criterion*)
s=teff-I Tr[teff]/3;
σMises=SMSSqrt[(3/2) Tr[s.s],1,2];

σy=(σyg (1-ω0g (Tc-T0g)) + Khg (1-ωKg (Tc-T0g)) yg +Rinfg (1-ωKg (Tc-T0g)) (1-Exp[-δhg yg]));
F=σMises-σy;

(*Enačbe plastičnega razvoja/Plastic evolution equations*)
A=SMSD[F,τ,"Ignore"→NumberQ,"Symmetric"→True];
M=Simplify[-2 Δyg A];
mexp=SMSMatrixExp[M,1];
Z=Simplify[F.Cpi-mexp.F.Cpin];

(*Lokalni rezidual/Local residual*)
Og={Z[[1,1]],Z[[2,2]],Z[[3,3]],Z[[1,2]],Z[[1,3]],Z[[2,3]],F};

```

Slika 4.25: Koda *AceGen* definicije elastičnega potenciala  $W$  in notranjega reziduala  $Q_g$   
Figure 4.25: *AceGen* code of definition of elastic energy  $W$  and internal residual  $Q_g$

dveh elementih z enim vozliščem v vsaki vozliščni točki in s povezavo vozlišč pomikov in temperatur. Psevdo potencial mehanskega problema z Neo-Hookevim elastičnim ozivom je (poenostavljene enačbe (4.40) do (2.1.2))

$$Wu \equiv W^u = \frac{\mu}{2} \left( \hat{I}_C - 3 \right) + \frac{\kappa}{4} \left( J_F^2 - 2 \log(J_F) - 1 \right) - b_T^u \frac{\kappa}{2} \left( J_F - \frac{1}{J_F} \right), \quad (4.107)$$

$$buT \equiv b_T^u = 3\alpha_T (T - T_0), \quad (4.108)$$

kjer je  $W^u$  elastična deformacijska energija (3.163) dana v poglavju 3.5.3. Psevdo-potencial ne stacionarnega toka toplote (poenostavljene enačbe (4.46) do (4.49)):

$$WT \equiv W_{g,\alpha}^T = \nabla_x T \cdot \mathbf{b}_{\nabla}^T + T b^T, \quad (4.109)$$

$$\mathbf{b}DT \equiv \mathbf{b}_{\nabla}^T = -\mathbf{q}_T, \quad (4.110)$$

$$\mathbf{bT} \equiv \mathbf{b}^T = (\rho c)_E \dot{T}. \quad (4.111)$$

```

SMSInitialize["Q1NeoHookeThermal", "Environment" -> "AceFEM"];
SMSTemplate["SMSTopology" -> "Q1", "SMSNoNodes" -> 8, "SMSNodeID" -> {"D", "D", "D", "D", "T", "T", "T", "T"},
  "SMSDOFGlobal" -> {2, 2, 2, 2, 1, 1, 1, 1},
  "SMSDomainDataNames" -> {"κ -Togostni modul", "μ -Strižni modul", "ρ -gostota", "αT -temperaturni raztezek",
    "kT -toplotna prevodnost", "cp -specifična toplota"}, "SMSDefaultData" -> {1, 0.5, 1, 0, 1, 1}
];
SMSStandardModule["Tangent and residual"];
{κg, μg, ρg, αTg, kTg, cp} = SMSReal[Table[es$$["Data", i], {i, Length[SMSDomainDataNames]}]];
SMSDo[Ig, 1, SMSInteger[es$$["id", "NoIntPoints"]]]; (* začetek Gauss-ove zanke *)
E = {ξ, η, ζ} + Table[SMSReal[es$$["IntPoints", i, Ig]], {i, 3}]; (* točka *)
XIO = Table[SMSReal[nd$$[i, "X", j]], {i, 4}, {j, 2}];
peIO = SMSReal[Table[nd$$[i, "at", j], {i, 8}, {j, SMSDOFGlobal[i]}]];
penIO = SMSReal[Table[nd$$[i, "ap", j], {i, 8}, {j, SMSDOFGlobal[i]}]];
uIO = peIO[[1;;4, 1;;2]]; TIO = peIO[[5;;8, 1]]; TnIO = penIO[[5;;8, 1]]; pe = Flatten[peIO];
En = {{-1, -1}, {1, -1}, {1, 1}, {-1, 1}};
Nh = Table[1/4 (1 + ξ En[[i, 1]]) (1 + η En[[i, 2]]), {i, 1, 4}]; (* interpolacijska funkcija *)
u = Append[Nh.uIO, 0]; T = Nh.TIO; Tn = Nh.TnIO; (* Interpolacija osnovnih količin *)
SMSFreeze[X, Append[Nh.XIO, ζ]]; SMSFreeze[x, X + u]; Je = SMSD[X, E]; Jed = Det[Je];
H = SMSD[u, X, "Dependency" -> {E, X, SMSInverse[Je]}]; (* materialn gradient *)
F = IdentityMatrix[3] + H; SMSFreeze[je, F.Je];
gradT = SMSD[T, x, "Dependency" -> {E, x, SMSInverse[je]}]; (* prostorski gradient *)

qT = -kTg gradT; (* toplotni tok *)
Δt = SMSReal[rdata$$["TimeIncrement"]]; (* časovni korak *)
DTDt = (T - Tn) / Δt; (* časovni odvod temperature *)
SMSFreeze[buT, 3 αTg T]; SMSFreeze[bDT, -qT]; SMSFreeze[bT, ρg cp DTDt]; (* konstante *)

SMSFreeze[C, F.T.F, "Symmetric" -> True]; JF = Det[F];
Wu = (μg / 2) (JF^-2/3 Tr[C] - 3) + (κg / 4) (JF^2 - 1 - 2 Log[JF]) - (buT κg / 2) (JF - 1 / JF); (* Neo-Hooke *)
WT = bDT.gradT + T bT; (* psevdo potencial temperature *)
W = Wu + WT; (* potencial *)

wgp = SMSReal[es$$["IntPoints", 4, Ig]]; (* Utež *)
Rg = Jed SMSD[W, pe, "Constant" -> {buT, bDT, bT, je}]; SMSEExport[wgp Rg, p$$, "AddIn" -> True];
Kg = SMSD[Rg, pe]; SMSEExport[wgp Kg, s$$, "AddIn" -> True];
SMSEndDo[]; (* konec Gauss-ove zanke *)
SMSWrite[];

```

Slika 4.26: Izsek kode *AceGen* elementa enovite implementacije za izračun enostavnega termo-mehanskega problema

Figure 4.26: *AceGen* input segment of the element according to unified implementation for the computation of the simple thermo-mechanical problem

Na sliki 4.26 je prikazana implementacija enačb (4.107) in (4.109) v simbolni kodi *AceGen* na primeru štirivozliščnega končnega elementa po enoviti implementaciji z enim vozliščem za pomika in enim za temperaturo v vsaki topološki točki. Na sliki 4.27 je prikazana koda *AceGen* enačbe (4.107) v prvem in enačbe (4.109) elementu. Razlika je v zapisu vozlišč. Pri sekundarnih vozliščih dodamo znake "–M", ki povedo da so ta vozlišča prava vozlišča le, če so bila definirana s strani drugega elementa, če ne so navidezna vozlišča 4.1.2. Razlika je tudi v definiciji potenciala W in v spremenljivkah, po katerih je ta odvajan. V tem primeru so matrice zaradi jasnosti izračunane z neučinkovitim eksplicitnim izrazom. Možne pa so različne kombinacije podane v poglavju 4.3, ki so bile prikazane v izsekih na slikah 4.71, 4.72 in 4.74 in druge.

```

SMSInitialize["Q1NeoHookeT", "Environment" -> "AceFEM"];
SMSTemplate["SMSTopology" -> "Q1", "SMSNoNodes" -> 8, "SMSNodeID" -> {"D", "D", "D", "D", "T -M", "T -M", "T -M", "T -M"},
  "SMSDofGlobal" -> {2, 2, 2, 2, 1, 1, 1, 1}, "SMSAdditionalNodes" -> Hold[{#1, #2, #3, #4} &],
  "SMSDomainDataNames" -> {"k -Togostni modul", "mu -Strižni modul", "alpha -temperaturni raztezek"}, "SMSDefaultData" -> {1, 0.5, 0}
];
SMSStandardModule["Tangent and residual"];
{kg, mu, alpha} + SMSReal[Table[es$$["Data", i], {i, Length[SMSDomainDataNames]}]];
SMSDo[ig, 1, SMSInteger[es$$["id", "NoIntPoints"]]]; (* začetek Gauss-ove zanke *)
E = {xi, eta, zeta} + Table[SMSReal[es$$["IntPoints", i, Ig], {i, 3}]]; (* točka *)
XIO = Table[SMSReal[nd$$[i, "X", j]], {i, 4}, {j, 2}];
peIO = SMSReal[Table[nd$$[i, "at", j], {i, 8}, {j, SMSDofGlobal[[i]]}]];
uIO = peIO[1;; 4, 1;; 2]; TIO = peIO[5;; 8, 1]; pe = Flatten[peIO];
En = {-1, -1}, {1, -1}, {1, 1}, {-1, 1}];
Nh = Table[1/4 (1 + xi En[[i, 1]] (1 + eta En[[i, 2]]), {i, 1, 4}]]; (* interpolacijska funkcija *)
u = Append[Nh.uIO, 0]; T = Nh.TIO; (* Interpolacija osnovnih količin *)
SMSFreeze[X, Append[Nh.XIO, zeta]]; SMSFreeze[x, X + u]; Je = SMSD[X, E]; Jed = Det[Je];
H = SMSD[u, X, "Dependency" -> {E, X, SMSInverse[Je]}]; (* materialn gradient *)
F = IdentityMatrix[3] + H; SMSFreeze[je, F.Je];

SMSFreeze[buT, 3 alpha T]; (* konstante *)
SMSFreeze[C, F.T.F, "Symmetric" -> True]; JF = Det[F];
W = -frac(mu}{2} (JF^{2/3} Tr[C] - 3) + frac(kg}{4} (JF^2 - 1 - 2 Log[JF]) - frac(buT kg}{2} (JF - frac{1}{JF})); (* potencial *)

wgp = SMSReal[es$$["IntPoints", 4, Ig]]; (* Utež *)
Rg = Jed SMSD[W, pe[1;; 8], "Constant" -> {buT}]; SMSEXP[wp Rg, p$$, "AddIn" -> True];
Kg = SMSD[Rg, pe]; SMSEXP[wp Kg, s$$, "AddIn" -> True];
SMSEndDo[]; (* konec Gauss-ove zanke *)
SMSWrite[];

```

```

SMSInitialize["Q1ThermalD", "Environment" -> "AceFEM"];
SMSTemplate["SMSTopology" -> "Q1", "SMSNoNodes" -> 8, "SMSNodeID" -> {"T", "T", "T", "T", "D -M", "D -M", "D -M", "D -M"},
  "SMSDofGlobal" -> {1, 1, 1, 1, 2, 2, 2, 2},
  "SMSDomainDataNames" -> {"rho -gostota", "kT -toplotna prevodnost", "cp -specifična toplota"}, "SMSDefaultData" -> {1, 1, 1}
];
SMSStandardModule["Tangent and residual"];
{rho, kT, cp} + SMSReal[Table[es$$["Data", i], {i, Length[SMSDomainDataNames]}]];
SMSDo[ig, 1, SMSInteger[es$$["id", "NoIntPoints"]]]; (* začetek Gauss-ove zanke *)
E = {xi, eta, zeta} + Table[SMSReal[es$$["IntPoints", i, Ig], {i, 3}]]; (* točka *)
XIO = Table[SMSReal[nd$$[i, "X", j]], {i, 4}, {j, 2}];
peIO = SMSReal[Table[nd$$[i, "at", j], {i, 8}, {j, SMSDofGlobal[[i]]}]];
penIO = SMSReal[Table[nd$$[i, "ap", j], {i, 8}, {j, SMSDofGlobal[[i]]}]];
uIO = peIO[1;; 4, 1;; 2]; TIO = peIO[5;; 8, 1]; TnIO = penIO[5;; 8, 1]; pe = Flatten[peIO];
En = {-1, -1}, {1, -1}, {1, 1}, {-1, 1}];
Nh = Table[1/4 (1 + xi En[[i, 1]] (1 + eta En[[i, 2]]), {i, 1, 4}]]; (* interpolacijska funkcija *)
u = Append[Nh.uIO, 0]; T = Nh.TIO; Tn = Nh.TnIO; (* Interpolacija osnovnih količin *)
SMSFreeze[X, Append[Nh.XIO, zeta]]; SMSFreeze[x, X + u]; Je = SMSD[X, E]; Jed = Det[Je];
H = SMSD[u, X, "Dependency" -> {E, X, SMSInverse[Je]}]; (* materialn gradient *)
F = IdentityMatrix[3] + H; SMSFreeze[je, F.Je];
gradT = SMSD[T, x, "Dependency" -> {E, x, SMSInverse[je]}]; (* prostorski gradient *)

qT = -kTg gradT; (* toplotni tok *)
DeltaT = SMSReal[rdata$$["TimeIncrement"]]; (* časovni korak *)
DTDt = (T - Tn) / DeltaT; (* časovni odvod temperature *)
SMSFreeze[bDT, -qT]; SMSFreeze[bT, rho cp g DTDt]; (* konstante *)
W = bDT.gradT + T bT; (* potencial *)

wgp = SMSReal[es$$["IntPoints", 4, Ig]]; (* Utež *)
Rg = Jed SMSD[W, pe[1;; 4], "Constant" -> {buT, bDT, bT, je}]; SMSEXP[wp Rg, p$$, "AddIn" -> True];
Kg = SMSD[Rg, pe]; SMSEXP[wp Kg, s$$, "AddIn" -> True];
SMSEndDo[]; (* konec Gauss-ove zanke *)
SMSWrite[];

```

Slika 4.27: Izsek kode *AceGen* dveh elementov ločene implementacije za izračun enostavnega termomehanskega problema

Figure 4.27: *AceGen* input segment of the two elements written according to separate implementations for the computation of simple thermo-mechanical problem



## 5 MATRIČNE FUNKCIJE

V poglavju 3.5.3 smo predstavili različne hiperelastične modele. Večino modelov je možno enostavno zapisati z invariantami deformacijskih tenzorjev. Za formulacijo elastičnih deformacijskih energij Henckyjevega in Ogdenovega modela, ali zapisati enega izmed splošnih deformacijskih tenzorjev Seth-Hillove družine (3.22,3.24) ali logaritmični deformacijsko tenzor (3.25), pa so potrebne tenzorske funkcije ali operacije nad lastnimi vrednostmi. Izpeljava ravnotežnih enačb in konsistentne matrike teh modelov zahteva odvajanje energije, posledično to pomeni, da so potrebni prvi in drugi odvodi tenzorskih funkcij. Inkrementalna multiplikativna formulacija elastoplastičnega modela predstavljena v poglavju 4.3.3 zahteva integracijo evolucije plastičnega tečenja, ki ohranja volumen, kar lahko dosežemo s formulacijo tečenja z uporabo eksponenta matrike (Itskov in Aksel, 2002, Korelc in Stupkiewicz, 2014). Z numerično knjižnico podprogramov, katerih rezultat bi bila izbrana matrična funkcija in njen prvi in drugi odvod, definiranim z računsko natančnostjo na vsem definicijskem območju funkcije, bi bila formulacija zgornjih in podobnih kompleksnih modelov, ki zahtevajo uporabo tenzorske funkcije močno poenostavljena, rezultati pa do računske natančnosti točni.

V naslednjih poglavjih bo prikazana izpeljava matričnih funkcij v zaključeni obliki z odvajanjem rodovne funkcije lastnih vrednosti matrike, kot je to prikazal Lu (2004). Izpeljane enačbe bodo osnova za kreiranje numerične knjižnice podprogramov. Metodo bomo aplicirali na nekaj najpogostejših matričnih funkcij, kot so eksponent, logaritem, koren, potenca in končna potenčna vsota matrike. Razvoj bo prikazan za matrike dimenzij  $3 \times 3$  za katere je poznan analitičen izraz za izračun lastnih vrednosti (Goddard in Ledniczky, 1997, Korelc in Stupkiewicz, 2014). Ker so analitični izrazi v okolici večkratnih lastnih vrednosti singularni, pripadajoče lastne vrednosti pa niso enolične, bo rodovna funkcija na teh območjih razvita v Taylorjevo vrsto. Razvite zaključene oblike bodo numerično preverjene s pomočjo orodja *Mathematica* na nestabilnem območju večkratnih lastnih vrednosti, kjer je potreben razvoj rodovne funkcije v vrsto. Kot referenčne vrednosti bodo uporabljene potenčne vrste matričnih funkcij, ki jih je možno izračunati na želeno natančnost. Na koncu bo prikazana še uporaba matričnih funkcij na primeru različnih hiperelastičnih in elasto-plastičnih materialnih modelov.

### 5.1 Izpeljava zaključenih oblik matričnih funkcij z avtomatskim odvajanjem

Izpeljava matričnih funkcij in njihovih prvih in drugih odvodov bo pokazana za primer matrik dimenzij  $3 \times 3$  s tremi realnimi lastnimi vrednostmi. Zaključene oblike izbranih matričnih funkcij bodo izpeljane z uporabo sistema za avtomatsko generiranje kode *AceGen* (Korelc, 2011) in sistema za računalniško algebro *Mathematica* (Wolfram Research, 2013).

#### 5.1.1 Splošen zapis matričnih funkcij

Za izpeljavo poljubne matrične funkcije  $\mathcal{F}(\mathbf{A})$  bo uporabljena v uvodu omenjena metoda, ki jo je podal Lu (2004), kjer je podana tudi teoretična osnova. Lu (2004) navaja, da je poljubna matrična funkcija definirana kot odvod ustrezne skalarne rodovne funkcije  $G(\mathbf{A})$  po elementih transponirane matrike. Prva naloga je zapisati ustrezno funkcijo, ki bo vrnila želeno matrično funkcijo. Rodovna (angl. *generating*) funkcija se zapiše kot vsota pomožnih funkcij  $g(\lambda_i)$ , ki operirajo nad lastnimi vrednostmi  $\lambda_i$  matrike

**A.** Pomožna funkcija je definirana kot integral skalarne ekvivalentne  $f(\lambda_i)$ , ki operira nad lastnimi vrednostmi  $\lambda_i$ . Splošna enačba za določitev matrične funkcije sledi:

$$f(\lambda_i) = \mathcal{F}(\mathbf{A})|_{\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{3,3} \rightarrow \lambda_i = \text{eigenvalues}(\mathbf{A})_i \in \mathbb{R}}, \quad (5.1)$$

$$g(\lambda_i) = \int f(\lambda_i) d\lambda_i, \quad (5.2)$$

$$G(\mathbf{A}) = \sum_i g(\lambda_i), \quad (5.3)$$

$$\mathcal{F}(\mathbf{A}) = \frac{\partial G(\mathbf{A})}{\partial \mathbf{A}^T}. \quad (5.4)$$

Da lahko zapišemo matrično funkcijo je potrebno poznati zaključeno obliko lastnih vrednosti matrike  $\mathbf{A}$ . Ker bo za izpeljavo uporabljena procedura avtomatskega odvajanja, je potrebno rodovno funkcijo zapisati v taki obliki, da bo možno določiti njene odvode. To lahko dosežemo, če definiramo lastne vrednosti kot funkcijo komponent matrike  $\mathbf{A}$ . Lastne vrednosti se določijo kot rešitev kubičnega karakterističnega polinoma matrike  $\mathbf{A}$  na več različnih načinov. Proceduro za določitev lastnih vrednosti matrike  $3 \times 3$  lahko povzamemo po [Korelc in Stupkiewicz \(2014\)](#), [Goddard in Ledniczky \(1997\)](#). Postopek zahteva razcep matrike  $\mathbf{A}$  na volumetrični  $\mathbf{A}'' = \lambda_v \mathbf{I}$  in deviatorični del  $\mathbf{A}' = \mathbf{A} - \mathbf{A}''$ , kjer je  $\lambda_v = \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbf{A})$  lastna vrednost volumetričnega dela  $\mathbf{A}''$ . Z razcepom na deviatorični in volumetrični del zmanjšamo zaokrožitveno napako v okolici večkratnih enakih lastnih vrednosti. Karakteristični polinom tretjega reda matrike  $\mathbf{A}'$  zapišemo kot:

$$(\lambda')^3 - \frac{1}{2} p \lambda' - q = 0, \quad p = \text{tr}(\mathbf{A}'\mathbf{A}'), \quad q = \det \mathbf{A}'. \quad (5.5)$$

Tri lastne vrednosti  $\lambda'_i$  matrike  $\mathbf{A}'$ , ki rešijo enačbo (5.5), se zapišejo s trigonometričnimi funkcijami:

$$\lambda'_1 = t \cos \phi, \quad \lambda'_2 = t \cos \left( \phi - \frac{2\pi}{3} \right), \quad \lambda'_3 = t \cos \left( \phi + \frac{2\pi}{3} \right), \quad (5.6)$$

kjer so

$$t = \sqrt{\frac{2}{3}} \sqrt{p}, \quad r = 3\sqrt{6} \frac{q}{p^{3/2}}, \quad \phi = \frac{1}{3} \arccos r. \quad (5.7)$$

Lastne vrednosti matrike  $\mathbf{A}$  nato sledijo po enačbi

$$\lambda_i = \lambda_v + \lambda'_i. \quad (5.8)$$

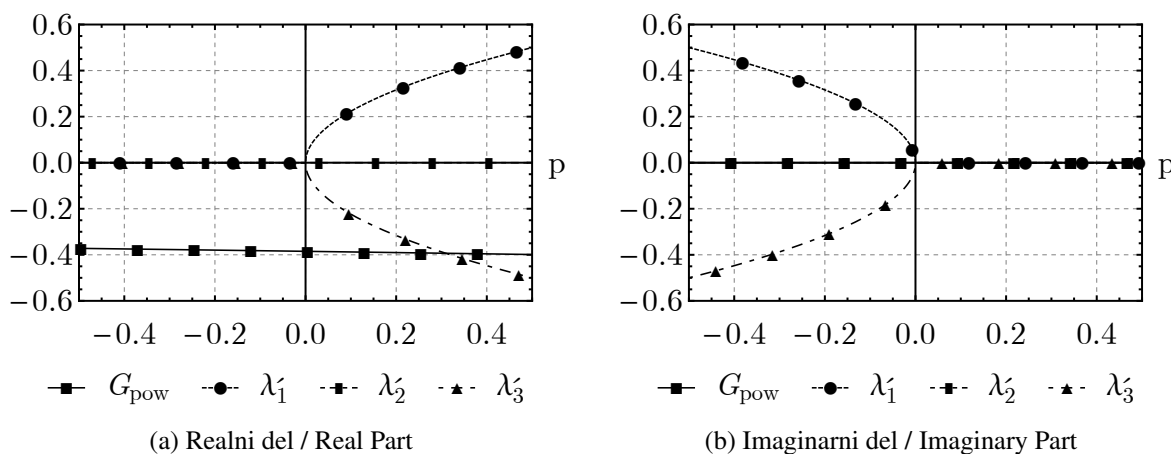
Opisane enačbe so splošne in analitične, vendar pa lahko za nekatera območja pride do velikih zaokrožitvenih napak in singularnosti. Do tega pride v primeru ko imamo dve ali tri večkratne lastne vrednosti. V primeru treh enakih lastnih vrednosti so enačbe celo singularne. Naravo lastnih vrednosti lahko razberemo iz diskriminante karakterističnega polinoma  $\Delta = \frac{1}{2} p^3 - 27q^2$ . Njen predznak določa naravo rešitev, in sicer:

1. če  $\Delta > 0$ , potem ima  $\mathbf{A}$  tri različne lastne vrednosti;
2. če  $\Delta = 0$ , potem ima  $\mathbf{A}$  vsaj dve večkratni lastni vrednosti;
3. če  $\Delta < 0$ , potem ima  $\mathbf{A}$  eno realno in en par konjugiranih kompleksnih lastnih vrednosti.

Pogoj  $\Delta \geq 0$  mora biti vedno izpolnjen, če želimo zagotoviti, da bo imela matrika tri realne lastne vrednosti, saj kompleksne lastne vrednosti v mehaniki trdnin običajno pomenijo fizikalno nemogoče stanje. Ta pogoj je enak pogoju  $-1 \leq r \leq 1$  in posredno pomeni  $p \geq 0$ . Ko se  $r$  in  $p$  približujeta svojim robnim vrednostim, postanejo enačbe slabo pogojene in singularne. Pri majhni perturbaciji  $p$ -ja in  $r$ -ja preko svojih mejnih vrednosti 0 oziroma  $\pm 1$  preidemo v območje dveh konjugiranih kompleksnih in ene realne lastne vrednosti. To lahko vodi v numerične probleme, ko se matrika nahaja na robnem območju. Na tem območju se nahajamo vsakokrat, ko imamo dve ali tri enake realne lastne vrednosti. Zelo pogost primer v mehaniki je enotska matrika kot začetna matrika, ki ima tri enake lastne vrednosti. Pogosto matrika preide tudi v območje dveh enakih lastnih vrednosti. Ker je v nasprotju z lastnimi vrednostmi rodovna funkcija  $G$  gladka in numerično stabilna na vsem območju, je osnovna ideja predlagane metode to, da se na problematičnih območjih, ko se matrika nahaja v bližini svojih mejnih vrednosti  $p$  in  $r$ , rodovno funkcijo  $G$  zamenja z njenim ustreznim razvojem v vrsto. Bližina robnih vrednosti je definirana z ustreznimi tolerancami  $\varepsilon_p$  in  $\varepsilon_r$ , ki so odvisne od izbrane matrične funkcije.

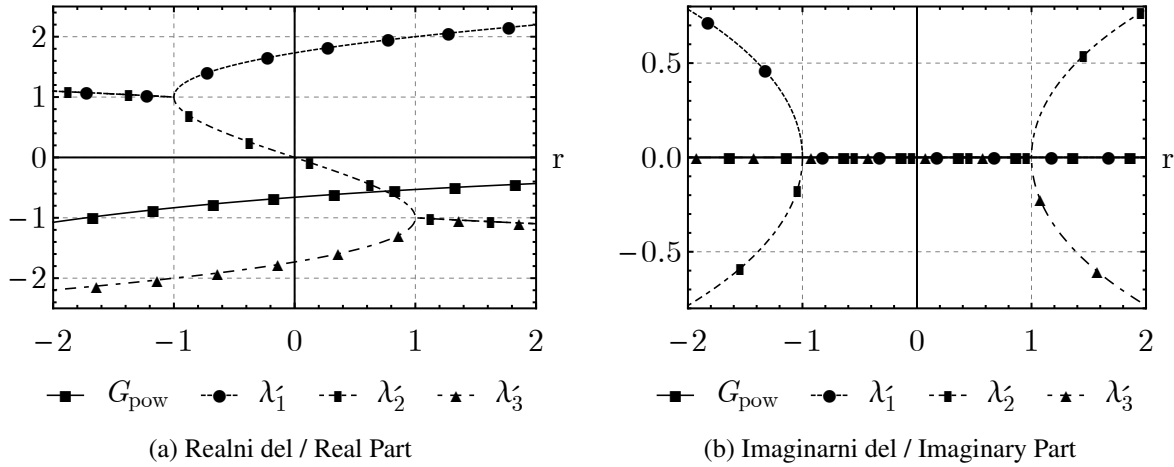
### 5.1.2 Obravnava slabo pogojenih območij

Za ilustracijo sta na slikah 5.1 in 5.2 prikazana realni in imaginarni del rodovne funkcije potence matrike, ki je definirana kot  $G_{\text{pow}} = \sum_{i=1}^3 \lambda_i^{\eta+1} / (\eta + 1)$  (poglavje 5.1.4), skupaj z realnim in imaginarnim delom lastnih vrednosti  $\lambda'_i$  za podatke  $\lambda_v = 3$  in  $\eta = -2.5$ . Na sliki 5.1 so prikazani  $G$  in  $\lambda'_i$  na intervalu  $p \in [-0.5, 0.5]$  za podatke  $q = 0$  in na sliki 5.2 na intervalu  $r \in [-2, 2]$  za  $t = 2$ . Ugotovimo lahko da je imaginarni del  $G$  enak nič, prav tako je  $G$ , za razliko od  $\lambda'_i$ , v obeh primerih gladka in zvezno odvedljiva funkcija na vsem obravnavanem območju ( $p \geq 0 \wedge |r| \leq 1$ ). Zaradi navedenih razlogov, je potrebno omenjena kritična območja ločeno obravnavati.



Slika 5.1: Lastne vrednosti  $\lambda'_i$  in rodovna funkcija potence matrike na območju  $p \rightarrow 0$   
 Figure 5.1: Eigenvalues  $\lambda'_i$  and generating function of matrix power in region  $p \rightarrow 0$

Za prvi posebni primer, ko se  $p$  nahaja v bližini nule je potrebno rodovno funkcijo razviti okoli  $p = 0$ . Razvoj funkcije okoli  $p = 0$  označimo s  $G_p$ . Iz enačb sledi, da ko je pogoj  $\Delta \geq 0$  izpolnjen, sledi tudi pogoj  $p \geq 0$ . Hkrati je vrednost  $q$  omejena na  $-\frac{1}{3\sqrt{6}}p^{\frac{3}{2}} < q < \frac{1}{3\sqrt{6}}p^{\frac{3}{2}}$ . Za primer  $p < \varepsilon_p$ , ko je  $\varepsilon_p \geq 0$  dovolj majhna vrednost sledi, da se mora tudi vrednost  $q$  približevati nuli, zato lahko enačbe razvijemo



Slika 5.2: Lastne vrednosti  $\lambda_i$  in rodovna funkcija potence matrike na območju  $r \rightarrow \pm 1$   
 Figure 5.2: Eigenvalues  $\lambda_i$  and generating function of matrix power in region  $r \rightarrow \pm 1$

v okolici  $p = 0$  in  $q = 0$ . Izbrana oblika razvoja v Taylorjevo vrsto za splošno rodovno funkcijo sledi:

$$G_p = \sum_{i=0}^{n_p} \sum_{j=0}^{n_q} \frac{\partial^{i+j} G(p, q, \lambda_v)}{\partial p^i \partial q^j} \Big|_{\substack{p \rightarrow 0 \\ q \rightarrow 0}} \frac{p^i q^j}{i! j!}, \quad (5.9)$$

kjer sta  $n_p$  and  $n_q$  minimalno število reda razvoja po  $p$  in  $q$ , ter  $n_{p,q}$  celotna največja potenca obeh skupaj. Navedene vrednosti je potrebno določiti za vsako matrično funkcijo posebej.

Za drugi posebni primer, ko parameter  $r$  doseže eno izmed svojih robnih vrednosti  $\pm 1$ , razvijemo rodovno funkcijo okoli  $r = \pm 1$ . Razvoj označimo z  $G_r$  in definiramo kot:

$$G_r = \sum_{i=0}^{n_r} \frac{\partial^i G(r, t, \lambda_v)}{\partial r^i} \Big|_{r \rightarrow \pm 1} \frac{(r + s_r)^i}{i!}, \quad \text{kjer } s_r = \begin{cases} 1 & \text{če } r < -1 + \varepsilon_r \\ -1 & \text{če } r > 1 - \varepsilon_r \end{cases}, \quad (5.10)$$

kjer je  $n_r$  minimalno število reda razvoja po  $r$  in  $\varepsilon_r > 0$  dovolj majhna toleranca. Z izbiro  $s_r = \mp 1$  obravnavamo dva primera hkrati in sicer  $r = -1$  in  $r = 1$ .

Z navedenimi razvoji smo pokrili vsa problematična definicijska območja in lahko v splošnem zapišemo celotno rodovno funkcijo za celotno definicijsko območje kot:

$$\mathcal{G} = \begin{cases} G_p, & \text{če } p < \varepsilon_p \\ G_r, & \text{če } r < -1 + \varepsilon_r \quad \vee \quad r > 1 - \varepsilon_r \\ G, & \text{drugače} \end{cases} \quad (5.11)$$

Izračun matrične funkcije  $\mathcal{F}(\mathbf{A})$  zahteva izračun prvega odvoda rodovne funkcije  $\mathcal{G}$  po transponirani matriki  $\mathbf{A}^T$ . Če je potreben izračun prvega ( $D\mathcal{F}(\mathbf{A})$ ) ali drugega ( $D^2\mathcal{F}(\mathbf{A})$ ) odvoda matrične funkcije, potem je potrebno poznati tudi odvode rodovne funkcije višjega reda. Računska natančnost razvoja rodovne funkcije v vrsto pada z vsakim višjim redom odvajanja, saj s tem pada red razvoja, zato je potrebno to upoštevati pri zahtevi po višjih odvodih matrične funkcije. Vrednosti toleranc  $\varepsilon_p > 0$  in  $\varepsilon_r > 0$  in red razvoja rodovne funkcije je potrebno določiti za vsako matrično funkcijo posebej tako, da bodo napake odvodov v območju natančnosti računalnika. Te vrednosti bomo podali pri obravnavanju vsake od matričnih funkcij ločeno.

### 5.1.3 Avtomatizacija odvajanja matričnih funkcij

Predpostavimo, da imamo na voljo računalniško kodo, ki je sposobna izračunati rodovno funkcijo  $G(\mathbf{A})$ . Iz kode za izračun rodovne funkcije se lahko pridobi koda za izračun matrične funkcije in njenega prvega in drugega odvoda po matriki  $\mathbf{A}$  s pomočjo procesa avtomatskega odvajanja (poglavje 2) in ustreznih orodij za avtomatsko odvajanje. Uvedena je bila notacija  $\hat{\delta}_{\square}$ , ki označuje operator avtomatskega odvajanja. Sledi formulacija matrične funkcije in njenih odvodov bazirana na avtomatskem odvajanju:

$$\mathcal{F}(\mathbf{A}) = \frac{\hat{\delta}\mathcal{G}(\mathbf{A})}{\hat{\delta}\mathbf{A}^T}, \quad (5.12)$$

$$D\mathcal{F}(\mathbf{A}) = \frac{\partial\mathcal{F}(\mathbf{A})}{\partial\mathbf{A}} = \frac{\hat{\delta}\mathcal{F}(\mathbf{A})}{\hat{\delta}\mathbf{A}}, \quad (5.13)$$

$$D^2\mathcal{F}(\mathbf{A}) = \frac{\partial^2\mathcal{F}(\mathbf{A})}{\partial\mathbf{A}^2} = \frac{\hat{\delta}(D\mathcal{F}(\mathbf{A}))}{\hat{\delta}\mathbf{A}}. \quad (5.14)$$

Enačbe (5.11), (5.12), (5.13) in (5.14) skupaj sestavljajo osnovo za algoritem za avtomatizacijo formulacije matričnih funkcij. Ta algoritem je dan na sliki 5.3. Če povzamemo vsebino algoritma: po enačbi (5.11) se najprej določi ustrezna rodovna funkcija glede na vrednost spremenljivk  $p$  ali  $r$ . Ko je rodovna funkcija definirana, se po enačbi (5.12) izračuna ustrezna matrična funkcija in po (5.13) in (5.14) zahtevani odvodi. Z opisanim postopkom se lahko izračunajo poljubne matrične funkcije, kot so eksponent, logaritem, koren ali potenca matrike in druge. Enačbe različnih rodovnih funkcij za izbrane matrične funkcije, ki bodo dane kasneje, se bile zapisane, nato pa so bile s pomočjo programskega orodja *AceGen* (Korelc, 2011) izpeljane ustrezne programske kode. Opisan algoritem (slika 5.3) izračuna pravilen rezultat za poljubno matriko  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{3,3}$  s tremi realnimi lastnimi vrednostmi.

Koeficienti razvojev okoli  $p \rightarrow 0$  in  $q \rightarrow 0$  (5.9)  $\left(\frac{\partial^{i+j}G}{\partial p^i \partial q^j}\right)_{\substack{p \rightarrow 0 \\ q \rightarrow 0}}$  so v splošnem poleg  $p$  in  $q$  tudi funkcija

$\lambda_v$ , in koeficienti razvoja  $r \rightarrow \pm 1$  (5.10)  $\left(\frac{\partial^i G}{\partial r^i}\right)_{r \rightarrow \pm 1}$  so v splošnem poleg  $r$  tudi funkcija  $t$  in  $\lambda_v$ . Posledično se lahko koeficiente določi samo z dolgim in zapletenim limitnim procesom. Za ta namen je bilo uporabljeno simbolno orodje *Mathematica* (Wolfram Research, 2013).

Poseben razmislek smo namenili tudi sestavi matrike  $\mathbf{A}$  dimenzije  $3 \times 3$ . Če je matrika poljubna to pomeni, da je vseh 9 komponent neodvisnih (oznaka  $\mathbf{A}_F$ ). Pogosto pa operiramo z matrikami, ki imajo nekatere komponente med seboj odvisne. Najpogosteje so matrike simetrične (na primer levi ali desni tenzorji raztezkov), kjer velja da je  $A_{ij} = A_{ji}$ . V tem primeru imamo 6 neodvisnih komponent (oznaka  $\mathbf{A}_{FS}$ ). V dvodimenzionalnih modelih (na primer ravninsko deformacijsko ali napetostno stanje) operiramo tudi z matrikami, ki imajo pet neodvisnih komponent  $A_{i3} = A_{3,j} = 0$  in  $A_{33} \neq 0$  (oznaka  $\mathbf{A}_{2D}$ ). Njena simetrična varianta, kjer je  $A_{12} = A_{21}$ , ima 4 neodvisne komponente (oznaka  $\mathbf{A}_{2DS}$ ). Izkaže se, da se vzorec matrike prenese tudi na matrično funkcijo, saj enakost komponent  $A_{ij} = A_{ji}$  pomeni tudi enakost komponent matrične funkcije te matrike  $\mathcal{F}(\mathbf{A})_{ij} = \mathcal{F}(\mathbf{A})_{ji}$ .

Orodje *AceGen* ima vgrajeno tudi sprotno optimizacijo kode, kar pomeni, da med elementi matrične funkcije in njenih odvodov, samodejno poišče skupne vzorce in dele kode ki se ponavljajo. Pri odvodih matrične funkcije se nekatere komponente odvodov ponavljajo. Dimenzija prvega odvoda je  $3 \times 3 \times 3 \times 3 = 81$  in drugega  $3 \times 3 \times 3 \times 3 \times 3 \times 3 = 729$ . Čeprav ima drugi odvod 729 komponent je le 165 od teh neodvisnih, kar je 4 krat manj elementov, kot če bi poračunali vseh 729 elementov brez sprotne optimizacije ali ročne definicije odvisnih elementov. To je posledica dejstva, da so mešani odvodi enaki: npr.  $\frac{\partial\mathcal{F}}{\partial A_{ij}\partial A_{kl}} = \frac{\partial\mathcal{F}}{\partial A_{kl}\partial A_{ij}}$ . Ta razmerja se na učinkovitosti izračuna poznajo v podobnem razmerju.

---

```

 $\lambda_v \leftarrow \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbf{A}); \mathbf{A}' \leftarrow (\mathbf{A}) - \lambda_v \mathbf{I}; p \leftarrow \text{tr}(\mathbf{A}' \mathbf{A}'^T)^{-\frac{1}{2}}; q \leftarrow \det(\mathbf{A}); \Delta \leftarrow \frac{1}{2} p^3 - 27 q^2;$ 
if  $\Delta < 0$  then
  | Exit; // Matrika  $\mathbf{A}$  ima kompleksne lastne vrednosti
end if
Če je matrična funkcija definirana za pozitivno definitne matrike  $\mathbf{A}$  ( $\lambda_i > 0$ ), so potrebni dodatni pogoji;
if  $p < \varepsilon_p$  then
  |  $\mathcal{G} \leftarrow G_p(p, q, \lambda_v);$  // razvoj  $G$  v okolici  $p=0$  in  $q=0$ .
else
  |  $t \leftarrow \sqrt{\frac{2}{3}} \sqrt{p}; r \leftarrow 3\sqrt{6} \frac{q}{p^{3/2}};$ 
  | if  $r > -1 + \varepsilon_r$  in  $r < 1 - \varepsilon_r$  then
  | |  $\mathcal{G} \leftarrow G(r, t, \lambda_v);$  // Splošen primer
  | else
  | | if  $r < -1 + \varepsilon_r$  then
  | | |  $s_r \leftarrow 1$ 
  | | | else
  | | |  $s_r \leftarrow -1$ 
  | | | end if
  | | |  $\mathcal{G} \leftarrow G_r(r, t, \lambda_v, s_r);$  // Razvoj  $G$  okoli  $r = \pm 1$ .
  | end if
end if
Izračun matrične funkcije in njenega prvega ter drugega odvoda z uporabo avtomatskega odvajanja.;
 $\mathcal{F}(\mathbf{A}) \leftarrow \frac{\delta \mathcal{G}}{\delta \mathbf{A}^T}; D\mathcal{F}(\mathbf{A}) \leftarrow \frac{\delta \mathcal{F}(\mathbf{A})}{\delta \mathbf{A}}; D^2\mathcal{F}(\mathbf{A}) \leftarrow \frac{\delta D\mathcal{F}(\mathbf{A})}{\delta \mathbf{A}}$ 
return  $\mathcal{F}(\mathbf{A}), D\mathcal{F}(\mathbf{A}), D^2\mathcal{F}(\mathbf{A})$ 

```

Slika 5.3: Avtomatizacija izračuna matrične funkcije in njenih odvodov  
Figure 5.3: Automation of calculation of matrix function and its derivatives

Preglednica 5.1: Lastnost izpeljanih zaprtih potenc matrike glede na različne sheme  
Table 5.1: Properties of derived closed form matrix power for different matrix patterns

matrična funkcija $\square^n$	Število neodvisnih komponent	Velikost kode [kB]	Št. enačb v kodi <i>AceGen</i>
Izračun matrične funkcije brez odvodov			
$\mathbf{A}_{2DS}$	4	12.7	286
$\mathbf{A}_{2D}$	5	12.9	287
$\mathbf{A}_{FS}$	6	13.5	295
$\mathbf{A}_F$	9	14.3	297
Izračun matrične funkcije s prvim odvodom			
$\mathbf{A}_{2DS}$	4 + 10 =	14	34.9
$\mathbf{A}_{2D}$	5 + 15 =	20	37.
$\mathbf{A}_{FS}$	6 + 21 =	27	40.3
$\mathbf{A}_F$	9 + 45 =	54	48.7
Izračun matrične funkcije s prvim in drugim odvodom			
$\mathbf{A}_{2DS}$	4 + 10 + 21 =	35	96.5
$\mathbf{A}_{2D}$	5 + 15 + 35 =	55	117.
$\mathbf{A}_{FS}$	6 + 21 + 74 =	101	173.
$\mathbf{A}_F$	9 + 45 + 165 =	219	285.

Izvorna koda vseh matričnih funkcij in njihovih odvodov je bila kreirana z uporabo orodja *AceGen* za vsako sestavo matrike in število odvodov posebej. Koda je osnova za kreiranje numerične knjižnice matričnih funkcij. Če uporabniška koda vsebuje klic ene izmed zaprtih oblik matričnih funkcij, se ustrezna koda za klicano matrično funkcijo, zeleno stopnjo odvoda in ustrezno sestavo dane matrike doda med linkanjem. Število neodvisnih komponent matrične funkcije in njenih dveh odvodov ter velikost *AceGen* ustvarjene kode je razvidna v preglednici 5.1 na primeru potence matrike. Dolžine neodvisnih kompo-

ment so enake vsem matričnim funkcijam, velikosti kode in števila enačb pa dane za potenco matrike in za ostale funkcije lahko odstopajo.

### 5.1.4 Izpeljava izbranih elementarnih matričnih funkcij

Splošna izpeljava matričnih funkcij je bila predstavljena v prejšnjem poglavju 5.1.1, v tem poglavju pa bo prikazana izpeljava izbranih najpogosteje uporabljenih matričnih funkcij. Najpogostejše funkcije, ki smo jih zasledili v mehaniki trdnin so eksponent ( $\exp \mathbf{A}$ ), logaritem ( $\log \mathbf{A}$ ) in potenca matrike ( $\mathbf{A}^\eta \equiv \text{pow}(\mathbf{A}, \eta)$ ), ter še variacije potence kot sta koren matrike ( $\sqrt{\mathbf{A}}$ ) in končna vsota potenc matrike ( $\sum_{k=1}^m \xi_k \mathbf{A}^{\eta_k} \equiv \Sigma_{\text{pow}}(\mathbf{A}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta})$ ). Ekvivalentna funkcija  $f(\lambda_i)$  (5.1), pripadajoča pomožna funkcija  $g(\lambda_i)$  (5.2) in rodovna funkcija  $G(\lambda_i)$  (5.3), so za vse obravnavane matrične funkcije dane v preglednici 5.2.

Preglednica 5.2: Definicije skalarnih rodovnih funkcij  
Table 5.2: Definitions of scalar generating functions

funkcija	$\mathcal{F}(\mathbf{A})$	$f(x)$	$g(x)$	$G(\lambda_i)$
eksponent	$\exp \mathbf{A}$	$\exp x$	$\exp x$	$\exp(\lambda_v) \sum_{i=1}^3 \exp(\lambda'_i)$
logaritem	$\log \mathbf{A}$	$\log x$	$-x + x \log x$	$-3\lambda_v + \sum_{i=1}^3 \lambda_i \log(\lambda_i)$
koren	$\sqrt{\mathbf{A}}$	$\sqrt{x}$	$\frac{2}{3}\sqrt{x^3}$	$\frac{2}{3} \sum_{i=1}^3 \sqrt{\lambda_i^3}$
potenca	$\mathbf{A}^\eta$	$x^\eta$	$\frac{x^{\eta+1}}{\eta+1}$	$\frac{1}{\eta+1} \sum_{i=1}^3 \lambda_i^{\eta+1}$
vsota potenc	$\sum_{k=1}^m \xi_k \mathbf{A}^{\eta_k}$	$\sum_{k=1}^m \xi_k x^{\eta_k}$	$\sum_{k=1}^m \frac{\xi_k x^{\eta_k+1}}{\eta_k+1}$	$\sum_{k=1}^m \frac{\xi_k}{\eta_k+1} \sum_{i=1}^3 \lambda_i^{\eta_k+1}$

Kot je bilo že predstavljeno, je potrebno ločeno obravnavati dva posebna primera  $p \rightarrow 0$  in  $r \rightarrow \pm 1$ . Prvi razvoj  $p \rightarrow 0$  in  $q \rightarrow 0$  je določen po enačbi (5.9). Za dovolj majhen  $\varepsilon_p$  in ustrezne rede razvoja  $n_p, n_q$  in  $n_{pq}$  je možno doseči visoko natančnost razvoja in njegovih odvodov, ki je enaka natančnosti računalnika računalnika. Dejanske vrednosti  $\varepsilon_p, n_p, n_q$  in  $n_{pq}$  so bile pridobljene po izčrpnem numeričnem testiranju (z uporabo aritmetike poljubne natančnosti v programu *Mathematica*). Nekaj rezultatov teh analiz je prikazano v poglavjih 5.3 in 5.3.2.

Izkaže se, da ima izbran red razvoja  $n_p$  večji vpliv na natančnost kot red  $n_q$ , zato je slednji nekoliko manjši. Hkrati je eksponent matrike zaradi narave eksponentne funkcije (odvod/integral eksponentne funkcije je funkcija sama) in možnosti  $G_{\text{exp}}$  razcepa na volumski in deviatorični del  $G_{\text{exp}} = \lambda_v G'_{\text{exp}}$  natančnejši za nižje rede. Iz numeričnih testov je bilo prav tako ugotovljeno, da je razvoj tretjega reda  $n_r = 3$  dovolj dober za vse matrične funkcije za dovolj majhen  $\varepsilon_r$ . Splošen razvoj rodovne funkcije  $G$  tretjega reda okoli  $r = \pm 1$  sledi iz enačbe (5.10).

$$G_r = G|_{r \rightarrow \pm 1} + \frac{\partial G}{\partial r} \Big|_{r \rightarrow \pm 1} (r + s_r) + \frac{\partial^2 G}{\partial r^2} \Big|_{r \rightarrow \pm 1} \frac{(r + s_r)^2}{2} + \frac{\partial^3 G}{\partial r^3} \Big|_{r \rightarrow \pm 1} \frac{(r + s_r)^3}{6}. \quad (5.15)$$

Izbrani redi razvoja  $G$  po  $p$  in  $r$  in pripadajoče tolerance  $\varepsilon_p$  in  $\varepsilon_r$  so dani v preglednici 5.3 za vse matrične funkcije.

Izbrane vrednosti parametrov vodijo do programske kode, ki izračunajo rezultate za vrednost matrične funkcije z natančnostjo računalnika na vsem definicijskem intervalu funkcije. Visoka natančnost na



Preglednica 5.3: Numerični parametri rodovnih funkcij  
Table 5.3: Numerical parameters of generating function

function	$\varepsilon_p$	$n_p$	$n_q$	$n_{pq}$	$\varepsilon_r$	$n_r$
$\exp \mathbf{A}$	0.2	7	4	7	0.002	3
$\log \mathbf{A}$	0.05	8	6	8	0.001	3
$\sqrt{\mathbf{A}}$	0.05	8	6	8	0.001	3
$\mathbf{A}^\eta$	0.05	8	6	8	0.001	3
$\sum_{k=1}^m \xi_k \mathbf{A}^{\eta_k}$	0.05	8	6	8	0.001	3

vsem definicijskem intervalu funkcije se ohrani tudi za prvi in drugi odvod. Pri tem, da je natančnost prvega odvoda med  $10^{-13}$  in  $10^{-11}$ , natančnost drugega odvoda pa med  $10^{-11}$  in  $10^{-8}$ .

Členi razvoja rodovnih funkcij so bili dobljeni s pomočjo simbolnega orodja *Mathematica* (Wolfram Research, 2013) in so dani v naslednjih poglavjih. Izpeljava limitnih vrednosti odvodov  $r \rightarrow \pm 1$  je z matematičnega stališča v programu *Mathematica* veliko zahtevnejša od izpeljave limit za prvi posebni primer ko  $p \rightarrow 0$  in  $q \rightarrow 0$ , saj je pri slednjem potrebno poračunati limito polinoma, pri prvem pa je potrebno določiti limito kompleksnih trigonometričnih funkcij.

### EkspONENT matrike

Izpeljavo in uporabo eksponenta matrike in njenega prvega odvoda sta že prikazala Korelc in Stupkiewicz (2014) na primeru evolucije plastičnega tečenja z velikimi deformacijami. EkspONENT matrike  $\exp \mathbf{A}$  je definiran za poljubno matriko z realnimi lastnimi vrednostmi.

Rodovna funkcija eksponenta matrike za prvi poseben primer za  $n_p = 7$ ,  $n_q = 4$  in  $n_{pq} = 7$  se določi po enačbi (5.9) in ima naslednjo obliko:

$$\begin{aligned}
 G_{\exp,p} = \exp(\lambda_v) & \left( p^7/5579410636800 + p^6 (q/364 + 1)/15328051200 \right. \\
 & + p^5 (q^2/240240 + q/264 + 1) /58060800 + p^4/322560 (q^3/207567360 \\
 & + q^2/123552 + q/180 + 1) + p^3 (q^4/197604126720 + q^3/72648576 \\
 & + q^2/55440 + q/112 + 1) /2880 + p^2/48 (q^4/43589145600 + q^3/19958400 \\
 & + q^2/20160 + q/60 + 1) + p/2 (q^4/6227020800 + q^3/3628800 + q^2/5040 \\
 & \left. + q/24 + 1) + q^4/159667200 + q^3/120960 + q^2/240 + q/2 + 3 \right). \tag{5.16}
 \end{aligned}$$

Limite rodovne funkcije  $G_{\exp}$  in njenih odvodov v razvoju (5.15), ko  $r \rightarrow \pm 1$  za  $n_r = 3$  so:

$$\begin{aligned}
 G_{\exp}|_{r=\pm 1} & = \exp(\lambda_v) \left( e^{-s_r t} + 2e^{s_r t/2} \right), \\
 \frac{\partial G_{\exp}}{\partial r} \Big|_{r=\pm 1} & = \exp(\lambda_v) \left( \frac{1}{18} t e^{-s_r t} \left( e^{3s_r t/2} (3s_r t - 2) + 2 \right) \right), \\
 \frac{\partial^2 G_{\exp}}{\partial r^2} \Big|_{r=\pm 1} & = \exp(\lambda_v) \left( \frac{1}{1944} e^{-s_r t} \left( 8t(3t + 8s_r) \right. \right. \\
 & \left. \left. + t e^{3s_r t/2} (-64s_r + 9t(8 + t^2 - 4ts_r)) \right) \right), \\
 \frac{\partial^3 G_{\exp}}{\partial r^3} \Big|_{r=\pm 1} & = \exp(\lambda_v) \left( \frac{1}{349920} e^{-s_r t} \left( t e^{3s_r t/2} (3s_r t(3200 + 480t^2 + 9t^4)) \right) \right)
 \end{aligned}$$



$$- 10(896 + 480t^2 + 27t^4) + 160t(56 + 3t(t + 8s_r))) \Big). \quad (5.17)$$

Zgornje limite vstavimo v enačbo (5.15), da dobimo razvoj rodovne funkcije  $G_{\text{exp},r}$ . Za dovolj dobro natančnost eksponenta matrike in njenega prvega odvoda je dovolj tudi nižji red razvoja v vrsto  $n_p = 5$  in omejitev največjega odvoda na  $n_{pq} = 5$ , kot sta pokazala [Korelc in Stupkiewicz \(2014\)](#), kar poveča numerično učinkovitost.

### Logaritem matrike

Logaritem je definiran za pozitivna realna števila  $x > 0$ , kar lahko posplošimo na matrično varianto, saj mora veljati  $\lambda_i > 0$ . Zaradi bolj neugodne funkcije, je red razvoja v vrsto večji kot pri eksponentu matrike. Razvoj rodovne funkcije  $G_{\log}$  za prvi posebni primer z izbiro  $n_p = 8$ ,  $n_q = 6$  in  $n_{pq} = 8$  se določi po enačbi (5.9) kot:

$$\begin{aligned} G_{\log,p} = & 3\lambda_v(\log(\lambda_v) - 1) + 1/2\lambda_v^{-1} \Big( p + \lambda_v^{-1} (-q + \lambda_v^{-1} (p^2/12 + \lambda_v^{-1} \\ & (-pq/4 + \lambda_v^{-1} (p^3/60 + q^2/5 + \lambda_v^{-1} (-p^2q/12 + \lambda_v^{-1} (p^4/224 + pq^2/7 \\ & + \lambda_v^{-1} (-p^3q/32 - q^3/12 + \lambda_v^{-1} (p^5/720 + p^2q^2/12 + \lambda_v^{-1} (-p^4q/80 \\ & - pq^3/10 + \lambda_v^{-1} (p^6/2112 + p^3q^2/22 + q^4/22 + \lambda_v^{-1} (-p^5q/192 - p^2q^3/12 \\ & + \lambda_v^{-1} (p^7/5824 + pq^4/13 + 5p^4q^2/208 + \lambda_v^{-1} (-p^6q/448 - 5p^3q^3/84 \\ & - q^5/35 + \lambda_v^{-1} (p^8/15360 + p^5q^2/80 + p^2q^4/12 + q\lambda_v^{-1} (-p^7/1024 \\ & - 5p^4q^2/128 - pq^4/16 + q\lambda_v^{-1} (7p^6/1088 + 5p^3q^2/68 + q^4/51 + pq\lambda_v^{-1} \\ & (-7p^4/288 - pq^2/12 + q\lambda_v^{-1} (35p^3/608 + q^2/19 + 1/4pq\lambda_v^{-1} (q\lambda_v^{-1}/3 \\ & - 7p/20)))))))))) \Big). \end{aligned} \quad (5.18)$$

Limite rodovne funkcije logaritma matrike in njenih odvodov za razvoj  $r \rightarrow \pm$  tretjega reda  $n_r = 3$  so:

$$\begin{aligned} G_{\log}|_{r=\pm 1} &= -s_1 \log(s_1) + 2s_2 \log(s_2) - 3\lambda_v, \\ \frac{\partial G_{\log}}{\partial r} \Big|_{r=\pm 1} &= \frac{t}{9} \left( \log(s_1) - \log(s_2) \right) + \frac{s_r t^2}{6s_2}, \\ \frac{\partial^2 G_{\log}}{\partial r^2} \Big|_{r=\pm 1} &= \frac{t^2}{1944s_1s_2^3} \left( -51t^3 - 36s_r t^2 \lambda_v + 72t\lambda_v^2 + 96s_r \lambda_v^3 \right) \\ &\quad + s_r t \left( \log(s_1) - \log(s_2) \right) 8/243, \\ \frac{\partial^3 G_{\log}}{\partial r^3} \Big|_{r=\pm 1} &= \frac{3t^2}{349920s_1^2s_2^5} \left( 1081s_r t^6 + 1638t^5\lambda_v - 714s_r t^4\lambda_v^2 \right. \\ &\quad \left. - 6020t^3\lambda_v^3 - 5040s_r t^2\lambda_v^4 + 3360t\lambda_v^5 + 4480s_r \lambda_v^6 \right) \\ &\quad + t \left( \log(s_1) - \log(s_2) \right) 56/2187, \end{aligned} \quad (5.19)$$

kjer sta  $s_1 = -s_r t + \lambda_v$  in  $s_2 = s_r t/2 + \lambda_v$ .

## Koren matrike

Koren matrike, je označen z

$$\text{sqrt}\mathbf{A} = \sqrt{\mathbf{A}} \quad (5.20)$$

in je definiran za matrike z nenegativnimi realnimi lastnimi vrednostmi  $\lambda_i \geq 0$ . Razvoj  $G_{\text{sqrt}}$  v okolici  $p = 0$  in  $q = 0$  za red  $n_p = 8$ ,  $n_q = 6$  in  $n_{pq} = 8$  je:

$$\begin{aligned} G_{\text{sqrt},p} = & \sqrt{\lambda_v} \left( 2\lambda_v + \lambda_v^{-1}/4 (p - \lambda_v^{-1}/2 (q - \lambda_v^{-1}/16 (p^2 - 5\lambda_v^{-1}/2 (pq \right. \\ & - 7\lambda_v^{-1}/10 (p^3/12 + q^2 - 3\lambda_v^{-1}/4 (p^2q/2 - 11\lambda_v^{-1}/14 (p^4/32 + pq^2 \\ & - 13\lambda_v^{-1}/8 (p^3q/2 + q^3/3 - 5\lambda_v^{-1}/8 (p^5/120 + p^2q^2/2 - 17\lambda_v^{-1}/6 \\ & (p^4q/40 + pq^3/5 - 19\lambda_v^{-1}/44 (p^6/480 + p^3q^2/5 + q^4/5 - 7\lambda_v^{-1}/4 \\ & (p^5q/80 + p^2q^3/5 - 23\lambda_v^{-1}/26 (p^7/2240 + p^4q^2/16 + pq^4/5 - 25 \\ & \lambda_v^{-1}/2 (p^6q/2240 + p^3q^3/84 + q^5/175 - 27\lambda_v^{-1}/80 (p^8/26880 \\ & + p^5q^2/140 + p^2q^4/21 - 29q\lambda_v^{-1}/24 (p^7/2240 + p^4q^2/56 + pq^4/35 \\ & - 31q\lambda_v^{-1}/34 (p^6/320 + p^3q^2/28 + q^4/105 - 11pq\lambda_v^{-1}/4 (p^4/240 \\ & + pq^2/70 - 35q\lambda_v^{-1}/114 (p^3/32 + q^2/35 - 37pq\lambda_v^{-1}/800 \\ & \left. (p - 13q\lambda_v^{-1}/14)))))))))))))) \right). \end{aligned} \quad (5.21)$$

Limite  $G_{\text{sqrt}}$  in odvodov tretjega reda (5.15) za drugi primer  $r \rightarrow \pm 1$  so dane spodaj:

$$\begin{aligned} G_{\text{sqrt}}|_{r=\pm 1} &= \frac{2}{3} (s_1^3 + 2s_2^3), \\ \frac{\partial G_{\text{sqrt}}}{\partial r} \Big|_{r=\pm 1} &= \frac{t}{9} \left( s_1 + \frac{s_r t - 4\lambda_v}{4s_2} \right), \\ \frac{\partial^2 G_{\text{sqrt}}}{\partial r^2} \Big|_{r=\pm 1} &= t \left( \frac{16\lambda_v s_r - 13t}{486s_1} + \frac{71t^3 - s_r 24t^2 \lambda_v - 480\lambda_v^2 t - s_r 512\lambda_v^3}{15552s_2^5} \right), \\ \frac{\partial^3 G_{\text{sqrt}}}{\partial r^3} \Big|_{r=\pm 1} &= t \left( \frac{56s_1}{2187} + \frac{(16\lambda_v s_r - 17t^2)}{s_1^3 2916} + \frac{1}{2239488s_2^9} \left( s_r 3329t^5 + 8276t^4 \lambda_v \right. \right. \\ & \left. \left. - s_r 10624t^3 \lambda_v^2 - 74240t^2 \lambda_v^3 - s_r 112640t \lambda_v^4 - 57344\lambda_v^5 \right) \right), \end{aligned} \quad (5.22)$$

kjer sta  $s_1 = \sqrt{-s_r t + \lambda_v}$  in  $s_2 = \sqrt{s_r t/2 + \lambda_v}$ .

## Potenca matrike

Potenca matrike

$$\text{pow}(\mathbf{A}, \eta) = \mathbf{A}^\eta \quad (5.23)$$

je definirana za pozitivno definitne matrike za vsako relano potenco  $\eta \in \mathbb{R} \setminus \{-1\}$ , in za negativne matrike za celoštevilske potence  $\eta \in \mathbb{Z} \setminus \{-1\}$ ,  $\eta \rightarrow -1$ . Rodovna funkcija potence (preglednica (5.2)) ni definirana za vrednost potence  $\eta = -1$ , saj velja

$$\int x^{-1} dx = \log(x) \neq g_{\text{pow}}(x, \eta) = \frac{x^{\eta+1}}{\eta+1}. \quad (5.24)$$



kjer je  $\boldsymbol{\eta} = (\eta_k : k = 1, \dots, m)$  seznam potenc in  $\boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^m$  seznam realnih faktorjev. Očitno je dovolj če poznamo rodovno funkcijo potence matrike. Vsoto potenc izrazimo z vsoto rodovnih funkcij členov. Celotna rodovna funkcija sledi kot:

$$\mathcal{G}_{\Sigma_{\text{pow}}}(\mathbf{A}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) = \begin{cases} \sum_{k=1}^n \xi_k G_{\text{pow}}(\mathbf{A}, \eta_k) & p \geq \varepsilon_p \wedge r \geq -1 + \varepsilon_r \wedge r \leq 1 - \varepsilon_r, \\ \sum_{k=1}^n \xi_k G_{\text{pow},p}(\mathbf{A}, \eta_k) & p < \varepsilon_p, \\ \sum_{k=1}^n \xi_k G_{\text{pow},r}(\mathbf{A}, \eta_k) & r < -1 + \varepsilon_r \wedge r > 1 - \varepsilon_r. \end{cases} \quad (5.28)$$

## 5.2 Alternative za določitev matričnih funkcij

V tem poglavju bodo predstavljene nekatere pogosto uporabljene metode za določitev matričnih funkcij. Nekatere od teh bodo implementirane z orodjem *AceGenv* namene testiranja matričnih funkcij.

### 5.2.1 Spektralni razcep

Najpogosteje se matrično funkcijo določi s spektralnim razcepom matrike  $\mathbf{A}$ :

$$\mathcal{F}(\mathbf{A}) = \mathbf{Q}\mathcal{F}(\boldsymbol{\Lambda})\mathbf{Q}^{-1}, \quad \mathbf{Q} = [\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_n], \quad \mathcal{F}(\boldsymbol{\Lambda})_{i,j} = \begin{cases} f(\lambda_i), & i = j, \\ 0, & \text{sicer} \end{cases}, \quad (5.29)$$

kjer je  $\mathbf{n}_i$  je lastni vektor, ki pripada lastni vrednosti  $\lambda_i$  in  $\boldsymbol{\Lambda}$  je diagonalna matrika lastnih vrednosti. Za določitev lastnih vrednosti in pripadajočih lastnih vektorjev obstaja več metod, v splošnem pa je potrebno rešiti sistem:

$$(\mathbf{A} - \lambda_i \mathbf{I}) \mathbf{n}_i = \mathbf{0}, \quad \mathbf{n}_i \neq \mathbf{0}. \quad (5.30)$$

### 5.2.2 Razvoj matrične funkcije v potenčno vrsto

Matrično funkcijo je alternativno možno zapisati z razvojem v neskončno potenčno vrsto. Razvoj v vrsto bo uporabljen kot referenčna formulacija matričnih funkcij. V splošnem vsaka neskončna vrsta, v primeru, da vrsta obstaja in da se matrika nahaja znotraj konvergenčnega radija funkcije (ta je lahko tudi 0 v nekaterih primerih), konvergira proti točni rešitvi. Z namenom, da bo razvoj v vrsto uporabljen za preverjanje učinkovitosti in natančnosti predlagane zaključene oblike bodo vse navedene matrične funkcije alternativno definirane s končno potenčno vsoto. Razvoj matrike v vrsto se lahko posploši iz razvoja ekvivalentne skalarne funkcije  $f$ . Eksponent matrike  $\mathbf{A}$  lahko zapišemo z razvojem v naslednjo neskončno potenčno vrsto:

$$\exp \mathbf{A} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} \mathbf{A}^i = \mathbf{I} + \mathbf{A} + \frac{1}{2} \mathbf{A}^2 + \frac{1}{6} \mathbf{A}^3 + \dots \quad (5.31)$$

Vrsta (5.31) je absolutno konvergentna.

Logaritme matrike  $\mathbf{A}$  se lahko zapiše z naslednjo neskončno vrsto:

$$\begin{aligned} \log \mathbf{A} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{2}{2i+1} ((\mathbf{A} - \mathbf{I}) \cdot (\mathbf{A} + \mathbf{I})^{-1})^{(2i+1)} = 2(\mathbf{A} - \mathbf{I}) \cdot (\mathbf{A} + \mathbf{I})^{-1} \\ + \frac{2}{3} ((\mathbf{A} - \mathbf{I}) \cdot (\mathbf{A} + \mathbf{I})^{-1})^3 + \frac{2}{5} ((\mathbf{A} - \mathbf{I}) \cdot (\mathbf{A} + \mathbf{I})^{-1})^5 \dots \end{aligned} \quad (5.32)$$

Vrsta (5.32) je absolutno konvergentna za pozitivno definitne matrike  $\mathbf{A}$ , t.j.  $\lambda_i > 0$ .

Potenca matrike  $\mathbf{A}$  se zapiše z naslednjo neskončno potenčno vrsto:

$$\mathbf{A}^\eta = \sum_{i=0}^{\infty} \binom{\eta}{i} (\mathbf{A} - \mathbf{I})^i = \mathbf{I} + \eta(\mathbf{A} - \mathbf{I}) + \binom{\eta}{2} (\mathbf{A} - \mathbf{I})^2 + \binom{\eta}{3} (\mathbf{A} - \mathbf{I})^3 + \dots \quad (5.33)$$

Vrsta (5.33) ima konvergenčni radij 1 in je absolutno konvergentna za pozitivno definitne matrike  $\mathbf{A}$ , ki so največ za 1 oddaljene od  $\mathbf{I}$ , torej morajo biti lastne vrednosti med  $0 < \lambda_i < 2$ . Binomski koeficient se določi kot  $\binom{\eta}{i} = \frac{\eta!}{i!(\eta-i)!} = \frac{\eta(\eta-1)\dots(\eta-i+1)}{i(i-1)\dots 1}$ . Iz enačbe (5.33) sledita tudi enačbi za koren matrike, če izberemo  $\eta = 1/2$  in vsoto potenc matrike.

---

```

n ← 0, n_f ← 1, F(A) ← I and B ← I;
repeat
    B ← BA; n ← n + 1; n_f ← n_f n;
    F_inc ← 1/n_f B;    F ← F + F_inc;
    DF_inc ← δF_inc / δA;    DF ← DF + DF_inc;
    D2F_inc ← δDF_inc / δA;    D2F ← D2F + D2F_inc;
until ||D2F_inc||_F^2 < ε_T^2 ∧ n > 2;
return F(A), DF(A) and D2F(A)

```

Slika 5.4: Zapis ADB končne vrste za približek eksponenta matrike  $\mathcal{F}(\mathbf{A}) = \exp \mathbf{A}$  in njegovih prvih in drugih odvodov

Figure 5.4: ADB form of truncated series approximation of matrix exponential  $\mathcal{F}(\mathbf{A}) = \exp \mathbf{A}$  and its first and second derivatives

---



---

```

n ← 0, B ← (A - I) · (A + I)^-1, C ← BB and F(A) ← 2B;
repeat
    B ← BC; n ← n + 1;
    F_inc ← 2/(2n+1) B;    F ← F + F_inc;
    DF_inc ← δF_inc / δA;    DF ← DF + DF_inc;
    D2F_inc ← δDF_inc / δA;    D2F ← D2F + D2F_inc;
until ||D2F_inc||_F^2 < ε_T^2 ∧ n > 2;
return F(A), DF(A) and D2F(A)

```

Slika 5.5: Zapis ADB končne vrste za približek logaritma matrike  $\mathcal{F}(\mathbf{A}) = \log \mathbf{A}$  in njegovih prvih in drugih odvodov

Figure 5.5: ADB form of truncated series approximation of matrix Logarithm  $\mathcal{F}(\mathbf{A}) = \log \mathbf{A}$  and its first and second derivatives

---

Algoritmčna implementacija razvoja v vrsto je enostavna. Izračunati je potrebno prvi člen pri  $i = 0$ , nato pa vsak nadaljnji člen vrste sledi kot produkt prejšnjega z ustreznim faktorjem in matriko, postopek se ponavlja v zanki dokler norma prirastka rezultata ne pade pod predpisano vrednost  $\varepsilon_T = 10^{-16}$ . Algoritmi vsake od funkcij so prikazani v slikah 5.4, 5.5, 5.6. Algoritma za potenco in koren matrike sta

enaka algoritmu za vsoto potenc matrike za en člen  $m = 1$  in izbiro  $\xi_1 = 1$  in  $\eta_1 = 1/2$ .

---

```

n ← 0, n_f ← 1, η_f ← (1)_{k=1}^m, B ← I;
F(A, ξ, η) ← ∑_{k=1}^m ξ_k I, DF ← 0, D^2F ← 0;
repeat
  B ← BA; n ← n + 1; n_f ← n_f n;
  η_f ← η_f (η - n + 1);
  F_inc ← ∑_{k=1}^m ξ_k \frac{η_{f,k}}{n_f} B;   F ← F + F_inc;
  DF_inc ← \frac{δ F_inc}{δ A};           DF ← DF + DF_inc;
  D^2F_inc ← \frac{δ^2 F_inc}{δ A^2};       D^2F ← D^2F + D^2F_inc;
until ||D^2F_inc||_F^2 < ε_T^2 ∧ n > 2 ∧ n < n_max;
return F(A, ξ, η), DF(A, ξ, η) and D^2F(A, ξ, η)

```

---

Slika 5.6: Zapis ADB končne vrste za približek vsote potenc matrike  $\mathcal{F}(\mathbf{A}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) = \sum_{k=1}^n \xi_k \mathbf{A}^{\eta_k}$  in njenih prvih in drugih odvodov

Figure 5.6: ADB form of truncated series approximation of matrix power sum  $\mathcal{F}(\mathbf{A}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) = \sum_{k=1}^n \xi_k \mathbf{A}^{\eta_k}$  and its first and second derivatives

---

Število potrebnih členov je določeno z natančnostjo drugega odvoda matrične funkcije  $\|D^2\mathcal{F}_{inc}\|_F \leq \varepsilon_T$  in je navzgor omejeno z  $n_{max}$ . S tem pogojem sta napaki matrične funkcije in njenega prvega odvoda avtomatsko znotraj dovoljene vrednosti  $\varepsilon_T$ . Izračun norme matrike dimenzije  $3 \times 3 \times 3 \times 3 \times 3 \times 3$  je numerično veliko dražje kot izračun norme prvega odvoda dimenzije  $3 \times 3 \times 3 \times 3$  ali matrične funkcije  $3 \times 3$  in predstavlja nezanemarljivo zmanjšanje učinkovitosti. Izkaže se tudi, da je izračun Frobeniusove norme drugega odvoda  $\|D^2\mathcal{F}\|_F = \sqrt{\sum_{i,j,\dots,n}^{3,3,\dots,3} (D^2\mathcal{F}_{i,j,\dots,n})^2}$  zaradi korena časovno dražji od kvadrata  $\sum_{i,j,\dots,n}^{3,3,\dots,3} (D^2\mathcal{F}_{i,j,\dots,n})^2$  te norme, enako velja za prirastek  $\|D^2\mathcal{F}_{inc}\|_F \leq$ , tako da je s stališča učinkovitosti bolj ugodno, da se kvadrat prirastka primerja s kvadratom tolerance  $\varepsilon_T^2$ .

Odvodi matrične funkcije so določeni s proceduro avtomatskega odvajanja, kot je prikazano v algoritmih na slikah 5.4, 5.5, 5.6. Izpeljane končne potenčne vrste matričnih funkcij bodo uporabljene za namen primerjave z zaključenimi oblikami matričnih funkcij dobljenih z odvajanjem rodovne funkcije izpeljanih v poglavju 5.1.1 slika 5.3. Tako kot slednje bomo tudi približke izpeljali z orodjem AceGen v jeziku C.

Vrste izpeljane v jeziku C, smo predhodno dodatno preverili še z vrstami izpeljanimi v jeziku *Mathematica* z visoko natančno aritmetiko. Napaka vrst in njihovih odvodov izračunanih v C jeziku je za vse matrične funkcije in njihove odvode reda velikosti natančnosti računalnika. Slabost razvoj je, da so določene matrične funkcije, kot je potenca, konvergenčne le na omejenem območju in slaba učinkovitost predvsem izračuna višjih odvodov.

### 5.2.3 Izpeljava matrične funkcije iz splošne rodovne funkcije brez razvoj

Z namenom, da prikažemo potrebnost razvoja splošne rodovne funkcije v vrsto na problematičnih območjih, je v tem poglavju prikazana izpeljava matrične funkcije, kjer splošne rodovne funkcije  $G$  ne bomo razvili v vrsto. Ta formulacija bo označena z indeksom per. Matrična funkcija v tem primeru sledi neposredno iz splošne rodovne funkcije  $G$  (5.3) ki sledi iz lastnih vrednosti  $\lambda_{per}$ :

$$\mathcal{F}_{per}(\mathbf{A}) = \frac{\partial G(\mathbf{A})}{\partial \mathbf{A}^T} = \frac{\partial (\sum_{i=1} g(\lambda_{per,i}))}{\partial \mathbf{A}^T}. \quad (5.34)$$

Lastne vrednosti, označene z  $\lambda_{per,i}$ , bodo določene po že znanih trigonometričnih enačbah (5.6) in (5.8), kot je bilo opisano v poglavju 5.1.1, s to razliko, da bosta problematični količini  $p$  in  $r$ , iz katerih sledi

enačba za lastne vrednosti, odmaknjeni od robnih območij  $p = 0$  in  $r = \pm 1$  za majhno vrednost. Torej če sta  $p$  in  $r$  za manj kot  $\varepsilon_{p,0}$  ali  $\varepsilon_{r,0}$  oddaljeni od roba, se za  $\varepsilon_{p,0}$  ali  $\varepsilon_{r,0}$  odmakneta od roba, tako da vrednosti  $p$  in  $r$  nikoli ne dosežeta svojega roba:

$$\lambda_{\text{per},i} = \lambda_i \Big|_{\substack{p \rightarrow p_\varepsilon \\ r \rightarrow r_\varepsilon}}, \quad (5.35)$$

$$\text{kjer } p_\varepsilon = \begin{cases} p & \text{če } p \geq \varepsilon_{p,0} \\ p + \varepsilon_{p,0} & \text{če } p < \varepsilon_{p,0} \end{cases} \quad \text{in} \quad r_\varepsilon = \begin{cases} r & \text{če } |r| \leq 1 - \varepsilon_{r,0} \\ r + s_r \varepsilon_{r,0} & \text{če } |r| > 1 - \varepsilon_{r,0} \end{cases}. \quad (5.36)$$

Matrična funkcija  $\mathcal{F}_{\text{per}}$  je definirana po enačbi (5.12), s to razliko, da namesto po celotni rodovni funkciji  $\mathcal{G}$  odvajamo splošno rodovno funkcijo  $G(\lambda_{\text{per},i})$  izraženo z lastnimi vrednostmi, izračunanimi s perturbiranimi  $p_\varepsilon$  in  $r_\varepsilon$ . Odvodi  $\mathcal{F}_{\text{per}}$  so določeni enako kot odvodi funkcije  $\mathcal{F}$  po enačbah (5.13) in (5.14).

Formulacija bo primerjana z ostalimi formulacijami na primerih potence in vsote potenc simetričnih matrik v poglavju 5.3.2.

### 5.3 Učinkovitost in natančnost matričnih funkcij v zaključeni obliki

Izpeljane matrične funkcije  $\exp \mathbf{A}$ ,  $\log \mathbf{A}$ ,  $\sqrt{\mathbf{A}}$ ,  $\mathbf{A}^\eta$  in  $\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{A}^\eta = \sum \xi_k \mathbf{A}^{\eta_k}$  in njihove prve ter druge odvode 5.1 bomo primerjali s pripadajočimi razvoji v končno vrsto. Razvoji v vrsto bodo vzeti kot referenčne vrednosti in so označeni z indeksom  $(\square)_{\text{ser}}$ :  $\exp_{\text{ser}} \mathbf{A}$ ,  $\log_{\text{ser}} \mathbf{A}$ ,  $(\sqrt{\mathbf{A}})_{\text{ser}}$ ,  $(\mathbf{A}^\eta)_{\text{ser}}$  in  $(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{A}^\eta)_{\text{ser}} = (\sum \xi_k \mathbf{A}^{\eta_k})_{\text{ser}}$  ter določeni z ustreznim končnim razvojem v vrsto kot je bilo prikazano v poglavju 5.2.2. Razvoji v vrsto so ustrezne referenčne vrednosti, saj je možno napako drugih odvodov funkcij predpisati in je v našem primeru določena z  $\varepsilon_T = 10^{-16}$ .

Pri primerjavi bodo uporabljeni naslednji vhodni podatki. Toleranci  $\varepsilon_p$  in  $\varepsilon_r$  za različna območja in matrične funkcije so dani v preglednici 5.3. Izbran eksponent potence, ki bo uporabljen v potenci matrike, je  $\eta = 1.5$  in seznama eksponentov potenc in faktorjev funkcije v vsoti potenc sta  $\sum \xi_k \mathbf{A}^{\eta_k}$   $\boldsymbol{\xi} = (5, -4, 10, 0)$  in  $\boldsymbol{\eta} = (2.4, -1.35, 0.5, 1)$ . Enaki podatki bodo uporabljeni v vseh prikazanih testih natančnosti in učinkovitosti za vse matrične funkcije.

Računska natančnost različnih formulacij matričnih funkcij in njenih odvodov je definirana s Frobeniusovo normo razlike rezultatov izbrane formulacije matrične funkcije  $\mathcal{F}$  in njeno referenčno vrednostjo  $\mathcal{F}_{\text{ser}}$ . Napaka matrične funkcije  $\mathcal{F}$  je definirana kot  $\Delta \mathcal{F} = \|\mathcal{F} - \mathcal{F}_{\text{ser}}\|_F$ , njenega prvega odvoda  $\Delta D\mathcal{F} = \|D\mathcal{F} - D\mathcal{F}_{\text{ser}}\|_F$  in drugega odvoda  $\Delta D^2\mathcal{F} = \|D^2\mathcal{F} - D^2\mathcal{F}_{\text{ser}}\|_F$ . Vsi izračunani časi bodo normirani z  $t_{\text{exp M,G}}$ , to je povprečen čas potreben za izračun eksponenta matrike in prvega ter drugega odvoda na območju kjer je za izračun matričnega eksponenta uporabljena splošna rodovna funkcija  $G_{\text{exp}}$ .

Učinkovitost bo določena s primerjavo normiranih CPU časov. Izračun izbrane formulacije matrične funkcije je bil izveden 200000 krat. Vse ponovitve so bile pognane na osebнем računalniku s procesno enoto Intel i7-2700K 3.50GHz z operacijskim sistemom Microsoft Windows 7 64bit in 16GB DDR III pomnilnika. C koda je bila prevedena z MinGW 5.1.3 (angl. Minimalist GNU for Windows) prevajalnikom. Pri izračunu je bilo zaradi objektivnosti uporabljeno eno procesorsko jedro.

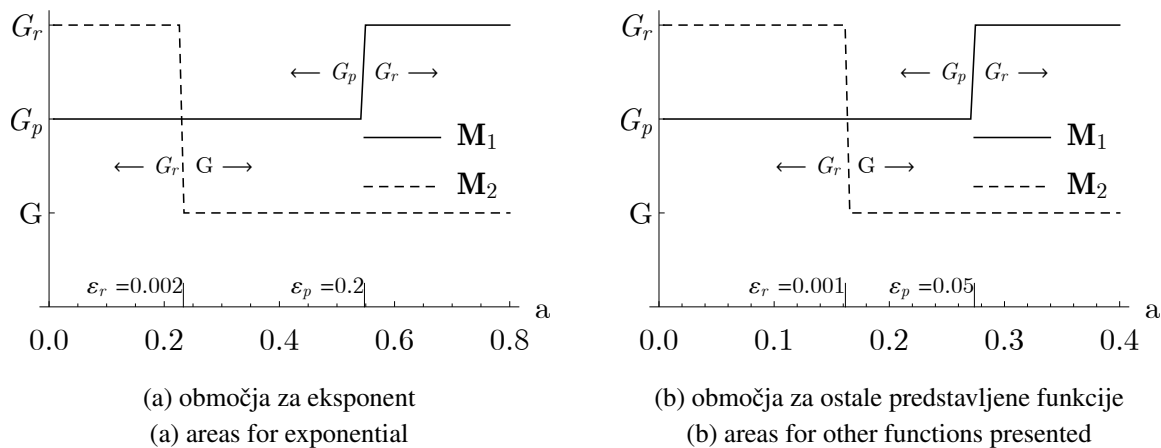
#### 5.3.1 Primerjava računske natančnosti in učinkovitosti na primeru polnih nesimetričnih matrik

V tem poglavju bomo primerjali računsko natančnost in učinkovitost predlagane formulacije (algoritem na sliki 5.3) za izračun različnih matričnih funkcij in njihovih prvih ter drugih odvodov. Kot referenčne

vrednost bodo uporabljeni rezultati formulacij matričnih funkcij z razvoji v vrsto  $\mathcal{F}_{\text{ser}}$  (poglavje 5.2.2). Spodnji dve nesimetrični polni matriki  $\mathbf{M}_1$  in  $\mathbf{M}_2$  bosta uporabljeni za oceno računske natančnosti in učinkovitosti:

$$\mathbf{M}_1 = \begin{bmatrix} a+1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 2 \end{bmatrix} \quad \text{in} \quad \mathbf{M}_2 = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & a+1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} + \mathbf{I}, \quad (5.37)$$

kjer je  $a$  prosti parameter. S spreminjanjem parametra  $a$  matrike prehajajo med splošno obliko rodovne funkcije ( $G$ ) in razvojema rodovne funkcije v vrsto ( $G_p$  in  $G_r$ ). Matrika  $\mathbf{M}_1$  je izbrana tako, da je  $r = 1$  za vsak  $a$ , torej je vedno v nestabilnem območju. Za  $a = 0$  sta vrednosti  $p = 0$  in  $r = 1$ . V tem primeru ima območje  $p \rightarrow 0$  prednost pred območjem  $r \rightarrow \pm 1$ . Matrika  $\mathbf{M}_1$  tako preide iz prvega posebnega območja ( $G_p$ ) v drugo posebno območje ( $G_r$ ), ko je  $p > \varepsilon_p$ . Matrika  $\mathbf{M}_2$  ima pri  $a = 0$  vrednost  $r = 1$  in z večanjem  $a$ -ja  $r$  pada, zato preide iz drugega posebnega območja ( $G_r$ ) v splošno območje ( $G$ ), ko je  $|r| < 1 - \varepsilon_r$ . Območja so prikazana na sliki 5.7. S tako izbiro matrik bo preverjena računska natančnost posameznega območja  $G$ ,  $G_p$  in  $G_r$ . Ker sta toleranci  $\varepsilon_p$  in  $\varepsilon_r$  za eksponent matrike različni od ostalih matričnih funkcij, pride do prehoda pri različnih vrednostih  $a$ . Zato je za eksponent matrike parameter  $a$  vzet z intervala  $[0, 0.8]$  in za ostale funkcije je vzet iz intervala  $[0, 0.4]$ . Matrične funkcije  $\exp \mathbf{M}$ ,  $\log \mathbf{M}$ ,



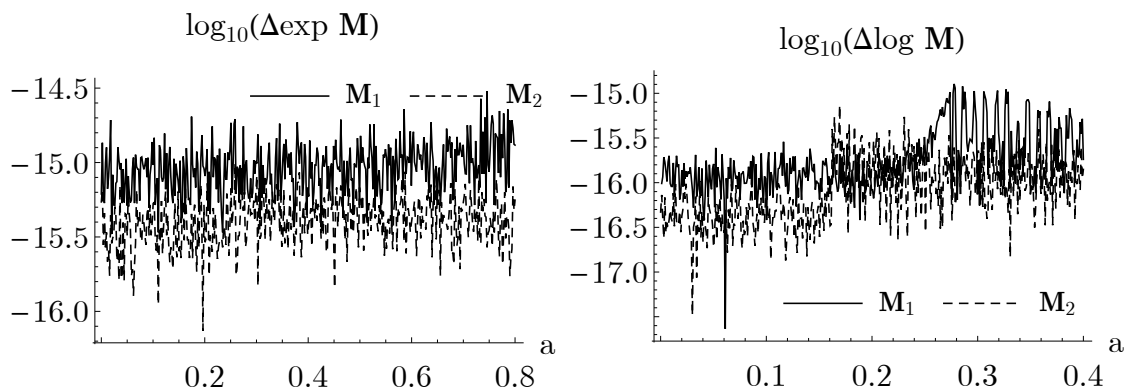
Slika 5.7: Območja matrik  $\mathbf{M}(a)$  za različne matrične funkcije  
Figure 5.7: Areas of matrices  $\mathbf{M}(a)$  for different matrix functions

$\sqrt{\mathbf{M}}$ ,  $\mathbf{M}^n$  in  $\sum \xi_k \mathbf{A}^{\eta_k}$  v zaključeni obliki bodo primerjane na matrikah (5.37) s pripadajočimi razvoji v vrsto, označenimi s ser (angl. *series*) ( $\exp \mathbf{M}$ )<sub>ser</sub>, ( $\log \mathbf{M}$ )<sub>ser</sub>, ( $\sqrt{\mathbf{M}}$ )<sub>ser</sub>, ( $\mathbf{M}^n$ )<sub>ser</sub> in  $(\sum \xi_k \mathbf{A}^{\eta_k})$ <sub>ser</sub>. Norme razlik funkcij so prikazane na slikah od 5.8 do 5.10 za 400 inkrementov  $a$ . Norme razlik odvodov so prikazane na slikah od 5.11 do 5.15.

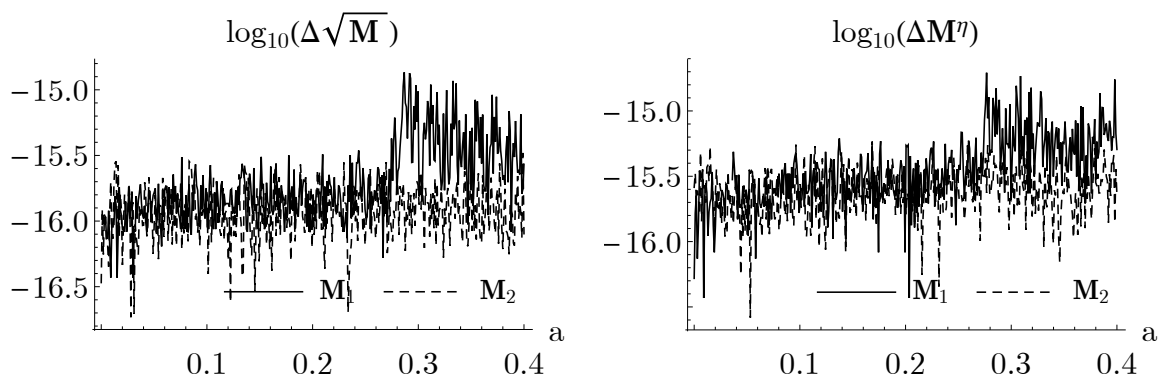
Rezultati kažejo, da je računska natančnost oziroma napaka matrične funkcije v vseh primerih v območju natančnosti računalnika med  $10^{-14}$  in  $10^{-16}$  za vse matrične funkcije, razen v primeru vsote potenc  $\sum \xi_k \mathbf{A}^{\eta_k}$ , kjer pride do lokalnega skoka na  $10^{-13}$  na prehodu med območji (slika 5.10). Iz grafov je razvidno, da je napaka odvodov največja na prehodu med območji. To je posledica tega, da napaka razvojev  $G_p$  in  $G_r$  raste, ko se matrika odmika od območja  $p = 0$  in/ali  $r \pm 1$ . Po drugi strani, pa je enačba za  $G$  v območju  $p = 0$  in/ali  $r \pm 1$  singularna in njena napaka pada, ko se oddaljujemo od robnih vrednosti. V točkah ko je  $p = \varepsilon_p$  ali  $|r| = 1 - \varepsilon_r$  je napaka posledično največja. Točke prehoda so podane v grafu (slika 5.7) za obe matriki in za vse funkcije.

Z vsakim odvodom se napaka poveča, odvisno od tega kako računsko neugodna je obravnavana matrika.

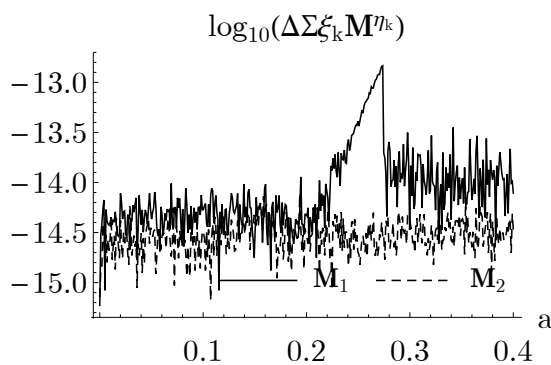




Slika 5.8: Računska natančnost eksponenta in logaritma matrike  
Figure 5.8: Accuracy of matrix exponential and logarithm

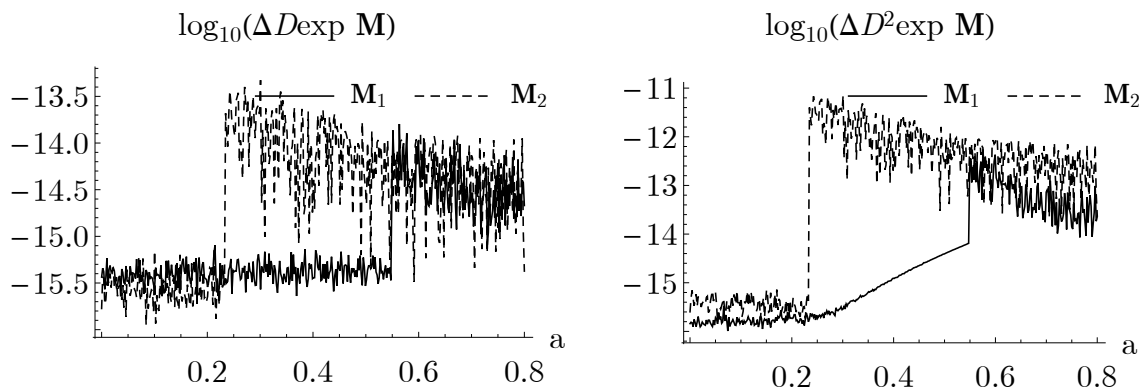


Slika 5.9: Računska natančnost korena in potence matrike  
Figure 5.9: Accuracy of matrix square root and power

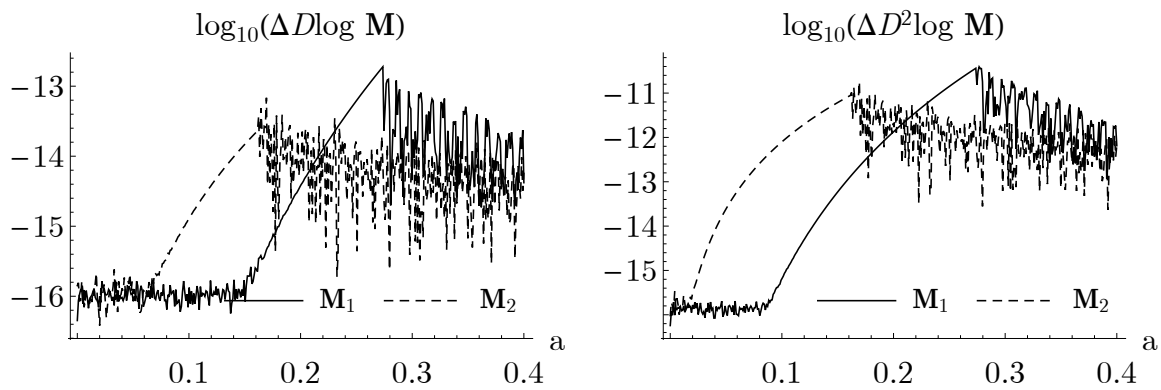


Slika 5.10: Računska natančnost vsote potenc matrike  
Figure 5.10: Accuracy of matrix power sum

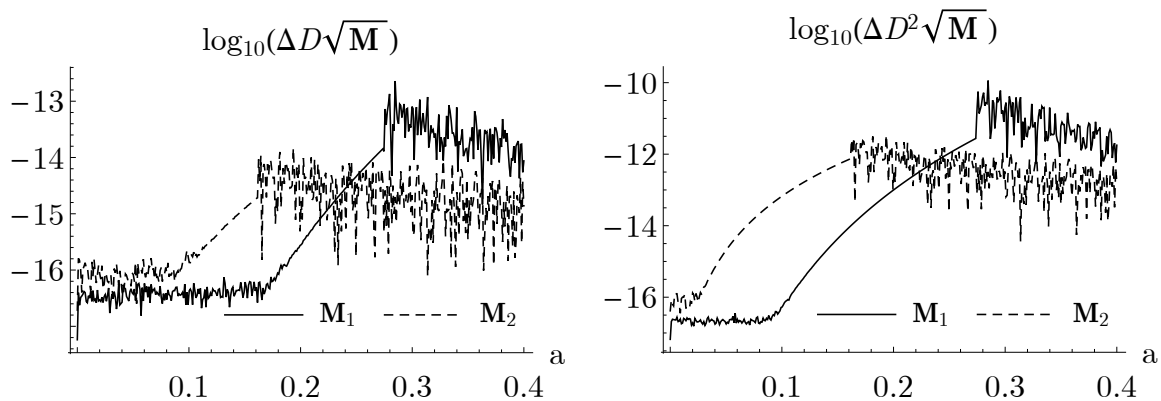
Napake prvih odvodov so pod  $10^{-13}$  v območju prehoda med območji, nato se zmanjšujejo, ko se oddaljujemo. V primeru  $\xi \cdot M^n$  je nekoliko večja  $10^{-11}$  (slika 5.15a). Napake drugih odvodov so večje in so pod  $10^{-11}$ , razen za  $\xi \cdot M^n$  kjer je nekoliko večja  $10^{-8}$  (slika 5.11b). Iz rezultatov lahko sklepamo, da so izpeljane matrične funkcije dovolj točne. Za večjo natančnost odvodov bi bilo potrebno rodovne funkcije na območjih slabe pogojenosti razviti z razvojem višjega reda in ustrezno povečati toleranci  $\varepsilon_p$  in  $\varepsilon_r$ .



Slika 5.11: Računska natančnost odvodov eksponenta matrike  
Figure 5.11: Accuracy of derivatives of matrix exponential

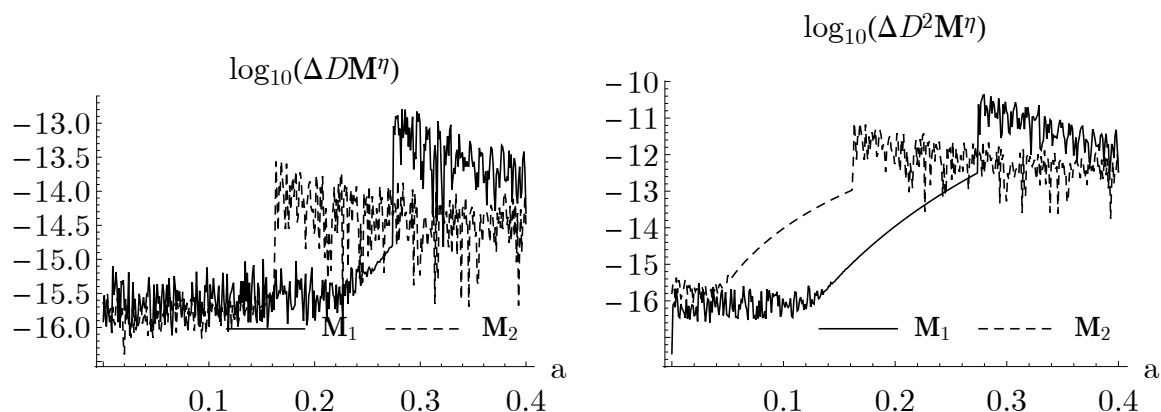


Slika 5.12: Računska natančnost odvodov logaritma matrike  
Figure 5.12: Accuracy of derivatives of matrix logarithm

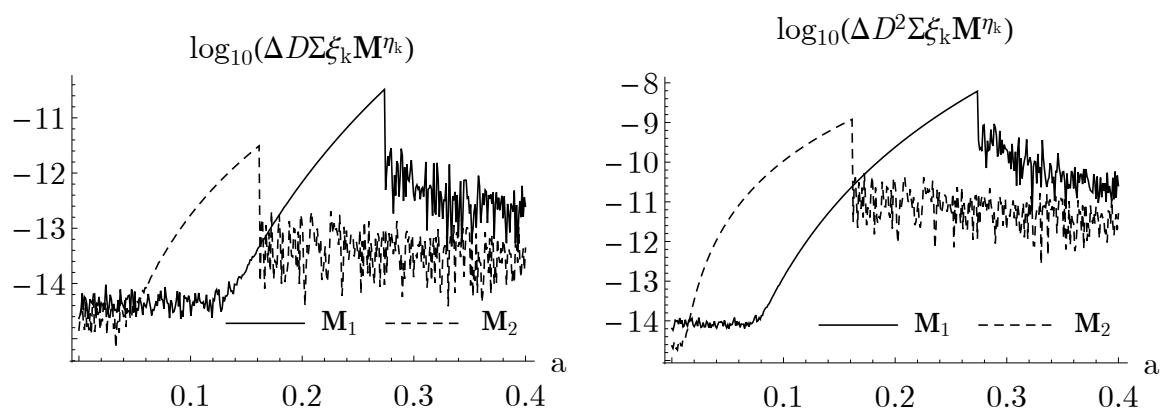


Slika 5.13: Računska natančnost odvodov korena matrike  
Figure 5.13: Accuracy of derivatives of matrix square root

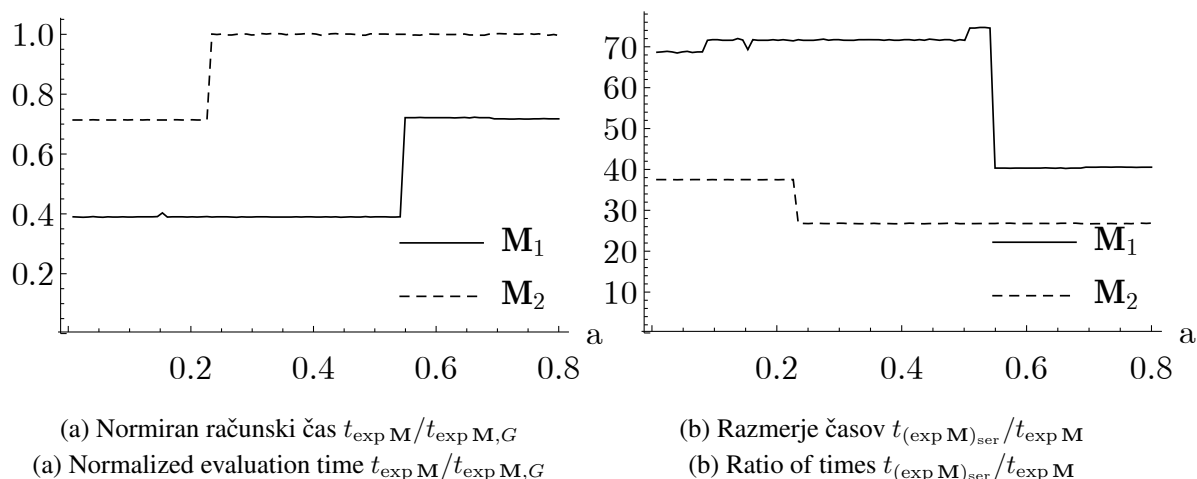
Poleg natančnosti je bila na matrikah  $M_1$  in  $M_2$  primerjana tudi učinkovitost v primerjavi s končnimi vrstami. Na slikah 5.16a, 5.17a, 5.18a, 5.19a in 5.20a so prikazani normirani časi izračuna matričnih funkcij v zaključeni obliki. Časi so normirani s povprečnim časom izračuna matričnega eksponenta na splošnem območju  $t_{\exp M, G}$  za vse funkcije, tako da je možno spremljati relativno razliko med posameznimi rodovnimi funkcijami  $G$ ,  $G_p$  in  $G_r$  in med posameznimi matričnimi funkcijami. Ugotovljeno je



Slika 5.14: Računska natančnost odvodov potence matrike  
Figure 5.14: Accuracy of derivatives of matrix power

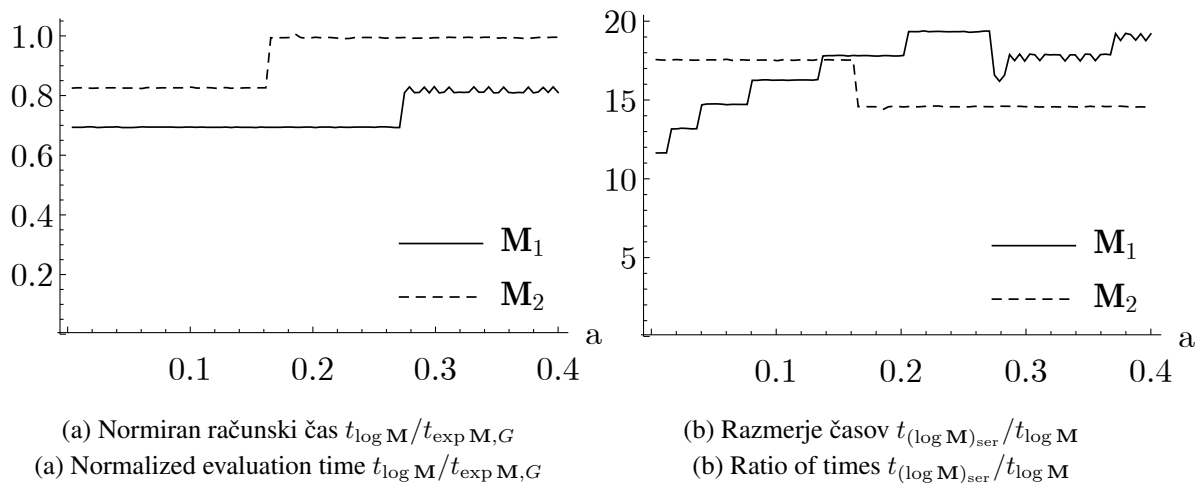


Slika 5.15: Računska natančnost odvodov vsote potenc matrike  
Figure 5.15: Accuracy of derivatives of matrix power sum

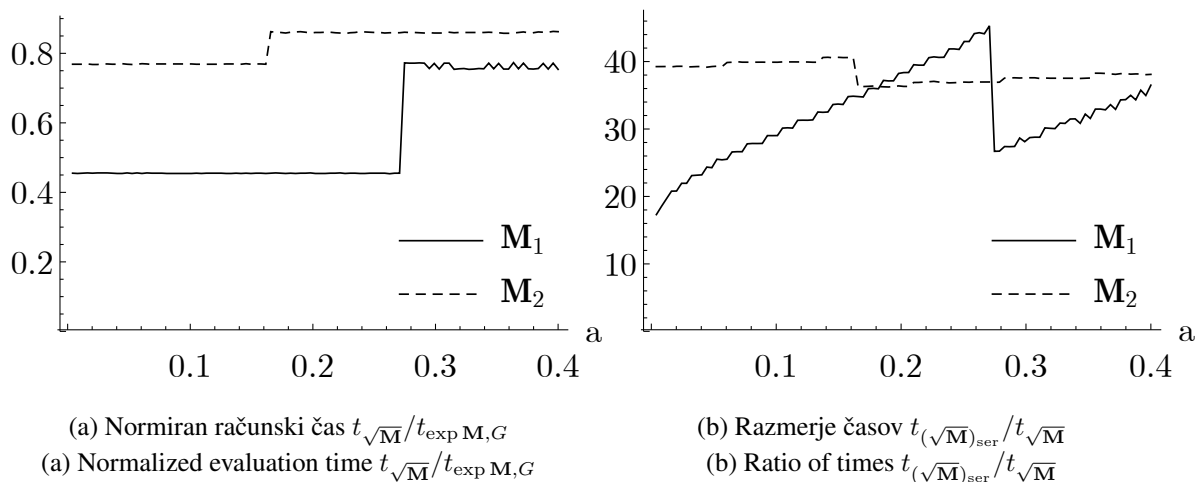


Slika 5.16: Učinkovitost zaključene oblike eksponenta matrike  $\exp M$   
Figure 5.16: Efficiency of closed-form matrix exponential  $\exp M$

bilo, da imajo zaključene oblike v primeru analitične rodovne funkcije  $G$  podobne čase izračuna z maksimalnim odstopanjem 10 %. Za vse funkcije velja, da je izračun najenostavnejšega razvoja  $G_p$  v vrsto najhitrejši ( $0.4 t_{\text{exp } M, G}$  za eksponent do  $0.7 t_{\log M, G}$  za logaritem), sledi izračun  $G_r$  ( $0.7 t_{\text{exp } M, G}$  za ek-

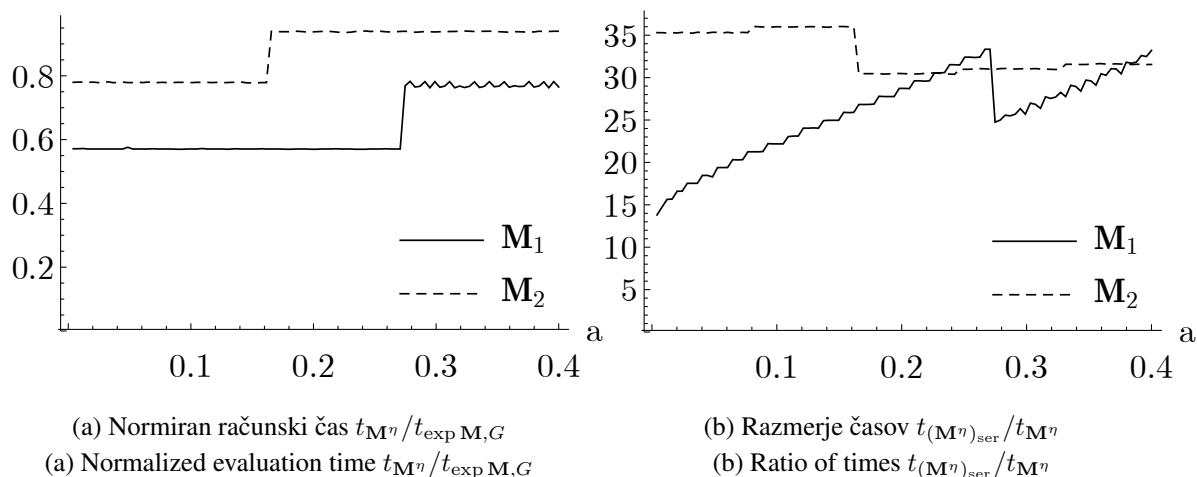


Slika 5.17: Učinkovitost logaritma matrike  $\log M$   
 Figure 5.17: Efficiency of matrix Logarithm  $\log M$

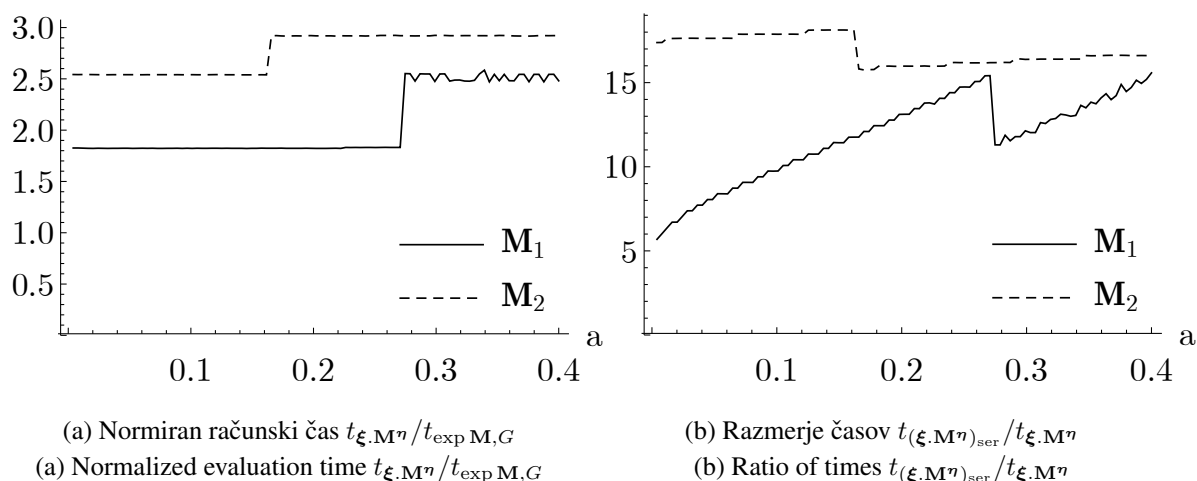


Slika 5.18: Učinkovitost korena matrike  $\sqrt{M}$   
 Figure 5.18: Efficiency of matrix square root  $\sqrt{M}$

sponent do  $0.85 t_{\log M, G}$  za logaritem) in izračun osnovne funkcije  $G$  izražene s trigonometričnimi funkcijami, ki je najpočasnejši. Logaritem matrike izkazuje najmanjše odstopanje med različnimi območji in eksponent največje. Izjema je funkcija  $\sum \xi_k \mathbf{A}^{\eta_k}$ , kjer je čas sorazmeren s številom členov  $m$ . Ker je v tem primeru izbrano število členov  $m = 3$ , je računski čas natanko trikrat daljši glede na matriko potence za vsa tri območja. Na slikah 5.16b, 5.17b, 5.18b, 5.19b in 5.20b so prikazane relativne razlike med zaključeno obliko matričnih funkcij in njenimi razvoji v končno vrsto. Razvoji funkcij v vrsto so počasnejši za faktor od 30 do 80 krat za eksponent matrike, od 10 do 25 krat za logaritem matrike, od 20 do 50 krat za potenco in koren matrike ter od 6 do 18 krat za vsoto potenc matrike. Pri vrstah lahko v nekaterih primerih spremljamo naraščanje časa (slike 5.17b, 5.18b, 5.19b in 5.20b za matriko  $M_1$ ), saj se oddaljujemo od središča konvergenčnega radija funkcij. V primeru potenc in korena matrike, za dovolj velik  $a$  vrsta ne konvergira več. V primeru logaritma matrike pa se le večja število potrebnih členov vrste.



Slika 5.19: Učinkovitost potence matrice  $M^n$   
 Figure 5.19: Efficiency of matrix power  $M_i^n$



Slika 5.20: Učinkovitost vsote potenc matrice  $\sum \xi_k M^{\eta_k}$   
 Figure 5.20: Efficiency of matrix power sum  $\sum \xi_k M^{\eta_k}$

### 5.3.2 Primerjava računske natančnosti in učinkovitosti potence in vsote potenc na primeru simetričnih matrik

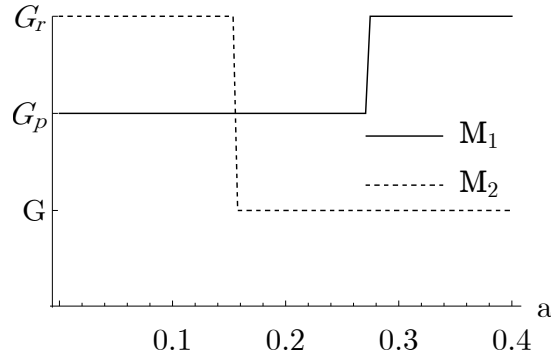
V prejšnjem poglavju 5.3.1 je bilo na vseh izpeljanih matričnih funkcijah pokazano, da so te računsko natančne in numerično učinkovite. V tem poglavju bosta izmed izpeljanih funkcij primerjane le potence matrice  $A^\eta$  in vsota potenc matrik  $\sum \xi_k A^{\eta_k}$  v zaključeni obliki z njunima razvojem v potenčno vrsto  $(A^\eta)_{ser}$  in  $(\sum \xi_k A^{\eta_k})_{ser}$ , za ilustracijo pa je k primerjavi dodana tudi formulaciji  $(A^\eta)_{per}$  in  $(\sum \xi_k A^{\eta_k})_{per}$ , kjer problematičnih območij nismo razvili v vrsto temveč smo vrednosti  $p$  ali  $r$  za  $\varepsilon_{p_0}$  ali  $\varepsilon_{r_0}$  odmaknili od vrednosti 0 ali  $\pm 1$  (poglavje 5.2.3). Vrednosti uporabljeni v primerjavah sta  $\varepsilon_{p_0} = \varepsilon_{r_0} = 10^{-12}$ .

Namesto nesimetričnih polnih matrik (5.37), ki smo jih izbrali v prejšnjem poglavju za ovrednotenje točnosti in učinkovitosti, so določene nove simetrične matrice podobnih lastnosti. Novi matriki  $M_1$  in

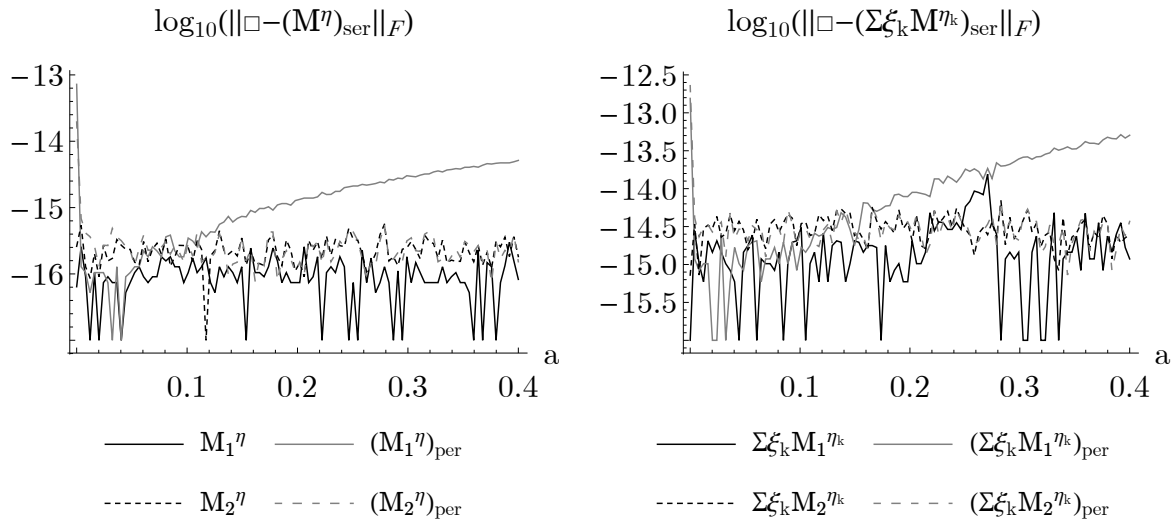
$\mathbf{M}_2$  sta:

$$\mathbf{M}_1 = \begin{bmatrix} a+1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \text{ in } \mathbf{M}_2 = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & a \end{bmatrix} + \mathbf{I}. \quad (5.38)$$

Diagonalna matrika  $\mathbf{M}_1$  je v praksi zelo pogosta, saj imajo deformacijski tenzorji v mehaniki trdnin na začetku analize enaka enotski matriki. Območja rodovnih funkcij  $G$ ,  $G_p$  in  $G_r$  so prikazana na sliki 5.21.

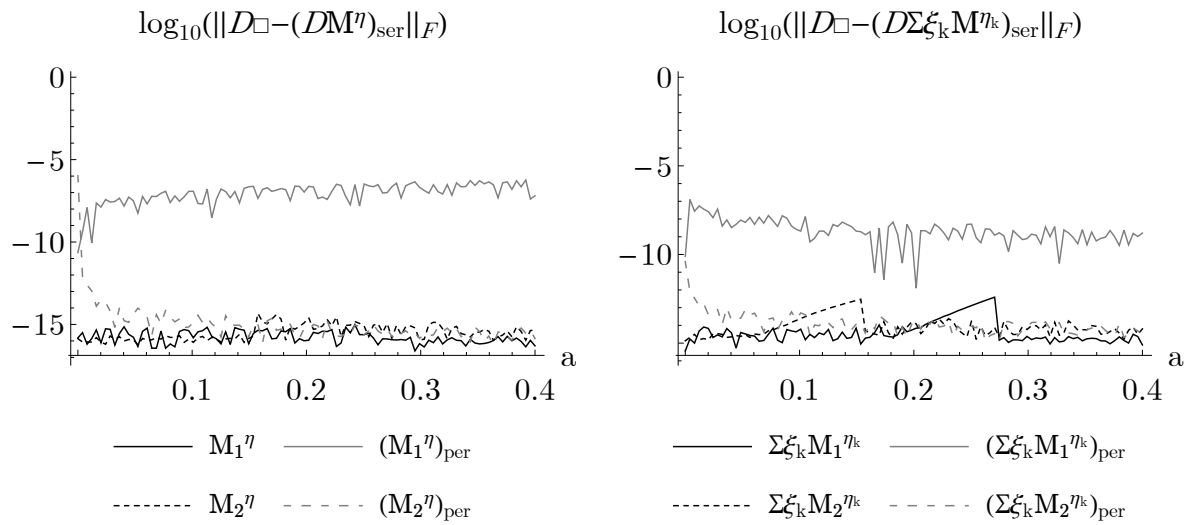


Slika 5.21: Območja matrik  $\mathbf{M}_i(a)$  za funkciji  $\mathbf{A}^\eta$  in  $\sum \xi_k \mathbf{A}^{\eta_k}$   
Figure 5.21: Areas of matrices  $\mathbf{M}_i(a)$  for functions  $\mathbf{A}^\eta$  and  $\sum \xi_k \mathbf{A}^{\eta_k}$

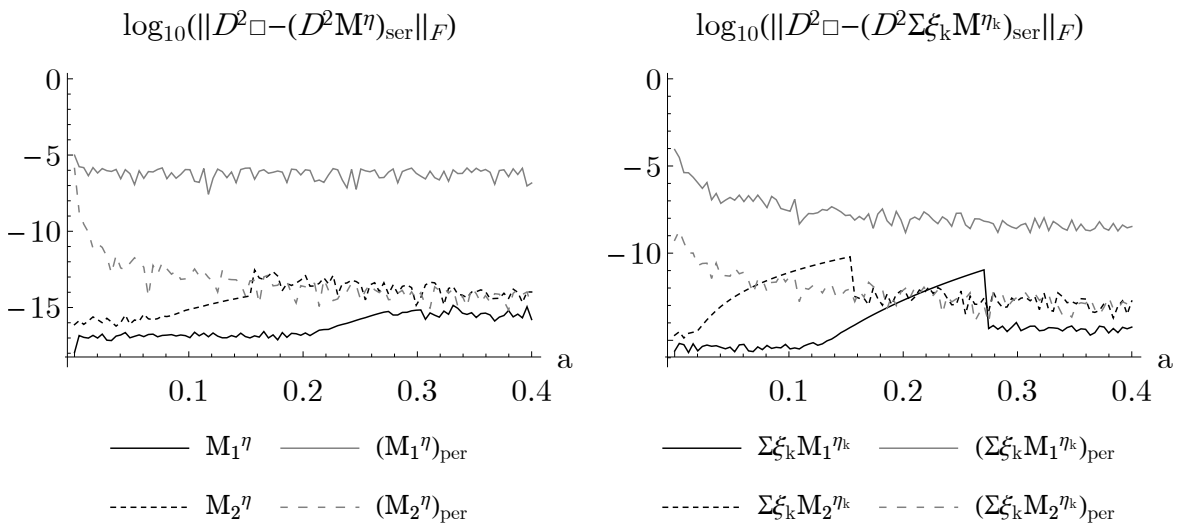


Slika 5.22: Računska natančnost potenc in vsote potenc matrike  
Figure 5.22: Accuracy of matrix power and sum of powers

Rezultat računske natančnosti potence in vsote potenc simetričnih matrik so prikazani na slikah 5.22, 5.23 in 5.24. Red velikosti napak in oblike grafov funkcij  $\mathbf{M}^\eta$  in  $\sum \xi_k \mathbf{M}^{\eta_k}$  so podobni kot v primeru nesimetrične matrike (slike 5.9, 5.14, 5.10 in 5.15), saj imajo nesimetrične matrike podobna območja kot simetrične. V splošnem so napake odvodov formulacij  $(\mathbf{M}^\eta)_{\text{per}}$  in  $(\sum \xi_k \mathbf{M}^{\eta_k})_{\text{per}}$  večje od  $\mathbf{M}^\eta$  in  $\sum \xi_k \mathbf{M}^{\eta_k}$  na obeh problematičnih območjih območju. Ker se matrika  $\mathbf{M}_1$  nahaja na robnem območju za vsak  $a$ , saj je  $r = 1$ , je v rezultatih formulacij  $\mathcal{F}_{\text{per}}(\mathbf{M}_1)$   $1 - |r| \leq \varepsilon_{r_0}$  vedno izpolnjeno. Posledično je  $r$  za  $\varepsilon_{r_0}$  zamaknjen od roba, kar se kaže tudi v rezultatih, saj so napake odvodov funkcij  $(\mathbf{M}_1^\eta)_{\text{per}}$



Slika 5.23: Računska natančnost prvih odvodov potenc in vsote potenc matrike  
Figure 5.23: Accuracy of first derivatives of matrix power and sum of powers

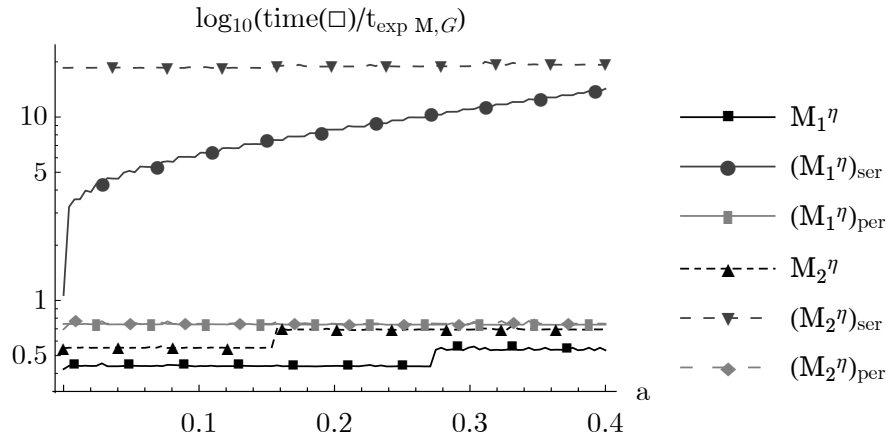


Slika 5.24: Računska natančnost drugih odvodov potenc in vsote potenc matrike  
Figure 5.24: Accuracy of second derivatives of matrix power and sum of powers

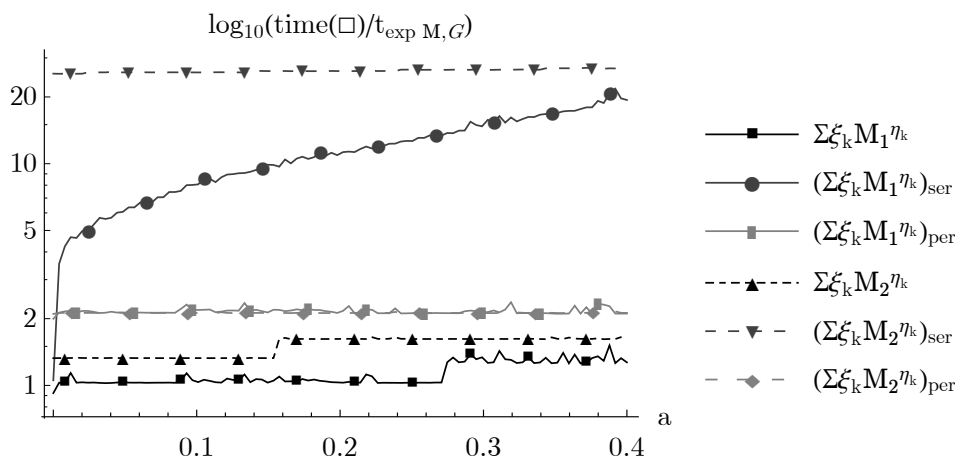
in  $(\Sigma\xi_k M_1^{\eta_k})_{\text{per}}$  okoli  $10^{-8}$  za prvi in  $10^{-6}$  za drugi odvod na vsem območju in so relativno velike glede na rezultate funkcij  $M_2^\eta$  in  $\Sigma\xi_k M_2^{\eta_k}$ , kjer smo problematična območja ustrezno obravnavali in so posledično napake precej manjše in so pod  $10^{-12}$  za prvi in pod  $10^{-10}$  za drugi odvod. Funkciji  $(M_2^\eta)_{\text{per}}$  in  $(\Sigma\xi_k M_2^{\eta_k})_{\text{per}}$  izkazujeta tudi lokalno povečanje napake na območju okoli  $a = 0$ .

Rezultati učinkovitosti potencia matrike in vsote potenc matrike so prikazani na slikah 5.25 in 5.26. Rezultati učinkovitosti so zaradi primerljivosti z rezultati učinkovitosti nesimetričnih matrik normirani s časom  $t_{\text{exp } M, G}$ , ki je bil uporabljen za normiranje časov matričnih funkcij na primeru nesimetričnih matrik (poglavje 5.3.1). Opaziti je možno povečanje učinkovitosti za 40–50 % pri obeh zaključenih oblikah potenc in pri razvojih v vrsto glede na učinkovitost za nesimetrične matriko. To razmerje ustreza razmerju neodvisnih spremenljivk za simetrične in nesimetrične matrike (preglednica 5.1). Na območju splošne rodovne funkcije  $G$  je potencia matrike  $(M^\eta)_{\text{per}}$  enako učinkovita kot potencia matrike v zaključeni obliki  $M^\eta$ , vsota potenc  $(\Sigma\xi_k M^{\eta_k})_{\text{per}}$  pa je izračunana 25 % počasneje od zaključene oblike  $\Sigma\xi_k M^{\eta_k}$ . Razlog

za to sta različna načina izpeljave funkcije  $\Sigma \xi_k \mathbf{M}^{\eta_k}$ , saj je posledično funkcija drugače implementirana v kodo. Kot za nesimetrične matrike so funkcije izračunane z razvojem v vrsto  $\mathcal{F}_{\text{ser}}$  občutno počasnejše od izpeljav  $\mathcal{F}$  in  $\mathcal{F}_{\text{per}}$  v podobnem razmerju kot za polne matrike od 20 do 35 krat (sliki 5.19 in 5.20).



Slika 5.25: Normiran računski čas potence matrike  $\xi \mathbf{M}^\eta$   
Figure 5.25: Normalized evaluation time of matrix power  $\xi \mathbf{M}^\eta$



Slika 5.26: Normiran računski čas vsote potenc  $\Sigma \xi_k \mathbf{M}^{\eta_k}$   
Figure 5.26: Normalized evaluation time of sum of matrix powers  $\Sigma \xi_k \mathbf{M}^{\eta_k}$

Iz rezultatov na primeru simetričnih matrik lahko pridemo do podobnih zaključkov kot za polno matriko. Zaključimo lahko tudi, da je izračun funkcij simetričnih matrik s kodo optimirano za simetrične matrike ugoden, saj se izkaže, da je računski čas sorazmeren številu izhodnih spremenljivk in je skoraj dvakrat krajši.

#### 5.4 Aplikacija matričnih funkcij v mehaniki

Izpeljane matrične funkcije bomo v tem poglavju uporabili za implementacijo elastičnih deformacijskih energij različnih hiperelastičnih modelov in za implementacijo pogoja plastičnega tečenja. V poglavju 3.5.3 smo predstavili najpogostejše hiperelastične modele, ki se uporabljajo v praksi. Implementacija nekaterih osnovnih modelov v kodi končnih elementov je prikazana v poglavju 4.2.1. Namenoma pa smo se izognili formulaciji elementa Ogdenovega in Henckyjevega modela, saj bosta formulirana v naslednjem



poglavju z uporabo zaključenih oblik matričnih funkcij.

Implementacija evolucije plastičnih deformacij je že prikazana v poglavju 4.3.3. Ta zahteva uporabo matričnega eksponenta, ki je direktno izvrednoten z uporabo izpeljane zaključene oblike matričnega eksponenta, kot je prikazano na izseku kode 4.25. Pravilnost in uporabo matričnega eksponenta sta prikazala že Korelc in Stupkiewicz (2014). V naslednjih poglavjih bo prikazana alternativna formulacija Ogdenovega materialnega modela z uporabo vsote matrik potenc, ter implementacija Henckyjevega materialnega modela.

#### 5.4.1 Implementacija Ogdenovega materialnega modela

V tem poglavju bo prikazana formulacija in implementacija stisljivega Ogdenovega modela. S tem da dovolimo volumske deformacije modela se izognemo potrebi po obravnavi nestisljivosti. Ogdenov materialni model je predstavljan v poglavju 3.5.3 kot vsota volumetričnega dela  $U$  in deviatoričnega dela  $\widehat{W}_{\text{Ogden}}$ , ki je izražen s potencami deviatoričnih delov raztezkov  $\widehat{\lambda}_i^{\alpha_k}$ :

$$W_{\text{Ogden}} = \widehat{W}_{\text{Ogden}} + U = \sum_{k=1}^m \frac{\mu_k}{\alpha_k} (\widehat{\lambda}_1^{\alpha_k} + \widehat{\lambda}_2^{\alpha_k} + \widehat{\lambda}_3^{\alpha_k} - 3) + U. \quad (5.39)$$

Kot je bilo pokazano v poglavju 5.3.2 je zapis z lastnimi vrednostmi zaradi problemov z večkratnimi lastnih vrednosti, neugoden, zato je v nadaljevanju predstavljena alternativna formulacija, kjer se bomo poslužili možnosti, da je deviatorični del Ogdenovega potenciala enak rodovni funkciji matrične funkcije. Zapišemo lahko rezidual deviatoričnega dela  $\widehat{W}_{\text{Ogden}}$

$$\widehat{\mathbf{R}}_e(\mathbf{p}_e) = \frac{\partial \widehat{W}_{\text{Ogden}}}{\partial \mathbf{p}_e} = \frac{\partial \widehat{W}_{\text{Ogden}}}{\partial \widehat{\lambda}_i} \frac{\partial \widehat{\lambda}_i}{\partial \widehat{\mathbf{C}}} \frac{\partial \widehat{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{p}_e}, \quad (5.40)$$

kjer je  $\widehat{\mathbf{C}} = J_F^{-2/3} \mathbf{C}$  deviatorični del desnega Cauchy-Greenovega deformacijskega tenzorja (poglavje 3.2.2).  $\widehat{c}_i = \widehat{\lambda}_i^2$  so lastne vrednosti  $\widehat{\mathbf{C}}$ . Znotraj enačbe (5.40) nastopa faktor  $\frac{\partial \widehat{W}_{\text{Ogden}}}{\partial \widehat{\lambda}_i} \frac{\partial \widehat{\lambda}_i}{\partial \widehat{\mathbf{C}}} = \frac{\partial \widehat{W}_{\text{Ogden}}}{\partial \widehat{\mathbf{C}}}$ . Po enačbi (5.4) je rezultat odvajanja skalarne funkcije v obliki vsote funkcij, ki operirajo nad lastnimi vrednostmi, matrična funkcija  $\mathcal{F}$ . Pomožna funkcija je za Ogdenov model enaka  $g = \mu_k / \alpha_k \widehat{c}_i^{\alpha_k/2}$ , posledično je ekvivalentna funkcija enaka  $f(\widehat{c}_i) = \frac{\partial g(\widehat{c}_i)}{\partial \widehat{c}_i} = \mu_k / 2 \widehat{c}_i^{\alpha_k/2-1}$ , kar pripelje do izraza:

$$\frac{\partial \widehat{W}_{\text{Ogden}}}{\partial \widehat{\mathbf{C}}} = \sum_{k=1}^m \frac{\mu_k}{2} \widehat{\mathbf{C}}^{\frac{\alpha_k}{2}-1}, \quad (5.41)$$

pri čemer smo upoštevali simetrijo  $\widehat{\mathbf{C}} = \widehat{\mathbf{C}}^T$ . Iz enačbe (5.41) sledi, da je izraz  $\widehat{W}_{\text{Ogden}}$  rodovna funkcija matrične funkcije na desni strani enačbe. Če enačbo nekoliko posplošimo, lahko zapišemo izraz na desni kot vsoto oz. linearno kombinacijo potenc matrike 5.1.4:

$$\Sigma_{\text{pow}} \left( \widehat{\mathbf{C}}, \frac{\boldsymbol{\mu}}{2}, \frac{\boldsymbol{\alpha}}{2} - 1 \right) = \frac{\partial \mathcal{G}_{\Sigma_{\text{pow}}} \left( \widehat{\mathbf{C}}, \frac{\boldsymbol{\mu}}{2}, \frac{\boldsymbol{\alpha}}{2} - 1 \right)}{\partial \widehat{\mathbf{C}}} = \sum_{k=1}^m \frac{\mu_k}{2} \widehat{\mathbf{C}}^{\frac{\alpha}{2}-1}. \quad (5.42)$$

Z izbiro faktorjev  $\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\mu}/2$  in potenc  $\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\alpha}/2-1$  kot parametrov funkcije  $\Sigma \boldsymbol{\xi}_k \mathbf{M}^{\boldsymbol{\eta}_k}$ , Ogdenovo elastično deformacijsko energijo (5.39) alternativno zapišemo z rodovno funkcijo vsote potenc, razvito na slabo

pogojenih območjih (5.28),

$$W_{\text{Ogden}} = \widehat{W}_{\text{Ogden}} + U, \quad (5.43)$$

$$\widehat{W}_{\text{Ogden}} = \sum_{k=1}^m \frac{\mu_k}{\alpha_k} \left( \sum_{i=1}^3 \widehat{\lambda}_i^{\alpha_k} - 3 \right) = \mathcal{G}_{\Sigma^{\text{pow}}} \left( \widehat{\mathbf{C}}, \frac{\boldsymbol{\mu}}{2}, \frac{\boldsymbol{\alpha}}{2} - 1 \right) - \sum_{k=1}^m \frac{3\mu_k}{\alpha_k}. \quad (5.44)$$

Ker smo izpeljali zaključeno obliko matričnih funkcij, nimamo direktnega dostopa do rodovne funkcije, temveč lahko zapišemo deviatorični del potenciala kot fiktivno spremenljivko in ji definiramo le potreben odvod (5.41) izražen z zaključeno obliko vsote potenc (5.42):

$$W_{\text{Ogden}} = \widehat{W}_{\text{Ogden}} \Big|_{\frac{D\widehat{W}_{\text{Ogden}}}{D\widehat{\mathbf{C}}} = \Sigma^{\text{pow}}(\widehat{\mathbf{C}}, \frac{\boldsymbol{\alpha}}{2} - 1, \frac{\boldsymbol{\mu}}{2})} + U(J_F), \quad \widehat{W}_{\text{Ogden}} = \text{fiktivna spremenljivka}. \quad (5.45)$$

Procedura avtomatskega odvajanja nato pri izračunu reziduala (5.40) avtomatsko uporabi zaključeno obliko vsote potenc, na mestu, kjer je to potrebno:

$$\mathbf{R}_{e,\text{Ogden}}(\mathbf{p}_e) = \sum_{k=1}^m \frac{\mu_k}{2} \widehat{\mathbf{C}}^{\frac{\alpha_k}{2}-1} \frac{\partial \widehat{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{p}_e} + \frac{\partial U}{\partial \mathbf{p}_e}. \quad (5.46)$$

Za določitev tangentne matrike Ogdenovega modela je potrebno poznati še prvi odvod matrične funkcije  $\sum \mu_k/2 \widehat{\mathbf{C}}^{\alpha_k/2-1}$  po tenzorju  $\widehat{\mathbf{C}}$ . Primer implementacije Ogdenovega modela (5.45) v kodo *AceGen* je prikazan na sliki 5.28 in izsek kode za izračun tenzorja  $\widehat{\mathbf{C}}$  na sliki 5.27.

```
C=SMSFreeze[F.F,"Symmetric"→True];JF=SMSSqrt[Det[C]];
SMSFreeze[CISO,JF^(-2/3)C,"Symmetric"→True,"Ignore"→NumberQ];
```

Slika 5.27: Izsek kode *AceGen* za izračun deviatoričnega dela desnega Cauchy-Greenovega deformacijskega tenzorja  $\widehat{\mathbf{C}} \equiv \text{CISO}$

Figure 5.27: *AceGen* input segment for the computation of deviatoric part of right Cauchy-Green deformation tensor  $\widehat{\mathbf{C}} \equiv \text{CISO}$

```
DWDCISO=SMSMatrixPowerSeries[CISO,Flatten[{{μig/2,(αig/2-1)}^T},nlg,1];
SMSFreeze[WISO,SMSFictive[[],
"Dependency"→({
SMSVariables[Flatten[CISO]],
SMSVariables[Flatten[DWDCISO]]})^T];
Wu=WISO+U;
```

Slika 5.28: Izsek kode *AceGen* za izračun deformacijske energije Ogdenovega modela (5.45)

Figure 5.28: *AceGen* input segment for the computation of the Ogden model (5.45)

Za namen prikaza pravilnosti Ogdenovega modela, bo na enak način implementiran tudi model, kjer bo uporabljen razvoj vsote potenc matrike v potenčno vrsto  $(\sum \mu_k/2 \widehat{\mathbf{C}}^{\alpha_k/2-1})_{\text{ser}}$  (glej poglavje 5.2.2):

$$W_{\text{Ogden,ser}} = \widehat{W}_{\text{Ogden}} \Big|_{\frac{D\widehat{W}_{\text{Ogden}}}{D\widehat{\mathbf{C}}} = \left( \sum \frac{\mu_k}{2} \widehat{\mathbf{C}}^{\frac{\alpha_k}{2}-1} \right)_{\text{ser}}} + U. \quad (5.47)$$

Ta formulacija je problematična, saj je  $(\ )_{\text{ser}}$  razvit okoli enotske matrike  $\mathbf{I}$  s konvergenčnim radijem 1, kar pomeni da matrična funkcija izračuna pravilne rezultate le v notranjosti konvergenčnega radija.

## 5.4.2 Implementacija Henckyjevega materialnega modela

Henckyjev materialni model je predstavljan v poglavju 3.5.3 in je izražen z logaritmičnim tenzorjem deformaciji, kar pomeni, da je implementacija z uporabo zaključene oblike logaritma matrike direktna. Potencial sledi iz enačbe (3.181):

$$W_{\text{Hencky}} = \frac{\kappa}{2}\theta^2 + \mu\|\hat{\mathbf{h}}\|^2, \quad (5.48)$$

pri tem je izohoričen logaritmičen deformacijski tenzor izračunan uporabo zaključene oblike matričnega logaritma  $\hat{\mathbf{h}} = \frac{1}{2}\log(\hat{\mathbf{b}})$ . Primer implementacije Henckyjevega modela  $W_{\text{Hencky}}$  v kodi *AceGen* je dan na sliki 5.29.

```
hISO=1/2 SMSMatrixLog[CISO,2];
Wu= mu g Tr[hISO.hISO]+Kg/2 Log[JF]^2;
```

Slika 5.29: Izsek kode *AceGen* za izračun deformacijske energije Henckyjevega modela (5.49)

Figure 5.29: *AceGen* input segment for the computation of the Hencky model (5.49)

Z namenom prikaza pravilnosti na primeru, bo implementiran tudi model, kjer bo uporabljen razvoj logaritma matrike v vrsto (glej poglavje 5.2.2):

$$W_{\text{Hencky,ser}} = \frac{\kappa}{2}\theta^2 + \mu\|\hat{\mathbf{h}}_{\text{ser}}\|^2, \quad \text{kjer je } \hat{\mathbf{h}}_{\text{ser}} = \frac{1}{2}(\log(\hat{\mathbf{b}}))_{\text{ser}}. \quad (5.49)$$

## 5.5 Učinkovitost in natančnost matričnih funkcij na primeru metode končnih elementov

V tem poglavju bo na različnih računskih primerih prikazana učinkovitost in računska natančnost formulacij končnih elementov različnih hiper-elastičnih in elasto-plastičnih materialnih modelov, ki zahtevajo uporabo matričnih funkcij in njihovih odvodov, ter referenčnih modelov, ki ne zahtevajo uporabe matričnih funkcij. Elementi bodo uporabljeni za različne analize po metodi končnih elementov, iz katerih bomo ocenili ustreznost in pravilnost izpeljanih zaključenih oblik matričnih funkcij, glede na numerično učinkovitost in natančnost rezultatov analize.

### 5.5.1 Predstavitev elementov

Primerjali bomo tri matrične funkcije in sicer vsoto potenc, logaritem in eksponent matrike. Uporaba vsote potenc bo prikazana na primeru Ogdenovega materialnega modela. Model je izpeljan z uporabo zaključene oblike vsote potenc in razvojem vsote potenc v potenčno vrsto, kot je opisano v poglavju 5.4.1. Hiperelastični Neo-Hookev model in Mooney-Rivlinov model bosta uporabljena kot referenčna modela. Omenjena modela sta že splošno uveljavljena in preverjena, hkrati ne zahtevata uporabe matričnih funkcij, ampak sta izražena z invariantami izbranega deformacijskega tenzorja.

Uporaba matričnega logaritma bo prikazana na primeru izotropičnega Henckyjevega materialnega modela, ki ima elastično deformacijsko energijo izraženo z logaritmom raztezkov.

Poleg elastičnih variant omenjenih hiperelastičnih modelov, bodo implementirane tudi elastoplastične. Dodatni končni elementi bodo izpeljani za nekatere formulacije hiperelastičnih modelov, ki bodo dopolnjene z Von-Misesovim pogojem plastičnega tečenja 4.3.3. Henckyjevem modelu bo dodan tudi kriterij tečenja Cam-Clay 4.3.3. Za elsto-plastične modele je potreben pravilen opis evolucije plastičnega

tečenja, enačbi (4.98, 4.99), z uporabo eksponenta matrike, kot je prikazano v poglavju 4.3.3 na sliki 4.25.

Preglednica 5.4: Primerjani končni elementi glede na deformacijsko energijo in funkcijo tečenja  
Table 5.4: Compared finite elements accordingly to strain energy function and yield function

okrajšava	tip	el. def. energija	št. enačbe	funkcija tečenja	št. enačbe
<b>Hiperelastični modeli</b>					
NH	hiperelastičen	$W_{\text{NeoHooke}}$	(3.178)	-	-
MR	hiperelastičen	$W_{\text{MooneyRivlin}}$	(3.176)	-	-
Og	hiperelastičen	$W_{\text{Ogden}}$	(5.45)	-	-
Og <sub>ser</sub>	hiperelastičen	$W_{\text{Ogden, ser}}$	(5.47)	-	-
He	hiperelastičen	$W_{\text{Hencky}}$	(5.48)	-	-
He <sub>ser</sub>	hiperelastičen	$W_{\text{Hencky, ser}}$	(5.49)	-	-
<b>Elasto-plastični modeli</b>					
NH-Mi	elasto-plastičen	$W_{\text{NeoHooke}}$	(3.178)	$\mathcal{F}_{\text{Mises}}$	(4.103)
MR-Mi	elasto-plastičen	$W_{\text{MooneyRivlin}}$	(3.176)	$\mathcal{F}_{\text{Mises}}$	(4.103)
Og-Mi	elasto-plastičen	$W_{\text{Ogden}}$	(5.45)	$\mathcal{F}_{\text{Mises}}$	(4.103)
He-Mi	elasto-plastičen	$W_{\text{Hencky}}$	(5.49)	$\mathcal{F}_{\text{Mises}}$	(4.103)
CC	elasto-plastičen	$W_{\text{Hencky}}$	(5.49)	$\mathcal{F}_{\text{CamClay}}$	(4.105)

Vse elastične deformacijske energije modelov bodo zaradi medsebojne primerljivosti zapisane v obliki vsote volumetričnega in izohoričnega dela. Volumetrični del je (3.165):

$$U = \frac{\kappa}{\beta} \left( J_F^e^{-\beta} + \beta \log(J_F^e) - 1 \right), \quad U_{\log} = \frac{\kappa}{2} \theta_e^2. \quad (5.50)$$

$U$  je uporabljen za družino Ogdenovih deformacijskih energij in njenih izpeljav, ter  $U_{\log}$  za družino Henckyjevih deformacijskih energij. Predstavljene funkcije hiperelastičnih deformacijskih energij in funkcij tečenja bodo kombinirane med sabo v različnih končnih elementih, z namenom da dobimo različne kombinacije elementov z različnimi matričnimi funkcijami in njihovimi odvodi. Vse obravnavane formulacije materialnih modelov so dane v preglednici 5.4, kjer je navedeno, katera deformacijska energija je uporabljena znotraj kode, ter kateri pogoj tečenja je uporabljen v elasto-plastičnih modelih. V preglednici 5.5 je navedeno katera formulacija matrične funkcije in kateri red odvoda so zahtevani za formulacijo posameznega modela.

Vsak materialni model iz preglednice 5.4 je implementiran s standardno osem vozliščno osem točkovno Gaussovo integracijo, ter v standardnem štiri vozliščnem osno-simetričnem končnem elementu. Vsi elementi uporabljajo linearne interpolacije (interpolacija (4.34) za 8-vozliščni element in interpolacija (4.35) za 4-vozliščni element) in so formulirani po klasičnem izoparametričnem principu (poglavje 4). Vozliščne spremenljivke vseh elementov so pomiki. Vse kode so bile optimizirane in avtomatsko izpeljane z uporabo avtomatskega sistema za generacijo kode *AceGen* (Korelc, 2011). Število enačb izpeljanih tekom avtomatske procedure in fizična velikost C kode s pod-rutinami je podana v preglednici 5.6.

### 5.5.2 Opis testnega primera

Učinkovitost in točnost materialnih modelov formuliranih z izpeljanimi matričnimi funkcijami bo ocenjena na štirih enostavnih primerih, ki bodo rešeni po metodi končnih elementov.

Osnovna modela bosta v vseh primerih kocka dimenzije  $1\text{m} \times 1\text{m} \times 1\text{m}$  in kvadrat  $1\text{m} \times 1\text{m}$  z debelino

Preglednica 5.5: Matrične funkcije in njihovi odvodi, ki se pojavijo znotraj končnih elementov  
Table 5.5: Appearance of matrix functions and their derivatives within the finite elements

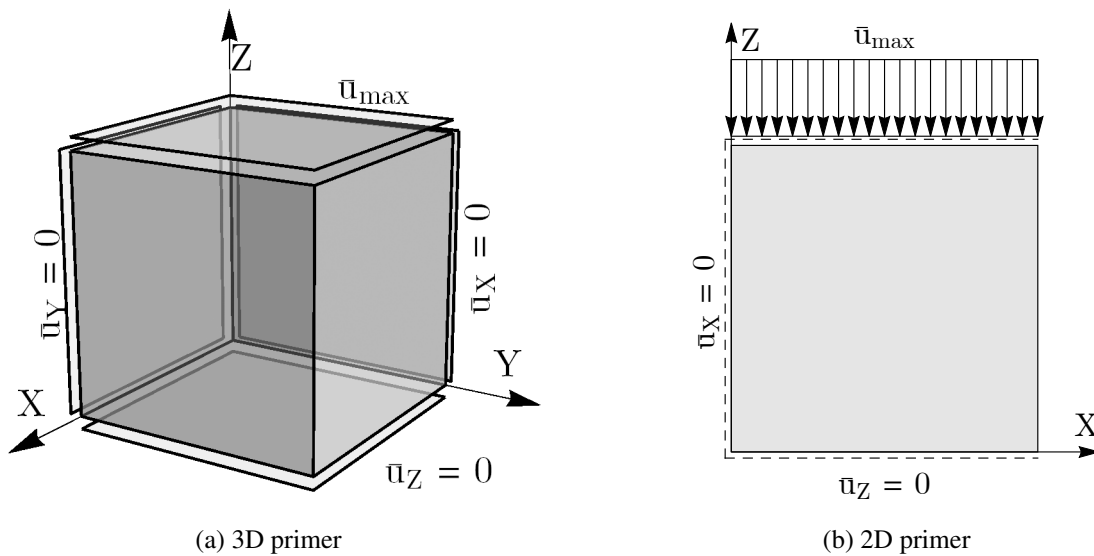
element	$\exp \mathbf{A}$	$D \exp \mathbf{A}$	$D^2 \exp \mathbf{A}$	$\log \mathbf{A}$	$D \log \mathbf{A}$	$D^2 \log \mathbf{A}$	$\sum \xi_k \mathbf{A}^{\eta_k}$	$D \sum \xi_k \mathbf{A}^{\eta_k}$	$D^2 \sum \xi_k \mathbf{A}^{\eta_k}$
Hiperelastični modeli									
NH	×	×	×	×	×	×	×	×	×
MR	×	×	×	×	×	×	×	×	×
Og	×	×	×	×	×	×	✓	✓	×
Og <sub>ser</sub>	×	×	×	×	×	×	✓	✓	×
He	×	×	×	✓	✓	✓	×	×	×
He <sub>ser</sub>	×	×	×	✓	✓	✓	×	×	×
Elasto-plastični modeli									
NH-Mi	✓	✓	×	×	×	×	×	×	×
MR-Mi	✓	✓	×	×	×	×	×	×	×
Og-Mi	✓	✓	×	×	×	×	✓	✓	×
He-Mi	✓	✓	×	✓	✓	✓	×	×	×
CC	✓	✓	×	✓	✓	✓	×	×	×

Preglednica 5.6: Lastnosti avtomatsko kreirane kode  
Table 5.6: Characteristics of automatically generated codes

Element	Št. enačb		C koda (KB)	
	Q1	H1	Q1	H1
NH	398	857	19.	52.4
MR	515	1020	23.2	61.2
Og	564	1125	26.1	65.2
Og <sub>ser</sub>	727	1421	29.9	73.7
He	594	1354	27.7	78.3
He <sub>ser</sub>	1227	3969	54.	215.
NH-Mi	2330	3885	105.	215.
MR-Mi	3331	4986	152.	279.
Og-Mi	2954	5102	145.	307.
He-Mi	3499	6683	185.	441.
CC	3843	7259	202.	475.

1 m. Prvi je diskretiziran z  $9 \times 9 \times 9 = 729$  heksahedričnimi (H1) končnimi elementi, drugi pa z  $36 \times 36 = 1296$  osno-simetričnimi štirikotnimi končnimi elementi (Q1). Tako razmerje je izbrano, da je število enačb problema v obeh primerih kar se da enako in je 2600 ter 2627. Kocka ima v ravnini (stranica kocke) s koordinato  $Z = 0$  preprečene pomike v navpični smeri  $u_Z = 0$ , v ravnini  $Y = 0$  ima preprečene vodoravne pomike  $u_Y = 0$  ter v ravnini  $X = 0$  preprečene  $u_X = 0$ . Na zgornji ploskvi (koordinata  $Z = 1$  m) je vsiljen pomik  $u_Z = u_{max}$ . Analogno so robni pogoji nanesti na spodnjo in zgornjo stranico kvadrata (glej sliko 5.30). Pomiki na ostalih stranicah oz ploskvah so prosti, tako da je po domeni telesa homogeno deformacijsko in napetostno stanje. Izbrana sta dva končna pomika  $u_{max} = 9$  m in  $u_{max} = -0.9$  m, tako da je v prvem dosežen raztezek 10 in drugem skrček 0.1. Enake robne pogoje predpišemo na kvadratu s koordinatama  $X, Y$ , kjer je  $Y$  v navpični smeri (glej sliko 5.30).

Zaradi ustreznosti izbire materialnih, geometrijskih in robnih parametrov je po domeni mreže končnih elementov homogeno napetostno in deformacijsko stanje. Plastifikacija nastopi v vseh Gaussovih točkah



Slika 5.30: Začetno stanje primerov  
Figure 5.30: Initial state of examples

elasto-plastičnih modelov po prvem koraku in se tekom analize plastično stanje ohrani v vseh Gaussovih točkah. Uporabljeni materialni parametri so dani v preglednici 5.8. Delni strižni moduli v primeru Ogdenovega materialnega modela so izbrani tako, da je celotni strižni modul vedno enak  $\mu = \sum_{k=1}^n \frac{\mu_k \alpha_k}{2} = 0.5$  MPa, kar povzroči enak začetni elastični odziv vseh modelov. Delni strižni moduli so dani v preglednici 5.8. Osnovo za določitev razmerij potenc in modulov smo povzeli po Brodersen (2004). Poissonov količnik je določen iz celotnega strižnega  $\mu$  in stisljivostnega modula  $\kappa$  po enačbi  $\nu = \frac{3\kappa - 2\mu}{6\kappa + 2\mu} = 0.285714$ .

Preglednica 5.7: Materialne parametri za vse modele  
Table 5.7: Material parameters for all models

Parameter	Oznaka	Vrednost	Enota	Enačba
Togostni modul	$\kappa$	1	MPa	Vsi $W$
Celotni strižni modul	$\mu$	0.5	MPa	Vsi $W$
Potenca volumetične deformacije	$\beta$	-2	-	Vol. del $U$
Napetost tečenja	$\sigma_{y0}$	$10^{-4}$	MPa	$\mathcal{F}_{Mises}$
Modul utrjevanja	$K_h$	0	MPa	$\mathcal{F}_{Mises}$
Zaostala napetost tečenja	$\sigma_{y\infty}$	$10^{-4}$	MPa	$\mathcal{F}_{Mises}$
EkspONENT zasičenosti	$\delta$	1	-	$\mathcal{F}_{Mises}$
Ref. konsolidacijski pritisk	$p_{ref}$	$10^{-2}$	MPa	$\mathcal{F}_{CamClay}$
Ref. vol. log. deformacija	$\theta_{ref}^p$	0.1	MPa	$\mathcal{F}_{CamClay}$
Naklon kritične linije stanja	$\alpha$	1.4	-	$\mathcal{F}_{CamClay}$
Začetni pritisk	$\delta$	$10^{-2}$	MPa	$\mathcal{F}_{CamClay}$

Primere smo rešili z uporabo Newton-Raphsonove iteracijske procedure in konsistentno lineariziranih tangentnih matrik, zato je pričakovana kvadratična konvergenca Newton-Raphsonove iteracijske procedure. Pomiki  $u_{max}$  so bili naneseni v dveh fazah in sicer najprej do 1 % pomika, nato pa v naslednji fazi do 100 %  $u_{max}$ . V vsaki fazi je bil pomik nanesen v večjih adaptivno izbranih korakih  $\Delta\lambda$ . Pri tem je v prvi fazi največji dovoljen prirastek koraka  $\Delta\lambda_{max} = 0.005$ , posledično je  $0.01u_{max}$  dosežen v 9 adaptivno izbranih korakih, pri 100 % uspešni konvergenči korakov, v drugi fazi pa je  $\Delta\lambda_{max} = 0.025$  in doseže pomik  $u_{max}$  v 47 adaptivno izbranih korakih, pri 100 % uspešni konvergenči korakov. Kriterij

Preglednica 5.8: Materialne lastnosti izohoričnega dela energije  
Table 5.8: Material characteristics of isochoric parts of potentials

El. potencial	Št. členov $m$	Potence $\alpha$	Strižni moduli $\mu$ (MPa)
$W_{\text{NH}}, W_{\text{He}}, W_{\text{Ogden}} _{m=1}$	1	(2)	(0.5)
$W_{\text{MR}}, W_{\text{Ogden}} _{m=2}$	2	(2, -2)	(0.284, -0.216)
$W_{\text{Ogden}} _{m=3}$	3	(1.3, 5, -2)	(0.7456, 0.00142, -0.0118)

uspešne konvergenec je  $\|\Delta \mathbf{p}\| < \varepsilon_{NR} = \varepsilon_{NR} = 10^{-8}$ . Algoritem za en korak Newton-Raphsonove iteracijske procedure je podan na sliki 2.1 v poglavju 2.1.

### 5.5.3 Primerjava rezultatov

Numerična učinkovitost vseh materialnih modelov v preglednici 5.4 bo primerjana na primeru 2D osnosimetrične in 3D topologije, ter za dva predpisana pomika  $u_{max} = 9$  m in  $u_{max} = -0.9$  m, nanesena v dveh fazah. S tem dobimo štiri analize končnih elementov za vsak materialni model iz preglednice 5.4. Vse implementacije Ogdenovega modela bodo izračunane za 1, 2 in 3 člene vrste ( $m$ ) iz preglednice 5.8, z ustrežno izbiro parametrov  $\alpha$  in  $\mu$ , tako da bo vsak končni element Ogdenovega modela uporabljen 3 krat na vsak opisan primer. Primerjali bomo elemente glede na različne formulacije matričnih funkcij in glede na primerjavo z ekvivalentnimi modeli brez uporabe matričnih funkcij, kjer ti obstajajo.

#### Primerjava numerične učinkovitosti

Vse formulacije so dosegle končni pomik, razen formulacij  $\text{Og}_{\text{ser}}$ . V Simulaciji s potencialom  $\text{Og}_{\text{ser}}|_{m=2}$  in  $\text{Og}_{\text{ser}}|_{m=3}$  z dvema in tremi členi vrste  $m$ , iteracijska procedura ni uspela skonvergirati do polne obtežbe, ustavila se je že pri  $0.6u_{max} = -0.54$  m pomika v tlaku in pri  $0.045u_{max} = 0.41$  m v nategu. Pri teh pomikih so glavni raztezki enaki  $\lambda \approx (1.41, 0.9, 0.9)$  in lastne vrednosti deviatoričnega dela desnega Cauchy-Greenovega deformacijskega tenzorja  $(\hat{\mathbf{C}}) \hat{\lambda}^2 \approx (1.81, 0.74, 0.74)$ . V primeru tlačnega pomika, so kvadrati deviatoričnih delov raztezkov  $\hat{\lambda}^2 \approx (1.81, 1.81, 0.31)$ . Te lastne vrednosti pa so blizu roba konvergenčnega radija 1, kar povzroči odpoved števila iteracij. Model Cam-Clay je za primer nateznih pomikov ( $u_{max} = 9$  m) kvadratično konvergiralo do pomika  $0.4u_{max} = 3.6$  m, nato je adaptivna procedura zaradi slabe konvergence začela drobiti korake. Razlog za to je, da se model plastificira pri nateznih napetosti in se s povečevanjem pomika hitro oddaljuje od porušne ploskve, ki ima obliko elipsoida, posledično je opazna slaba konvergenca procedure. Ostale formulacije so vse dosegle končni predpisan pomik  $u_{max}$ .

Rezultati učinkovitosti elementov so dani v preglednicah 5.10 in 5.9 za vsak opisan primer (3D ali 2D in  $u_{max} = 9$  m ali  $u_{max} = -0.9$  m). Paralelizacija kode je bila onemogočena zaradi objektivnejše ocene rezultata. Za oceno numerične učinkovitosti avtomatsko ustvarjenih kod, sta najbolj merodajna povprečen čas potreben za izračun reziduala in tangentne matrike elementa ( $\mathbf{K}_e$  in  $\mathbf{R}_e$  čas) in povprečno število iteracij na korak, ki določa hitrost konvergence. Povprečni časi so prikazani v preglednici 5.9, za čas pri 1 %  $u_{max}$  ter 100 %  $u_{max}$ . Povprečno število iteracij na korak za vsak primer je prikazano v preglednici 5.10.

#### Čas sestavljanja matrik

Učinkovitost formulacije z vrsto  $\text{Og}_{\text{ser}}$  je na območju do 1 % pomika (preglednica 5.9) primerljiva, tudi hitrejša v nekaterih primerih, od formulacije Og z zaključeno obliko klub ugotovitvam na primerjavi



Preglednica 5.9: Normiran povprečen  $K_e$  in  $R_e$  čas sestavljanja  
Table 5.9: Normalized  $K_e$  and  $R_e$  assembly time

% $u_{max}$ nateg/tlak topologija	Normiran povprečen $K_e$ in $R_e$ čas							
	1 % $u_{max}$				100 % $u_{max}$			
	$u_{max} = 9$		$u_{max} = -0.9$		$u_{max} = 9$		$u_{max} = -0.9$	
	Q1	H1	Q1	H1	Q1	H1	Q1	H1
NH	1.	7.01	1.12	8.16	1.01	7.04	1.06	7.08
Og $_{ m=1}$	3.12	15.4	2.92	15.	3.25	15.4	3.3	15.1
Og $_{ser m=1}$	1.49	12.5	1.5	12.4	1.54	12.7	1.55	12.2
MR	1.09	9.56	1.25	10.3	1.19	9.74	1.2	10.9
Og $_{ m=2}$	2.83	15.3	2.95	14.7	3.03	15.2	3.08	14.8
Og $_{ser m=2}$	1.97	15.9	1.69	13.4	3.82	30.5	4.23	29.1
Og $_{ m=3}$	3.01	15.1	3.07	15.4	3.27	15.	3.35	15.2
Og $_{ser m=3}$	1.9	15.1	1.61	12.6	4.6	32.7	4.36	30.2
He	3.96	25.	4.09	24.7	3.87	25.1	3.94	26.1
He $_{ser}$	3.4	64.4	3.26	53.6	27.1	768.	17.9	471.
NH-Mi	9.72	38.3	7.5	34.1	10.3	39.	9.27	40.2
Og-Mi $_{ m=1}$	29.	88.5	24.2	73.9	30.4	92.3	30.4	89.4
MR-Mi	19.4	86.4	10.6	42.4	47.1	170.	12.9	52.6
Og-Mi $_{ m=2}$	44.4	148.	24.8	75.3	99.7	310.	29.6	88.9
Og-Mi $_{ m=3}$	39.5	135.	25.4	75.8	88.1	287.	29.2	86.9
He-Mi	59.8	236.	32.8	114.	141.	500.	41.5	140.
CC	29.8	111.	42.7	146.	20.3	113.	52.7	180.

Preglednica 5.10: Celoten čas računskega primera, skupno število iteracij in povprečno število iteracij nakorak

Table 5.10: Total simulation time, total number of iterations and average number of iterations per step

nateg/tlak topologija	Celoten čas računskega primera (s)				Celotno število iteracij				Povprečno št. iteracij/korak			
	$u_{max} = 9$		$u_{max} = -0.9$		$u_{max} = 9$		$u_{max} = -0.9$		$u_{max} = 9$		$u_{max} = -0.9$	
	Q1	H1	Q1	H1	Q1	H1	Q1	H1	Q1	H1	Q1	H1
NH	2.01	5.78	2.11	6.2	170	170	176	178	3.04	3.04	3.14	3.18
Og $_{ m=1}$	4.12	10.6	4.33	10.9	170	170	176	178	3.04	3.04	3.14	3.18
Og $_{ser m=1}$	2.43	9.11	2.56	9.19	170	170	176	178	3.04	3.04	3.14	3.18
MR	2.15	7.39	2.22	8.61	173	173	181	181	3.09	3.09	3.23	3.23
Og $_{ m=2}$	3.94	10.7	4.2	10.9	173	173	181	181	3.09	3.09	3.23	3.23
Og $_{ser m=2}$	3.08	14.5	5.58	20.3	94	108	172	168	2.47	2.45	2.61	2.62
Og $_{ m=3}$	4.19	10.5	4.36	10.9	173	173	176	178	3.09	3.09	3.14	3.18
Og $_{ser m=3}$	4.16	16.	5.83	22.1	115	115	177	179	2.4	2.4	2.49	2.52
He	5.06	16.8	5.51	19.2	181	183	197	200	3.23	3.27	3.52	3.57
He $_{ser}$	29.5	476.	22.4	344.	181	183	197	200	3.23	3.27	3.52	3.57
NH-Mi	15.1	31.7	14.5	35.4	240	241	258	259	4.29	4.3	4.61	4.62
Og-Mi $_{ m=1}$	42.3	72.3	45.4	75.5	240	241	258	259	4.29	4.3	4.61	4.62
MR-Mi	67.7	144.	20.1	45.6	251	264	258	259	4.33	4.71	4.61	4.62
Og-Mi $_{ m=2}$	142.	259.	44.4	75.1	251	263	258	259	4.33	4.7	4.61	4.62
Og-Mi $_{ m=3}$	120.	238.	43.8	73.4	240	261	258	259	4.29	4.66	4.61	4.62
He-Mi	195.	434.	62.6	119.	245	273	263	263	4.38	4.71	4.7	4.7
CC	2430.	3160.	106.	207.	20436	8500	353	356	6.68	6.88	5.43	5.48

posameznih matrik  $M_i$ , da je  $(\sum \xi_k \mathbf{A}^{\eta_k})_{ser}$  počasnejša tudi do 20 krat. Razlog za razliko od primerjave na posameznih matrikah  $M_i$  je v tem, da potrebujemo le prvi odvod simetrične matrike, kar je občutno povečalo učinkovitost vrste. Vendar pa se z oddaljevanjem od konvergenčnega radija ta čas povečuje zaradi večjega števila potrebnih členov razvoja, in je večji od formulacij Og, razen pri  $m = 1$ , tam je zgolj ena potenca  $\alpha = 2a$ . Vendar pa, ko se tenzor  $\hat{C}$  v Gaussovi točki elementa približuje konvergenčnemu



radiju ena s središčem v  $\mathbf{I}$ , zanka potrebuje vedno več členov vrste, da izračuna točen rezultat, dokler ni doseženo maksimalno število členov  $n = 1000$ , kjer vrsta odpove. Posledično se čas sestavljanja povečuje in je do dvakrat večji od formulacij Og, z izjemo  $\text{Og}_{\text{ser}}|_{m=1}$ , kjer je simulacija skonvergirala do konca. Po pričakovanju sta NH model in MR model, ki sta formulirana direktno z invariantami tenzorja  $\widehat{\mathbf{C}}$  brez matričnih funkcij hitrejša od ekvivalentnih Ogdenovih formulacij s potenco matrike in ustreznim številom členov za okoli 20 do 60 %. Če primerjamo Ogdenov model z enim členom  $\text{Og}|_{m=1}$  z Neo-Hookovim je čas sestavljanja  $\text{Og}|_{m=1}$  od 4 (2D tlak) do 2 (3D nateg) krat daljši od NH. Razlike so manjše, če primerjamo modela  $\text{Og}|_{m=2}$  in Mooney-Rivlin, kjer je čas sestavljanja  $\text{Og}|_{m=2}$  od 3 (2D tlak) do 1.5 (3D nateg) krat daljši od MR. Razlike modelov z Misesovim pogojem tečenja so 50 % manjše.

Za razliko od Ogdenovega modela s potenčno vrsto  $\text{Og}_{\text{ser}}$  so elementi s Henckyjevim modelom  $\text{He}_{\text{ser}}$  uspešno izračunali vse računske primere. Učinkovitosti implementacij He in  $\text{He}_{\text{ser}}$  pa se za Henckyjeve modele močno razlikujejo med seboj zaradi drugega odvoda logaritma matrike, ki je zahtevan v formulacijah. Formulacije  $\text{He}_{\text{ser}}$  so počasnejše od He za do 30 krat v nategu in 15 krat v tlaku za 3D primere, za 2D je ta razlika za pol manjša. Čeprav je razvoj logaritma v vrsto  $\log(\mathbf{M})_{\text{ser}}$  konvergenten na vsem definicijskem območju, pa je število potrebnih členov v bližini enotske matrike  $\mathbf{I}$  najmanjše in se večja, ko se od  $\mathbf{I}$  oddaljujemo. Ta trend je razviden v razmerju časov sestavljanja matrik pri izpisu stanja 1 % in 100 % doseženega pomika (preglednica 5.9) in je značilen tudi za potenčne vrste, čeprav pri slednjih zaradi hitrega dosega radija konvergence in posledično odpovedi analize to ni tako očitno, trend pa je razviden v primerjavi učinkovitosti na primeru posameznih matrik (poglavje 5.3).

Čas sestavljanja matrik simulacij z elasto-plastičnim Von-Misesoveim pogojem tečenja modeli so od 5 za H1 topologijo do 10 krat za Q1 topologijo večji. Povečanje časa sestavljanja je za kriterij Cam-Clay okoli 30 %. Uporaba matričnih funkcij za formulacijo potenciala v elasto-plastičnih problemih je tako povzročilo sorazmerno povečanje računskega časa, kot v primerih brez matričnih funkcij. Čas sestavljanja je odvisen tudi od časa računanja notranje iteracijske zanke v vsaki Gaussovi točki. Čas sestavljanja predstavlja za Neo-Hookeve modele okoli 25 do 50 % in za elasto-plastične modele s Henckyjevim potencialom tudi do 98 % časa potrebnega za eno iteracijo.

### Hitrost konvergence

Na učinkovitost formulacij vpliva tudi hitrost konvergence formulacij. Hitrost konvergence je razvidna iz povprečnega števila iteracij na korak za doseg predpisane tolerance, rezultati so dani v preglednici 5.9. Povprečno število iteracij na korak je med 3 in 7. Hiperelastični modeli v povprečju potrebujejo okoli 3 iteracije na korak, elasto-plastični modeli z Misesovim kriterijom ( $\square$ -Mi) pa okoli 4.3 za uspešno konvergenco. Cam-Clay modeli (CC) potrebujejo od 5.5 do 6.5 iteracij. Pri koncu analize je v splošnem potrebnih več iteracij kot na začetku analize. V vseh primerih so formulacije z zaključenimi oblikami matričnih funkcij primerljive s formulacijami matričnih funkcij z razvojem v vrsto. Enako velja za direktne formulacije NH in MR in pripadajoče  $\text{Og}|_{m=1}$  in  $\text{Og}|_{m=2}$  modele.

Preglednica 5.11: Norma prirastkov pomikov tipičnega časovnega koraka za  $\text{Og}_{\square}|_{m=1}$

Table 5.11: Norm of increments of displacements for typical time step of  $\text{Og}_{\square}|_{m=1}$

It.	NH	$\text{Og} _{m=1}$	$\text{Og}_{\text{ser}} _{m=1}$
1	0.0031	0.0031	0.0031
2	0.0000739	0.0000739	0.0000739
3	$1.68 \times 10^{-8}$	$1.68 \times 10^{-8}$	$1.68 \times 10^{-8}$
4	$8.77 \times 10^{-16}$	$8.77 \times 10^{-16}$	$8.77 \times 10^{-16}$

Ker sta  $\mathbf{R}$  in  $\mathbf{K}$  konsistentno linearizirani matriki določeni z natančnostjo računalnika lahko pričakujemo

Preglednica 5.12: Norma prirastkov pomikov tipičnega časovnega koraka za  $Og_{\square}|m = 2$   
 Table 5.12: Norm of increments of displacements for typical time step of  $Og_{\square}|m = 2$

It.	MR	$Og_{\square} m=2$	$Og_{ser} m=2$
1	0.0031	0.0031	0.0031
2	0.0000498	0.0000498	0.0000498
3	$1.03 \times 10^{-8}$	$1.03 \times 10^{-8}$	$1.03 \times 10^{-8}$
4	$4.39 \times 10^{-16}$	$4.36 \times 10^{-16}$	$4.4 \times 10^{-16}$

Preglednica 5.13: Norma prirastkov pomikov tipičnega časovnega koraka za  $Og_{\square}|m = 3$   
 Table 5.13: Norm of increments of displacements for typical time step of  $Og_{\square}|m = 3$

It.	$Og_{\square} m=3$	$Og_{ser} m=3$
1	0.0031	0.0031
2	0.0000624	0.0000624
3	$1.42 \times 10^{-8}$	$1.42 \times 10^{-8}$
4	$7.52 \times 10^{-16}$	$7.5 \times 10^{-16}$

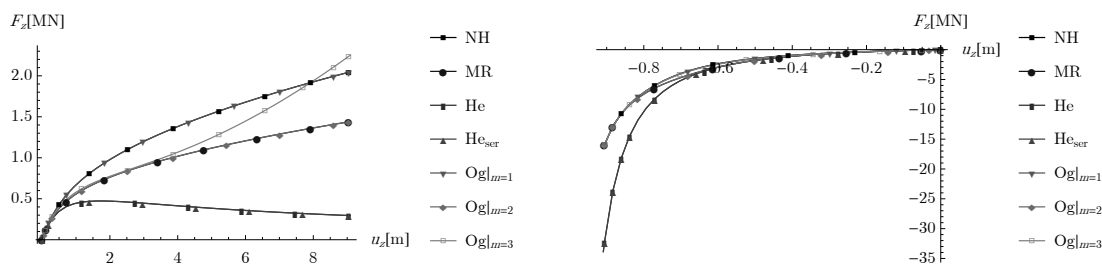
Preglednica 5.14: Norma prirastkov pomikov tipičnega časovnega koraka za modele  $He_{\square}$   
 Table 5.14: Norm of increments of displacements for typical time step of models  $He_{\square}$

It.	He	$He_{ser}$
1	0.0031	0.0031
2	0.0000723	0.0000723
3	$1.55 \times 10^{-7}$	$1.55 \times 10^{-7}$
4	$7.1 \times 10^{-13}$	$7.1 \times 10^{-13}$
5	$2.59 \times 10^{-18}$	$3.73 \times 10^{-18}$

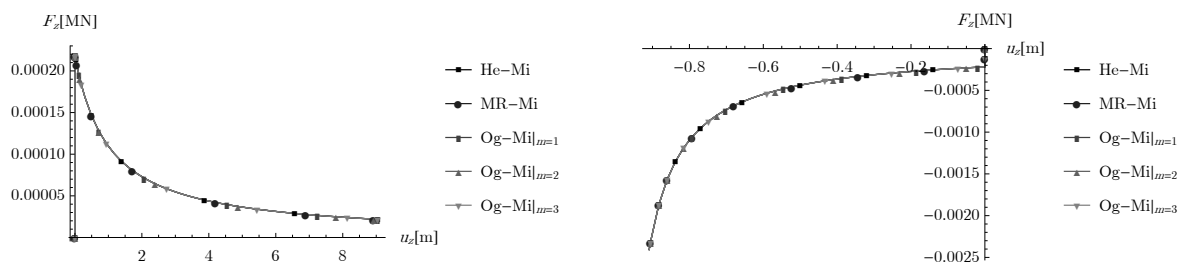
Preglednica 5.15: Norma prirastkov pomikov za vse elasto-plastične modele  $\square$ -Mi in CC  
 Table 5.15: Norm of increments of displacements for all elasto-plastic models  $\square$ -Mi & CC

It.	He-Mi	$Og\text{-Mi} m=1$	$Og\text{-Mi} m=2$	$Og\text{-Mi} m=3$	CC
1	0.0031	0.0031	0.0031	0.0031	0.031
2	0.000997	0.001	0.001	0.001	0.00113
3	$2.87 \times 10^{-6}$	$9.55 \times 10^{-7}$	$9.55 \times 10^{-7}$	$9.55 \times 10^{-7}$	0.000109
4	$2.36 \times 10^{-11}$	$8.73 \times 10^{-13}$	$4.59 \times 10^{-12}$	$1.44 \times 10^{-12}$	$1.12 \times 10^{-6}$
5	$1.22 \times 10^{-15}$	$2.26 \times 10^{-16}$	$4.1 \times 10^{-16}$	$2.96 \times 10^{-16}$	$1.16 \times 10^{-10}$
6					$1.66 \times 10^{-17}$

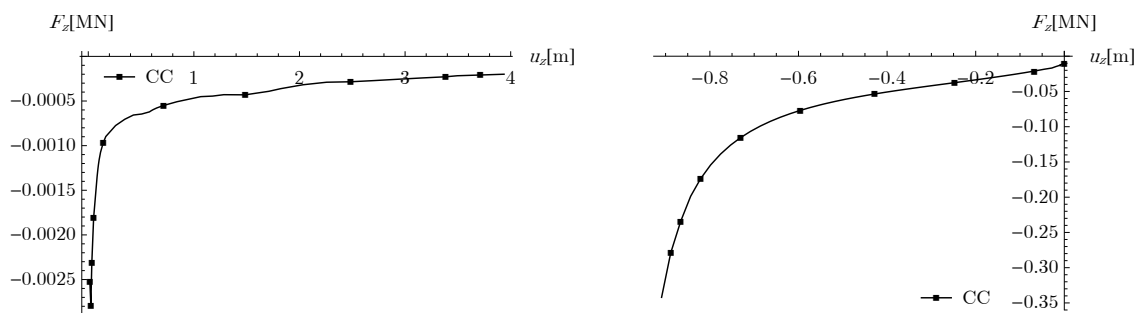
kvadratično konvergenco Newton-Raphsonove iteracijske procedure. Hkrati morajo vse ekvivalentne formulacije v enakem številu iteracij priti do identičnega rezultata. V preglednicah 5.11 do 5.15 so prikazane Evklidove norme prirastkov k globalnim prostostnim stopnjam tipičnega uspešnega časovnega koraka Newton-Raphsonove iteracije. Vrednosti izpisane v preglednicah so dane pri doseženem  $\lambda = 0.02$  s prejšnjim obtežnim korakom  $\Delta\lambda = 0.01$ . Prikaz pri tem pomiku je bil izbran, ker formulacije z razvojem matrične funkcije v potenčno vrsto ne dosežejo večjih pomikov (glej prejšnje poglavje 5.5.3). Iz preglednic 5.11 do 5.15 je razvidno, da je kvadratična konvergenca dosežena pri vseh končnih elementih. Enakost norm prirastkov je hkrati pokazatelj, da se rezultati vseh alternativnih formulacij ujemajo vsaj do predpisanega  $\varepsilon_{NR}$  natančno.



Slika 5.31: Pomik - sila diagram končnih elementov NH, MR, He in  $Og|m=3$   
 Figure 5.31: Displacement - force graph of elements NH, MR, He and  $Og|m=3$



Slika 5.32: Pomik - sila diagram elementov s Von-Misesovim kriterijem tečenja  $\square$ -Mi  
 Figure 5.32: Displacement - force graph of elements with Von-Mises yield criterion  $\square$ -Mi



Slika 5.33: Pomik - sila diagram elementov s kriterijem tečenja Cam-Clay  $\square$ -CC  
 Figure 5.33: Displacement - force graph of elements with Cam-Clay yield criterion  $\square$ -CC

### Grafi rezultatov

Na slikah od 5.31 do 5.33 so prikazani grafi pomik-sila v smeri nanesenega pomika. Prikazani rezultati so rezultati 3D končnih elementov na primeru tlaka in natega. Rezultati osno-simetričnih 2D primerov so enaki rezultatom 3D primerov, zato ti niso podani. Opazimo lahko, da se grafi različnih materialnih modelov dobro ujemajo do pomika  $\pm 0.1$ , kar ustreza raztezku 1.1 in 0.9, različni modeli nato začnejo razlikovati med seboj. To je skladno s trditvijo, da se mora odziv vseh modelov ujemati z linearnem Hookovemu modelu pri majhnih deformacijah in pomikih (poglavje 3.5.3). Rezultati Ogdenovih modelov (Og in Og-Mi) se pri enem  $m = 1$  in dvema  $m = 2$  členoma ujemajo z ekvivalentnimi direktnimi formulacijami z rezultati elementov NH in MR ter NH-Mi in MR-Mi, z razlikami velikostnega reda natančnosti računalnika, kar je razvidno tudi iz preglednic z Numerično učinkovitostjo v prejšnjem poglavju.

V prispevku (Hudobivnik in Korelc, 2016) smo prikazali še primerjavo eksponenta matrike z implicitno Eulerjevo metodo 4.100. Ta je pokazala, da je slednji hitrejši od formulacije z eksponentom od 20 % za von Misesov model do 5 % za model Cam-Clay, hkrati smo pokazali, da enačba 4.100 ne ohranja volumna plastičnih deformacij (Hudobivnik in Korelc, 2016).

“Ta stran je namenoma prazna.”

## 6 RAČUNSKI PRIMERI RAZLIČNIH TERMO-HIDRO-MEHANSKIH POVEZANIH PROBLEMOV

V tem poglavju bodo primerjane različne implementacije končnih elementov (poglavje 2.2.4) na različnih smiselnih kombinacijah povezanih problemov iz preglednice 4.3, pri različnih nivojih nelinearnosti mehanskega problema, kot je prikazano v preglednici (6.1).

Preglednica 6.1: Konstitutivni materialni modeli, obravnavani v računskih primerih

Table 6.1: Constitutive material models considered in simulations

okrajšava	tip	el. def. energija	št. enačbe	funkcija tečenja
LE	linearno-elastičen	$W_{\text{Hooke}}$	(3.169)	-
HY	hiperelastičen	$W_{\text{NeoHooke}}$	(3.178)	-
LP	elasto-plastičen + majhne def.	$W_{\text{Hooke}}$	(3.169)	$\mathcal{F}_{\text{Mises}}$ (4.103)
JC	elasto-plastičen + velike def.	$W_{\text{NeoHooke}}$	(3.178)	$\mathcal{F}_{\text{Mises}}$ (4.103)

Primerjane bodo ločene (**B** in **C**) in enovite implementacije (**A.1**, **A.2**). Pokazali bomo da vse implementacije, ki vrnejo polno tangentno matriko končnega elementa (te so **A.1**, **A.2** in **B**) vrnejo enake rezultate, saj v vseh treh primerih enovito rešujemo poln sistem enačb celotnega problema, razlike med implementacijami pa se bodo pojavile pri učinkovitosti ločene implementacije **B**, na račun izpeljave kode v ločenih končnih elementih. Prav tako bo pokazano, da je razlika med učinkovitostjo enovitih implementacij **A.1** in **A.2** po pričakovanju zanemarljiva, saj je razlika med njima zgolj organizacija vozlišč in vrstni red prostostnih stopenj. Enačbe povezanih problemov bodo rešene z enovitim pristopom z reševanjem polnega sistema enačb, kot je opisano v poglavju 2.1, 2.2.5 in 4.2, z uporabo Newton-Raphsonove iteracijske procedure in adaptivnimi časovnimi koraki (slika 2.1 algoritem za en korak in slika 2.8 algoritem za globalni korak sekvenčne sheme).

Poleg tega pa bo na primeru sekvenčnega reševanja (poglavje 2.2.5) izbranih povezanih problemov prikazana implementacija **C**, kjer rešujemo  $n_K$  sistemov enačb, kjer so neznanke vsakega sistema  $\mathbf{p}^{(K)}$ . V primeru močno nelinearnih problemov rezultati sekvenčnega pristopa lahko zelo počasi konvergirajo. Pri linearnem odzivu potrebuje sekvenčni pristop več korakov za globalno konvergenco rezultatov, medtem ko monolitni pristopi v primeru linearnih problemov potrebujejo le eno iteracijo na korak.

### 6.1 Študija učinkovitosti različnih nivojev povezanosti ločene in enovite implementacije končnih elementov

V tem poglavju sta na različnih kombinacijah termalnega, hidravličnega in mehanskega problema primerjani enovita implementacija **A.1** (v tem poglavju ozančena **A**) in ločena implementacija **B** (poglavje 2.2.4). Obe implementaciji vrneti enaki, le različno organizirani, globalni tangentni matriki in reziduala posameznega problema, zato nas zanima predvsem primerjava učinkovitosti ločene implementacije z ločenimi končnimi elementi za vsako skupino polj in enovite formulacije z enim elementom za cel problem. Implementaciji sta primerjani na različnih mehanskih konstitutivnih modelih z različnimi nivoji nelinearnosti, ki so dani v preglednici 6.1, hkrati se primerjane tudi štiri različne kombinacije povezanosti, od nepovezanega mehanskega problema do termo-hidro-mehanskega problema zasičenega z eno tekočino in na primeru dvodimenzionalne in trodimenzionalne topologije.

### 6.1.1 Končni elementi

Kombinacije in enačbe, ki bodo implementirane v kodo končnih elementov, so dane v preglednici 6.2. Pri tem so posamezni povezani členi v psevdo-potencialih, ki so ničelni, izvzeti iz formulacije končnega elementa za optimalno primerjavo implementacij. Na splošno pa bi lahko za ločeno implementacijo **B** izpeljali elemente za polno povezan problem, saj povezani deli nedefiniranih polj vrnejo rezultat 0. Uporabljene bodo enačbe zasičenega medija s poenostavljenimi enačbami za konstantno zasičenostjo  $S_l = 1$  in konstantnim pritiskom plina  $p_g = 0$ , ter ostalimi poenostavitvami, danimi za vsako kombinacijo v preglednici 6.2. Pri tem je potrebno poudariti, da se pri modelih v kombinaciji z Neo-Hookovim potencialom, gradienti količin v enačbah toplote in toka tekočine izračuna na trenutni konfiguraciji (4.26), v kombinaciji z Hookovimi modeli pa na začetni konfiguraciji (4.24), saj upoštevamo teorijo majhnih deformacij.

Preglednica 6.2: Povzetek psevdo potencialov za primer 1  
Table 6.2: The summary of pseudo-potentials for example 1

problem	oznaka polja	št. enačbe	Nivo povezanosti			
			<b>M</b>	<b>MT</b>	<b>MH</b>	<b>THM</b>
Mehansko delo	<b>M</b>	Pregl. 6.1	$P \leftarrow 0$ $U_T \leftarrow 0$	$P \leftarrow 0$	$U_T \leftarrow 0$	✓
Toplotni tok	<b>T</b>	(3.184)	×	$\mathbf{q}_{lg} \leftarrow \mathbf{0}$	×	✓
Tok tekočine	<b>H</b>	(3.188)	×	×	$\dot{T} \leftarrow 0$	✓

Vsaka množica enačb bo implementiran za 2D domeno s štirikotnim končnim elementom (oznaka: Q1) in za 3D domeno s heksahedričnim končnim elementom (oznaka: H1), oba z linearno interpolacijo količin. Za vsak nivo nelinearnosti mehanskega dela, nivo povezanosti fizikalnih problemov in topologijo ter način implementacije je potrebno izpeljati enoličen nabor končnih elementov. Za enovito implementacijo **A** je potreben en element za vsak nivo povezanosti, konstitutivni model in topologijo. Primer 2D Termo-mehanskega problema za - **MT** z Neo-Hookovim modelom je prikazan v izseku kode *AceGen* na sliki 4.26 za enovito implementacijo. Za ločeno implementacijo **B** je potrebno izpeljati mehanski element za vsak nivo povezanosti, konstitutivni model in topologijo, medtem ko je za tekočinski in toplotni problem potrebno izpeljati en element za referenčno in en za trenutno konfiguracijo za vsak nivo povezanosti in topologijo, t.j. skupaj osem za toplotno in osem za tekočinsko polje. Podatki vseh potrebnih kod elementov so zbrani v preglednici 6.3.

Skupna velikost izvorne C kode in število enačb končnih elementov formulacije **B** je večja od formulacij **A**. To je bilo pričakovano, saj je v primeru implementacije po poljih **B** potrebno nekatere količine poračunati v vsakem elementu, predvsem interpolacijo, kinematiko v primeru prostorskih gradientov, nekatere konstitutivne zakone, temperaturno odvisne materialne parametre i.p.d.. Delež teh enačb je v elastičnih modelih okoli 20 % na dodaten element, za LP je delež 10 %, in zaJC 5 % na element. Iz preglednice 6.3 je razvidno, da se pri večji nelinearnosti in kompleksnejši topologiji razlika med **A** in **B** manjša, nasprotno pa je večanje razlike med **A** in **B** je moč opaziti z večanjem števila fizikalnih polj, na račun ponavljanja skupnih delov enačb.

### 6.1.2 Opis računskih primerov

Opisane implementacije in kombinacije so analizirane na naslednjih primerih. Testni primer je kvader dimenzije  $2m \times 3m \times 2m$ . 2D model kvadra ima dimenzijo  $2m \times 2m$  z debelino  $3m$ , dikretizirano z

Preglednica 6.3: Skupna velikost izvorne kode [kB] in števila enačb  
Table 6.3: Comparison of source code size [kB] and No. of equation

Pristop	A				B		
	M	TM	HM	THM	TM (2 el.)	HM (2 el.)	THM (3 el.)
Skupna velikost izvorne kode [kB]							
LE <sub>Q1</sub>	6.31	9.87	10.7	17.3	11.5	13.1	25.
HY <sub>Q1</sub>	8.55	13.4	15.1	22.5	16.2	17.8	32.4
LP <sub>Q1</sub>	14.6	19.7	19.7	27.7	21.5	22.3	35.4
JC <sub>Q1</sub>	53.4	69.	61.9	79.8	71.9	65.	90.7
LE <sub>H1</sub>	19.6	26.5	28.9	39.8	29.5	34.2	52.3
HY <sub>H1</sub>	25.3	35.4	47.5	60.6	42.1	54.6	80.6
LP <sub>H1</sub>	33.5	42.4	43.6	56.8	46.7	48.7	68.9
JC <sub>H1</sub>	110.	128.	137.	154.	136.	144.	178.
Število enačb znotraj kode elementov							
LE <sub>Q1</sub>	158	221	246	387	297	340	681
HY <sub>Q1</sub>	207	310	349	516	406	450	857
LP <sub>Q1</sub>	392	508	488	681	589	590	981
JC <sub>Q1</sub>	1226	1531	1394	1753	1630	1509	2127
LE <sub>H1</sub>	397	478	521	681	666	758	1253
HY <sub>H1</sub>	485	625	894	1085	876	1165	1796
LP <sub>H1</sub>	779	896	892	1109	1098	1138	1707
JC <sub>H1</sub>	2077	2395	2559	2848	2631	2815	3583

mrežo  $80 \times 40 = 3200$  topoloških končnih elementov, za implementacijo **B** je število vseh elementov  $n_K$  krat večje kot za enovito implementacijo, kjer je  $n_K = 2$  ali  $n_K = 2$ , odvisno od števila polj. 3D model je diskretiziran z  $16 \times 8 \times 16 = 2048$  topološkimi končnimi elementi. Za tekočino je izbrana voda, in ustrezno so uporabljeni standardni materialni podatki za vodo, za mehanski del so izbrani realni parametri. Uporabljene materialne karakteristike so dane v preglednici 6.4. Uporabljene bodo naslednje kombinacije povezanih problemov:

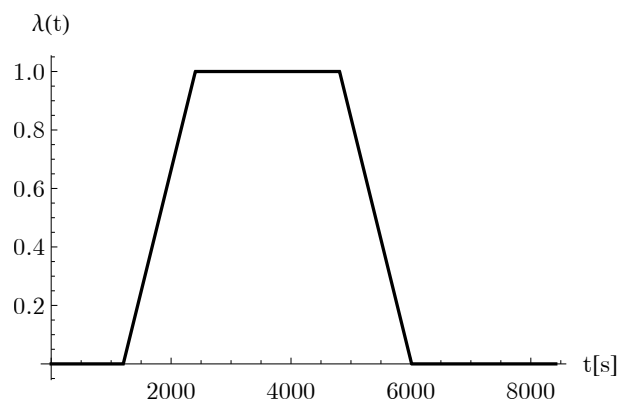
**M:** Prva kombinacija je nepovezan mehanski problem. Dirichletov robni pogoj, pomik  $\bar{u}_Z = -0.5m$ , je predpisan na zgornjo ploskev kocke, ta potek nanašanja vodi množitelj  $\lambda(t)$ , ki je funkcija časa  $t$ . Do časa  $t_c/2$  je  $\lambda = 0$ , nato se v času  $t_c/2$  poveča na  $\lambda = 1$ , po preteku  $t_c$  se  $\lambda$  zmanjša v času  $t_c/2$  na 0, nato se po  $t_c$  računski primer ustavi.  $t_c$  je ocenjen iz koeficienta konsolidacije tega primera, in predstavlja čas do umiritve pritiskov in je za ta primer izbran  $t_c = 2400$  s, glej sliko 6.1. Stranica  $X = 0$  ima preprečen pomik  $\bar{u}_X = 0$ . Na spodnji stranici so navpični pomiki preprečeni  $\bar{u}_Z = 0$ . V primeru plastifikacije do te pride sočasno v vseh elementih. Izbrano je ravninsko deformacijsko stanje za 2D in 3D primer, zato so v slednjem  $\bar{u}_Y = 0$  (slika 6.2a).

**MT:** V tem primeru rešujemo termo-mehanski problem z dvema poljema. Na konfiguracijo modela **M** je, poleg robnih pogojev za mehanski odziv, na zgornji stranici podan vir toplote  $q_T = 500 \frac{W}{m^2}$  kot naravni (Neumannov) robni pogoj voden z  $\lambda(t)$ , ki je enak kot v modelu **M**. Na spodnji  $Z = 0$  in desni stranici  $X = 2$  m je predpisana temperatura  $\bar{T} = 0$  (sliki 6.2a in b).

**MH:** V tem primeru rešujemo hidro-mehanski problem z dvema poljema. Na konfiguracijo modela **M** je, poleg robnih pogojev za mehanski odziv na zgornji  $Z = 2$  m in desni stranici  $X = 2$  m, predpisan konstanten pritisk  $\bar{p}_l = 0$ . Dodano polje pritiskov povzroči porazdelitev zunanje obtežbe na trdno in tekočo fazo. Ker je vsiljen pomik, se pričakuje porast pornih pritiskov, in

Preglednica 6.4: Materialni karakteristike termo-hidro-mehanskega povezanega problema  
Table 6.4: Material parameters of thermo-hydro-mechanical coupled problem

Parameter	Oznaka	Vrednost	Enota
Elastični modul	$E$	$1 \times 10^7$	Pa
Poissnov količnik	$\nu$	0.25	
Debelina	$t$	3	m
Gostota trdnine	$\rho$	7500	$\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$
Poroznost	$n$	0.5	
Biotov koeficient	$\alpha_b$	1	
Sila na enoto mase, smer Z	$b_z$	-9.81	$\frac{\text{m}}{\text{s}^2}$
Notranja prepustnost trdnine	$k_s$	$1. \times 10^{-12}$	$\text{m}^2$
Lastnosti plastičnega tečenja			
Začetna napetost tečenja	$\sigma_{y0}$	$2 \times 10^5$	Pa
Zaostala napetost tečenja	$\sigma_{y\infty}$	$5 \times 10^5$	Pa
Koeficient utrjevanja	$K_h$	$2 \times 10^6$	Pa
Plastični eksponent zasičenosti	$\delta$	1	
Mehčanje napetosti tečenja	$\omega_0$	0.0003	$\frac{1}{\text{K}}$
Mehčanje utrjevanja	$\omega_K$	0	$\frac{1}{\text{K}}$
Faktor disipacije toplote	$\chi$	0.9	
Toplotne lastnosti medija			
Koeficient toplotnega raztezka	$\alpha_T$	0.000012	$\frac{1}{\text{K}}$
Toplotna prevodnost	$k_T$	41.7	$\frac{\text{W}}{\text{K m}}$
Notranji vir toplote	$Q$	0	$\frac{\text{W}}{\text{m}^3}$
Specifična toplota trdnine	$c_p$	461	$\frac{\text{J}}{\text{K kg}}$
Lastnosti vode			
Gostota tekočine	$\rho_l$	1000	$\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$
Togostni modul tekočine	$\kappa_l$	$2.2 \times 10^9$	Pa
Koeficient toplotnega raztezka tekočine	$\alpha_T^l$	0.000069	$\frac{1}{\text{K}}$
Toplotna prevodnost tekočine	$k_T^l$	0.6	$\frac{\text{W}}{\text{K m}}$
Viskoznost tekočine	$\mu_l$	0.001	Pa·s
Specifična toplota tekočine	$c_p^l$	4140	$\frac{\text{J}}{\text{K kg}}$

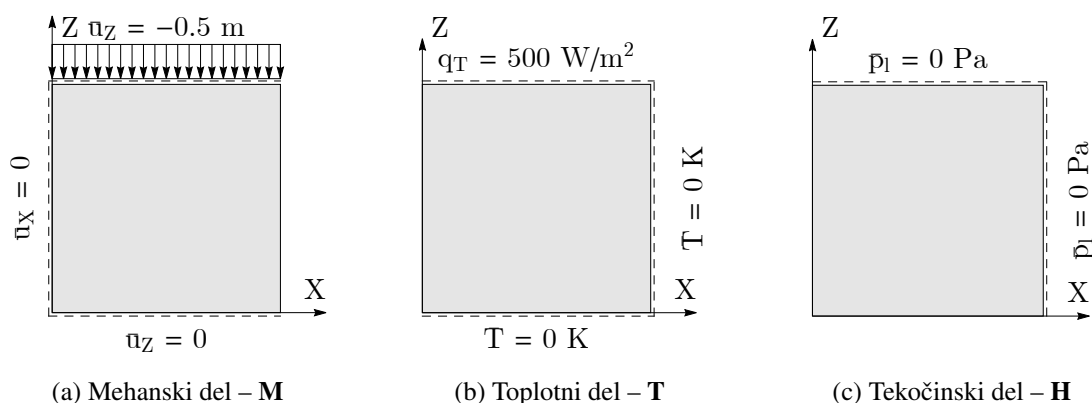


Slika 6.1: Funkcija množitelja  $\lambda(t)$  po času  $t$   
Figure 6.1: Function of multiplier  $\lambda(t)$  in time  $t$

njihova umiritev ko je vsiljevanje pomikov ustavljeno (slika 6.2a in c).



**THM:** Zadnji obravnavan primer združuje konfiguracije vseh treh zgornjih primerov (slika 6.2a, b in c).



Slika 6.2: Robni pogoji posameznega podproblema **THM**  
 Figure 6.2: Boundary conditions of each subproblem of **THM** problem

Vseh različnih primerov skupaj je 32 (2 topologiji, 4 konstitutivni modeli in 4 nivoji povezanosti), če upoštevamo še reševanje z dvema različnima implementacijama elementov, je to skupaj 56 različnih računskih primerov (elementi za primer **M** so enaki za obe implementaciji). Vsi računski primeri so bili pognani na osebni računalnik s procesno enoto *Intel i7-2700K* 3.50GHz z operacijskim sistemom *Microsoft Windows 7 64bit* in 16GB DDR III pomnilnika. Za prevedbo kode v C jezik je bil uporabljen *MinGW 5.1.3* (angl. Minimalist GNU for Windows) prevajalec. Pri izračunu je bila zaradi objektivnosti uporabljena ena procesorska nit.

### 6.1.3 Primerjava rezultatov

Vseh 56 računskih primerov je bilo pognanih z uporabo programskega orodja *AceFEM* (Korelc, 2011) v okolju *Mathematica*. Računski primeri so bili pognani s proceduro, ki adaptivno izbira naslednji časovni korak, velikost časovnih korakov se pri uspešni konvergenci povečuje, pri neuspešnih pa zmanjšuje (algoritem na sliki 2.1). V vseh primerih je bilo število korakov 133, kar pomeni, da so vsi uspešno skonvergirali do predpisane tolerance v vsakem časovnem koraku. Enačbe so bile rešene enovito za celoten povezan problem hkrati z uporabo Newton-Rhapsonove iteracijske procedure. Rezultati obeh načinov implementacij so enaki, saj rešujemo identične sisteme enačb, bolj relevantna pa je primerjava učinkovitosti implementacij. Rezultati obeh implementacij se ujemajo vsaj do predpisane tolerance natančno. Predvsem nas zanima velikost kode in učinkovitost ločene implementacije **B** v primerjavi z enovito **A**. Učinkovitost implementacij je odvisna predvsem od hitrosti konvergence in časa sestavljanja lokalnih matrik **K** končnih elementov **R**. Rezultati hitrosti konvergence so dani v preglednici 6.5, v tem primeru je hitrost konvergence enaka za obe implementaciji, saj gre za enak primer, in je zato relevanten čas sestavljanja matrik. Primera z enim poljem in linearnim materialom **M-LE<sub>Q1</sub>** in **M-LE<sub>H1</sub>** dosežeta predpisano toleranco v prvi iteraciji, saj je problem linearen, z večanjem kompleksnosti modela in števila polj, nelinearnost narašča, najbolj nelinearna modela sta elasto-plastična modela velikih deformacij s tremi polji **THM-JP<sub>Q1</sub>** in **THM-JP<sub>H1</sub>**. Oba potrebujeta okoli 4.2 iteracij za doseg konvergence rezultatov.

Časa sestavljanja lokalnih matrik **K** končnih elementov **R** je dan v preglednici 6.7, direktna primerjava med implementacijama **A** in **B** pa je dana v preglednici 6.6. Iz preglednic je razvidno, da je čas sestavljanja matrik primera **B-THM-JC<sub>H1</sub>** za nekaj procentov daljši od primera **B-THM-JC<sub>H1</sub>**, v nekaterih

Preglednica 6.5: Primerjava hitrosti konvergence in celotnih časov računskih primerov  
Table 6.5: Comparison of convergence speed and total simulation times

Pristop Primer	<b>A.1</b>				<b>B</b>		
	<b>M</b>	<b>TM</b>	<b>HM</b>	<b>THM</b>	<b>TM</b>	<b>HM</b>	<b>THM</b>
Število iteracij na korak							
LE <sub>Q1</sub>	2.	2.61	2.48	2.86	2.61	2.48	2.79
HY <sub>Q1</sub>	2.46	2.62	3.05	3.2	2.74	3.05	3.14
LP <sub>Q1</sub>	3.53	3.66	3.95	4.28	3.92	3.95	4.14
JC <sub>Q1</sub>	3.63	3.68	4.16	4.35	3.95	4.16	4.26
LE <sub>H1</sub>	2.	2.61	2.45	2.82	2.61	2.45	2.76
HY <sub>H1</sub>	2.44	2.62	3.03	3.16	2.72	3.03	3.11
LP <sub>H1</sub>	3.51	3.66	3.91	4.2	3.89	3.91	4.06
JC <sub>H1</sub>	3.62	3.67	4.1	4.28	3.93	4.1	4.2
Skupen čas reševanja problema (s)							
LE <sub>Q1</sub>	9.64	19.3	18.2	36.7	24.5	26.1	49.2
HY <sub>Q1</sub>	11.6	22.6	25.2	46.2	29.3	31.7	60.1
LP <sub>Q1</sub>	15.	26.5	26.9	51.9	32.8	36.4	64.8
JC <sub>Q1</sub>	22.5	41.7	41.5	74.8	52.8	46.6	86.9
LE <sub>H1</sub>	39.8	101.	94.	209.	109.	125.	217.
HY <sub>H1</sub>	55.7	121.	162.	305.	132.	159.	294.
LP <sub>H1</sub>	60.5	122.	128.	271.	142.	171.	266.
JC <sub>H1</sub>	99.8	188.	235.	405.	215.	230.	406.

Preglednica 6.6: Primerjava normiranih povprečnih časov za iteracijo,  $t_n = t_{KR,B}/t_{KR,A}$   
Table 6.6: Comparison of normalised average iteration time,  $t_n = t_{KR,B}/t_{KR,A}$

	LE <sub>Q1</sub>	HY <sub>Q1</sub>	LP <sub>Q1</sub>	JC <sub>Q1</sub>	LE <sub>H1</sub>	HY <sub>H1</sub>	LP <sub>H1</sub>	JC <sub>H1</sub>
<b>TM</b>	1.49	1.29	1.16	1.17	1.22	1.03	1.15	1.05
<b>HM</b>	1.98	1.31	1.47	1.07	2.36	0.931	1.95	0.952
<b>THM</b>	1.5	1.39	1.29	1.13	1.17	0.904	1.03	1.02

primerih HY<sub>H1</sub> in HM-JC<sub>H1</sub> pa je sestavljanje celo hitrejše za implementacijo **B**. Največje razlike so v splošnem pri modelih za majhnih deformacijah in 2D topologijo. Za MH primere, je implementacija **B** tudi dvakrat počasnejša. Ker gre za avtomatsko generacijo in optimizacijo kode, ki jo izvede orodje *AceGen*, nad samo velikostjo časa nimamo neposrednega vpliva. Čas sestavljanja posameznih elementov je majhen, reda velikosti  $\mu\text{s}$ , kar pomeni, da se pri drugačnem poteku optimizacije, učinkovitost elementa lahko spremeni za nekaj 10 %, lahko tudi za nekaj 100 %, če so enačbe v elementu formulirane neugodno.

Tangentna matrika  $\mathbf{K}_e^{(K)}$  in rezidual  $\mathbf{R}_e^{(K)}$  posameznih elementov imajo različne dimenzije, vendar sta globalni matriki po sestavljanju lokalnih matrik identični, prav tako je čas reševanja sistema enačb enak. Časi reševanja so dani v preglednici 6.7. Razlike v času reševanja so med **A** in **B** minimalne, med modeli pa se pojavljajo razlike zaradi različnega števila enačb med nivoji povezanosti in topologijo. Čeprav je število enačb podobno za 2D in 3D modele, je razlika med časom reševanja sistema velika, kar gre pripisati strukturi tangentne matrike, saj je ta bolj polna za 3D primer.

Iz rezultatov lahko ugotovimo, da je formulacija pristopa po poljih **B** primeren za reševanje močno povezanih problemov, saj je učinkovitost primerljiva z učinkovitostjo implementacije **A**, za hiperelastične modele, v nekaterih primerih celo boljša. Največja razlika v učinkovitosti se pokaže pri problemih z linearno-elastičnim odzivom, saj je delež kode za diskretizacijo končnega elementa, ki se ponovi v vsakem elementu, lahko relativno velik.

Preglednica 6.7: Primerjava normiranih povprečnih časov na iteracijo, reševanje sistema in sestavljanja matrik elementa

Table 6.7: Comparison of normalised average iteration, solver and element assembly times

Pristop Primer	A.1				B		
	M	TM	HM	THM	TM	HM	THM
Normiran čas na iteracijo, $t_{It} = 0.0322$ s							
LE <sub>Q1</sub>	1.13	1.74	1.71	3.	2.2	2.45	4.13
HY <sub>Q1</sub>	1.1	2.02	1.93	3.35	2.5	2.43	4.47
LP <sub>Q1</sub>	1.	1.7	1.59	2.83	1.97	2.15	3.66
JC <sub>Q1</sub>	1.45	2.66	2.33	4.01	3.11	2.62	4.75
LE <sub>H1</sub>	4.69	9.07	8.94	17.3	9.84	11.9	18.5
HY <sub>H1</sub>	5.31	10.9	12.5	22.5	11.3	12.2	22.1
LP <sub>H1</sub>	4.07	7.86	7.7	15.1	8.57	10.3	15.4
JC <sub>H1</sub>	6.43	12.	13.4	22.1	12.8	13.1	22.6
Normiran čas reševanja sistema, $t_{Sol} = 0.00959$ s							
LE <sub>Q1</sub>	1.4	3.25	3.17	5.42	3.17	3.26	5.37
HY <sub>Q1</sub>	1.4	3.27	3.17	5.45	3.14	3.2	5.42
LP <sub>Q1</sub>	1.01	2.38	2.36	4.16	2.36	2.45	4.11
JC <sub>Q1</sub>	1.	2.36	2.4	4.15	2.36	2.44	4.17
LE <sub>H1</sub>	10.9	22.1	22.	42.3	22.4	22.3	41.9
HY <sub>H1</sub>	11.	22.3	22.2	42.3	22.4	21.8	41.9
LP <sub>H1</sub>	7.85	16.2	16.4	32.3	16.6	16.5	31.6
JC <sub>H1</sub>	7.93	16.	16.7	32.5	16.6	16.5	31.9
Normiran čas sestavljanja matrike elementa, $t_{KR} = 2.7810^{-6}$ s							
LE <sub>Q1</sub>	1.	1.43	1.39	3.69	2.14	2.76	5.52
HY <sub>Q1</sub>	1.18	2.46	2.42	5.13	3.17	3.16	7.13
LP <sub>Q1</sub>	1.53	2.56	2.28	4.87	2.97	3.35	6.31
JC <sub>Q1</sub>	3.23	6.02	4.87	9.07	7.03	5.2	10.3
LE <sub>H1</sub>	5.16	10.8	10.4	22.8	13.2	24.6	26.6
HY <sub>H1</sub>	9.07	21.	30.2	52.3	21.5	28.1	47.3
LP <sub>H1</sub>	7.92	15.1	13.7	28.	17.3	26.8	28.8
JC <sub>H1</sub>	21.1	38.7	45.2	67.4	40.5	43.	68.5

## 6.2 Študija učinkovitosti ločenih in enovitih implementacij končnih elementov na primeru enovitega in ločenega reševanja

V tem poglavju bodo na različnih kombinacijah končnih elementov primerjane vse predstavljene ločene in enovite implementacije (poglavje 2.2) **A.1**, **A.2**, **B** in **C**, ki bodo uporabljene za monolitno in sekvencno reševanje povezanih problemov. Rezultati bodo primerjani na različnih mehanskih konstitutivnih modelih, ki so dani v preglednici 6.1 in različnimi nivoji povezanosti.

### 6.2.1 Končni elementi

Kombinacije in enačbe, ki bodo implementirane v kodo končnih elementov, so dane v preglednici 6.8. Enačbe in predpostavke kombinacije **THM** so enake kot za prejšnji primer preglednica 6.2 v poglavju 6.1.1, s to razliko da smo zanemarili toploto zaradi mehanskega gretja, kar pa na rezultat ni bistveno vplivalo, saj so razmerja podobna kot v prejšnjem poglavju 6.1. Dodana je kombinacija **THGM** z dodatnim plinskim poljem **G**. Posledično je potrebno uporabiti druge elemente (glej preglednico 6.8), ki vsebujejo plinske enačbe faznega prehoda in upoštevati sorbcijsko krivuljo.

Vsae enačbe problema so implementiran v 2D domeni s štirikotnim končnim elementom z linearno in-

Preglednica 6.8: Povzetek šibkih oblik za primer 2  
Table 6.8: The summary of weak forms for example 2

polje	oznaka polja	Nivo povezanosti	
		<b>THM</b>	<b>THGM</b>
Mehansko delo	M	Pregl. 6.1 <sub> <math>S_l=1, p_g=0</math></sub>	Pregl. 6.1
Toplotni tok	T	(3.184)	(3.187)
Tok tekočine	H	(3.188)	(3.192)
Tok plina	G	×	(3.193)

terpolacijo. Za vsak nivo nelinearnosti mehanskega dela, nivo povezanosti polj in način implementacije je potrebno izpeljati enoličen nabor končnih elementov. Za implementaciji **A.1** in **A.2** je potrebno izpeljati en element za vsak nivo povezanosti (**THM** in **THGM**) za štiri konstitutivne modele, za formulaciji **B** in **C** je potrebno izpeljati za vsak nivo povezanosti toliko elementov, kolikor je polj. In sicer so za mehanski problem izpeljani element za štiri konstitutivne modele za **THM** in štiri za **THGM** problem. Podobno je potrebno za ostala polja izpeljati po dva elementa za konfiguracijo (začetna, trenutna) za **THM** in **THGM** problem, pri čemer element za plinsko polje pri **THM** ni izpeljan, ker je polje konstantno  $p_g = 0$ . Ker je implementacija **C** enaka **B**, le da ni potreben izračun ne diagonalnih tangentnih matrik, je bilo v elemente **B** dodano stikalo, ki teh delov ne izvozi. Na ta način se izognemo izpeljavi elementov implementacije **C**. Vse kode elementov so zbrane v preglednici 6.9. Čeprav so enačbe **THM** modela enake kot v 1. primeru (poglavje 6.1) so izpeljani novi elementi, ki imajo dodaten modul za izračun občutljivosti neznank. Posledično je velikost kode v 1. primeru približno 2 krat večja kot v preglednici 6.3. V preglednici 6.10 je prikazana velikost vsakega elementa implementacije **B**, pri čemer

Preglednica 6.9: Primerjava velikosti izvorne kode [kB] in število enačb  
Table 6.9: Comparison of source code size [kB] and number of equations

Primer Pristop	Število enačb znotraj kode elementov						Skupna velikost izvorne kode [kB]					
	<b>THM</b>			<b>THGM</b>			<b>THM</b>			<b>THGM</b>		
	<b>A.1</b>	<b>A.2</b>	<b>B</b>	<b>A.1</b>	<b>A.2</b>	<b>B</b>	<b>A.1</b>	<b>A.2</b>	<b>B</b>	<b>A.1</b>	<b>A.2</b>	<b>B</b>
LE	586	586	980	1668	1664	3799	33.5	33.6	51.	195.	195.	563.
HY	851	844	1443	1948	1948	4499	46.	46.4	70.3	208.	208.	591.
LP	1426	1426	1797	2587	2585	4680	66.9	66.9	83.3	271.	271.	616.
JC	3052	3048	3662	4242	4244	6813	147.	147.	171.	354.	353.	713.

so elementi nemehanskih problemov podvojeni, enaki elementi so za **JP** in **HY** in enaki za **LE** in **LP**, kar je razvidno tudi iz velikosti kode in št. enačb. Iz preglednice lahko razberemo, da je razlika med **THM** in **THGM** za mehanski del med 60-80 kB, medtem, ko je osnoven **LE** model velik zgolj 20 kB. Večina te dodatne kode je skupna vsem elementom. Razlika med **THM** in **THGM** implementacij **A** je 160 kB, kar predstavlja 6 kratno povečanje kode. Dodatna koda predstavlja v večini enačbe zasičenosti, plinske enačbe in masne spremembe tekočine, ki so potrebni v problemu **THGM**. Posledično je potrebno pri primerih z implementacijo **B** te enačbe 4 krat izračunati, vpliv tega na učinkovitost pa bomo ocenili v nadaljevanju, lahko pa pričakujemo slabšo učinkovitost ločene formulacije na primeru **THGM** kot na primeru **THM**.

Za obravnavana primera potrebujemo tudi robne končne elemente (zadnja člena enačb (3.187) in (3.192)). Ti so za **A.2**, **B** in **C** enaki, za **A.2** pa je potreben element za vsako kombinacijo povezanosti pregl. 6.10.

Preglednica 6.10: Primerjava velikosti izvorne kode in število enačb elementov tipa **B**  
 Table 6.10: Comparison of source code size and number of equations of elements of type **B**

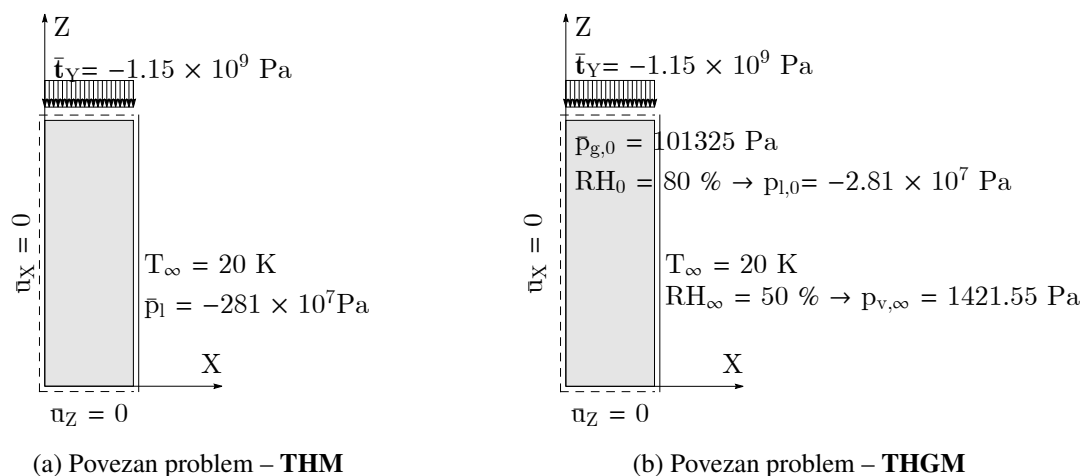
Elementi tipa <b>B</b>	Elementi <b>THM</b>				Elementi <b>THGM</b>				
	M	T	H	Skupaj	M	T	H	G	Skupaj
Velikost izvorne C kode [kB]									
LE	19.9	14.6	16.5	51.	80.5	156.	165.	161.	563.
HY	23.6	23.4	23.3	70.3	83.9	164.	173.	169.	591.
LP	52.1	14.6	16.5	83.3	134.	156.	165.	161.	616.
JC	124.	23.4	23.3	171.	207.	164.	173.	169.	713.
Število enačb znotraj kode elementov									
LE	386	281	313	980	528	940	1223	1108	3799
HY	457	505	481	1443	595	1167	1424	1313	4499
LP	1203	281	313	1797	1409	940	1223	1108	4680
JC	2676	505	481	3662	2909	1167	1424	1313	6813

Preglednica 6.11: Primerjava velikosti kode in števila enačb robnih elementov  
 Table 6.11: Comparison of code size and number of equations of boundary elements

Robni elementi	(A.1) <sup>THM</sup> <sub>BC,T</sub>	(A.1) <sup>THGM</sup> <sub>BC,T</sub>	(A.2) <sub>BC,T</sub>	(A.1) <sup>THGM</sup> <sub>BC,H</sub>	(A.2) <sub>BC,H</sub>
Velikost C kode [kB]	47	47	47	135	134
Število enačb	2.97	2.97	2.94	7.91	7.6

### 6.2.2 Opis računskih primerov

Opisane implementacije in kombinacije bodo analizirane na naslednjih primerih. Testni primer bo 2D štirikotnik  $0.02\text{m} \times 0.06\text{m}$  z debelino 1 m, diskretizirano z mrežo končnih elementov  $160 \times 40 = 6400$  na podmnožico  $G_k$ . Voda in suh zrak sta izbrana kot tekočine znotraj medija. Standardni materialni podatki so izbrani in podani v preglednici 6.13, podatki za vodo so enaki kot prej in so podani na koncu preglednice in 6.4. Podatki za plinasto fazo so dani v preglednici 6.12. Uporabljene bodo naslednje kombinacije povezanih problemov, osnova za **THGM** primer je povzeta po (Obeid in sod., 2001):



Slika 6.3: Robni pogoji primerov **THM** in **THGM**  
 Figure 6.3: Boundary conditions of **THM** and **THGM** examples

**THM:** Primer s tremi polji. Pomik  $u_x = 0$  je predpisan na desnem robu ( $X = 0$ ) in  $u_y = 0$  na spodnjem ( $Y = 0$ ). Na zgornji stranici ( $Y = 0.06$  m) je predpisan naravni robni pogoj, porazdeljena obtežba,  $\bar{t}_y = -1.15 \times 10^9$ . Začetna temperatura je  $T_{t=0} = 0\text{K}$ . Na desni stranici ( $X = 0.02$

m) je predpisan konvekcijski robni pogoj s temperaturo okolja  $T_\infty = 20$  K. Na desni stranici je predpisan tudi Dirichletov robni pogoj za tlak tekočine  $p_l = -2.81 \times 10^7$  Pa. Računski primer traja do časa  $t_{max} = 1$  h. Robna pogoja  $\bar{t}_X$  in  $p_l$  sta nanesena v času  $0.1 t_{max}$ , nato je množitelj 1 (6.3a).

**THGM:** Primer s štirimi polji, je podoben primeru **THM** s tem da so predpisani robni pogoji za računski primer sušenje vlažnega medija. Robni pogoji mehanskega dela in temperature so enaki kot prej.  $T_{t=0} = 0$  K predstavlja začetno absolutno temperaturo  $T_A = T_0 + T = 273.15$  K, kjer zaradi plinskega zakona ta ne sme biti 0. Podobno je potrebno po telesu predpisati začetni zračni atmosferski tlak  $p_{g,t=0} = 101325$  Pa. Na desnem robu je predpisana relativna vlažnost  $RH_\infty = 50\%$ , kar ustreza pornemu pritisku okolja  $p_{v,\infty} = 1421.55$  Pa, po telesu pa je predpisana 80 % vlažnosti telesa tako, da se določi ustrezeni začetni pritisk tekočine, ki je  $p_{l,t=0} = -2.81 \times 10^7$  Pa. Čas računskega primera je  $t_{max} = 16$  let, obtežba pa je nanesena v  $0.8 t_{max}$ . Podoben čas računskega primera je podal tudi (Obeid in sod., 2001). Primer **THM** predstavlja zasičen medij, medtem ko primer **THGM** predstavlja sušenje delno zasičenega medija. Pri prvem čas določa izbrana prepustnost medija, pri drugem pa čas določa relativna prepustnost, ki je nekaj redov velikosti manjša, kot pri zasičenem primeru, kjer je 1, ter izbran koeficient difuzije vodne pare (6.3b).

Preglednica 6.12: Materialni karakteristike plinov  
Table 6.12: Material parameters of gases

Parameter	Oznaka	Vrednost	Enota
Začetna temperatura	$T_0$	273.15	K
Univerzalna plinska konstanta	$R$	8.31446	$\frac{\text{JK}}{\text{mol}}$
Para			
Molska masa tekočine	$M_l$	0.018	$\frac{\text{kg}}{\text{mol}}$
Specifična evaporacijska entalpija	$\Delta h_v$	$2.257 \times 10^6$	$\frac{\text{J}}{\text{kg}}$
Temperatura vrenja	$T_{lb}$	373.15	K
Pritisk zasičenosti pare pri $T_{lb}$	$p_{vs}$	101325	Pa
Koeficient difuzije pare	$D_g$	$5 \times 10^{-10}$	$\frac{\text{m}^2}{\text{s}}$
Zrak			
Toplotna prevodnost plina	$k_T^g$	0.025	$\frac{\text{W}}{\text{K m}}$
Viskoznost plina	$\mu_g$	0.0000183	$\text{Pa} \cdot \text{s}$
Specifična toplota plina	$c_p^g$	1012	$\frac{\text{J}}{\text{K kg}}$
Molska masa plina	$M_g$	0.02897	$\frac{\text{kg}}{\text{mol}}$

Vseh različnih primerov je osem (štiri konstitutivni modeli in dva nivoja povezanosti), ti bodo rešeni vsak s po pet različnimi kombinacijami implementacij in načina reševanja. Vsak od primerov bo rešen z monolitnim pristopom in z uporabo implementacij **A.1**, **A.2** in **B**, ter s sekvenčnim pristopom, z uporabo elementov z implemencijama **A.2** in **C**, kjer je koda elementov implemencije **C** enaka **B**, izračunu polne matrike elementa v sekvenčnem pa se izognemo s stikalom v kodi, medtem, ko se implementaciji **A.2** izračuna polna matrika za vsak element, katere neuporabljeni deli se zavržejo.

### 6.2.3 Primerjava rezultatov

Vseh 40 računskih primerov je bilo pognanih z uporabo programskega orodja *AceFEM* (Korelc, 2011) v okolju *Mathematica*. Računski primeri so bili pognani z adaptivnimi časovnimi koraki, ki se po potrebi

Preglednica 6.13: Materialni karakteristike termo-hidro-mehanskega povezanega problema  
Table 6.13: Material parameters of thermo-hydro-mechanical coupled problem

Parameter	Oznaka	Vrednost	Enota
Elastični modul	$E$	$23 \times 10^9$	Pa
Poissonov količnik	$\nu$	0.225	
Gostota trdnine	$\rho$	1990	$\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$
Poroznost	$n$	0.154	
Biotov koeficient	$\alpha_b$	0.9999	
Togostni modul trdnine	$\kappa_s$	$23 \times 10^{13}$	Pa
Debelina	$t$	1	m
Lastnosti plastičnega tečenja			
Začetna napetost tečenja	$\sigma_{y0}$	$6.96 \times 10^7$	Pa
Zaostala napetost tečenja	$\sigma_{y\infty}$	$6.96 \times 10^7$	Pa
Koeficient utrjevanja	$K_h$	$46 \times 10^8$	Pa
Plastični eksponent zasičenosti	$\delta$	1	
Mehčanje napetosti tečenja	$\omega_0$	0	$\frac{1}{\text{K}}$
Mehčanje utrjevanja	$\omega_K$	0	$\frac{1}{\text{K}}$
Lastnosti prepustnosti medija			
Notranja prepustnost trdnine	$k_s$	$1.02 \times 10^{-21}$	$\text{m}^2$
Nepovratna zasičenost tekočine	$S_l^{ir}$	0.102	
Nepovratna zasičenost plina	$S_g^{ir}$	0.632	
Pritisk na meji zasičenosti medija	$p_{sat}$	22107	Pa
Parameter zasičenosti	$n_{VG}$	2	
Parameter relativne prepustnosti	$\iota_{VG}$	0.5	
Toplotne lastnosti medija			
Koeficient toplotnega raztezka	$\alpha_T$	0.00012	$\frac{1}{\text{K}}$
Toplotna prevodnost	$k_T$	1.5	$\frac{\text{W}}{\text{K m}}$
Notranji vir toplote	$Q$	0	$\frac{\text{W}}{\text{m}^3}$
Specifična toplota trdnine	$c_p$	800	$\frac{\text{J}}{\text{K kg}}$
Robni pogoji			
Koeficient konvekcijskega pretoka toplote	$\alpha_T$	17	$\frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}}$
Koeficient konvekcijskega pretoka mase pare	$\alpha_c^l$	$7.5 \times 10^{-8}$	$\frac{\text{kg}}{\text{m}^2 \text{s Pa}}$

povečujejo. Enačbe so bile rešene enovito z reševanjem sistema enačb za vsa polja hkrati in sekvenčno z zaporednim reševanjem sistema enačb vsakega polja posebej z uporabo Newton-Raphsonove iteracijske procedure. Za primer **THGM** je bilo v primeru monolitnega 84 in sekvenčnega reševanja 83 korakov. V primeru **THM** je bilo število korakov 66, razen za modele JC (el. pl z velikimi def.), kjer jih je bilo 73 pri monolitnem in 67 pri sekvenčnem reševanju.

Hitrost konvergence (preglednica 6.14) je enaka za vse primere implementacij s celovitim reševanjem in narašča s kompleksnostjo modelov in števila polj. Rezultati sekvenčnega pristopa konvergirajo počasneje. Za konvergenco koraka je potrebno v povprečju 4.5 globalnih iteracij za **THM** in 7.85 za **THGM**. Na globalno iteracijo je potrebno izvesti med 7.6 in 16 lokalnih iteracij in izračunov sistemov enačb. Skupno število potrebnih iteracij na korak, za doseg konvergence vseh prostostnih stopenj, je med 24 in 97 kar je od 10 do 20 krat več iteracij kot za enovito reševanje.

V preglednici 6.15 so prikazane Evklidove norme prirastkov k globalnim prostostnim stopnjam tipičnega uspešnega časovnega koraka Newton-Raphsonove iteracije ločene formulacije pri enovitem reševanju in



Preglednica 6.14: Primerjava učinkovitosti primerov z različnimi implementacijami in pristopi reševanja  
 Table 6.14: Comparison of numerical efficiency of examples with different element implementations and solution procedures

Primer Reševanje Impl.	THM					THGM				
	Celovit			Sekv.		Celovit			Sekv.	
	A.1	A.2	B	C	A.2	A.1	A.2	B	C	A.2
Število iteracij na korak										
	$N_{IT,gl}/N_{IT,loc}$					$N_{IT,gl}/N_{IT,loc}$				
LE	2.	2.	2.	4.67/7.62	4.67/7.62	3.3	3.3	3.3	7.82/11.3	7.87/11.2
HY	2.98	2.98	2.98	4.71/8.04	4.71/8.04	3.42	3.42	3.39	7.82/11.3	7.86/11.3
LP	3.26	3.26	3.26	4.71/10.5	4.71/10.5	4.73	4.73	4.73	7.92/15.5	7.99/15.4
JC	5.58	5.58	5.58	4.59/11.8	4.59/11.8	6.32	6.32	6.32	7.81/15.9	7.86/15.9
Skupno število iteracij										
LE	143	143	143	1632	1632	287	287	287	5054	5076
HY	208	208	208	1775	1775	297	297	295	5106	5124
LP	226	226	226	2542	2542	407	407	407	7871	7932
JC	424	424	424	3020	3020	541	541	541	8077	8118
Skupen čas reševanja problema (s)										
LE	41.2	42.2	54.8	448.	367.	122.	124.	163.	2180.	1980.
HY	57.9	59.4	72.3	515.	459.	141.	145.	177.	2220.	2240.
LP	45.8	48.3	61.6	509.	419.	154.	159.	197.	3000.	2690.
JC	218.	222.	231.	1080.	1060.	342.	346.	377.	4170.	4320.
Normiran čas na iteracijo, $t_{It} = 0.165$ s										
LE	1.75	1.79	2.33	1.67	1.37	2.57	2.62	3.44	2.62	2.37
HY	1.69	1.73	2.11	1.76	1.57	2.88	2.97	3.64	2.64	2.65
LP	1.23	1.3	1.65	1.22	1.	2.3	2.36	2.94	2.31	2.05
JC	3.12	3.17	3.3	2.17	2.13	3.84	3.88	4.23	3.13	3.23
Normiran čas reševanja sistema, $t_{Sol} = 0.0124$ s										
LE	4.96	4.9	4.89	1.83	1.9	8.37	8.31	7.77	1.58	1.56
HY	4.75	4.93	4.88	1.74	1.77	8.19	8.27	7.98	1.51	1.56
LP	3.36	3.45	3.41	1.14	1.18	6.55	6.55	6.25	1.03	1.02
JC	3.7	3.79	3.77	1.11	1.14	6.54	6.6	6.43	1.	1.01
Normiran čas sestavljanja matrike elementa, $t_{KR} = 7.0110^{-7}$ s										
LE	1.02	1.02	2.31	2.06	1.	4.43	4.5	6.83	5.27	4.29
HY	2.03	2.07	3.02	2.66	1.99	5.71	5.81	7.59	5.49	5.5
LP	1.08	1.14	2.09	1.79	1.06	4.78	4.9	6.73	5.59	4.8
JC	8.07	8.15	8.43	5.5	5.38	10.3	10.4	11.4	8.69	9.19

Preglednica 6.15: Konvergenca THGM primerov z enovitim reševanjem  
 Table 6.15: Convergence of THGM example with unified solving procedure

It.	$B_{LE}^{THGM}$	$B_{HY}^{THGM}$	$B_{LP}^{THGM}$	$B_{JC}^{THGM}$
1	0.0646	0.0769	0.0942	0.0815
2	0.000158	0.000103	0.0379	0.0522
3	$1.68 \times 10^{-9}$	$2.61 \times 10^{-9}$	0.000384	0.000397
4	$2.91 \times 10^{-15}$	$3.81 \times 10^{-15}$	$5.96 \times 10^{-8}$	$1.45 \times 10^{-6}$
5			$1.74 \times 10^{-14}$	$1.79 \times 10^{-8}$
6				$2.94 \times 10^{-10}$

v preglednici 6.16 so prikazane Evklidove norme pri sekvenčnem reševanju. Enovito reševanje doseže kvadratično konvergenco vseh primerov razen primeri JC, kjer se kvadratična konvergenca pri dosegu norme  $10^{-8}$  upočasni, na račun tega, da različna polja konvergirajo z različno hitrostjo. Najpočasneje konvergirata polja obeh tekočin. Sekvenčno reševanje v danem primeru konvergira počasi za vse obravnavane materialne modele. Hitrost konvergenca je neodvisna od izbrane implementacije.



Preglednica 6.16: Konvergenca primerov **THGM** ločene implementacije z sekvenčnim reševanjem

Table 6.16: Convergence of **THGM** example of separate implementation with sequential solution procedure

It.	$\mathbf{B}_{LE}^{THGM}$	$\mathbf{B}_{HY}^{THGM}$	$\mathbf{B}_{LP}^{THGM}$	$\mathbf{B}_{JC}^{THGM}$
1	0.476	0.631	0.771	0.79
2	0.0265	0.0336	0.0268	0.0351
3	0.00158	0.00226	0.00143	0.00243
4	0.000187	0.000254	0.00019	0.000244
5	0.0000377	0.0000482	0.0000377	0.0000378
6	$9.31 \times 10^{-6}$	0.0000119	$8.72 \times 10^{-6}$	$8.54 \times 10^{-6}$
7	$2.31 \times 10^{-6}$	$2.94 \times 10^{-6}$	$2.03 \times 10^{-6}$	$1.93 \times 10^{-6}$
8	$5.91 \times 10^{-7}$	$7.51 \times 10^{-7}$	$4.82 \times 10^{-7}$	$4.55 \times 10^{-7}$
9	$1.33 \times 10^{-7}$	$1.69 \times 10^{-7}$	$1.04 \times 10^{-7}$	$9.7 \times 10^{-8}$
10	$3.49 \times 10^{-8}$	$4.43 \times 10^{-8}$	$2.53 \times 10^{-8}$	$2.33 \times 10^{-8}$
11	$9.27 \times 10^{-9}$	$1.17 \times 10^{-8}$	$6.18 \times 10^{-9}$	$5.64 \times 10^{-9}$
12	$2.48 \times 10^{-9}$	$3.13 \times 10^{-9}$	$1.52 \times 10^{-9}$	$1.37 \times 10^{-9}$
13	$6.66 \times 10^{-10}$	$8.42 \times 10^{-10}$	$3.74 \times 10^{-10}$	$3.34 \times 10^{-10}$

Časi sestavljanja (preglednica 6.14) matrik  $\mathbf{K}_e$  in  $\mathbf{R}_e$  formulacij **A** so v vseh primerih hitrejši od formulacije **B**, in sicer od 230 % pri primeru **THM-LE** do 3 % pri **THM-JC**, odvisno od primera. Ugotovitve pri primeru **THM** so podobne kot na primeru **THM** v prejšnjem poglavju 6.1. Če primerjamo najbolj zahteven problem **THGM-JC**, pa lahko ugotovimo, da so razlike nekoliko večje kot pri **THM** vendar še vseeno majhne, in sicer sta enoviti implementaciji **A** le za 10 % hitrejši od **B**, kar je malo, glede na to, da je koda za **B** 60 % večja. V nasprotju, pa je razlika v času sestavljanja med **A** in **B** za primer **THGM-LE** 154 %. Vpliv na celtni čas reševanja pa je občutno manjši, in je ločena implementacija **B** počasnejša do 40 % za LE in do 8 % za JE konstitutivni model. Čas sestavljanja je pri sekvenčnem reševanju hitrejši, tako za **C** in **A.2** implementaciji, pri čemer je slednja primerljiva z enovito, sekvenčni **C** pa je od **B** hitrejši do 50 %. Poleg tega, da je sestavljanje manjše globalne matrike hitrejše, je pri implementaciji **C** izračunana le diagonalni del matrike, vendar pa je **C** vseeno počasnejša od **A.2**. Implementacija **C** je bila hitrejša od implementacije **A.2** le za primer **THGM** z elementi s hiperelastičnim potencialom (HY, JC).

Po pričakovanju je čas reševanja sistema enačb v primeru sekvenčnega reševanja, zaradi manjših posameznih sistemov enačb, krajši, kot za enovito reševanje. Razmerja med časi so od 2 do 4 pri **THM** in od 5 do 7 krat pri primeru **THGM**. Posledično so časi na iteracijo pri sekvenčnem reševanju krajši, vendar pa je ta razlika le okoli 30 %, medtem ko je potrebno izvesti 10 do 20 krat več iteracij, kar možno vpliva na celoten čas reševanja. Iz tega lahko ugotovimo, da je sekvenčno reševanje neučinkovito, poleg tega konvergenca za nekatere primere ni zagotovljena. Metoda je uporabna zgolj za primere, kjer dobimo rešitve posameznega polja v zaprti obliki, in ne moremo reševati polnega sistema enačb.

Iz rezultatov lahko ugotovimo, da je implementacija po poljih **B** primerna za reševanje močno povezanih problemov, saj je učinkovitost primerljiva v primerjavi modela **A**, tudi za zahtevnejše modele **THGM-JC**. Največja razlika v učinkovitosti se pokaže pri problemih z enostavnimi enačbami problema, saj je delež kode za diskretizacijo končnega elementa, ki se ponovi v vsakem elementu, lahko relativno velik. Ta delež se poveča tudi v primeru kompleksnejših modelov, kadar je isti del konstitutivnih enačb potreben v vsakem polju, zato je pri štirih poljih učinkovitost za 10 % slabša kot pri treh, kjer je ta razlika le nekaj procentov. V primeru **THGM** predstavlja velik del enačb sorbcijska krivulja in izračun delnih pritiskov plina in masnega deleža vlage, ki nastopajo v poljih toplote in obeh tokov. V primeru **THGM** je zato zaradi narave enačb potrebno vedno definirati tekočinska in toplotna polja hkrati (preglednica

4.3), medtem ko za manj povezana polja v primeru ne zasičenega problema **THM** to ni potrebno. Za take primere, kjer so polja nerazdružljiva in kjer delež konstitutivnih enačb predstavlja velik del kode je smiselneje uporabiti implementacijo **A.2**. Možne so tudi različne kombinacije med ločeno in enovito, npr. taka, kjer bi mehansko polje izračunali v eni in termalni ter tekočinska polja v drugi kodi. Ker je potencial aditiven, so možne tudi poljubne kombinacije končnih elementov, kjer lahko v elementu poračunamo le en del celotnega potenciala enega polja, kot na primer razdelitev termalnega potenciala na del, odvisen od elasto-plastičnega odziva in ostali del.

## 7 ZAKLJUČEK

V doktorski disertaciji smo pokazali, da je možno z ustreznimi simbolično-numeričnimi orodji, ki temeljijo na naprednih tehnologijah, učinkovito in natančno formulirati in rešiti močno povezane inženirske probleme z velikim številom polj. Hkrati smo podali tudi rešitev za formulacijo in linearizacijo problemov, ki temeljijo na uporabi tenzorskih funkcij. Enačbe so bile izpeljane na način, da se ohrani kvadratična konvergenca polne Newton-Raphsonove iteracijske procedure.

V prvih poglavjih disertacije smo se osredotočili na formulacijo povezanih problemov. Pokazali smo, da je možno izpeljavo povezanih problemov s pomočjo formulacije, ki temelji na avtomatskem odvajanju, avtomatizirati. Taka formulacija, v kolikor potencial problema ni definiran, zahteva prevedbo šibkih oblik diferencialnih enačb povezanih problemov v skalarno funkcijo, t. i. psevdo-potencial. Izpeljeva reziduala in polne konsistentne tangentne matrike povezanega problema nato, ob uporabi ustreznega orodja za generacijo programske kode, ki omogoča avtomatsko odvajanje, sledi avtomatsko z definicijo ustreznih izjem pri odvajanju.

Na različnih primerih povezanih termo-hidro-mehanskih problemov smo podali postopek prevedbe šibkih oblik v pripadajoče psevdo-potenciale. Ti so bili osnova za kreiranje enovite kode končnih elementov. Poslužili smo se tudi možnosti implementacije fizično ločene kode po posameznih fizikalnih poljih, s čimer postanejo povezani problemi enostavnejši za implementacijo in bolj obvladljivi. Na računskih primerih smo primerjali različne nivoje povezanosti, konstitutivne modele in implementacije ter pokazali, da je učinkovitost ločenih implementacij končnih elementov v splošnem primerljiva učinkovitosti enovitih. Za problem s štirimi polji in elasto-plastično formulacijo z velikimi deformacijami je razlika v času sestavljanja 10 %, za tri polja je ta razlika 4 %. Za enostavne šibko povezane primere se je izkazalo, da je numerična učinkovitost ločene implementacije tudi do dvakrat slabša od enovite. Nasprotno pa je za močno povezane nelinearne elasto-plastične modele z velikimi deformacijami numerična učinkovitost zgolj za nekaj odstotkov slabša, v izjemnih primerih pa celo boljša. Pri velikih problemih, kjer čas sestavljanja matrik običajno predstavlja manjši delež celotnega časa, se ta razlika občutno zmanjša.

Zaključimo lahko, da je ločena implementacija po fizikalnih poljih primerna za reševanje povezanih problemov, kjer se ponavljanje enačb pojavlja v primernem deležu. Za povezane probleme, kjer so polja povezana preko notranjih spremenljivk (npr. plastičnih deformacij) ali kjer je delež kode za diskretizacijo končnega elementa, ki se ponovi v vsakem elementu, relativno velik, je primernejša implementacija v enem elementu. Izjema so problemi ki jih je možno aditivno razdeliti na podprobleme, na način, da je ponavljanje kode v vsakem podproblemu kar se da majhno, kot je bilo to možno pri toplotni energiji za plastično in mehansko delo, ki smo jo združili skupaj z elementom za izračun mehanskega odziva. Primerjana sta bila tudi sekvenčni in enovit način reševanja enačb. Pri sekvenčnem pristopu smo pokazali, da so posamezne iteracije na račun izpeljave manjših matrik elementov in reševanja več manjših sistemov enačb tudi do 30 % hitrejše od enovitega reševanja. Na enostavnem termo-hidro-mehanskem primeru s tremi polji je število globalnih iteracij na korak v povprečju med 4 in 5, vendar pa je za vsako globalno iteracijo v povprečju potrebnih še okoli 8 in 12 lokalnih iteracij za elastične in elasto-plastične modele. Nekoliko večje vrednosti je možno razbrati iz termo-hidro-mehanskega primera dvofaznega toka, s skupaj štirimi polji, kjer je potrebnih okoli 8 globalnih iteracij in od 11 do 16 lokalnih za vsako globalno iteracijo. V splošnem so formulacije z velikimi deformacijami zahtevale v povprečju eno lokalno iteracijo več. Skupno nanese pri sekvenčnem reševanju od 10- do 20-krat več Newton-Raphsonovih iteracij

za dosego predpisane napake rezultatov kot pri enovitem reševanju, kar močno vpliva na računski čas simulacije. Dodatna slabost sekvenčnega pristopa je tudi ta, da konvergenca kljub drobljenju časovnih korakov v splošnem ni zagotovljena. Kvadratična konvergenca je dosežena v vseh primerih celovitega reševanja. Hitrost konvergence rezultatov ni odvisna od implementacij, temveč od načina reševanja in nivoja nelinearnosti povezanega problema in je znašala od ene iteracije na korak za dosego konvergence za linearne pa tudi do šest in več za močno povezane nelinearne probleme, zato lahko zaključimo, da je sekvenčno reševanje v primerjavi z enovitim neučinkovito in nezanesljivo.

V zadnjem delu disertacije smo se osredotočili na formulacijo tenzorskih funkcij kot bistvenega dela implementiranih končnih elementov. Z njimi lahko na primer enostavno opišemo zahtevnejše konstitivne zakone elastičnih in elasto-plastičnih mehanskih modelov pri velikih deformacijah. Predstavili smo izpeljavo zaključene oblike poljubne matrične funkcije ter njenih prvih in drugih odvodov za matrike dimenzije  $3 \times 3$  z realnimi lastnimi vrednostmi. Matrična funkcija je bila formulirana kot odvod njene pripadajoče rodovne funkcije po matriki. Čeprav je rodovna funkcija izražena z lastnimi vrednostmi, pa je v nasprotju z njimi gladka in stabilna. Posledično je bilo treba na območjih, kjer so lastne vrednosti slabo pogojene, funkcijo zamenjati z njenim razvojem v stabilno potenčno vrsto. Pokazali smo, da metoda hkrati nudi tudi alternativno formulacijo problemov, izraženih z lastnimi vrednostmi, kot je to prikazano na primeru Ogdenovega materialnega modela. Prikazana je bila izpeljava eksponenta, logaritma, potence, korena in vsote potenc matrike in njihovih prvih ter drugih odvodov.

Z uporabo sistema za generiranje kode *AceGen* je bila ustvarjena knjižnica podprogramov C, katere rezultat je izbrana matrična funkcija in njen prvi in drugi odvod v zaključeni obliki. Posledično se lahko matrične funkcije obravnava kot elementarne funkcije. S tem pa postane izpeljava nekaterih kompleksnih nelinearnih modelov močno poenostavljena in rezultati natančni do natančnosti računalnika. Izpeljane matrične funkcije so bile preverjene z alternativnimi formulacijami, in so se izkazale kot najučinkovitejše in natančne. Napaka izvrednotenja matričnih funkcij je v vseh primerih pod  $10^{-14}$ , napake odvodov pa se z vsakim redom povečujejo, tako da je največja napaka  $5 \times 10^{-13}$  za prvi odvod in  $10^{-10}$  za drugi. Izjema je vsota potenc matrike, kjer so te vrednosti nekoliko višje. Napake so največje v okolici večkratnih lastnih vrednosti in padajo z oddaljevanjem.

Uporaba matričnih funkcij je bila prikazana na različnih elastičnih in elasto-plastičnih materialnih modelih. Na različne načine so bili izpeljani Henckyjevi in Ogdenovi modeli, kjer je potrebna uporaba logaritma in vsote potenc matrike, ter elasto-plastični modeli z različnimi elastičnimi odzivi in s von Misesovim pogojem in pogojem tečenja Cam-Clay, kjer je za pravilen opis evolucije plastičnega tečenja potreben eksponent tenzorja. Pokazali smo, da je računski natančnost modelov, ki so bili formulirani z izpeljano zaključeno obliko matrične funkcije, enaka natančnosti računalnika. Hkrati pa so ti modeli numerično učinkoviti, če jih primerjamo z alternativno formulacijo matrične funkcije z uporabo razvoja v vrsto. Vsi materialni modeli, izpeljani z zaključenimi oblikami, so dosegli identično konvergenco in rezultate do natančnosti računalnika, kot alternativni modeli z razvojem v vrsto. Vsi Ogdenovi modeli z enim in dvema členoma imajo enake rezultate kot alternativni formulaciji z Neo-Hookovim in Mooney-Rivlinovim modelom. Prav tako je konvergenca vseh formulacij kvadratična.

Iz rezultatov učinkovitosti in natančnosti na primerih posameznih matrik in primerih različnih elastičnih in elasto-plastičnih materialnih modelov je moč sklepati, da so matrične funkcije v zaključeni obliki, izpeljane z odvajanjem rodovne funkcije, stabilne, hitre in dosegajo natančnost računalnika na vsem definicijskem območju funkcij, tako da je njihova uporaba upravičena. Ker njihovi prvi in drugi odvodi dosegajo visoko natančnost, je možno z avtomatskim odvajanjem izpeljati konsistentne sisteme enačb, ki zagotovijo kvadratično konvergenco interakcijske procedure. Izpeljane funkcije so na voljo za uporabo v okoljih *AceGen* in *AceFEM*, postopek pa se lahko aplicira na poljubno matrično funkcijo.

## 8 POVZETEK

V doktorski disertaciji je predstavljen pristop k formulaciji in reševanju močno povezanih inženirskih problemov po metodi končnih elementov z uporabo tehnologije avtomatskega odvajanja, kar nam omogočata orodji *AceGen* in *AceFEM*. Simbolno-numerično okolje *AceGen* je orodje za avtomatsko izpeljavo enačb in avtomatsko generacijo programske kode. *AceGen* povezuje transformacijo kode-v-kodo (angl. *code-to-code*) z avtomatskim odvajanjem v načinu odvajanja nazaj (angl. *backward or adjoint mode*) ali naprej in sprotno optimizacijo kode, s čimer je možno izpeljavo enačb problema avtomatizirati (Korelc, 2009). Ta kombinacija hkrati vodi do učinkovite in natančne programske kode problema (Griewank in Walther, 2008). *AceFEM* je simbolno-numerično okolje za analizo problemov po metodi končnih elementov.

Osnova za formulacijo poljubnega nelinearnega povezanega problema je sistem parcialnih diferencialni enačb, katerega rešitev so izbrane osnovne količine kot funkcija lege in časa. Analitična rešitev poljubnega problema običajno ni na voljo, zato se moramo poslužiti numeričnih metod, kot je metoda končnih elementov. Enačbe poljubnega nelinearnega povezanega problema smo diskretizirali po metodi končnih elementov. Diskretizacija enačb vodi do iskanja ničel reziduala. Običajno nelinearne probleme rešujemo iterativno po Newton-Raphsonovi iteracijski metodi z reševanjem posameznih linearnih sistemov enačb v vsaki iteraciji. Za to pa potrebujemo programsko kodo, ki natančno in učinkovito izračuna rezidual problema (neničelna stran enačb) in gradient enačb problema (tangenta matrika). Kadar je poznan potencial poljubnega problema, je rešitev problema minimum potenciala. Rezidual povezanega problema je v tem primeru gradient skalarnega potenciala. Kadar tak potencial ne obstaja, enačbe problema oz. rezidual sledijo iz šibke oblike diferencialnih enačb povezanega problema. Šibke oblike diferencialnih enačb so s stališča avtomatizacije in posledično sprotne optimizacije kode neugodne, saj zahtevajo več klicev procedure avtomatskega odvajanja, kar onemogoči učinkovito sprotno optimizacijo kode. Za najbolj učinkovito formulacijo povezanih problemov z uporabo avtomatskega odvajanja nazaj se izkaže, če enačbe problema izhajajo iz gradienta skalarnega potenciala. Za nekatere primere tak potencial obstaja, v splošnem pa je poznana le šibka oblika diferencialnih enačb. Pokazali smo, da je možno poljubno šibko obliko preoblikovati v skalarno funkcijo, t. i. psevdo-potencial. Z uporabo avtomatskega odvajanja in ustreznih izjem pri odvajanju se lahko iz psevdo-potenciala ali potenciala avtomatsko izpeljejo enačbe problema in konsistentna tangenta matrika končnega elementa, ki zagotovijo kvadratično konvergenco Newton-Raphsonove iteracijske metode. Hkrati taka avtomatizirana formulacija problema vodi do izjemno hitrih in računsko natančnih kod končnih elementov. Kadar potencial problema obstaja, izjeme pri odvajanju niso potrebne.

Če želimo izvesti polno Newton-Raphsonovo iteracijsko metodo za povezane fizikalne probleme z neomejenim številom fizikalnih polj, se soočimo s problemom naraščanja programske kode končnega elementa z vsakim dodanim poljem. Sčasoma problem postane neobvladljiv, tako z gledišča časa, potrebnega za izpeljavo enačb, kot tudi z gledišča odpravljanja napak v kodi. Ta problem je treba zastaviti na tak način, da bo količina kode v posameznem elementu kar se da minimalna (Hudobivnik in Korelc, 2013). V večini problemov lahko upoštevamo zakon o aditivnosti energije oziroma dela, kar pomeni, da je možno celoten problem aditivno razdeliti na več posameznih podproblemov. V ta namen smo definirali podmnožice osnovnih polj, kjer enačbe posameznih podproblemov izpeljemo znotraj fizično ločenega končnega elementa. V vsakem fizično ločenem elementu nato izpeljemo zgolj del enačb, ki pripada posameznemu podproblemu. Rezultat posameznih elementov so polne, v splošnem nekvadratne matrike

končnih elementov z vsemi povezanimi členi, iz katerih lahko sestavimo globalno tangentno matriko problema. Ker so globalne matrike polne lahko povezan problem rešujemo celovito, s čimer se kvadratična konvergenca Newton-Raphsonove iteracijske procedure ohrani, saj rešujemo enak sistem enačb kot pri enoviti implementaciji. Povezave med ločenimi elementi se vršijo le preko vozliščnih količin, posledično postanejo povezani problemi enostavnejši za implementacijo in bolj obvladljivi. Ločitev kode po elementih pa s stališča učinkovitosti ni trivialna za probleme, kjer so polja odvisna od notranjih spremenljivk, prav tako je pričakovati ponavljanje delov kode, kjer je delež enačb, ki je skupen več poljem, relativno velik. Predstavili smo različne možne implementacije končnih elementov povezanih problemov. Predstavili smo dve enoviti in dve ločeni implementaciji. Predlagana ločena implementacija vrne ne kvadratne tangentne matrike s povezanimi deli, ki skupaj tvorijo polno globalno matriko, medtem ko klasična vrne zgolj kvadratne dele matrik. Slednja se zato uporablja le za reševanje enačb po sekvenčnem pristopu, hkrati je izračun matrik učinkovitejši kot v drugih implementacijah. Omenjene implementacije so bile v doktorski disertaciji analizirane s stališča numerične učinkovitosti na primeru termo-hidro-mehanskih problemov.

### **Enačbe večfaznih termo-hidro-mehanskih problemov**

Predstavljeno metodologijo reševanja povezanih problemov smo prikazali na primeru formulacije in reševanja termo-hidro-mehanskih povezanih problemov. V ta namen je treba izpeljati šibke oblike obravnavanih primerov. Termo-hidro-mehanski problemi so problemi, ki opisujejo tok toplote in masni tok ene ali več tekočin po deformabilnem poroznem mediju. Posledično smo podali kinematične enačbe, plinske zakone, Fourierjev, Fickov in Darcyjev zakon ter druge konstitutivne in materialne zakone, ki so potrebni. Enačbe smo povzeli po avtorjih [Wriggers \(2008\)](#), [Lewis in sod. \(2004\)](#), [Moran in Shapiro \(2009\)](#) in [de Boer \(1998\)](#). Osnova za izpeljavo enačb povezanih problemov so ravnotežne enačbe. Zapisali smo zakon o ohranitvi mase, vrtilne in gibalne količine, energije in entropije. Zakona o ohranitvi mase tekočine in plina sta osnova za izračun neznanih pritiskov tekočine in plina. Zakon o ohranitvi energije je osnova za določitev neznanih temperatur. Zakon o ravnotežju gibalne količine pa je osnova za izračun pomikov problema. Z reševanjem diferencialnih lahko za enostavne probleme in pravilne geometrije telesa izračunamo analitične vrednosti neznanih količin. V splošnem to ni možno in je treba za izračun po metodi končnih elementov izpeljati ustrezne šibke oblike diferencialnih enačb. Z uporabo variacijskega računa nad lokalnimi ravnotežnimi enačbami in integracijo dobljene variacije lokalnih ravnotežnih enačb po vsem telesu, smo izpeljali šibke oblike diferencialnih enačb termo-hidro-mehanskega problema. Kot testna funkcija je bila uporabljena variacija osnovnih neznank problema. Šibke oblike diferencialnih enačb je nato možno transformirati v ustrezne psevdo-potencialne oblike termo-hidro-mehanskih problemov. Poleg tega smo podali elastične deformacijske energije pogosto uporabljenih materialnih modelov, kot so Hookov, Neo-Hookov, Henckyjev, Ogdenov in Saint-Venantov model.

### **Avtomatizacija formulacije povezanih problemov**

Za reševanje povezanih problemov po metodi končnih elementov je najprej treba definirati diskretizirano mrežo končnih elementov. Ker smo povezan problem aditivno razdelili na posamezne podprobleme, je na mestu vsakega topološkega elementa treba za vsak izbran podproblem definirati končni element z izvorno kodo, ki pripada temu podproblemu, tako da je vsota vseh podproblemov enaka celotnemu povezanemu problemu. V primeru enovite implementacije je treba definirati le en končni element, v katerem so izpeljane vse enačbe povezanega problema. Po izoparametričnem konceptu smo znotraj vsakega končnega elementa z uporabo Lagrangejevega polinoma interpolirali vozliščne neznanke polj in vozliščne koordinate. Oblikovne funkcije so funkcije referenčnih koordinat, ki so definirane v ortonormirani bazi na enostavni pravilni topologiji. S tem zapisom pri formulaciji enačb ni bistvene razlike, ali

so te zapisane na začetni ali trenutni konfiguraciji. Podali smo tudi ustrezne izseke iz programske kode za izračun teh transformacij, ter dodatno izseke iz kode za izračun gradientov in divergenc skalarnih in vektorskih količin, ki so potrebni za opis problemov. Izpeljane šibke oblike termo-hidro-mehanskega problema smo transformirali v ustrezno psevdo-potencialno obliko. Podali smo tudi ustrezne izvlečke iz simbolne kode *AceGen* za izračun posameznih psevdo-potencialov. Integracijo enačb po elementu smo nadomestili z numerično integracijo z vsoto prispevkov v vsaki Gaussovi točki. Za ločeno in enovito implementacijo končnih elementov smo podali ustrezen zapis reziduala in tangente matrike Gaussove točke elementa, ki je osnova za avtomatsko izpeljavo teh enačb znotraj kode končnega elementa z uporabo procedure avtomatskega odvajanja in ustreznih izjem pri odvajanju. Za elasto-plastične modele je treba izračunati tudi notranje spremenljivke, zato smo podali ustrezno formulacijo notranje iteracijske zanke, ki vrne notranje spremenljivke in implicitne odvisnosti notranjih spremenljivk glede na neznanke problema, ki so potrebne za formulacijo tangentne matrike elementa. Podali smo tudi izsek kode za izračun plastičnega odziva materiala za primer von Misesovega kriterija porušitve. Za razumevanje so prikazani tudi izseki simbolne *AceGen* kode enovitega in dveh ločenih končnih elementov enostavnega termo-mehanskega problema.

### **Računski primeri termo-hidro-mehanskih povezanih problemov**

Na različnih računskih primerih termo-hidro-mehanskih problemov smo primerjali različne nivoje povezanosti, konstitutivne modele in implementacije ter analizirali učinkovitost ločenih implementacij, ki so bile rešene z enovitim reševanjem polnega sistema enačb. V analizah smo uporabili Neo-Hookov in Hookov materialni model, prvi upošteva velike deformacije in zahteva upoštevanje spremembe konfiguracije drugih polj, drugi pa je poenostavljen model za majhne deformacije in sprememba konfiguracije v drugih poljih ni bila upoštevana. Poleg elastičnega odziva modelov sta bili v primerih uporabljeni tudi elasto-plastični varianti omenjenih modelov z von Misesovim kriterijem tečenja.

Na računskih primerih smo primerjali različne nivoje povezanosti, konstitutivne modele in implementacije ter pokazali, da je učinkovitost ločenih implementacij končnih elementov v splošnem primerljiva učinkovitosti enovitih. Za enostavne šibko povezane primere se je izkazalo, da je numerična učinkovitost ločene implementacije tudi do dvakrat slabša od enovite. Nasprotno pa je za močno povezane nelinearne elasto-plastične modele z velikimi deformacijami numerična učinkovitost zgolj za nekaj odstotkov slabša in v izjemnih primerih celo boljša. Pri velikih problemih, kjer čas sestavljanja matrik običajno predstavlja manjši delež celotnega časa, se ta razlika občutno zmanjša. Zaključimo lahko, da je ločena implementacija poljih primerna za reševanje povezanih problemov, kjer se ponavljanje enačb pojavlja v primernem deležu. Za povezane probleme, kjer so polja povezana prek notranjih spremenljivk (npr. plastičnih deformacij) ali kjer je delež kode za diskretizacijo končnega elementa, ki se ponovi v vsakem elementu, relativno velik, je primernejša implementacija v enem elementu. To ne velja za primere, kjer je možno močno povezane člene aditivno zapisati in jih poračunati v skupnem elementu, kot je bilo to možno pri toplotni energiji za plastično delo.

Primerjana sta bila tudi sekvenčni in enovit način reševanja enačb. Pri sekvenčnem pristopu smo pokazali, da so posamezne iteracije na račun izpeljave manjših matrik elementov in reševanja več manjših sistemov enačb tudi do 30 % hitrejše od enovitega reševanja. Na enostavnem termo-hidro-mehanskem primeru s tremi polji je število globalnih iteracij na korak v povprečju med 4 in 5, vendar pa je za vsako globalno iteracijo v povprečju potrebnih še okoli 8 in 12 lokalnih iteracij. Nekoliko večje vrednosti je možno razbrati iz termo-hidro-mehanskega primera s štirimi polji, kjer je potrebnih okoli 8 globalnih iteracij in od 11 do 16 lokalnih za vsako globalno iteracijo. V splošnem so formulacije z velikimi deformacijami zahtevale v povprečju 1 lokalno iteracijo več. Skupno nanese pri sekvenčnem reševanju od

10- do 20-krat več Newton-Raphsonovih lokalnih iteracij za dosego predpisane napake rezultatov kot pri enovitem reševanju, kar močno vpliva na računski čas primera. Dodatna slabost sekvenčnega pristopa je tudi ta, da konvergenca kljub krajšanju časovnih korakov v splošnem ni zagotovljena. Kvadratična konvergenca je dosežena v vseh primerih celovitega reševanja. Hitrost konvergence iteracijske procedure ni odvisna od izbrane implementacije, temveč od načina reševanja in nivoja nelinearnosti povezanega problema in je znašala od ene iteracije na korak za dosego konvergence za linearne pa tudi do šest in več za močno povezane nelinearne probleme. Zato lahko zaključimo, da je sekvenčno reševanje v primerjavi z enovitim neučinkovito in nezanesljivo.

## Matrične funkcije

V predzadnjem poglavju disertacije smo se osredotočili na formulacijo tenzorskih funkcij kot bistvenega dela implementiranih končnih elementov. Z njimi lahko na primer enostavno opišemo zahtevnejše konstitutivne zakone elastičnih in elasto-plastičnih mehanskih modelov pri velikih deformacijah. Predstavili smo izpeljavo zaključene oblike poljubne matrične funkcije ter njenih prvih in drugih odvodov za matrike dimenzije  $3 \times 3$  z realnimi lastnimi vrednostmi. Matrična funkcija je bila formulirana kot odvod njene pripadajoče rodovne funkcije po matriki. Čeprav je rodovna funkcija izražena z lastnimi vrednostmi, pa je v nasprotju z njimi gladka in stabilna. Lastne vrednosti so v bližini večkratnih enakih lastnih vrednosti slabo pogojene. Posledično je bilo treba na teh območjih, funkcijo zamenjati z njenim razvojem v stabilno potenčno vrsto. Pokazali smo, da metoda hkrati nudi tudi alternativno formulacijo problemov, izraženih z lastnimi vrednostmi, kot je to prikazano na primeru Ogdenovega materialnega modela. Prikazana je bila izpeljava eksponenta, logaritma, potence, korena in vsote potenc matrike in njihovih prvih ter drugih odvodov.

Z uporabo sistema za generiranje kode *AceGen* je bila ustvarjena knjižnica podprogramov C, ki vrne izbrano matrično funkcijo in njen prvi in drugi odvod v zaključeni obliki. Posledično se lahko matrične funkcije obravnava kot elementarne funkcije. S tem pa postane izpeljava nekaterih kompleksnih nelinearnih modelov močno poenostavljena in rezultati natančni do natančnosti računalnika. Izpeljane matrične funkcije so bile preverjene z alternativnimi formulacijami, in so se izkazale kot učinkovite in natančne. Napaka izračuna matričnih funkcij je v vseh primerih pod  $10^{-14}$ , napake odvodov pa se z vsakim redom povečujejo, tako da je največja napaka  $5 \times 10^{-13}$  za prvi odvod in  $10^{-10}$  za drugi. Izjema je vsota potenc matrike, kjer so te vrednosti nekoliko višje. Napake so največje v okolici večkratnih lastnih vrednosti in padajo z oddaljevanjem.

Uporaba matričnih funkcij je bila prikazana na različnih elastičnih in elasto-plastičnih materialnih modelih. Na različne načine so bili izpeljani Henckyjevi in Ogdenovi modeli, kjer je potrebna uporaba logaritma in vsote potenc matrike, ter elasto-plastični modeli z različnimi elastičnimi odzivi s von Misesovim in Cam-Clay pogojem tečenja, kjer je za pravilen opis evolucije plastičnega tečenja potreben eksponent tenzorja. Pokazali smo, da je računski natančnost modelov, ki so bili formulirani z izpeljano zaključeno obliko matrične funkcije, enaka natančnosti računalnika. Hkrati pa so ti modeli učinkovitejši, če jih primerjamo z alternativno formulacijo matrične funkcije z uporabo razvoja v vrsto. Vsi materialni modeli, izpeljani z zaključenimi oblikami, so dosegli enako konvergenco in rezultate do natančnosti računalnika, kot alternativni modeli z razvojem v vrsto. Vsi Ogdenovi modeli z enim in dvema členoma so vrnil enake rezultate kot alternativni formulaciji z Neo-Hookevim in Mooney-Rivlinovim modelom. Prav tako je konvergenca vseh formulacij kvadratična.

Iz rezultatov učinkovitosti in natančnosti na primerih posameznih matrik in primerih različnih elastičnih in elasto-plastičnih materialnih modelov je moč sklepati, da so matrične funkcije v zaključeni obliki, izpeljane z odvajanjem rodovne funkcije, stabilne, hitre in natančne na vsem definicijskem območju



funkcij, tako da je njihova uporaba upravičena. Ker prvi in drugi odvodi matričnih funkcij dosegajo visoko natančnost, je možno z avtomatskim odvajanjem izpeljati konsistentne sisteme enačb, ki zagotovijo kvadratično konvergenco interakcijske procedure. Izpeljane funkcije so na voljo za uporabo v okoljih *AceGen* in *AceFEM*, postopek pa se lahko aplicira na poljubno matrično funkcijo.

“Ta stran je namenoma prazna.”

## 9 SUMMARY

The doctoral dissertation presents an approach for the formulation and solution of strongly coupled engineering problems that the finite element method using the automatic differentiation technique, which the software tools *AceGen* and *AceFEM* enables. The symbolic-numerical environment *AceGen* is a tool for performing automatic derivation of equations and automatic code generation. *AceGen* combines code-to-code transformation with both automatic differentiation modes forward and backward or adjoint and simultaneous code optimisation, which enables us to automate code generation procedure of the equations of the problem (Korelc, 2009). This combination also leads to efficient and accurate codes. Automation of formulation is achieved with the use of automatic differentiation. For details see (Griewank and Walther, 2008). *AceFEM* is symbolic-numerical environment for solving problems using finite element method.

The basis for the formulation of arbitrary non-linear coupled problem is a system of partial differential equations, the solutions of which are selected basic quantities as a function of position and time. Analytical solution of arbitrary problem is usually not available. Therefore, we have to resort to numerical methods such as finite element method. The equations of arbitrary non-linear coupled problem are discretized according to the finite element method. The discretized system of equations leads to finding the zero of residual vector. Usually, non-linear problems are solved using the Newton-Raphson iteration method, by iteratively solving linear systems of equations. An efficient and accurate program code, which calculates the residual of problem (non-zero part of the equations) and the gradient of system of the equations (tangent matrix), is therefore required. When the scalar potential of arbitrary problem is known, the solution of such problem is the minimum of the potential. The residual is in this case the gradient of scalar potential. When such potential does not exist, the residual follows from the weak form of the differential equations of coupled problems. The weak form of the differential equation is unfavourable from the automation and simultaneous optimisation point of view, since it leads to multiple calls of automatic differentiation procedure, which prevents efficient code optimisation. It turns out that the most efficient formulation of coupled problem using the automatic differentiation technique is when the equation of problem follows as a gradient of scalar potential. For some problems such potential exists, but usually only the weak form of the differential equation of the problem is available. We have shown that it is possible to transform arbitrarily weak form of differential equation of coupled problems into scalar function called pseudo-potential. By using the automatic differentiation procedure and defining a proper differentiation exception, the equations of the problem and the consistent tangent matrix of finite element can be automatically derived from the pseudo-potential, which ensures the quadratic convergence of Newton-Raphson iteration procedure. At the same time such formulation of the problem leads to extremely fast and accurate finite element codes. When the potential exist, no differentiation exceptions are required.

If the full Newton-Raphson iteration method is performed on coupled physical problems with a very large number of physical fields, we are faced with the grow of finite element code size with each added field. In time the problem can become unmanageable, both from the perspective of the time needed to derive equations, as well as from the perspective of the error correction in code. The problem must thus be defined in such way that the amount of code in an individual element is kept to a minimum (Hudobivnik and Korelc, 2013). In most cases a law of addition of energy can be considered, which means the whole problem can be additively split into individual sub-problems. With this in mind a subset of basic fields

was defined, with corresponding equations to be derived inside physically separate finite element code. Therefore, in each physically separated finite element code only the part of equations corresponding to a single sub-problem is derived. The results of each element are thus full, generally non-square tangent matrices with all the required coupled terms, which are then used to assemble global tangent matrix. Consequently, global matrix is full, which enables us to solve coupled problem monolithically, which also preserves the quadratic convergence of the Newton-Raphson iteration procedure, since we are solving identical system of equations as would be obtained by unified approach. The connection between different finite elements is performed only through the nodal quantities. Consequently, the coupled problems become more manageable and simpler to implement. The separation of code into multiple finite element codes is not trivial from the point of view of code efficiency for the problems, where multiple fields depend on internal variables. Additionally, a repetition of parts of the code can be expected, which can be a problem in those cases, where the proportion of common equations is large. We have presented some possible implementations of finite elements of coupled problems. We have presented two unified and two separate implementations. The proposed separate implementation results in non-rectangular tangent matrices, which combined form full tangent matrix, as opposed to classical separate implementation, where only square part of matrix is returned. The latter can only be used for sequential solving of equations, but at the same time they are more efficient than other implementations. The listed implementations were in the doctoral dissertation analysed according to numerical efficiency on an example of thermo-hydro-mechanical problems.

### **Equations of multiphase thermo-hydro-mechanical problems**

The presented methodology of solving arbitrary coupled problems was demonstrated on the example of formulation and solving of thermo-hydro-mechanical coupled problems. For this purpose the weak forms of each field of considered coupled problems needs to be derived. The thermo-hydro-mechanical problems are coupled problems that describe the flow of heat and mass flow of one or more fluids in deforming porous media. Consequently, we have listed the kinematic equations, gas laws, Fourier Fick's and Darcy's law and other constitutive and material laws that are required. The equations were taken from Wriggers (2008), Lewis et al. (2004), Moran and Saphiro (2009) and de Boer (1998). The basis of the coupled problems for the derivation of equations are equilibrium equations. We wrote the law of conservation of mass, angular and linear momentum, energy and entropy. The laws of conservation of mass of liquid and gas are the basis for calculating unknown pressures of liquid and gas. The law on energy conservation is the basis for determining the unknown temperatures. The balance of linear momentum is the basis for calculating the unknown displacement of medium. The differential equations can only be solved analytically for simple problems with correct geometry of the body. The results are analytical values of unknown quantities. In general, this is not possible, and it is necessary to derive the corresponding weak forms of differential equations for the calculation of the finite element method. By applying variational calculus on local equilibrium equations and integrating the resulting variations of local equilibrium equations over the whole body, weak forms of differential equations of thermo-hydro-mechanical problem are derived. As a test function a variation of the basic unknowns of the problem has been used. The weak forms of the differential equations can then be transformed into appropriate pseudo-potential forms of thermo-hydro-mechanical problems. In addition, we have listed the elastic strain energies of commonly used material models such as Hooke, Neo-Hooke, Hencky, Ogden and Saint-Venant models.

### **Automation of formulation of coupled problems**

To solve coupled problems using the finite element method it is first necessary to define the discretised finite element mesh. Since we have additively split the coupled problem into specific sub-problems, it is required that for each sub-problem a finite element code that belongs to chosen sub-problem is defined on the position of each topological finite element, so that the sum of all sub-problems is equal to the whole coupled problem. In the case of a uniform implementation it is necessary to only define a single final element in which all the equations of the coupled problem are derived. According to the isoperimetrical concept, we have interpolated nodal unknowns of fields and nodal coordinates within each finite element by using Lagrangian polynomial. The shape functions are functions of the reference coordinates which are defined in an orthonormal base of a simple trivial topology. With this concept it makes no essential difference whether they are written for the initial or the current configuration. We have also given the appropriate source codes used to calculate these transformations, and further source codes for the calculation of the gradients and divergences of the basic scalar and vector quantities which are necessary to describe the problems. The derived weak forms of thermo-hydro-mechanical problems were transformed into appropriate pseudo-potential form. We have given the appropriate extracts from the symbolic code *AceGen* for the calculation of each pseudo-potential. Integration of equations over an element domain was replaced by numerical integration with the sum of contributions in each Gaussian point. The formulation of Gauss point residual and the tangent matrix was provided for both the separate and the uniform implementations of finite elements, which is the basis for the automatic derivation of these equations within the finite element code by using automatic differentiation procedure and appropriate differentiation exceptions. For elasto-plastic models the internal variables have to be calculated. Therefore, an appropriate formulation of the inner iterative loop that calculates the internal variables and the implicit dependence of internal variables with respect to the unknowns of the problem, which are necessary for the formulation of the element tangent matrix, was presented. We have given a source code to calculate the response of a plastic material such as von Mises yield criterion. For the understanding of the concept symbolic *AceGen* source codes of single unified and two separate finite elements are shown for simple thermo-mechanical problem.

### **Numerical examples of thermo-hydro-mechanical coupled problems**

The different levels of coupling, constitutive models and implementations and the efficiency of separate implementations, which were solved using monolithic approach by solving a full system of equations, have been compared on different numerical examples of thermo-hydro-mechanical coupled problems. The Neo-Hooke and Hooke material models were used in the analysis. The first takes into account large deformation and requires that the configuration change be taken into account in other fields. The second model is a simplified model for small deformations and the configuration change was not taken into account. In addition to the elastic response of the mentioned elastic models the elasto-plastic variants of the mentioned models with von Mises yield criteria were also used in comparison.

The comparison of different levels of coupling, constitutive models and implementations, has shown that the efficiency of separate implementations of finite element is generally comparable to the efficiency of unified implementations. For simple weakly coupled examples it turned out that the numerical efficiency of the separate implementation is up to two times lower than the unified implementation. In contrast, the numerical efficiency of strongly coupled non-linear elasto-plastic models of separate implementation with large deformation is for only a few percent lower and in extreme cases even better. For large problems, where matrix assembly time usually represents a smaller portion of the total time, this difference is reduced even more. We can conclude that the separate implementation is suited for solving coupled

problems, where the repetition of formulas appears in the appropriate proportion. For coupled problems, where the fields are connected via internal variables (e.g. plastic deformation) or in which the proportion of the code for the discretization of the finished element, which is repeated in each element, is relatively large, the unified implementation is more appropriate. This does not apply if heavily coupled terms can be as easily written as a sum and calculated separately, as was possible with the thermal energy for plastic work.

The sequential and unified approaches of solving equations were also compared. We have shown for the sequential approach that individual iterations are up to 30 % faster than a unified approach, on account of the derivation of smaller element matrices and solving several smaller systems of equations. The number of global iterations per step in a simple thermo-hydro-mechanical example with three fields is on average between four and five. However, for each global iteration about eight to twelve local iterations are still required on average. Slightly higher values can be obtained from the thermo-hydro-mechanical case with four physical fields, where around eight global iterations are needed and on average 11 to 16 local iterations for each global iteration. In general, the formulations with large deformations require on average one local iteration more. The total number of required iterations can in sequential approach amount up to 10- to 20-times more Newton-Raphson's local iterations to achieve the prescribed error compared to the unified approach, which has a significant impact on the computation time of simulations. Additional weakness of the sequential approach is that convergence generally cannot be guaranteed, despite the reduction of time step sizes. Quadratic convergence has been achieved in all cases of monolithic or unified solution approach. The convergence speed of the iteration procedure does not depend on implementations, but on the solution approach and the level of non-linearity of the coupled problem, ranging from one iteration per step to achieve convergence for linear problem, up to six and more iterations per step for strongly coupled non-linear problems. Therefore, we can conclude that the sequential solution procedure is inferior compared to the unified solution procedure, since it is inefficient and unreliable.

### Matrix functions

The penultimate chapter of the dissertation is focused on the formulation of tensor functions as an essential part of the implemented finite elements. With them we can for example easily describe complex constitutive laws, elastic and elasto-plastic mechanical models for large deformations. We have presented a derivation of closed form of arbitrary matrix function and its first and second derivatives of the matrix dimensions  $3 \times 3$  with real eigenvalues. Matrix function has been formulated as a derivative of its corresponding generating functions of the matrix. Although the generating function is expressed with eigenvalues, it is smooth and stable in contrast to the eigenvalues. Eigenvalues are ill conditioned in the vicinity of multiple equal eigenvalues. Consequently, it was necessary to replace the generating function with its stable power series expansion in this areas. We have also shown that this method at the same time provides an alternative formulation of problems expressed with its eigenvalues, as shown on the example of the Ogden material model. We have shown the derivation of exponent, logarithm, power, root of matrix and their first and second derivatives.

By using the code generating system *AceGen* a library of C subroutines was created, which returns a chosen matrix function and its first and second derivatives in closed form. Consequently, matrix functions can be treated as elementary functions. This makes the derivation of complex nonlinear models greatly simplified and their results up to the machine precision accurate. The derived matrix functions were verified with alternative formulations, and have proved to be efficient and up to machine precision accurate. Error of the evaluated matrix functions is in all cases under  $10^{-14}$ , while the errors of its derivatives are increased with each order, so that the maximum error of the first derivative is  $5 \times 10^{-13}$  and for the

second  $10^{-10}$ . An exception is the sum of the powers of the matrix, where the errors of derivatives are somewhat higher. Errors are largest in the area of multiple eigenvalues and are falling when distancing from the transition area.

The usage of matrix functions has been demonstrated on various elastic and elasto-plastic material models. The Hencky and Ogden models, which require the use of the matrix logarithm and the sum of the powers of the matrix, and elasto-plastic models with different elastic responses with the von Mises and the Cam-Clay yield condition, which require for the correct description of the evolution of plastic yield the use of matrix exponent, were derived in different ways. We have shown that the accuracy of the models, which were formulated with a derived closed form matrix function, equals the machine precision accuracy. At the same time, these models are numerically efficient when compared to the alternative formulation of the matrix function derived using series expansion. All material models, derived from the proposed closed forms, yield identical convergence speed and equal results up to the machine precision accuracy as alternative models of development in the series. All Ogden models with one and two of the terms also returned the same results as the alternative formulations of the Neo-Hooke and Mooney-Rivlin models. Also, the quadratic convergence of all formulations is achieved.

From the results of the efficiency and accuracy of the examples of individual matrices and examples of various elastic and elasto-plastic material models it can be assumed that the matrix functions in closed form, obtained as a derivative of generating functions, are stable, fast and accurate on whole matrix function's definition area. Therefore, their use is justified. Since the first and the second derivatives of matrix functions are in the range of machine precision accuracy, it is possible to derive a consistent system of equations by using an automatic derivation procedure, which provides a quadratic convergence of the iteration procedure. The derived functions are available for the use in the environments *AceGen* and *AceFEM*. The presented process can also be applied to arbitrary matrix function.

“Ta stran je namenoma prazna.”



## VIRI

- Akers, R., Baffes, P., Kant, E., Randall, C., Steinberg, R. Y., 1998. Automatic synthesis of numerical codes for solving partial differential equations. *Mathematics and Computers in Simulation* 45: 3–22.
- Anand, L., 1979. On H. Hencky's Approximate Strain-Energy Function for Moderate Deformations. *Journal of Applied Mechanics* 46, 1: 78–82. doi:10.1115/1.3424532. 10.1115/1.3424532.
- Bartholomew-Biggs, M., Brown, S., Christianson, B., Dixon, L., 2000. Automatic differentiation of algorithms. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 124: 171–190.
- Beall, M., Shephard, M., 1999. Object-oriented framework for reliable numerical simulations. *Engineering with Computers* 15: 61–72.
- Biot, M., Willis, D., 1957. The Theory of Consolidation. *J. Appl Elastic Coefficients of the Mech* 24: 594–601.
- Bischof, C., Hovland, P., Norris, B., 2002. Implementation of Automatic Differentiation Tools. V Norris, C., Fenwick, J. J. B., Ur., *Proceedings of the ACM SIGPLAN Workshop on Partial Evaluation and Semantics-Based Program Manipulation*, New York, USA. ACM Press.
- Bischof, C. H., Bücker, H. M., Lang, B., Rasch, A., Risch, J. W., 2003. Extending the functionality of the general-purpose finite element package SEPRAN by automatic differentiation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 58, 14: 2225–2238.
- de Boer, R., 1996. Highlights in the Historical Development of the Porous Media Theory: Toward a Consistent Macroscopic Theory. *Applied Mechanics Reviews* 49, 4: 201–262.
- de Boer, R., 1998. Theory of Porous Media — Past and Present. *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* 78, 7: 441–466. doi:10.1002/(SICI)1521-4001(199807)78:7<441::AID-ZAMM441>3.0.CO;2-V.
- Bonet, J., Wood, R. D., 2000. *Nonlinear continuum mechanics for finite element analysis*, Cambridge, UK. Cambridge University Press, 279 str..
- Borja, R. I., 2004. Cam-Clay plasticity. Part V: A mathematical framework for three-phase deformation and strain localization analyses of partially saturated porous media. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 193, 48–51: 5301–5338.
- Borja, R. I., Alarcón, E., 1995. A mathematical framework for finite strain elastoplastic consolidation Part 1: Balance laws, variational formulation, and linearization. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 122, 1–2: 145–171.
- Borja, R. I., Lin, C.-H., Montáns, F. J., 2001. Cam-Clay plasticity, Part IV: Implicit integration of anisotropic bounding surface model with nonlinear hyperelasticity and ellipsoidal loading function. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 190, 26–27: 3293–3323.
- Borja, R. I., Tamagnini, C., 1998. Cam-Clay plasticity part III: Extension of the infinitesimal model to include finite strains. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 155, 1–2: 73–95.

- Borja, R. I., White, J. A., Laloui, L., 2013. Conservation Laws for Coupled Hydro-Mechanical Processes in Unsaturated Porous Media, 185–208, Hoboken, NJ, USA. John Wiley & Sons, Inc. doi:10.1002/9781118616871.ch8.
- Brodersen, B., 2004. Ogden type materials in non-linear continuum mechanics. Tehnično poročilo, Braunschweig, Germany. Technische Universitit Braunschweig, 2004: 20-21.
- Brooks, R., Corey, A., 1964. Hydraulic properties of porous media. Hydrological Papers 3: 1—27.
- Callari, C., Auricchio, F., Sacco, E., 1998. A finite-strain cam-clay model in the framework of multiplicative elasto-plasticity. International Journal of Plasticity 14, 12: 1155–1187.
- Čanadija, M., Brnić, J., 2004. Associative coupled thermoplasticity at finite strain with temperature-dependent material parameters. International Journal of Plasticity 20: 1851–1874. doi:10.1016/j.ijplas.2003.11.016.
- Chapelle, D., Gerbeau, J. F., Sainte-Marie, J., Vignon-Clementel, I., 2010. A poroelastic model valid in large strains with applications to perfusion in cardiac modeling. Computational Mechanics 46, 1: 91–101.
- Chapelle, D., Moireau, P., 2014. General coupling of porous flows and hyperelastic formulations—From thermodynamics principles to energy balance and compatible time schemes. European Journal of Mechanics - B/Fluids 46: 82 – 96. doi:10.1016/j.euromechflu.2014.02.009.
- Coussy, O., 2004. Poromechanics, Chichester, England. John Wiley & Sons, Ltd, 298 str..
- Danielsson, M., Parks, D., Boyce, M., 2004. Constitutive modeling of porous hyperelastic materials. Mechanics of Materials 36, 4: 347 – 358. doi:10.1016/S0167-6636(03)00064-4.
- Dhatt, G., Touzot, G., Lefrançois, E., 1985. The Finite Element Method Displayed, Chichester, England. John Wiley & Sons, Inc. doi:10.1002/9781118569764.
- Doll, S., Schweizerhof, K., 1999. On the Development of Volumetric Strain Energy Functions. Journal of Applied Mechanics 67, 1: 17–21. doi:10.1115/1.321146.
- Doyle, T., Ericksen, J., 1956. Nonlinear elasticity. Advances in applied mechanics 4: 53–115.
- van Engelen, R. A., Wolters, L., Cats, G., 1995. Ctadel: A Generator of Efficient Code for PDE-based Scientific Applications. Tehnično poročilo, Leiden Institute of Advanced Computer Science, <http://www.liacs.nl/TechRep/1995/tr95-26.ps.gz>.
- Eyheramendy, D., Zimmermann, T., 2000. Object-oriented symbolic derivation and automatic programming of finite elements in mechanics. Engineering with Computers 15, 1: 12–36.
- Flory, P., 1961. Thermodynamic relations for high elastic materials. Trans. Faraday. Soc. 57: 829–838.
- Gajo, A., 2011. Finite strain hyperelastoplastic modelling of saturated porous media with compressible constituents. International Journal of Solids and Structures 48, 11–12: 1738 – 1753. doi:10.1016/j.ijsolstr.2011.02.021.
- Gallopoulos, E., Houstis, E., , Rice, J., 1994. Problem-Solving Environments for Computational Science. IEEE Computational Science in Engineering 1: 11–23.

- Goddard, J. D., Ledniczky, K., 1997. On the Spectral Representation of Stretch and Rotation. *Journal of Elasticity* 47, 3: 255–259.
- Griewank, A., Walther, A., 2008. *Evaluating Derivatives: Principles and Techniques of Algorithmic Differentiation*, Philadelphia, Pennsylvania, USA. Society for Industrial and Applied Mathematics.
- Hencky, H., 1928. Über die Form des Elastizitätsgesetzes bei ideal elastischen Stoffen. *Z. Techn. Phys.* 9: 215–220.
- Hencky, H., 1931. The Law of Elasticity for Isotropic and Quasi-Isotropic Substances by Finite Deformations. *Journal of Rheology* 2, 2: 169–176. doi:10.1122/1.2116361.
- Hencky, H., 1933. The Elastic Behavior of Vulcanized Rubber. *Rubber Chemistry and Technology* 6, 2: 217–224. doi:10.5254/1.3547545.
- Higham, N., 2008. *Functions of Matrices*, Philadelphia, Pennsylvania, USA. Society for Industrial and Applied Mathematics, 431 str.. doi:10.1137/1.9780898717778.
- Hill, R., 1968a. On constitutive inequalities for simple materials—I. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 16, 4: 229–242. doi:10.1016/0022-5096(68)90031-8.
- Hill, R., 1968b. On constitutive inequalities for simple materials—II. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 16, 5: 315–322. doi:10.1016/0022-5096(68)90018-5.
- Horgan, C. O., Murphy, J. G., 2009. A generalization of Hencky's strain-energy density to model the large deformations of slightly compressible solid rubbers. *Mechanics of Materials* 41, 8: 943–950. doi:10.1016/j.mechmat.2009.03.001.
- Hozjan, T., Saje, M., Srpčič, S., Planinc, I., 2011. Fire analysis of steel–concrete composite beam with interlayer slip. *Computers & Structures* 89, 1–2: 189–200.
- Hozjan, T., Svensson, S., 2011. Theoretical analysis of moisture transport in wood as an open porous hygroscopic material. *Holzforschung: International Journal of the Biology, Chemistry, Physics and Technology of Wood* 65, 1: 97–102.
- Hudobivnik, B., Korelc, J., 2013. Automatic differentiation based formulation of coupled problems. V Idelsohn, S., Papadrakakis, M., Schrefler, B., Ur., V International Conference on Computational Methods for Coupled Problems in Science and Engineering held in Ibiza, Spain 17-19 June 2013, 1331–1342. International Center for Numerical Methods in Engineering.
- Hudobivnik, B., Korelc, J., 2016. Closed-form representation of matrix functions in the formulation of nonlinear material models. *Finite Elements in Analysis and Design* 111: 19 – 32. doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.finel.2015.12.002.
- Hudobivnik, B., Korelc, J., Šolinc, U., Limbert, G., 2014. Optimizacija gubanja modela umetne kože z izoparametričnimi in izogeometričnimi končnimi elementi. V Kuhljevi Dnevi 2014, Zbornik del, 63–70, Rogaška slatina. Slovensko društvo za mehaniko.
- Hughes, T., 2012. *The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*. Dover Civil and Mechanical Engineering, Mineola, New York, USA. Dover Publications.
- Hughes, T. J. R., Cottrell, J. A., Bazilevs, Y., 2005. Isogeometric analysis: CAD, finite elements, NURBS, exact geometry and mesh refinement. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 194, 39–41: 4135–4195. doi:10.1016/j.cma.2004.10.008.

- Ibrahimbegović, A., 2009. *Nonlinear Solid Mechanics*, Netherlands. Springer, 574 str..
- Irons, B. M., 1971. Quadrature rules for brick based finite elements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 3, 2: 293–294. doi:10.1002/nme.1620030213.
- Itskov, M., Aksel, N., 2002. A closed-form representation for the derivative of non-symmetric tensor power series. *International Journal of Solids and Structures* 39, 24: 5963–5978. doi: 10.1016/S0020-7683(02)00464-X.
- Karrech, A., Poulet, T., Regenauer-Lieb, K., 2012. Poromechanics of saturated media based on the logarithmic finite strain. *Mechanics of Materials* 51, 0: 118–136.
- Korelc, J., 1997. Automatic generation of finite-element code by simultaneous optimization of expressions. *Theoretical Computer Science* 187, 1-2: 231–248.
- Korelc, J., 2002. Multi-language and Multi-environment Generation of Nonlinear Finite Element Codes. *Engineering with Computers* 18, 4: 312–327.
- Korelc, J., 2009. Automation of primal and sensitivity analysis of transient coupled problems. *Computational Mechanics* 44, 5: 631–649.
- Korelc, J., 2011. *AceGen* and *AceFEM* user manual. URL <http://www.fgg.uni-lj.si/symech/>.
- Korelc, J., Stupkiewicz, S., 2014. Closed-form matrix exponential and its application in finite-strain plasticity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 1–28. doi:10.1002/nme.4653.
- Krabbenhoft, K., 2007. An alternative to primary variable switching in saturated-unsaturated flow computations. *Advances in Water Resources* 30, 3: 483–492.
- Levenston, M. E., Eisenberg, S. R., Grodzinsky, A. J., 1998. A variational formulation for coupled physicochemical flows during finite deformations of charged porous media. *International Journal of Solids and Structures* 35, 34-35: 4999–5019.
- Lewis, M. W., Rangaswamy, P., 2011. Constitutive Models for Rubber VII, poglavje A stable hyperelastic model for foamed rubber, 119–124. CRC Press. doi:10.1201/b11687-23.
- Lewis, M. W., Rangaswamy, P., 2013. Constitutive Models for Rubber VIII, poglavje Toward a hyperelastic model for foamed rubber with matrix compressibility and pore gas effects, 239–244. CRC Press. doi:10.1201/b14964-44.
- Lewis, R. W., Nithiarasu, P., Seetharamu, K. N., 2004. *Fundamentals of the Finite Element Method for Heat and Fluid Flow*, Chichester, England. John Wiley & Sons, Ltd, 341 str..
- Lewis, R. W., Schrefler, B. A., 1998. *The finite element method in the static and dynamic deformation and consolidation of porous media*, Chichester, England. John Wiley.
- Li, C., Borja, R. I., Regueiro, R. A., 2004. Dynamics of porous media at finite strain. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 193, 36–38: 3837 – 3870. doi:10.1016/j.cma.2004.02.014.
- Logg, A., 2007. Automating the Finite Element Method. *Archives of Computational Methods in Engineering* 14, 2: 93–138.
- Lu, J., 2004. Exact expansions of arbitrary tensor functions  $F(A)$  and their derivatives. *International Journal of Solids and Structures* 41, 2: 337–349.

- Matthies, H. G., Steindorf, J., 2002. Partitioned but strongly coupled iteration schemes for nonlinear fluid–structure interaction. *Computers & Structures* 80, 27–30: 1991 – 1999. doi:10.1016/S0045-7949(02)00259-6.
- Matthies, H. G., Steindorf, J., 2003. Partitioned strong coupling algorithms for fluid–structure interaction. *Computers & Structures* 81, 8–11: 805 – 812. doi:10.1016/S0045-7949(02)00409-1. K.J Bathe 60th Anniversary Issue.
- Melink, T., 2014. Metoda stohastičnih končnih elementov v modeliranju konstrukcij. Doktorska disertacija, Fakulteta za gradbeništvo in geodezijo, Univerza v Ljubljani.
- Miehe, C., 1995. Entropic thermoelasticity at finite strains. Aspects of the formulation and numerical implementation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 120, 3–4: 243 – 269. doi:10.1016/0045-7825(94)00057-T.
- Moler, C., Van Loan, C., 1978. Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix. *SIAM Review* 20, 4: 801–836. doi:10.1137/1020098.
- Moler, C., Van Loan, C., 2003. Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix, Twenty-Five Years Later. *SIAM Review* 45, 1: 3–49. doi:10.2307/25054364.
- Mooney, M., 1940. A Theory of Large Elastic Deformation. *Journal of Applied Physics* 11, 9: 582–592. doi:10.1063/1.1712836.
- Moran, M. J., Shapiro, H. N., 2009. *Fundamentals of engineering thermodynamics*. 6 edition, New York, NY. John Wiley and Sons Inc.
- Mroginski, J. L., Di Rado, H. A., Beneyto, P. A., Awruch, A. M., 2010. A finite element approach for multiphase fluid flow in porous media. *Mathematics and Computers in Simulation* 81, 1: 76–91. doi:10.1016/j.matcom.2010.07.001.
- Nedjar, B., 2013a. Formulation of a nonlinear porosity law for fully saturated porous media at finite strains. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 61, 2: 537 – 556. doi:10.1016/j.jmps.2012.09.010.
- Nedjar, B., 2013b. Poromechanics approach for modeling closed-cell porous materials with soft matrices. *International Journal of Solids and Structures* 50, 20–21: 3184 – 3189. doi:10.1016/j.ijsolstr.2013.05.022.
- Nedjar, B., 2014. On finite strain poroplasticity with reversible and irreversible porosity laws. Formulation and computational aspects. *Mechanics of Materials* 68: 237 – 252. doi:10.1016/j.mechmat.2013.08.011.
- Obeid, W., Mounajed, G., Alliche, A., 2001. Mathematical formulation of thermo-hygro-mechanical coupling problem in non-saturated porous media. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 190, 39: 5105–5122.
- Ogden, R. W., 1972. Large Deformation Isotropic Elasticity - On the Correlation of Theory and Experiment for Incompressible Rubberlike Solids. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 326, 1567: 565–584. doi:10.1098/rspa.1972.0026.
- Ogden, R. W., 1997. *Non-Linear Elastic Deformations*. Dover Civil and Mechanical Engineering, Mineola, New York, USA. Dover Publications.

- Oñate, E., 2009. Structural Analysis with the Finite Element Method. Linear Statics: Volume 1: Basis and Solids. Lecture Notes on Numerical Methods in Engineering and Sciences, Barcelona, Spain. Springer.
- Ortiz, M., Pandolfi, A., 2004. A variational Cam-clay theory of plasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 193, 27–29: 2645–2666.
- Ortiz, M., Radovitzky, R. A., Repetto, E. A., 2001. The computation of the exponential and logarithmic mappings and their first and second linearizations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 52, 12: 1431–1441. doi:10.1002/nme.263.
- Ortiz, M., Stainier, L., 1999. The variational formulation of viscoplastic constitutive updates. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 171, 3–4: 419–444.
- Pironneau, O., Hecht, F., Hyaric, A., 2008. FreeFem++. Tehnično poročilo, [www.freefem.org](http://www.freefem.org).
- Réthoré, J., de Borst, R., Abellan, M.-A., 2008. A two-scale model for fluid flow in an unsaturated porous medium with cohesive cracks. *Computational Mechanics* 42, 2: 227–238.
- Rivlin, R. S., 1948. Large Elastic Deformations of Isotropic Materials. IV. Further Developments of the General Theory. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 241, 835: 379–397. doi:10.1098/rsta.1948.0024.
- Roscoe, K. H., Burland, J. B., 1968. ON THE GENERALIZED STRESS-STRAIN BEHAVIOUR OF WET CLAY. Report, Road Research Laboratory.
- Roscoe, K. H., Schofield, A. N., Wroth, C. P., 1958. On The Yielding of Soils. *Géotechnique* 8, 1: 22–53.
- Rouainia, M., Muir Wood, D., 2000. An implicit constitutive algorithm for finite strain Cam-clay elastoplastic model. *Mechanics of Cohesive-frictional Materials* 5, 6: 469–489.
- Schaap, M. G., Van Genuchten, M. T., 2006. A Modified Mualem-van Genuchten Formulation for Improved Description of the Hydraulic Conductivity Near Saturation. *Vadose Zone Journal* 5, 12: 8.
- Schrefler, B. A., 1995. F. E. in environmental engineering: Coupled thermo-hydro-mechanical processes in porous media including pollutant transport. *Archives of Computational Methods in Engineering* 2, 3: 1–54.
- Schrefler, B. A., Scotta, R., 2001. A fully coupled dynamic model for two-phase fluid flow in deformable porous media. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 190, 24–25: 3223 – 3246. doi:10.1016/S0045-7825(00)00390-X. *Advances in Computational Methods for Fluid-Structure Interaction*.
- Schrefler, B. A., Xiaoyong, Z., 1993. A fully coupled model for water flow and airflow in deformable porous media. *Water Resour. Res.* 29, 1: 155–167.
- Seth, B., 1961. Generalized strain measure with applications to physical problems. Tehnično poročilo, Defense Technical Information Center.
- Simo, J. C., Hughes, T. J. R., 1998. *Computational Inelasticity*, New York, USA. Springer-Verlag.

- Simo, J. C., Miehe, C., 1992. Associative coupled thermoplasticity at finite strains: Formulation, numerical analysis and implementation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 98, 1: 41–104.
- Stadler, M., Holzapfel, G. A., Korelc, J., 2003. Cn continuous modelling of smooth contact surfaces using NURBS and application to 2D problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 57, 15: 2177–2203. doi:10.1002/nme.776.
- Storåkers, B., 1986. On material representation and constitutive branching in finite compressible elasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 34, 2: 125 – 145. doi:10.1016/0022-5096(86)90033-5.
- Šuštar, T., 2002. A Solution Approach to Non-linear Multi-field Problems. Doktorska disertacija, University of Wales Swansea.
- Svensson, S., Turk, G., Hozjan, T., 2011. Predicting moisture state of timber members in a continuously varying climate. *Engineering Structures* 33, 11: 3064–3070.
- Uzuoka, R., Borja, R. I., 2012. Dynamics of unsaturated poroelastic solids at finite strain. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 36, 13: 1535–1573. doi:10.1002/nag.1061.
- Van Genuchten, M. T., 1980. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil science society of America journal* 44, 5: 892–898.
- Vogel, T., van Genuchten, M., Cislerova, M., 2000. Effect of the shape of the soil hydraulic functions near saturation on variably-saturated flow predictions. *Advances in Water Resources* 24, 2: 133 – 144. doi:10.1016/S0309-1708(00)00037-3.
- Wang, W., Kosakowski, G., Kolditz, O., 2009. A parallel finite element scheme for thermo-hydro-mechanical (THM) coupled problems in porous media. *Computers and Geosciences* 35, 8: 1631–1641. doi:10.1016/j.cageo.2008.07.007.
- Wolfram Research, I., 2013. Mathematica version 9, Champaign, Illinois, USA. Wolfram Research, Inc. URL <http://www.wolfram.com/mathematica/>.
- Wriggers, P., 2008. *Nonlinear finite element methods*, Berlin, Germany. Springer.
- Xiao, H., 2005. Hencky Strain and Hencky Model: Extending History and Ongoing Tradition. *Multidiscipline Modeling in Materials and Structures* 1, 1: 1–52.
- Xiao, H., Chen, L. S., 2002. Hencky's elasticity model and linear stress-strain relations in isotropic finite hyperelasticity. *Acta Mechanica* 157, 1-4: 51–60. doi:10.1007/BF01182154.
- Zienkiewicz, O. C., Taylor, R. L., 2000a. *The Finite Element Method*, volume 1. 5th edition, Oxford, UK. Butterworth-Heinemann.
- Zienkiewicz, O. C., Taylor, R. L., 2000b. *The Finite Element Method*, volume 2. 5th edition, Oxford, UK. Butterworth-Heinemann.
- Zienkiewicz, O. C., Taylor, R. L., 2000c. *The Finite Element Method*, volume 3. 5th edition, Oxford, UK. Butterworth-Heinemann.