



**POLITECHNIKA
BYDGOSKA**
im. Jana i Jędrzeja Śniadeckich

**RADA NAUKOWA DISCYPLINY INŻYNIERIA
LĄDOWA, GEODEZJA I TRANSPORT**

ROZPRAWA DOKTORSKA

mgr inż. Magdalena Sosnowska

**MODELOWANIE TERMODYFUZJI SPRZĘŻONEJ
METODĄ ELEMENTÓW
CZASOPRZESTRZENNYCH**

***Modeling of coupled thermodiffusion using
the space-time finite element method***

DZIEDZINA: NAUK INŻYNIERYJNO-TECHNICZNYCH
DISCYPLINA: INŻYNIERIA LĄDOWA, GEODEZJA I TRANSPORT

PROMOTOR

PROF. DR HAB. INŻ. ADAM PODHORECKI
POLITECHNIKA BYDGOSKA IM. JANA I JĘDRZEJA ŚNIADECKICH

PROMOTOR POMOCNICZY

DR HAB. INŻ. MAGDALENA DOBISZEWSKA, PROF. PBŚ
POLITECHNIKA BYDGOSKA IM. JANA I JĘDRZEJA ŚNIADECKICH

Bydgoszcz, 2023

Publikacja wydana na prawach rękopisu

SPIS TREŚCI

1. Wstęp	9
1.1. Przedmiot, cel i zakres pracy, tezy badawcze	9
1.2. Znaczenie termodyfuzji w budownictwie	10
2. Aktualny stan wiedzy odnoszący się do zagadnienia termodyfuzji sprzężonej i metody elementów czasoprzestrzennych	16
2.1. Przegląd literatury z zakresu metody elementów czasoprzestrzennych	16
2.2. Przegląd literatury z zakresu termodyfuzji	17
2.3. Podsumowanie	20
3. Zagadnienie początkowo – brzegowe termodyfuzji sprzężonej	22
3.1. Sformułowanie problemu, przyjęte założenia	22
3.2. Podstawowe równania dyfuzji i przewodnictwa cieplnego	23
3.3. Równania różniczkowe termodyfuzji	33
3.4. Zestawienie równań termodyfuzji sprzężonej	43
4. Równania czasopracy wirtualnej	49
4.1. Wprowadzenie	49
4.2. Wyprowadzenie równań czasopracy wirtualnej termodyfuzji sprzężonej	49
4.3. Rozszerzenie zasady hamiltona na zagadnienie termodyfuzji sprzężonej	56
5. Metoda elementów czasoprzestrzennych do rozwiązywania zagadnienia termodyfuzji sprzężonej	59
5.1. Istota metody elementów czasoprzestrzennych	59
5.2. Określenie charakterystyki elementu czasoprzestrzennego (SKECZ) w zagadnieniach termodyfuzji sprzężonej	61
5.3. Równania metody elementów czasoprzestrzennych	65
5.4. Rekurencyjny charakter równań metody elementów czasoprzestrzennych	69

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

5.5. Kryteria doboru funkcji kształtu oraz stabilność metody elementów czasoprzestrzennych	72
6. Przykłady obliczeniowe	76
6.1. Pręt prosty poddany działaniu obciążenia, ciepła i dyfuzji	76
6.2. Rozważane problemy	82
6.3. Przykład nr 1 – drgania podłużne pręta wywołane wymuszeniem kinematycznym	85
6.4. Przykład nr 2 – wpływ dyskretyzacji czasoprzestrzennej na stabilność i dokładność mecz	88
6.5. Przykład nr 3 – obciążenie pręta siłą podłużną wywołujące drgania pręta, powstanie zmiennej temperatury i zmiennego stężenia substancji dyfundującej	94
6.6. Przykład nr 4 – źródło ciepła wywołujące drgania pręta, powstanie zmiennej temperatury i zmiennego stężenia substancji dyfundującej	105
6.7. Przykład nr 5 – źródło substancji dyfundującej wywołujące drgania pręta, powstanie zmiennej temperatury i zmiennego stężenia substancji dyfundującej	117
6.8. Przykład nr 6 – obciążenie pręta siłą podłużną, źródłem ciepła i substancji dyfundującej wywołujące drgania pręta, powstanie zmiennej temperatury i zmiennego stężenia substancji dyfundującej	131
7. Wnioski końcowe	137
Literatura	140
Streszczenie	152
Abstract	153

WYKAZ WAŻNIEJSZYCH OZNACZEŃ

- A – pole przekroju poprzecznego [m^2],
 b – stała materiałowa [$\frac{\text{J}}{\text{kg K}}$],
 C – stężenie substancji dyfundującej [$\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$],
 C_{ijkl} – składowa tensora opisującego parametry materiałowe związane z mechanicznymi właściwościami materiału [$\frac{\text{N}}{\text{m}^2}$],
 c – zmiana stężenia dyfundującej substancji [$\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$],
 $c_{\varepsilon,c}$ – ciepło właściwe przy ustalonej deformacji i koncentracji [$\frac{\text{J}}{\text{K m}^3}$],
 D – współczynnik dyfuzji [$\frac{\text{m}^2}{\text{s}}$],
 dS – zmiana entropii [$\frac{\text{J}}{\text{K m}^3}$],
 $d_e S$ – zmiana entropii wywołana oddziaływaniem układu z otoczeniem [$\frac{\text{J}}{\text{K m}^3}$],
 $d_i S$ – zmiana entropii wywołana przemianami wewnątrz układu [$\frac{\text{J}}{\text{K m}^3}$],
 E – moduł Younga [Pa],
 e – dylatacja, pierwszy niezmiennik stanu odkształcenia, względna zmiana objętości [–],
 F – energia swobodna Helmholtza [$\frac{\text{J}}{\text{m}^3}$],
 f_i – składowa wektora intensywności obciążenia przypadającego na jednostkę masy [$\frac{\text{N}}{\text{kg}}$],
 \mathcal{K} – energia kinetyczna [J],
 K – moduł ściśliwości [$\frac{\text{N}}{\text{m}^2}$],
 k – współczynnik przewodnictwa cieplnego [$\frac{\text{W}}{\text{m K}}$],
 \mathcal{L} – moc sił zewnętrznych [$\frac{\text{J}}{\text{s}}$],
 M – potencjał chemiczny [$\frac{\text{J}}{\text{kg}}$],
 n_i – kosinus kierunkowy orientujący powierzchnię graniczną ∂B (ν – normalna do powierzchni granicznej ∂B) [–],
 p_i – składowa wektora sił powierzchniowych [$\frac{\text{N}}{\text{m}^2}$],
 \dot{Q} – strumień ciepła, przyrost ilości ciepła w czasie [$\frac{\text{J}}{\text{s}}$],
 q_i – składowa wektora gęstości strumienia ciepła [$\frac{\text{W}}{\text{m}^2}$],
 S – entropia [$\frac{\text{J}}{\text{K m}^3}$],
 T – temperatura bezwzględna [K],
 \mathcal{U} – energia wewnętrzna [J],
 U – elementarna energia wewnętrzna [$\frac{\text{J}}{\text{m}^3}$],

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

- u_i – składowa wektora przemieszczeń [m],
 v_i – składowa wektora prędkości przemieszczeń [$\frac{m}{s}$],
 \dot{v}_i – składowa wektora przyspieszeń przemieszczeń [$\frac{m}{s^2}$],
 W – wydajność wewnętrznych źródeł ciepła [$\frac{W}{m^3}$],
 α – współczynnik uwzględniający efekt Dufoura [$\frac{J}{kg}$],
 α_c – współczynnik liniowej rozszerzalności dyfuzyjnej [$\frac{m^3}{kg}$],
 α_t – współczynnik liniowej rozszerzalności termicznej [$\frac{1}{K}$],
 α_{ij} – składowa tensora opisującego parametry materiałowe związane z mechanicznymi i termicznymi właściwościami materiału [$\frac{N}{K m^2}$],
 β_{ij} – składowa tensora opisującego parametry materiałowe związane z mechanicznymi i dyfuzyjnymi właściwościami materiału [$\frac{N m}{kg}$],
 δ_{ij} – delta Kroneckera [–],
 ε_{ij} – składowa tensora odkształceń [–],
 $\dot{\varepsilon}_{ij}$ – składowa tensora prędkości odkształceń [$\frac{1}{s}$],
 η_i – składowa wektora przepływu substancji dyfundującej [$\frac{kg}{m^2 \cdot s}$],
 θ – zmiana temperatury [deg],
 λ – stała materiałowa Lamé'go [$\frac{N}{m^2}$],
 λ_0 – współczynnik przewodzenia ciepła [$\frac{W}{m \cdot K}$],
 μ – stała materiałowa Lamé'go [$\frac{N}{m^2}$],
 ν – współczynnik Poissona [–],
 ρ – gęstość objętościowa ciała [$\frac{kg}{m^3}$],
 σ_{ij} – składowa tensora naprężeń [$\frac{N}{m^2}$],
 τ – wydajność wewnętrznych źródeł masy [$\frac{kg}{m^3 \cdot s}$],
 ω_{ij} – składowa tensora obrotu odkształceń [–],
 $\dot{\omega}_{ij}$ – składowa tensora prędkości obrotu odkształceń [$\frac{1}{s}$].

1. WSTĘP

1.1. PRZEDMIOT, CEL I ZAKRES PRACY, TEZY BADAWCZE

Zmiany pola temperatury i stężenia substancji dyfundującej pociągają za sobą deformację ciała. Odwrotnie, jeśli wywołamy proces deformacji w analizowanym ośrodku, to doprowadzi on do wtórnego procesu przewodzenia energii cieplnej i przepływu masy. Te zjawiska są ze sobą nierozdzielnie związane a termodyfuzja, jako dział mechaniki ciała stałego, zajmuje się badaniem tego sprzężenia [Nowacki 1991]. Sprzężone ze sobą pola temperatury, stężenia substancji dyfundującej i deformacji mogą być spowodowane siłami masowymi, siłami zewnętrznymi, oddziaływaniem ośrodka, który otacza ciało, wewnętrznymi źródłami ciepła lub masy. Uwzględnienie wzajemnego sprzężenia jest szczególnie istotne w przypadku zjawisk dynamicznych, dużych lub gwałtownie zachodzących zmian temperatury lub/i stężenia substancji dyfundującej. W dziedzinie budownictwa wyróżnić można wiele zjawisk z zakresu termodyfuzji, np. procesy ciepłno – wilgotnościowe lub powierzchniowe obróbki ciepłno – chemiczne.

Celem niniejszej pracy jest opracowanie modelu ciała stałego geometrycznie i fizycznie liniowego, poddanego działaniu zmiennego w czasie i przestrzeni obciążenia, oddziaływaniom termicznym oraz przepływowi masy, a także sformułowanie algorytmu rozwiązania tego problemu z użyciem metody elementów czasoprzestrzennych. Rozpatruje się niestacjonarny (nieustalony) przepływ ciepła i masy. Oznacza to, że rozkład temperatury i stężenia substancji dyfundującej oraz ilość wymienianego ciepła i masy ulegają zmianie w czasie. Energia wewnętrzna ciała zależna jest zatem od pola odkształceń, temperatury i stężenia substancji dyfundującej, a rozważanemu przypadkowi towarzyszy zmiana tej energii (dyssypacja energii). Stąd teza badawcza rozprawy brzmi: możliwe jest uzyskanie efektywnego rozwiązania zagadnienia początkowo – brzegowego termodyfuzji sprzężonej w ciałach stałych z użyciem metody elementów czasoprzestrzennych.

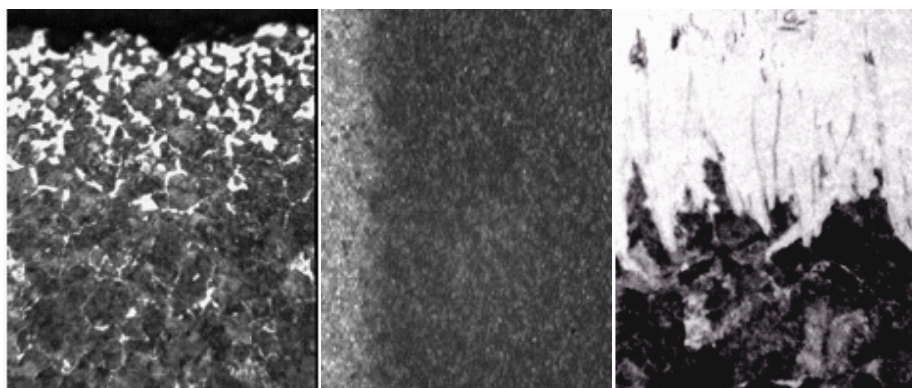
W części pierwszej rozprawy scharakteryzowano przedmiot, cel i zakres pracy oraz sformułowano tezę badawczą. Przedstawiono również znaczenie analizowanego zjawiska w budownictwie. Następnie dokonano przeglądu literatury zarówno z zakresu termodyfuzji, jak i metody elementów czasoprzestrzennych. Część trzecia rozprawy zawiera opis zagadnienia początkowo-brzegowego termodyfuzji sprzężonej w rozważanym ośrodku, począwszy od sformułowania problemu i przyjętych założeń, poprzez podstawy teoretyczne procesu, aż po syntezę równań różniczkowych cząstkowych względem czasu i przestrzeni. Wyprowadzone w tej części pracy zależności stanowią lokalne zdefiniowanie analizowanego zagadnienia. W celu rozwiązania tego problemu z użyciem metody elementów czasoprzestrzennych, konieczne jest przejście na sformułowanie globalne, obejmujące cały rozpatrywany obszar

danego ciała i cały przedział czasowy. Jednym ze sposobów przekształcenia sformułowania lokalnego w globalne jest zastosowanie metody czasopracy wirtualnej, co jest przedmiotem części czwartej niniejszej rozprawy. Następnie wyprowadzono równania metody elementów czasoprzestrzennych i scharakteryzowano algorytm obliczeń. W rezultacie, w części szóstej pracy, przedstawiono przykłady obliczeniowe z analizą otrzymanych wyników, w celu weryfikacji poprawności przyjętej metody rozwiązania rozważanego problemu. Na tej podstawie sformułowano wnioski końcowe.

1.2. ZNACZENIE TERMODYFUZJI W BUDOWNICTWIE

Dyfuzja jest zjawiskiem powszechnie spotykanym, zarówno w przyrodzie, jak i w technologicznych zastosowaniach. Jeżeli złączymy ze sobą dwie płytki metalowe, np. złotą i ołowianą, to po kilkunastu miesiącach zaobserwujemy, że cząsteczki ołowiu przejdą do złotej płytki i wzajemnie – cząsteczki złota do płytki ołowianej. Jest to tzw. dyfuzja wzajemna, czyli dwustronna. To proste doświadczenie pokazuje również, że dyfuzja jest zjawiskiem o charakterze molekularnym i statystycznym. Jednakże makroskopowa obserwacja tego procesu pozwala na traktowanie go w taki sposób, jak gdyby odbywał się w sposób ciągły. Dzięki temu możliwe jest sprowadzenie termodyfuzji do rozwiązywania zagadnień teorii ośrodków ciągłych.

Z technologicznego punktu widzenia, praktycznym przykładem dyfuzji są powierzchniowe obróbki ciepłno-chemiczne, takie jak azotowanie, nawęglanie, czy borowanie (rys. 1.1). W warunkach podwyższonej temperatury zachodzi wówczas termodyfuzja jednostronna, tj. dyfuzja gazu do ciała stałego. Z badań eksperymentalnych wynika, że wzrost temperatury na ogół w znaczący sposób przyspiesza przebieg dyfuzji. Niekiedy proces ten w warunkach naturalnych zachodzi na tyle powoli, że jego obserwacja jest niedostrzegalna i bezcelowa. Bardzo często do obróbki powierzchniowej metali stosuje się również różnego typu powłoki. Wówczas zachodzi proces dyfuzji wzajemnej. Zarówno w jednym, jak i w drugim przypadku, poznanie złożonych procesów transportowych pozwala na uzyskanie lepszych właściwości wierzchniej warstwy ochronnej. Umożliwia to optymalizację parametrów mechanicznych i chemicznych tych materiałów, a także prognozowanie ich trwałości. Przykłady wyznaczania pola naprężeń generowanego dyfuzją wzajemną w układzie powłoka – podłoże można znaleźć w pracy Wierzby [Wierzba 2006].



Rys. 1.1. Przebieg różnych procesów obróbki cieplno-chemicznej; od lewej: warstewka dyfuzyjna złożona z węgla, azotu, borków żelaza, uzyskana na płycie stalowej [<http://www.labmat.pw.plock.pl>]

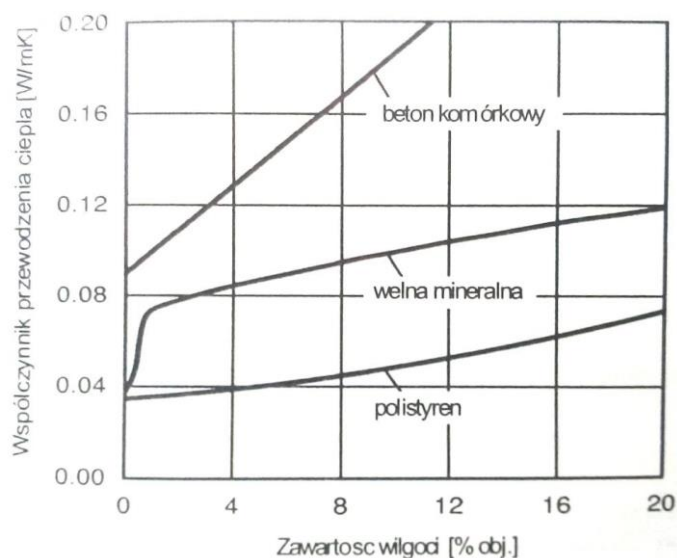
W dziedzinie budownictwa znaczącą grupę zjawisk z zakresu termodyfuzji stanowią procesy cieplno – wilgotnościowe, które są domeną fizyki budowli. Przepływ wilgoci i ciepła przez przegrody budowlane jest w dobie racjonalizowania zużycia energii jednym z głównych problemów projektowych i wykonawczych, interesujących inżynierów budownictwa. Dyfuzyjny przepływ pary wodnej może wpływać na wiele niekorzystnych zjawisk, jak np. korozja biologiczna i chemiczna, co w znaczący sposób pogarsza właściwości fizyko – mechaniczne materiałów (rys. 1.2). Oddziałuje to na trwałość i cechy użytkowe wykonanych z nich konstrukcji. Korozja chemiczna materiałów budowlanych spowodowana jest m.in. przez różnego rodzaju agresywne związki chemiczne, które w połączeniu z wodą tworzą kwasy: solny, siarkowy i węglowy [Dylla 2009]. Innym chemicznym skutkiem zawilgocenia są wykwity soli na powierzchniach zewnętrznych materiałów. Nośnikiem soli jest woda – podczas jej odparowywania dochodzi do krystalizacji soli. Z kolei korozja biologiczna przejawia się przede wszystkim w rozwoju glonów, mchów, porostów, bakterii i grzybów, które wpływają nie tylko na właściwości materiału, ale przede wszystkim są zagrożeniem dla zdrowia osób, mających kontakt z tymi elementami.



Rys. 1.2. Przykłady korozji biologicznej przegród budowlanych [Sosnowska 2015]

Wilgoć ma znaczący wpływ na izolacyjność cieplną materiałów budowlanych, co przykładowo zostało zaprezentowane na rys. 1.3. Woda, wnikając w pory materiału, wypiera powietrze. Ponieważ woda ma wielokrotnie wyższy współczynnik przewodzenia ciepła λ niż powietrze ($\lambda_{\text{powietrza}} = 0,02 \text{ W/mK}$, $\lambda_{\text{wody}} = 0,6 \text{ W/mK}$), powoduje tym większe obniżenie termoizolacyjności, im większa jest jej ilość w materiale [Dylla 2009]. W niektórych materiałach budowlanych, pory i kapilary pozwalają na wypełnienie wodą do 40% objętości całkowitej materiału. Często do opisu zależności między zawartością wilgoci a współczynnikiem przewodzenia ciepła λ wykorzystuje się prostą zależność liniową, mimo iż jest ona ważna tylko w przypadku niektórych materiałów budowlanych. Zawilgocenie powoduje również zmniejszenie wytrzymałości mechanicznej materiałów. Jest to spowodowane m.in. osłabianiem połączeń między kryształami siatki wewnętrznej materiału na skutek wilgoci. Ponadto nadmierne zmiany objętości elementu, na skutek wahań zawartości wody, wywołują skurcz i naprężenia. Prowadzi to często do powstawania rys i spękań, które również przyczyniają się do spadku wytrzymałości. Dla przykładu, wytrzymałość na ściskanie betonu komórkowego jest od 10 do 27% niższa przy wilgotności 30% w stosunku do wilgotności wynoszącej 8% [Dylla 2009].

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych



Rys. 1.3. Wyniki pomiarów współczynnika przewodzenia ciepła dla różnych materiałów w zależności od ich wilgotności względnej [Gawin 2007]

Trudności w opisie procesów ciepłno – wilgotnościowych materiałów budowlanych, które są w większości materiałami porowatymi, wynikają z różnych mechanizmów przenoszenia masy i energii. Zależą one w dużej mierze od stanu zawilgocenia materiału, jego struktury wewnętrznej oraz zachodzących przemian fazowych. Wilgoć w materiałach budowlanych występuje w różnorodnych postaciach [Gawin 2000]:

- woda związana chemicznie – powstaje na skutek rozkładu niektórych związków chemicznych, budujących szkielet materiału, jest to proces nieodwracalny, woda związana chemicznie doznaje jedynie niewielkich przemieszczeń na skutek odkształceń materiału;
- woda zaadsorbowana fizycznie – ten typ wilgoci przemieszcza się na skutek dyfuzji wody na powierzchni elementu z obszarów o wyższej koncentracji wilgoci ku obszarom o niższej koncentracji;
- woda kapilarna – przepływ wody kapilarnej spowodowany jest gradientem ciśnienia wody lub działaniem sił grawitacji, proces ten traktowany jest zwykle jako dyfuzja wywołana gradientem koncentracji wilgoci i opisywany prawem Ficka;
- woda swobodna – w większości przegród budowlanych występuje ona jedynie w sytuacjach wyjątkowych, takich jak powódź lub obfite opady deszczu, przepływ wody swobodnej odbywa się według podobnych mechanizmów co w przypadku wody kapilarnej, jednakże większą rolę odgrywają siły grawitacji;
- para wodna – może się ona przemieszczać w wyniku dyfuzji cząstek wody (ten mechanizm można opisać prawem Ficka) oraz na skutek

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

unoszenia adwekcyjnego cząstek wody wraz ze strumieniem gazu (ten mechanizm można opisać prawem Darcy'ego);

- lód – w większości przegród budowlanych nie występuje on w warunkach normalnej eksploatacji, na ogół przyjmuje się, że lód nie może się przemieszczać.

Więcej na ten temat można znaleźć w monografii Gawina [Gawin 2000], w której sformułowano zagadnienie początkowo – brzegowe opisujące sprzężone zjawiska ciepłno – wilgotnościowe w odkształcalnych materiałach budowlanych z uwzględnieniem m.in. struktury wewnętrznej wielofazowego ośrodka, przemian fazowych, procesu hydratacji lub dehydratacji cementu, podstawowych mechanizmów ruchu wody w różnych stanach skupienia. Wykorzystując metodę elementów skończonych, metodę różnic skończonych oraz zmodyfikowaną metodę Newtona-Raphsona, wykonano obliczenia dotyczące m.in. procesu wysychania ściany wykonanej z betonu komórkowego i higro-termicznego zachowania się ceglanej ściany w różnych wariantach ocieplenia.

Poznanie złożonych procesów przepływu masy i ciepła, pozwala również na modelowanie zachowania się konstrukcji w sytuacjach wyjątkowych, takich jak pożar, powódź, czy awaria nuklearna. Reakcja elementów konstrukcyjnych na zwiększanie temperatury otoczenia, ma również znaczenie podczas oceny ich odporności ogniowej. Wahający się zakres temperatur wpływa na cechy fizyczne materiału oraz wody (lub pary wodnej). W materiale porowatym, modyfikacjom ulega również wewnętrzna struktura porów, przez co zmieniają się jego podstawowe właściwości. W przypadku betonu, podlega on dodatkowo dehydratacji, co uwidacznia się w postaci upustów ciepła i źródeł wody swobodnej [Gawin 2011]. Na skutek działania temperatury powstają pęknięcia i zarysowania, co prowadzi do utraty szczelności betonu i w konsekwencji do korozji stali zbrojeniowej w wyniku migracji wilgoci do wnętrza konstrukcji. Ponadto, w bardzo wysokich temperaturach, występuje na ogół gwałtowne zjawisko eksplozyjnego odpryskiwania fragmentów konstrukcji, a proces niszczenia ma wpływ na przepuszczalność właściwą betonu. Gwałtowne zmiany temperatury wpływają również na mechanizmy przenoszenia wilgoci oraz na zachodzące przemiany fazowe i chemiczne. Powyższe zjawiska fizyczne, zachodzące w betonie w wysokich temperaturach oraz szeroki przegląd literatury z zakresu modelowania betonu we wspomnianych wyżej warunkach, zostały przedstawione przez Gawina w dwuczęściowej pracy [Gawin 2011].

Niekontrolowana termodyfuzja może mieć bardzo negatywne skutki. Przykładem jest zachowanie się drewna w atmosferze o dynamicznie zmieniającej się wilgotności. Materiał ten może z jednej strony absorbować parę wodną z otoczenia, z drugiej zaś strony – przy niskiej wilgotności powietrza – mokre drewno oddaje parę wodną. Na skutek wysychania materiału dochodzi do skurczu a konsekwencją niejednorodnego rozkładu wilgoci wewnątrz elementu jest powstanie odkształceń i naprężeń. Jeżeli dyfuzja zachodzi powoli, rozkład wilgoci wewnątrz elementu można uznać za równo-

mierny i materiał jest pozbawiony wewnętrznych naprężeń suszarniczych [Śliwa 2014]. Przyspieszenie tego procesu, często pożądane ze względów technologicznych i ekonomicznych, może nastąpić na skutek dostarczenia ciepła lub dzięki poddaniu elementów drewnianych działaniu sił zewnętrznych. Niekontrolowany, lub nieumiejętnie przeprowadzony proces wysychania, może doprowadzić do paczania się elementów drewnianych, powstawania szczelin, pęknięcia lub innych uszkodzeń. W materiale powstają niepożądane, ze względów wytrzymałościowych, naprężenia wewnętrzne. Modelowanie rozkładu wilgoci w suszonym materiale lub symulacja zjawisk zachodzących w procesie suszenia, pozwala zidentyfikować te fazy suszenia, w których może dojść do niepożądanych konsekwencji. Umożliwia to świadome sterowanie procesem usuwania wilgoci, poprzez zwiększanie tempa suszenia na etapach, które nie wpływają na jakość gotowych elementów. Więcej na temat niekorzystnych zjawisk towarzyszących procesowi transportu wilgoci można znaleźć w rozprawie doktorskiej Śliwy [Śliwa 2014]. W pracy tej przedstawiono rozwiązanie numeryczne modelu matematycznego, służącego do opisu zjawisk zachodzących podczas suszenia materiałów ilastych.

Innym destrukcyjnym przykładem oddziaływania procesów ciepło – wilgotnościowych na materiały budowlane są odkształcenia mechaniczne i powstające w efekcie naprężenia w zewnętrznych wyprawach przegród budowlanych. Szacuje się, że w przeciągu doby warstwa ta jest poddawana zmianom wilgotności względnej dochodzącym do 80% i zmianom temperatury do 40°C – przy swobodnym odkształcaniu odpowiada to zmianie długości wywołanej przyrostem temperatury wynoszącej 0,4 mm/m, a wywołanej przyrostem wilgotności 0,7 mm/m [Gawin 2007]. Te zjawiska są na szczęście przeciwstawne, ponieważ wzrost temperatury powoduje obniżenie wilgotności wyprawy tynkarskiej. Z uwagi na brak swobody odkształceń, powstają naprężenia, które mogą powodować powstanie zarysowań, a w skrajnych przypadkach nawet oderwanie warstwy wykończeniowej od podłoża.

2. AKTUALNY STAN WIEDZY ODNOSZĄCY SIĘ DO ZAGADNIENIA TERMODYFUZJI SPRĘŻONEJ I METODY ELEMENTÓW CZASOPRZESTRZENNYCH

2.1. PRZEGLĄD LITERATURY Z ZAKRESU METODY ELEMENTÓW CZASOPRZESTRZENNYCH

Pierwsze sformułowanie zależności pomiędzy zmiennymi przestrzennymi a zmienną czasową w obszarze czasoprzestrzennym zostało przedstawione w opracowaniu Gurtina [Gurtin 1964]. W późniejszych pracach, m.in. Argyrisa [Argyris 1969, Argyris 1972], zaczęto traktować jednakowo dyskretyzację przestrzenną i czasową. Następnie odstąpiono od tych rozważań, koncentrując się na niezależnej dyskretyzacji w czasie i w przestrzeni. Rozwiązywanie zagadnień dynamicznych sprowadzało się do dyskretyzacji przestrzennej konstrukcji jedną metodą (np. metodą elementów skończonych, elementów brzegowych), a następnie całkowania pochodnych czasowych z użyciem innej metody (np. Newmarka, różnic skończonych). W 1975 roku Kączkowski powrócił do czasoprzestrzennego podziału przestrzeni przy rozwiązywaniu zagadnień mechaniki konstrukcji. W swoich pracach przedstawił on interpretację fizyczną sformułowanych wcześniej wielkości czasoprzestrzennych oraz opracował równanie czasopracy wirtualnej [Kączkowski 1975, Kączkowski 1976].

Początkowo metodę elementów czasoprzestrzennych wykorzystywano do rozwiązywania zagadnień dynamiki liniowej [Kączkowski 1975, Kączkowski 1976]. Następnie pojawiły się prace dotyczące stabilności tej metody [Cyganecki 1979, Cyganecki 1980, Bajer 1987, Podhorecki 1989], przy czym wskazano również na możliwość uzyskania bezwarunkowo stabilnego rozwiązania poprzez modyfikację funkcji kształtu [Kacprzyk 1983, Kacprzyk 1984]. Kolejnym etapem było zastosowanie nieprostokątnych elementów czasoprzestrzennych, w szczególności wprowadzenie niestacjonarnego w czasie podziału czasoprzestrzeni lub elementów czterowymiarowych [Kączkowski 1983, Bajer 1984, Bajer 1986, Kacprzyk 2017, Dumont 2018].

W licznych publikacjach dokonano prób wykorzystania metody elementów czasoprzestrzennych do rozwiązywania bardziej złożonych zagadnień, m.in. z zakresu:

- termosprężystości [Kączkowski 1982, Kączkowski 1985, Kączkowski 1989, Bajer 1993, Bajer 1995, Larsson 2003, Darrall 2018, Wakeni 2019, Quaine 2020, Steinbach 2020, Kopp 2021];
- dyfuzji, przepływu cieczy w ciałach porowatych [Runesson 2001, Bause 2017, Bu 2019];
- lepkość sprężystości [Podhorecki 1985, Podhorecki 1986, Podhorecki 1991, Shaw 2000, Lachowicz 2017, Shaw 2019, Zhang 2020];

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

- zagadnień geometrycznie nieliniowych [Podhorecka 1988, Bohatier 1992, Podhorecka 1998, Karakashian 1999, Pei 2019, Wakeni 2019, Kopp 2021];
- materiałów kompozytowych [Podhorecki 1994, Janiak 2007, Burns 2022];
- zagadnień kontaktowych [Bajer 1988, Bajer 1991, Bohatier 1995, Bajer 1997, Gimperlein 2019].

Podstawy teoretyczne i szczegółowy opis metody elementów czasoprzestrzennych przedstawiono m.in. w pracach Bajera [Bajer 1989], Kączkowskiego [Kączkowski 1995] i Podhoreckiego [Podhorecki 2005].

Warto wspomnieć, że Frontin i inni wskazują, iż metoda elementów czasoprzestrzennych jest obiecującym podejściem do rozwiązywania równań różniczkowych cząstkowych. W metodzie tej możliwa jest bowiem adaptacyjna redystrybucja stopni swobody, zarówno w przestrzeni jak i w czasie, w celu optymalizacji rozwiązania. Jednocześnie zwracają oni uwagę, iż aplikacja tej metody do rzeczywistych problemów inżynierskich pozostaje otwartym obszarem badań, m.in. z uwagi na trudności w opisie przestrzeni czterowymiarowej (3d+t). Stąd w swojej pracy [Frontin 2021] Frontin i inni usystematyzowali informacje na temat procedury konstruowania elementów czterowymiarowych oraz zasad całkowania numerycznego wraz z przykładami.

2.2. PRZEGLĄD LITERATURY Z ZAKRESU TERMODYFUZJI

Bibliografia dotycząca zagadnień termosprężystości i termodyfuzji jest bardzo liczna. Podstawą rozwoju tych dziedzin były badania z zakresu elastokinetyki i teorii naprężeń cieplnych. W klasycznej elastokinetyce zakładano, że proces wymiany ciepła pomiędzy cząstkami ciała następuje bardzo wolno. W takim przypadku ruch związany z przewodnictwem cieplnym można traktować jako adiabatyczny, co oznacza, że podczas przemiany termodynamicznej, nie następuje wymiana ciepła między układem a otoczeniem. Z kolei w teorii naprężeń cieplnych, podstawę stanowiło klasyczne równanie przewodnictwa cieplnego, w którym nie występował człon związany z deformacją. Przyjmowano zatem założenie upraszczające, pomijając wzajemne oddziaływanie pola temperatur i pola odkształceń. Rozwiązując równanie przewodnictwa cieplnego, wyznaczano rozkład temperatur w rozpatrywanym obszarze. Następnie, znając pole temperatur, określano wielkość deformacji z równania teorii sprężystości. Liczne przykłady rozwiązania równania przewodnictwa cieplnego, zarówno metodami analitycznymi, jak i numerycznymi, można znaleźć w monografii Wiśniewskiego [Wiśniewski 2000].

Prekursorem badań z dziedziny termosprężystości był Biot, który w swojej pracy [Biot 1956] wyprowadził podstawowe zależności i równania, a także sformułował twierdzenia wariacyjne i na szeregu przykładów objaśnił ich zastosowanie. Jako pierwszy oparł się na związkach termodynamiki procesów

nieodwracalnych, ponieważ w przemianach związanych ze zmianą temperatury występuje odwracalny proces sprężysty i nieodwracalny proces termodynamiczny (wywołany przez samorzutny proces przenoszenia ciepła). Pierwsze rozwiązanie dynamicznego zagadnienia teorii naprężeń cieplnych zostało przeprowadzone przez Daniłowską [Daniłowska 1950]. Dotyczyło ono półprzestrzeni sprężystej $X_1 > 0$ ogrzanej nagle do pewnej temperatury w płaszczyźnie $X_1 = 0$.

Podobnie jak w przypadku termosprężystości, tak i termodyfuzja w ciałach stałych była pierwotnie traktowana tak, jak gdyby nie miała ona wpływu na deformację ciała. Pierwsze związki i równania różniczkowe termodyfuzji w ciałach stałych zostały wyprowadzone w roku 1961 przez Podstrigacza [Podstrigacz 1961].

Rozwój przemysłu energetycznego, raketowego i nuklearnego w drugiej połowie XX wieku, przyczynił się do postępu badań z dziedziny termosprężystości, a następnie termodyfuzji. Znaczący wkład w rozwój teoretyczny tych zagadnień mieli naukowcy rosyjscy, między innymi Kupradze [Kupradze 1950, Kupradze 1970], Podstrigacz [Podstrigacz 1960, Podstrigacz 1965], Majziel [Majziel 1951]. Niezwykle istotne były również prace Carslaw'a [Carslaw 1951], Boley'a [Boley 1960] oraz Lord'a i Shulman'a [Lord 1967]. W Polsce bogate źródło wiedzy związanej z termosprężystością i termodyfuzją stanowią monografie Nowackiego [Nowacki 1960, Nowacki 1966, Nowacki 1972, Nowacki 1981, Nowacki 1986, Nowacki 1991]. Pod jego naukowym kierownictwem został założony ośrodek, zajmujący się zagadnieniami termosprężystymi. W licznych publikacjach i monografiach usystematyzował on podstawowe prawa, zależności, równania, a także twierdzenia energetyczne i wariacyjne z zakresu klasycznej sprzężonej termosprężystości, termolekko-sprężystości i termodyfuzji. Obok Nowackiego, wspomnieć należy również prace Rożnowskiego [Rożnowski 1969, Rożnowski 1988], Stefaniaka [Stefaniak 1982, Stefaniak 1980, Stefaniak 1987, Stefaniak 1998], Ignaczaka [Ignaczak 1958, Ignaczak 1989] i Kubika [Kubik 1986, Kubik 1999, Kubik 2012].

Rozwiązania analityczne zagadnień termosprężystości i termodyfuzji, jakkolwiek dość liczne, zawierają szereg założeń upraszczających, przez co ograniczają się do stosunkowo prostych, elementarnych przypadków [Sternberg 1957, Boley 1960, Sneddon 1960, Nowacki 1972, Mokryk 1982]. Najczęściej stosowaną w zagadnieniach termosprężystości oraz termodyfuzji i jednocześnie najbardziej popularną metodą numeryczną jest metoda elementów skończonych (MES). Znalazła ona zastosowanie zarówno w elementach dwuwymiarowych, jak i przestrzennych [Hsu 1986, Gawin 2000, Dobiszewska 2003, Dobiszewska 2004, Gawin 2011, Madureira 2021]. W przypadku quasi-statycznej termosprężystości sprzężonej, z powodzeniem wykorzystywano również metodę elementów brzegowych (MEB). W publikacjach znaleźć można rozwiązania, otrzymane przy wykorzystaniu tej metody, zarówno dla ciał izotropowych, jak i anizotropowych [Tanaka 1995, Kögl 2003, Leitner 2021, Jiang 2022]. W kilku

pracach poczyniono udane próby zastosowania metody elementów czasoprzestrzennych (MECZ) do rozwiązywania zagadnień uwzględniających przepływ ciepła [Kączkowski 1985, Bajer 1995, Larsson 2003, Podhorecki 2005, Bradley 2018, Shivay 2019]. Na uwagę zasługuje również nowatorskie uogólnienie metody różnic skończonych na bezpośrednią dyskretyzację przestrzenno-czasową. Podobnie jak ma to miejsce w metodzie elementów czasoprzestrzennych, oś czasu została wprowadzona na równi z wymiarami przestrzennymi i dokonano jednoczesnej dyskretyzacji przestrzennej i czasowej. Metodą tą rozwiązano zagadnienia uwzględniające przepływ ciepła, w szczególności przykłady dynamicznej sprzężonej termosprężystości w płytach jednorodnych i niejednorodnych w różnych wariantach obciążenia [Lei 2020, Lei 2022]. Interesujące jest również zastosowanie w zagadnieniach termosprężystości metody składników pozornych (MSP), która jest uogólnieniem metody źródeł pozornych, opracowanej w połowie lat osiemdziesiątych XX wieku przez Stefaniaka. Koncepcja tej metody polega na rozszerzeniu obszaru zajmowanego przez model ciała na całą przestrzeń i sformułowaniu zagadnienia przestrzennego Helmholtza w tak określonym, fikcyjnym ośrodku. Przykład zastosowania metody składników pozornych w termosprężystości wraz z praktycznymi przykładami numerycznymi przedstawiono w monografii Jankowskiego [Jankowski 2007]. Atrakcyjną alternatywę dla wyżej opisanych metod numerycznych opartych na siatce, stanowią również metody bezsiatkowe. Hasanpour i inni zaproponowali metodę w pełni bezsiatkową, opartą na bazie punktów rozproszonych. Zaletą tych analiz jest również wykorzystywanie wielomianów niskiego stopnia przy budowie macierzy sztywności i mas. W kilku pracach wykorzystano metody bezsiatkowe do rozwiązania zagadnień sprzężonej termosprężystości [Zheng 2015, Hasanpour 2018].

Równoległe z rozwojem metod numerycznych, trwały prace nad nowymi modelami zjawiska termodyfuzji, zawierającymi pewne uogólnienia. Jedną z grup, które można wyodrębnić, stanowią zagadnienia, w których uwzględnia się wpływ innych pól niemechanicznych, jak np. pola elektrycznego i elektromagnetycznego [Nowacki 1966, Stefaniak 1982, Maruszewski 1986, Piekarski 2005, Jędrzejczyk-Kubik 2006, Othman 2010] lub przemiany fazowe i chemiczne [Gawin 2000, Gawin 2011]. Kolejną grupę uogólnień stanowią modele uwzględniające np. teorię plastyczności lub lepkosprężystości ciał [Jędrzejczyk-Kubik 1998, Kubik 1999, Nguyen 1999]. Prowadzone były również prace nad modelowaniem procesów termodynamicznych w przypadku wieloskładnikowego ośrodka mikropolarnego [Nowacki 1981, Nowacki 1991, Bojczuk 1998, Wieczorek 2009, Kubik 2012], w których korzysta się z modyfikacji klasycznego modelu ciągłego ciała stałego poprzez założenie, że transmisja obciążeń odbywa się nie tylko poprzez wektor siły, ale również przez wektor momentu. Poszukiwano również modeli termosprężystych, które byłyby w stanie jak najlepiej odzwierciedlić porowatość materiałów [Aouadi 2010, van Duijn 2020, Davarzani 2021, Saeedmonir 2022]. Saeed i inni w swojej pracy przedstawili szczegółowe analizy numeryczne rozkładu wielkości fizycznych

(pola temperatur, naprężeń i przemieszczeń) w jednowymiarowym, izotropowym, sprężystym ośrodku porowatym, zarówno dla fazy stałej, jak i ciekłej [Saeed 2020]. Natomiast Shivay i inni opracowali model materiału poro-termosprężystego uwzględniającego anizotropię materiału [Shivay 2021]. Szczególną grupę zagadnień z zakresu termodyfuzji ciał stałych, stanowią modele opisujące przepływ ciepła i wilgoci w konstrukcjach betonowych [Gawin 2000, Majewski 2007, Klemczak 2010, Gawin 2011, Cheng 2022].

Bardzo często modele teoretyczne, nawet te bardzo rozbudowane, nie odzwierciedlają spostrzeżeń uzyskiwanych z doświadczeń. Niektóre procesy, zachodzące w określonych warunkach, nie znajdują teoretycznego uzasadnienia. Przykładem może być termodyfuzja wodoru w stali, podczas której zachodzą liczne reakcje chemiczne, wywołujące silnie nieliniowe procesy. Stąd odrębną grupę rozwijanych zagadnień z zakresu termodyfuzji stanowiły badania eksperymentalne, w szczególności związane z wyznaczaniem współczynników dyfuzji różnych materiałów (np. [Świrska-Perkowska 2015, Jasiolec 2017, Szweda 2019, Jasiolec 2020]).

2.3. PODSUMOWANIE

Z przedstawionego powyżej przeglądu literatury wynika, że metoda elementów czasoprzestrzennych jest nadal stosowana i rozwijana. Z jej użyciem rozwiązywane są coraz bardziej złożone zagadnienia, a i sama procedura jest modyfikowana i udoskonalana. Coraz częściej doceniane są liczne zalety tej metody, wynikające z rozważania czasu t jako czwartej współrzędnej, na równi ze współrzędnymi przestrzennymi \mathbf{X} . Przede wszystkim, dokonuje się jednoczesnej dyskretyzacji przestrzennej i czasowej, zatem w przypadku zagadnień początkowo – brzegowych, układ równań różniczkowych cząstkowych przekształca się wprost w układ równań algebraicznych. Nieskrępowana dyskretyzacja stwarza również możliwości dostosowywania siatki podziału do zachodzących procesów.

Wykazano również, że termodyfuzja jest zjawiskiem istotnym w budownictwie, począwszy od zagadnień ciepłno-wilgotnościowych, poprzez obróbki ciepłno-chemiczne metali, aż po procesy zachodzące w dojrzewającym betonie, które później mają istotny wpływ na jego właściwości. Jednocześnie wskazano na liczne trudności w modelowaniu zagadnień z zakresu termodyfuzji, które wynikają z różnych mechanizmów przenoszenia masy i energii. Przebieg tego procesu zależy w dużej mierze od stanu zawilgocenia materiału, jego struktury wewnętrznej oraz zachodzących przemian fazowych. Wiele mechanizmów jest jeszcze nierozpoznanych, stąd opis tego zjawiska jest nadal udoskonalany.

Z powyższych analiz wynika, że zarówno zagadnienia z zakresu termodyfuzji, jak i metody elementów czasoprzestrzennych są nadal aktualne i mają istotne znaczenie w budownictwie. Są to dziedziny rozwojowe, w których w ostatnich latach poczyniono znaczne postępy. Stąd celowe wydaje się zastosowanie metody elementów czasoprzestrzennych do rozwiązania zagadnie-

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

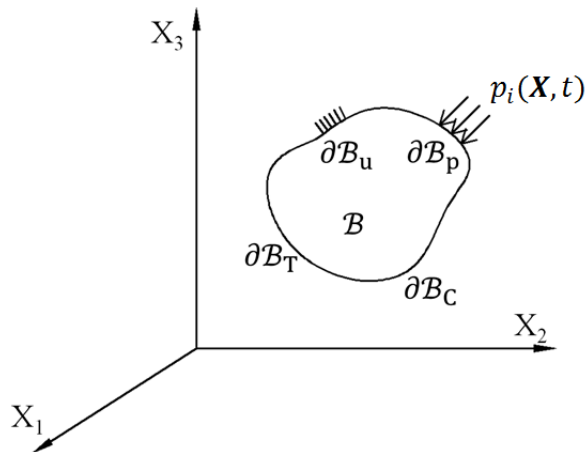
nia początkowo-brzegowego termodyfuzji sprzężonej, co stanowi przedmiot niniejszej rozprawy.

3. ZAGADNIENIE POCZĄTKOWO – BRZEGOWE TERMODYFUZJI SPRZĘŻONEJ

3.1. SFORMUŁOWANIE PROBLEMU, PRZYJĘTE ZAŁOŻENIA

Rozpatruje się ciało stałe o obszarze \bar{B} , stanowiące podzbiór przestrzeni euklidesowej trójwymiarowej, gdzie $\mathbf{X} = (X_1, X_2, X_3)$ (rys. 3.1). Przez B oznaczono wnętrze ciała, a przez ∂B jego powierzchnię graniczną, na którą składają się $\partial B_u, \partial B_p, \partial B_T, \partial B_C$. Przez ∂B_u oznaczono powierzchnię graniczną, na której znane są przemieszczenia $u_i(\mathbf{X}, t)$, przez ∂B_p powierzchnię graniczną, na której znane są obciążenia $p_i(\mathbf{X}, t)$, przez ∂B_T powierzchnię graniczną, na której znany jest rozkład pola temperatury $T(\mathbf{X}, t)$, natomiast przez ∂B_C oznaczono powierzchnię graniczną, na której znany jest rozkład pola stężenia substancji dyfundującej $C(\mathbf{X}, t)$.

$$\begin{aligned} \bar{B} &= B \cup \partial B, \\ \partial B &= \partial B_u \cup \partial B_p \cup \partial B_T \cup \partial B_C. \end{aligned} \quad (3.1)$$



Rys. 3.1. Obszar rozpatrywanego ciała stałego

Ciało stałe w stanie niezdeformowanym i beznaprężeniowym (w chwili $t = 0$) charakteryzuje się pewną ustaloną temperaturą $T_0 = T(\mathbf{X}, t_0)$ i stężeniem substancji dyfundującej $C_0 = C(\mathbf{X}, t_0)$. Taka charakterystyka ośrodka zwana jest stanem naturalnym. Pod wpływem działania obciążeń zewnętrznych (sił powierzchniowych i masowych), wskutek działania źródeł ciepła i masy wewnątrz ciała lub/i na skutek zmiany temperatury i wyrównywania stężeń substancji dyfundującej w obszarze, ciało dozna deformacji. Powstaną w nim wówczas przemieszczenia $u_i(\mathbf{X}, t)$, odkształcenia $\varepsilon_{ij}(\mathbf{X}, t)$, naprężenia $\sigma_{ij}(\mathbf{X}, t)$, tempe-

ratura zmieni się o $\theta(\mathbf{X}, t) = T - T_0$, a stężenie substancji dyfundującej zmieni się o $c(\mathbf{X}, t) = C - C_0$.

Do dalszych rozważań przyjmuje się następujące założenia:

- rozpatruje się ośrodek ciągły, fizycznie i geometrycznie liniowy;
- towarzysząca deformacji zmiana temperatury $\theta(\mathbf{X}, t) = T - T_0$ jest umiarkowana;
- towarzysząca deformacji zmiana stężenia substancji dyfundującej $c(\mathbf{X}, t) = C - C_0$ jest umiarkowana.

3.2. PODSTAWOWE RÓWNANIA DYFUZJI I PRZEWODNICTWA CIEPLNEGO

3.2.1. Prawo Fouriera

Prawo Fouriera opiera się na hipotezie, że wektor strumienia ciepła jest wprost proporcjonalny do gradientu temperatury [Dylla 2009, Fung 1969, Nowacki 1991, Wiśniewski 2000]:

$$q_i = -k T_{,i} \equiv -k \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad (3.2)$$

gdzie:

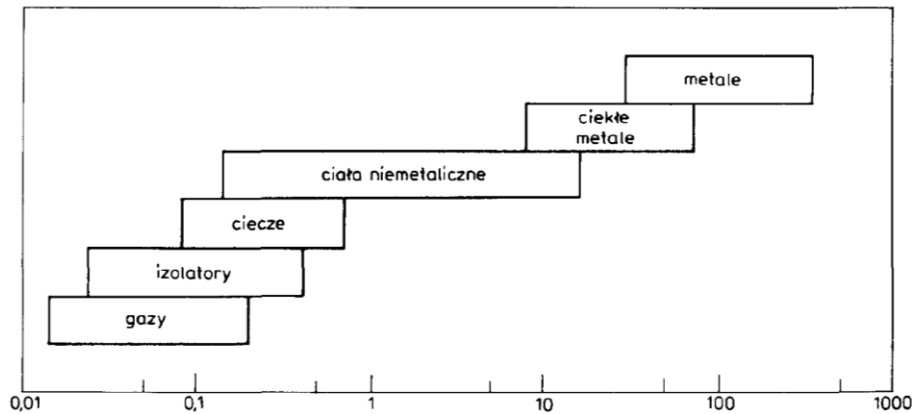
q_i – składowa wektora gęstości strumienia ciepła $[\frac{W}{m^2}]$,

k – współczynnik przewodzenia ciepła $[\frac{W}{m \cdot K}]$,

T – temperatura bezwzględna [K].

Ujemny znak we wzorze (3.2) wynika z faktu, że kierunek przepływu ciepła następuje z obszaru o temperaturze wyższej do obszaru o temperaturze niższej. Równanie to jest słuszne jedynie dla ciał izotropowych oraz przy stosunkowo niewielkich zmianach temperatury $|\theta/T_0| \ll 1$. Ponadto równanie Fouriera zostało sformułowane tak, jak gdyby nie istniała dyfuzja a ciało było nieodkształcalne.

Współczynnik przewodzenia ciepła k zależy od rodzaju przewodzenia ciepła (elektronowe, fononowe, molekularne) [Wiśniewski 2000]. Z tego względu, najwyższe współczynniki przewodzenia ciepła charakteryzują metale, w których ciepło przenoszone jest poprzez ruch swobodny elektronów. Natomiast najniższymi wartościami współczynnika przewodzenia ciepła k odznaczają się gazy, w których dominuje przewodzenie ciepła za pomocą ruchu cząsteczek (rys. 3.2).



Rys. 3.2. Zakres wartości współczynników przewodzenia ciepła k [$\frac{W}{m \cdot K}$] różnych substancji [Wiśniewski 2000]

3.2.2. Prawo Ficka

Fick sformułował prawo dyfuzji, wzorując się na wcześniejszym prawie przewodnictwa cieplnego Fouriera. Zgodnie z prawem Ficka, wektor przepływu substancji dyfundującej jest wprost proporcjonalny do gradientu stężenia substancji dyfundującej [Nowacki 1991]:

$$\eta_i = -D C_{,i} \equiv -D \frac{\partial C}{\partial x_i}, \quad (3.3)$$

gdzie:

η_i – składowa wektora przepływu substancji dyfundującej [$\frac{kg}{m^2 \cdot s}$],

D – współczynnik dyfuzji [$\frac{m^2}{s}$],

C – stężenie substancji dyfundującej [$\frac{kg}{m^3}$].

Ujemny znak we wzorze (3.3) wynika z faktu, że dyfuzja odbywa się w kierunku przeciwnym do wzrostu stężenia substancji dyfundującej. W wielu przypadkach, takich jak dyfuzja w cieczy, gazie czy też izotropowym ciele stałym, można przyjąć, że D jest współczynnikiem stałym. Ponadto prawo to jest słuszne jedynie przy stosunkowo niewielkich zmianach stężenia substancji dyfundującej $|c/C_0| \ll 1$. Równanie Ficka, podobnie jak prawo Fouriera, zostało sformułowane tak, jak gdyby nie istniał przepływ ciepła a ciało było nieodkształcalne.

Wartość współczynnika dyfuzji D jest zależna m.in. od temperatury i stężenia substancji dyfundującej. Z uwagi na fakt, że współczynnik ten uwzględnia kilka cech materiałowych, można go wyznaczać jedynie eksperymentalnie [Marynowicz 2007]. Przykłady wyznaczania wartości współczynnika dyfuzji dla różnych materiałów i przy wykorzystaniu różnych

metod można znaleźć m. in. w pracach Jarosa [Jaros 2011], Marynowicza [Marynowicz 2007], Szwedu [Szweda 2012, Szweda 2019] i Jasielca [Jasielec 2017, Jasielec 2020].

3.2.3. Pierwsza zasada termodynamiki

Z pierwszą zasadą termodynamiki związane jest pojęcie układu, jako wyróżnionego zbioru cząstek materialnych [Fung 1969]. Wyróżniamy następujące typy układów:

- układ otwarty – mamy z nim do czynienia wówczas, gdy możliwy jest przepływ masy pomiędzy układem a otoczeniem;
- układ zamknięty – występuje wówczas, gdy nie następuje wymiana masy pomiędzy układem a otoczeniem, ale możliwy jest przepływ energii;
- układ izolowany – taki układ, który nie wymienia z otoczeniem ani masy, ani energii.

W zagadnieniach termodyfuzji sprzężonej przyjmuje się założenie, że układ jest zamknięty, a nawet izolowany [Fung 1969, Nowacki 1991]. Założenie to nie jest ścisłe, jeżeli uwzględnimy zmianę masy, wynikającą z procesu dyfuzji (np. utrata wilgoci w procesie wysychania, przyrost masy azotu podczas azotowania itp.). Jednakże z uwagi na niską dynamikę procesu termodynamicznego (przyjęto założenia: $|\theta/T_0| \ll 1$ oraz $|c/C_0| \ll 1$) można przyjąć, że zmiana masy jest pomijalnie mała. Uwzględnienie zmiany masy ciała pociągnęło by za sobą szereg konsekwencji [Nowacki 1991]:

- konieczność zastąpienia zasady zachowania masy, równaniem bilansu masy;
- konieczność uwzględnienia masy całkowitej ciała w równaniu bilansu pędu;
- konieczność uwzględnienia masy całkowitej ciała oraz energii kinetycznej i cieplnej substancji dyfundującej w równaniu bilansu energii.

Uwzględnienie tych zmian spowodowałoby, że układ równań termodyfuzji byłby nieliniowy.

Dla dowolnego procesu termodynamicznego w układzie zamkniętym, pierwszą zasadę termodynamiki można zapisać następująco [Fung 1969]:

$$\frac{d}{dt}(U + \mathcal{K}) = \mathcal{L} + \dot{Q}, \quad (3.4)$$

gdzie:

U – energia wewnętrzna [J],

\mathcal{K} – energia kinetyczna [J],

\mathcal{L} – moc sił zewnętrznych [$\frac{J}{s}$],

\dot{Q} – strumień ciepła, przyrost ilości ciepła w czasie [$\frac{J}{s}$].

Całkowita charakterystyka rozważanego układu, zwana stanem układu, jest opisywana za pomocą zmiennych stanu. Jeżeli zmienne stanu są niezależne od

czasu, to dany układ znajduje się w równowadze termodynamicznej. W przeciwnym przypadku mówimy, że układ podlega procesowi. Funkcje stanu są to takie zmienne, które możemy wyrazić jako jednowartościowe funkcje układu innych zmiennych [Fung 1969]. Mają one tę własność, że ich wartość zależy jedynie od początkowego i aktualnego stanu układu, a nie od tego jak ten stan został osiągnięty (nie zależy od wyboru drogi, po której następuje przemiana termodynamiczna). W konsekwencji, różniczka funkcji stanu jest różniczką zupełną. Z pierwszej zasady termodynamiki (3.4) wynika, że istnieje pewna funkcja stanu, zwana energią wewnętrzną \mathcal{U} , która może wzrastać dzięki wykonanej nad układem pracy, albo na skutek pochłaniania ciepła. Przyrost w czasie energii wewnętrznej i kinetycznej jest równy mocy sił zewnętrznych i ilości ciepła zaabsorbowanej przez ciało. Równanie to jest nazywane zasadą zachowania energii, ponieważ wynika z niego, że w przyrodzie dokonuje się jedynie przemiana jednej formy energii w inną – nie można jej zatem ani zniszczyć ani wytworzyć (z niczego).

Przeprowadźmy teraz dyskusję poszczególnych członów równania (3.4):

- Moc sił zewnętrznych \mathcal{L} składa się z mocy sił powierzchniowych oraz mocy sił masowych [Nowacki 1972, Nowacki 1991]:

$$\mathcal{L} = \int_{\mathcal{B}} \rho f_i v_i d\mathcal{B} + \int_{\partial\mathcal{B}_p} p_i v_i d(\partial\mathcal{B}_p), \quad (3.5)$$

gdzie:

\mathcal{L} – moc sił zewnętrznych [$\frac{J}{s}$],

ρ – gęstość objętościowa ciała [$\frac{kg}{m^3}$],

f_i – składowa wektora intensywności obciążenia przypadającego na jednostkę masy [$\frac{N}{kg}$],

v_i – składowa wektora prędkości przemieszczeń [$\frac{m}{s}$],

p_i – składowa wektora sił powierzchniowych [$\frac{N}{m^2}$].

- Energię kinetyczną \mathcal{K} można opisać następującą zależnością [Nowacki 1972, Nowacki 1991]:

$$\mathcal{K} = \frac{\rho}{2} \int_{\mathcal{B}} v_i v_i d\mathcal{B}, \quad (3.6)$$

gdzie:

\mathcal{K} – energia kinetyczna [J],

ρ – gęstość objętościowa ciała [$\frac{kg}{m^3}$],

v_i – składowa wektora prędkości przemieszczeń [$\frac{m}{s}$].

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

- Energię wewnętrzną \mathcal{U} możemy przedstawić jako elementarną energię swobodną zsumowaną po objętości rozważanego ciała [Nowacki 1972, Nowacki 1991]:

$$\mathcal{U} = \int_{\mathcal{B}} U d\mathcal{B}, \quad (3.7)$$

gdzie:

\mathcal{U} – energia wewnętrzna [J],

U – elementarna energia wewnętrzna [$\frac{J}{m^3}$].

- Strumień ciepła \dot{Q} , czyli przyrost ilości ciepła w czasie, zapiszmy w następującej postaci [Dobiszewska 2003]:

$$\dot{Q} = - \int_{\partial\mathcal{B}} q_i n_i d(\partial\mathcal{B}) + \int_{\mathcal{B}} W d\mathcal{B}, \quad (3.8)$$

gdzie:

\dot{Q} – strumień ciepła, przyrost ilości ciepła w czasie [$\frac{J}{s}$],

q_i – składowa wektora gęstości strumienia ciepła [$\frac{W}{m^2}$],

n_i – kosinus kierunkowy orientujący powierz. graniczną $\partial\mathcal{B}$ [-],

W – wydajność wewnętrznych źródeł ciepła [$\frac{W}{m^3}$].

Równanie (3.8) możemy dodatkowo przekształcić, wykorzystując twierdzenie Gaussa – Ostrogradskiego [Fung 1969]:

$$\int_{\mathcal{B}} F_{ij,i} d\mathcal{B} \equiv \int_{\partial\mathcal{B}} F_{ij} n_i d(\partial\mathcal{B}), \quad (3.9)$$

otrzymując:

$$\dot{Q} = - \int_{\mathcal{B}} (q_{i,i} - W) d\mathcal{B}. \quad (3.10)$$

Wprowadzając zależności (3.5) ÷ (3.10) do równania (3.4) otrzymujemy:

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \left(\int_{\mathcal{B}} U d\mathcal{B} + \frac{\rho}{2} \int_{\mathcal{B}} v_i v_i d\mathcal{B} \right) = \\ & = \int_{\mathcal{B}} \rho f_i v_i d\mathcal{B} + \int_{\partial\mathcal{B}_p} p_i v_i d(\partial\mathcal{B}_p) - \int_{\mathcal{B}} (q_{i,i} - W) d\mathcal{B}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

Powyższe równanie możemy zapisać w postaci:

$$\int_{\mathcal{B}} (\dot{U} + \rho v_i \dot{v}_i) d\mathcal{B} = \int_{\mathcal{B}} \rho f_i v_i d\mathcal{B} + \int_{\partial\mathcal{B}_p} p_i v_i d(\partial\mathcal{B}_p) - \int_{\mathcal{B}} (q_{i,i} - W) d\mathcal{B}. \quad (3.12)$$

W celu przekształcenia zależności (3.12), korzystamy z równań równowagi, które zapisujemy następująco [Fung 1969]:

$$\sigma_{j,i,j} + \rho f_i = \rho \dot{v}_i, \quad (3.13)$$

gdzie:

σ_{ij} – składowa tensora naprężeń $[\frac{N}{m^2}]$,

ρ – gęstość objętościowa ciała $[\frac{kg}{m^3}]$,

f_j – składowa wektora intensywności obciążenia przypadającego na jednostkę masy $[\frac{N}{kg}]$,

\dot{v}_i – składowa wektora przyspieszeń przemieszczeń $[\frac{m}{s^2}]$.

W pierwszej kolejności zajmijmy się drugą całką, występującą po prawej stronie równania (3.12). Podstawimy do niej związki opisujące statyczne warunki brzegowe [Fung 1969]:

$$p_i = \sigma_{ji} n_j, \quad (3.14)$$

gdzie:

p_i – składowa wektora sił powierzchniowych $[\frac{N}{m^2}]$,

σ_{ij} – składowa tensora naprężeń $[\frac{N}{m^2}]$,

n_j – kosinus kierunkowy orientujący powierz. graniczną $\partial\mathcal{B}$ [-].

oraz zastosujmy przekształcenie Gaussa – Ostrogradskiego (3.9), otrzymując:

$$\begin{aligned} \int_{\partial\mathcal{B}_p} p_i v_i d(\partial\mathcal{B}_p) &= \int_{\partial\mathcal{B}_p} \sigma_{ji} n_j v_i d(\partial\mathcal{B}_p) = \\ &= \int_{\mathcal{B}} (\sigma_{ji} v_i)_{,j} d\mathcal{B} = \int_{\mathcal{B}} (\sigma_{j,i,j} v_i + \sigma_{ji} v_{i,j}) d\mathcal{B}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Następnie z równania (3.13) wyznaczamy:

$$\sigma_{j,i,j} = \rho \dot{v}_i - \rho f_i, \quad (3.16)$$

i zależność (3.16) podstawiamy do (3.15):

$$\int_{\partial\mathcal{B}_p} p_i v_i d(\partial\mathcal{B}_p) = \int_{\mathcal{B}} (\rho \dot{v}_i v_i - \rho f_i v_i + \sigma_{ji} v_{i,j}) d\mathcal{B}. \quad (3.17)$$

Otrzymane wyrażenie (3.17) podstawiamy do wzoru (3.12):

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{B}} (\dot{U} + \rho v_i \dot{v}_i) d\mathcal{B} = \\ & = \int_{\mathcal{B}} \rho f_i v_i d\mathcal{B} + \int_{\mathcal{B}} (\rho \dot{v}_i v_i - \rho f_i v_i + \sigma_{ji} v_{i,j}) d\mathcal{B} - \int_{\mathcal{B}} (q_{i,i} - W) d\mathcal{B}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Równanie (3.18) możemy ostatecznie zapisać w postaci:

$$\int_{\mathcal{B}} (\dot{U} - \sigma_{ji} v_{i,j} + q_{i,i} - W) d\mathcal{B} = 0. \quad (3.19)$$

Powyższy zapis musi być spełniony dla każdej elementarnej objętości \mathcal{B} , zatem można zapisać:

$$\dot{U} = \sigma_{ji} v_{i,j} - q_{i,i} + W. \quad (3.20)$$

W celu dokonania dalszych przekształceń, wyrażenie $v_{i,j}$, występujące we wzorze (3.20), dzielimy na część symetryczną i antysymetryczną:

$$v_{i,j} = \dot{u}_{i,j} = \frac{1}{2}(\dot{u}_{i,j} + \dot{u}_{j,i}) + \frac{1}{2}(\dot{u}_{i,j} - \dot{u}_{j,i}). \quad (3.21)$$

Wykorzystując związki geometryczne dla ośrodka geometrycznie liniowego [Fung 1969]:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij} &= \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}), \\ \omega_{ij} &= \frac{1}{2}(u_{i,j} - u_{j,i}), \end{aligned} \quad (3.22)$$

gdzie:

- u_i – składowa wektora przemieszczeń [m],
- ε_{ij} – składowa tensora odkształceń [-],
- ω_{ij} – składowa tensora obrotu odkształceń [-].

możemy zapisać:

$$v_{i,j} = \dot{\varepsilon}_{ij} + \dot{\omega}_{ij}, \quad (3.23)$$

gdzie:

- $\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2}(\dot{u}_{i,j} + \dot{u}_{j,i})$ – składowa tensora prędkości odkształceń [$\frac{1}{s}$],
- $\dot{\omega}_{ij} = \frac{1}{2}(\dot{u}_{i,j} - \dot{u}_{j,i})$ – składowa tensora prędkości obrotu odkształceń [$\frac{1}{s}$].

Związek (3.23) podstawiamy do równania (3.20):

$$\dot{U} = \sigma_{ji} \dot{\varepsilon}_{ij} + \sigma_{ji} \dot{\omega}_{ij} - q_{i,i} + W. \quad (3.24)$$

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

Tensor naprężeń, podobnie jak tensor prędkości odkształceń, to tensory symetryczne (tzn. $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$, $\epsilon_{ij} = \epsilon_{ji}$ dla $i \neq j$). Natomiast tensor prędkości obrotu odkształceń jest antysymetryczny (tzn. $\omega_{ij} = -\omega_{ji}$, dla $i \neq j$). Wiedząc, że iloczyn tensora symetrycznego i antysymetrycznego jest równy zeru, możemy zapisać ostateczną postać równania (3.24):

$$\dot{U} = \sigma_{ji} \dot{\epsilon}_{ij} - q_{i,i} + W. \quad (3.25)$$

3.2.4. Druga zasada termodynamiki

Pierwsza zasada termodynamiki, będąca zasadą zachowania energii, nie wprowadza istotnego rozróżnienia pomiędzy pracą a ciepłem. To sprawia, że nie wszystkie procesy zgodne z tą zasadą mogą rzeczywiście zachodzić. Stąd dla układów rzeczywistych wprowadza się ograniczenie w postaci drugiego prawa termodynamiki. W drugiej zasadzie termodynamiki występują trzy funkcje stanu [Nowacki 1991], tj. entropia S , temperatura bezwzględna T oraz stężenie substancji dyfundującej C . Wartości tych trzech parametrów, podobnie jak w przypadku energii wewnętrznej \mathcal{U} , nie zależą od drogi, po której następuje przemiana termodynamiczna, a jedynie od początkowych i końcowych parametrów stanu układu.

Entropia układu S w procesie termodynamicznym może się zmieniać z dwóch powodów [Nowacki 1991, Fung 1969]: na skutek oddziaływania z otoczeniem oraz poprzez zmiany zachodzące wewnątrz układu, tzn.:

$$dS = d_e S + d_i S, \quad (3.26)$$

gdzie:

dS – zmiana entropii [$\frac{J}{K m^3}$],

$d_e S$ – zmiana entropii wywołana interakcją układu z otoczeniem [$\frac{J}{K m^3}$],

$d_i S$ – zmiana entropii wywołana przemianami wewnątrz układu [$\frac{J}{K m^3}$].

Zmiana entropii $d_i S$ nigdy nie jest ujemna [Fung 1969], co oznacza, że entropia układu we wszechświecie rośnie. Jeżeli $d_i S = 0$, to mamy do czynienia z procesem odwracalnym, natomiast $d_i S > 0$ charakteryzuje procesy nieodwracalne. Proces jest odwracalny wówczas, jeżeli spełnione są jednocześnie następujące warunki:

- istnieje wtórny proces odwrotny, w wyniku którego parametry stanu przyjmą na powrót wartości sprzed zaistnienia procesu pierwotnego;
- układ w procesie odwrotnym przechodzi przez te same stany pośrednie (ale w odwrotnej kolejności) co proces pierwotny;
- po zakończeniu procesu odwrotnego, nie pozostaje w układzie i otoczeniu żaden ślad;
- w procesie odwrotnym układ wymienia z otoczeniem tę samą ilość masy, ciepła i pracy (z przeciwnym znakiem), co w procesie pierwotnym.

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

Jeżeli chociaż jeden z powyższych warunków nie jest spełniony, mamy do czynienia z procesem nieodwracalnym. Wszystkie procesy zachodzące w przyrodzie to procesy nieodwracalne. Za proces odwracalny można uznać graniczny przypadek procesu rzeczywistego, w którym stan układu zmienia się, przechodząc przez nieskończony ciąg stanów równowagi (tzw. proces quasi-statyczny).

Drugą zasadę termodynamiki możemy zapisać w następującej postaci [Nowacki 1991]:

$$T\dot{S} = -q_{i,i} - M\dot{C} + W, \quad (3.27)$$

gdzie:

T – temperatura bezwzględna [K],

S – entropia [$\frac{J}{K m^3}$],

q_i – składowa wektora gęstości strumienia ciepła [$\frac{W}{m^2}$],

M – potencjał chemiczny [$\frac{J}{kg}$],

C – stężenie substancji dyfundującej [$\frac{kg}{m^3}$],

W – wydajność wewnętrznych źródeł ciepła [$\frac{W}{m^3}$].

Równanie (3.27) możemy przekształcić do innej postaci, stosując zasadę zachowania masy [Nowacki 1991]:

$$\dot{C} = -\eta_{i,i} + \tau, \quad (3.28)$$

gdzie:

C – stężenie substancji dyfundującej [$\frac{kg}{m^3}$],

η_i – składowa wektora przepływu substancji dyfundującej [$\frac{kg}{m^2 \cdot s}$],

τ – wydajność wewnętrznych źródeł masy [$\frac{kg}{m^3 \cdot s}$].

którą podstawiamy do równania (3.27), otrzymując:

$$T\dot{S} = -q_{i,i} + M\eta_{i,i} + W - M\tau. \quad (3.29)$$

Otrzymane wyrażenie (3.29) jest równaniem różniczkowym cząstkowym, zatem możemy skorzystać z zależności na obliczanie pochodnej iloczynu i ilorazu:

$$\begin{aligned} \left(\frac{q_i}{T}\right)_{,i} &= \frac{q_{i,i} T - q_i T_{,i}}{T^2} = \frac{q_{i,i}}{T} - \frac{q_i T_{,i}}{T^2}, \\ \left(\eta_i \frac{M}{T}\right)_{,i} &= \eta_{i,i} \frac{M}{T} + \eta_i \left(\frac{M}{T}\right)_{,i}, \end{aligned} \quad (3.30)$$

z których wyznaczamy interesujące nas wyrażenia:

$$\frac{q_{i,i}}{T} = \left(\frac{q_i}{T}\right)_{,i} + \frac{q_i T_{,i}}{T^2}, \quad (3.31)$$

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

$$\eta_{i,i} \frac{M}{T} = \left(\eta_i \frac{M}{T} \right)_{,i} - \eta_i \left(\frac{M}{T} \right)_{,i},$$

a następnie podstawiamy otrzymane zależności do (3.29):

$$\dot{S} = - \left(\frac{q_i}{T} \right)_{,i} + \left(\eta_i \frac{M}{T} \right)_{,i} + \sigma, \quad (3.32)$$

w którym wielkość:

$$\sigma = - \frac{q_i T_{,i}}{T^2} - \eta_i \left(\frac{M}{T} \right)_{,i} + \frac{W}{T} - \frac{M\tau}{T}, \quad (3.33)$$

jest źródłem entropii, charakteryzującym szybkość tworzenia się entropii [Nowacki 1972]. Zatem odnosząc się do wcześniejszego postulatu termodynamiki, dotyczącego procesów nieodwracalnych, należy przyjąć, że źródło entropii przyjmuje zawsze wartości dodatnie $\sigma > 0$.

3.2.5. Synteza pierwszej i drugiej zasady termodynamiki

W rozdziałach 3.2.3 i 3.2.4 wyprowadzono pierwszą (3.25) i drugą (3.27) zasadę termodynamiki. Eliminując z tych równań składową wektora gęstości strumienia ciepła q_i , otrzymujemy:

$$\dot{U} = \sigma_{ji} \dot{\varepsilon}_{ij} + M\dot{C} + T\dot{S}. \quad (3.34)$$

Następnie wprowadzamy nową funkcję stanu, która opisuje energię swobodną Helmholtza [Nowacki 1972, Nowacki 1991]:

$$F = U - ST, \quad (3.35)$$

gdzie:

F – energia swobodna Helmholtza [$\frac{J}{m^3}$],

U – elementarna energia wewnętrzna [$\frac{J}{m^3}$],

S – entropia [$\frac{J}{K m^3}$],

T – temperatura bezwzględna [K].

Zależność (3.35) różniczkujemy po czasie a następnie przekształcamy, korzystając z równania (3.34):

$$\begin{aligned} \dot{F} &= \dot{U} - \dot{S}T - S\dot{T} = \sigma_{ji} \dot{\varepsilon}_{ij} + M\dot{C} + T\dot{S} - \dot{S}T - S\dot{T} = \\ &= \sigma_{ji} \dot{\varepsilon}_{ij} + M\dot{C} - S\dot{T}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Energia swobodna Helmholtza jest funkcją stanu zależną od tensora odkształceń, temperatury i stężenia substancji dyfundującej $F = F(\varepsilon_{ij}, T, C)$, zatem korzystając z definicji różniczki zupełnej, możemy zapisać:

$$d\dot{F} = \left(\frac{\partial F}{\partial \varepsilon_{ij}} \right)_{T,C} d\dot{\varepsilon}_{ij} + \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{\varepsilon_{ij},C} d\dot{T} + \left(\frac{\partial F}{\partial C} \right)_{\varepsilon_{ij},T} d\dot{C}. \quad (3.37)$$

Stąd porównując współczynniki w równaniach (3.36) i (3.37), otrzymujemy:

$$\sigma_{ji} = \frac{\partial F}{\partial \varepsilon_{ij}}, \quad S = -\frac{\partial F}{\partial T}, \quad M = \frac{\partial F}{\partial C}. \quad (3.38)$$

3.3. RÓWNANIA RÓŻNICZKOWE TERMODYFUZJI

3.3.1. Równania konstytutywne

Rozwińmy energię swobodną Helmholtza $F(\varepsilon_{ij}, T, C)$ w szereg potęgowy Taylora w otoczeniu stanu naturalnego ($\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^0, T = T_0, C = C_0$):

$$\begin{aligned} F(\varepsilon_{ij}, T, C) = & F(\varepsilon_{ij}^0, T_0, C_0) + \frac{\partial F(\varepsilon_{ij}^0, T_0, C_0)}{\partial \varepsilon_{ij}} (\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^0) + \\ & + \frac{\partial F(\varepsilon_{ij}^0, T_0, C_0)}{\partial T} (T - T_0) + \frac{\partial F(\varepsilon_{ij}^0, T_0, C_0)}{\partial C} (C - C_0) + \\ & + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2 F(\varepsilon_{ij}^0, T_0, C_0)}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl}} (\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^0) (\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^0) + \right. \\ & + \frac{\partial^2 F(\varepsilon_{ij}^0, T_0, C_0)}{\partial T^2} (T - T_0)^2 + \frac{\partial^2 F(\varepsilon_{ij}^0, T_0, C_0)}{\partial C^2} (C - C_0)^2 + \\ & + 2 \frac{\partial^2 F(\varepsilon_{ij}^0, T_0, C_0)}{\partial \varepsilon_{ij} \partial T} (\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^0) (T - T_0) + \\ & + 2 \frac{\partial^2 F(\varepsilon_{ij}^0, T_0, C_0)}{\partial \varepsilon_{ij} \partial C} (\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^0) (C - C_0) + \\ & \left. + 2 \frac{\partial^2 F(\varepsilon_{ij}^0, T_0, C_0)}{\partial C \partial T} (C - C_0) (T - T_0) \right] + \dots \end{aligned} \quad (3.39)$$

Przyjęte zostało założenie, że w stanie naturalnym ciało jest nieodkształcone, czyli $\varepsilon_{ij}^0 = 0$, zatem równanie (3.39) możemy uprościć do następującej postaci:

$$\begin{aligned} F(\varepsilon_{ij}, T, C) = & F(0, T_0, C_0) + \frac{\partial F(0, T_0, C_0)}{\partial \varepsilon_{ij}} \varepsilon_{ij} + \\ & + \frac{\partial F(0, T_0, C_0)}{\partial T} (T - T_0) + \frac{\partial F(0, T_0, C_0)}{\partial C} (C - C_0) + \\ & + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2 F(0, T_0, C_0)}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl}} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} + \frac{\partial^2 F(0, T_0, C_0)}{\partial T^2} (T - T_0)^2 + \right. \\ & \left. + \frac{\partial^2 F(0, T_0, C_0)}{\partial C^2} (C - C_0)^2 + 2 \frac{\partial^2 F(0, T_0, C_0)}{\partial \varepsilon_{ij} \partial T} \varepsilon_{ij} (T - T_0) + \right. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

$$+2 \frac{\partial^2 F(0, T_0, C_0)}{\partial \varepsilon_{ij} \partial C} \varepsilon_{ij} (C - C_0) + 2 \frac{\partial^2 F(0, T_0, C_0)}{\partial C \partial T} (C - C_0) (T - T_0) +$$

$$+ \dots$$

Następnie różniczkujemy funkcję energii swobodnej Helmholtza F względem odkształceń:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F(\varepsilon_{ij}, T, C)}{\partial \varepsilon_{ij}} &= \frac{\partial F(0, T_0, C_0)}{\partial \varepsilon_{ij}} + \frac{\partial^2 F(0, T_0, C_0)}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl}} \varepsilon_{kl} + \\ &+ \frac{\partial^2 F(0, T_0, C_0)}{\partial \varepsilon_{ij} \partial T} (T - T_0) + \frac{\partial^2 F(0, T_0, C_0)}{\partial \varepsilon_{ij} \partial C} (C - C_0) + \\ &+ \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^3 F(0, T_0, C_0)}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl} \partial \varepsilon_{mn}} \varepsilon_{kl} \varepsilon_{mn} + \frac{\partial^3 F(0, T_0, C_0)}{\partial \varepsilon_{ij} \partial T^2} (T - T_0)^2 + \right. \\ &+ \frac{\partial^3 F(0, T_0, C_0)}{\partial \varepsilon_{ij} \partial C^2} (C - C_0)^2 + 2 \frac{\partial^3 F(0, T_0, C_0)}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl} \partial T} \varepsilon_{kl} (T - T_0) + \\ &\quad \left. + 2 \frac{\partial^3 F(0, T_0, C_0)}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl} \partial C} \varepsilon_{kl} (C - C_0) + \right. \\ &\quad \left. + 2 \frac{\partial^3 F(0, T_0, C_0)}{\partial \varepsilon_{ij} \partial C \partial T} (C - C_0) (T - T_0) \right] + \dots \end{aligned} \quad (3.41)$$

Na podstawie zależności (3.38) można zapisać:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F(\varepsilon_{ij}, T, C)}{\partial \varepsilon_{ij}} &= \sigma_{ji}(\varepsilon_{ij}, T, C), \\ \frac{\partial F(\varepsilon_{ij}, T, C)}{\partial T} &= -S(\varepsilon_{ij}, T, C), \\ \frac{\partial F(\varepsilon_{ij}, T, C)}{\partial C} &= M(\varepsilon_{ij}, T, C). \end{aligned} \quad (3.42)$$

Przyjęte założenia, dotyczące stanu naturalnego (w stanie naturalnym naprężenia i odkształcenia są zerowe), obowiązują również dla energii swobodnej Helmholtza F , potencjału chemicznego M oraz entropii S , stąd:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F(0, T_0, C_0)}{\partial \varepsilon_{ij}} &= \sigma_{ji}(0, T_0, C_0) = 0, \\ F(0, T_0, C_0) &= 0 \\ \frac{\partial F(0, T_0, C_0)}{\partial T} &= -S(0, T_0, C_0) = 0, \\ \frac{\partial F(0, T_0, C_0)}{\partial C} &= M(0, T_0, C_0) = 0. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Ponadto wprowadzamy oznaczenia:

$$\begin{aligned}
 C_{ijkl} &= \frac{\partial^2 F(0, T_0, C_0)}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl}}, \\
 \alpha_{ij} &= -\frac{\partial^2 F(0, T_0, C_0)}{\partial \varepsilon_{ij} \partial T}, \\
 \beta_{ij} &= -\frac{\partial^2 F(0, T_0, C_0)}{\partial \varepsilon_{ij} \partial C}, \\
 b &= -\frac{\partial^2 F(0, T_0, C_0)}{\partial C \partial T}, \\
 m &= -\frac{\partial^2 F(0, T_0, C_0)}{\partial T^2}, \\
 s &= \frac{\partial^2 F(0, T_0, C_0)}{\partial C^2}, \\
 \theta &= T - T_0, \\
 c &= C - C_0,
 \end{aligned} \tag{3.44}$$

gdzie:

- C_{ijkl} – składowa tensora opisującego parametry materiałowe związane z mechanicznymi właściwościami materiału $[\frac{N}{m^2}]$,
- α_{ij} – składowa tensora opisującego parametry materiałowe związane z mechanicznymi i termicznymi właściwościami materiału $[\frac{N}{K m^2}]$,
- β_{ij} – składowa tensora opisującego parametry materiałowe związane z mechanicznymi i dyfuzyjnymi właściwościami materiału $[\frac{N m}{kg}]$,
- θ – zmiana temperatury [deg],
- c – zmiana stężenia substancji dyfundującej $[\frac{kg}{m^3}]$,
- b – stała materiałowa $[\frac{J}{kg K}]$,
- m – stała materiałowa $[\frac{N}{m^2 K^2}]$,
- s – stała materiałowa $[\frac{N m^4}{kg^2}]$.

Po wprowadzeniu oznaczeń (3.44) i uwzględnieniu założeń (3.43) zależności (3.40) i (3.41) przyjmą ostatecznie postać:

$$\begin{aligned}
 F(\varepsilon_{ij}, \theta, c) &= \\
 &= \frac{1}{2} C_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} - \alpha_{ij} \varepsilon_{ij} \theta - \beta_{ij} \varepsilon_{ij} c - b \theta c - \frac{1}{2} m \theta^2 + \frac{1}{2} s c^2 + \dots \\
 \frac{\partial F(\varepsilon_{ij}, \theta, c)}{\partial \varepsilon_{ij}} &= C_{ijkl} \varepsilon_{kl} - \alpha_{ij} \theta - \beta_{ij} c + \dots
 \end{aligned} \tag{3.45}$$

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

Z uwagi na założenie o infinitezimalnych odkształceniach, małym względnym przyroście temperatury $|\theta/T_0| \ll 1$ oraz małym przyroście stężenia substancji dyfundującej $|c/C_0| \ll 1$, możemy we wzorach (3.45) pominąć wielkości wyższego rzędu. Wykorzystując zależność (3.42)₁ oraz (3.45)₂, otrzymamy równanie konstytutywne termodyfuzji w postaci:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl} - \alpha_{ij}\theta - \beta_{ij}c. \quad (3.46)$$

Dla ciała izotropowego jednorodnego, rozwinięcia (3.45) oraz równanie konstytutywne (po uwzględnieniu powyższych założeń) przyjmą postać [Nowacki 1991]:

$$\begin{aligned} F(\varepsilon_{ij}, \theta, c) &= \\ &= \mu\varepsilon_{ij}\varepsilon_{ij} + \frac{\lambda}{2}e^2 - \gamma_T e\theta - \gamma_C ec - b\theta c - \frac{1}{2}m\theta^2 + \frac{1}{2}sc^2 + \dots \\ \frac{\partial F(\varepsilon_{ij}, \theta, c)}{\partial \varepsilon_{ij}} &= 2\mu\varepsilon_{ij} + (\lambda e - \gamma_T\theta - \gamma_C c)\delta_{ij} + \dots \\ \sigma_{ij} &= 2\mu\varepsilon_{ij} + (\lambda e - \gamma_T\theta - \gamma_C c)\delta_{ij}, \end{aligned} \quad (3.47)$$

gdzie:

- μ, λ – stałe materiałowe Lamé'go $[\frac{N}{m^2}]$,
- ε_{ij} – składowa tensora odkształceń $[-]$,
- σ_{ij} – składowa tensora naprężeń $[\frac{N}{m^2}]$,
- e – dylatacja, I niezmiennik stanu odkształcenia, względna zmiana objętości $[-]$,
- θ – zmiana temperatury $[\text{deg}]$,
- c – zmiana stężenia substancji dyfundującej $[\frac{kg}{m^3}]$,
- $\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{dla } i = j \\ 0, & \text{dla } i \neq j \end{cases}$ – delta Kroneckera $[-]$,
- b – stała materiałowa $[\frac{J}{kg K}]$,
- m – stała materiałowa $[\frac{N}{m^2 K^2}]$,
- s – stała materiałowa $[\frac{N m^4}{kg^2}]$.

Wielkości γ_T, γ_C można opisać następującymi zależnościami [Nowacki 1972]:

$$\begin{aligned} \gamma_T &= (3\lambda + 2\mu)\alpha_t = 3K\alpha_t, \\ \gamma_C &= (3\lambda + 2\mu)\alpha_c = 3K\alpha_c, \\ K &= \lambda + \frac{2}{3}\mu, \end{aligned} \quad (3.48)$$

gdzie:

- μ, λ – stałe materiałowe Lamé'go $[\frac{N}{m^2}]$,
- α_t – współczynnik liniowej rozszerzalności termicznej $[\frac{1}{K}]$,

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

α_c – współczynnik liniowej rozszerzalności dyfuzyjnej $[\frac{m^3}{kg}]$,
 K – moduł ściśliwości $[\frac{N}{m^2}]$.

3.3.2. Bilans entropii

W celu opisanego entropii S w sposób jawny, równanie (3.47)₁ zapisujemy w postaci:

$$F(\varepsilon_{ij}, T, C) = \mu \varepsilon_{ij} \varepsilon_{ij} + \frac{\lambda}{2} e^2 - \gamma_T e (T - T_0) + \quad (3.49)$$

$$-\gamma_C e (C - C_0) - b(T - T_0)(C - C_0) + \frac{1}{2} s (C - C_0)^2 + G(T),$$

gdzie funkcja $G(\theta)$ zawiera człony zależne wyłącznie od temperatury T . Otrzymane równanie (3.49) różniczkujemy względem temperatury T :

$$\frac{\partial F(\varepsilon_{ij}, T, C)}{\partial T} = -\gamma_T e - b(C - C_0) + \frac{\partial G(T)}{\partial T}. \quad (3.50)$$

Po porównaniu wzorów (3.38)₂ i (3.50) otrzymamy:

$$S = \gamma_T e + b(C - C_0) - \frac{\partial G(T)}{\partial T}. \quad (3.51)$$

Korzystając z definicji różniczki zupełnej można zapisać:

$$dS = \left(\frac{\partial S}{\partial \varepsilon_{ij}} \right)_{T,C} d\varepsilon_{ij} + \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{\varepsilon_{ij},C} dT + \left(\frac{\partial S}{\partial C} \right)_{\varepsilon_{ij},T} dC. \quad (3.52)$$

Z porównania zależności (3.51) i (3.52) wynika:

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial \varepsilon_{ij}} d\varepsilon_{ij} &= \gamma_T de, \\ \frac{\partial S}{\partial T} dT &= -\frac{\partial^2 G(T)}{\partial T^2} dT, \\ \frac{\partial S}{\partial C} dC &= bdC. \end{aligned} \quad (3.53)$$

Zależności (3.53) podstawiamy do (3.52), otrzymując:

$$dS = \gamma_T de + bdC - \frac{\partial^2 G(T)}{\partial T^2} dT. \quad (3.54)$$

Wprowadzając oznaczenie:

$$c_{\varepsilon,C} = -T \frac{\partial^2 G(T)}{\partial T^2} \equiv T \frac{\partial S}{\partial T}, \quad (3.55)$$

funkcję $G(T)$ można wyznaczyć z zależności:

$$\frac{\partial^2 G(T)}{\partial T^2} = -\frac{c_{\varepsilon,c}}{T}. \quad (3.56)$$

gdzie:

$c_{\varepsilon,c}$ – ciepło właściwe przy ustalonej deformacji i koncentracji [$\frac{J}{K m^3}$].

Całkując dwukrotnie równanie (3.56) otrzymamy:

$$\begin{aligned} \frac{\partial G(T)}{\partial T} &= -\int_{T_0}^T \frac{c_{\varepsilon,c}}{T} dT = -c_{\varepsilon,c} \int_{T_0}^T \frac{1}{T} dT = -c_{\varepsilon,c} (\ln|T| - \ln|T_0|) = \\ &= -c_{\varepsilon,c} \ln \left| \frac{T}{T_0} \right|, \\ G(T) &= -c_{\varepsilon,c} \int_{T_0}^T \ln \left| \frac{T}{T_0} \right| dT. \end{aligned} \quad (3.57)$$

Powyższą zależność (3.57)₁ podstawiamy do równania (3.51):

$$S = \gamma_T e + b(C - C_0) + c_{\varepsilon,c} \ln \left| \frac{T}{T_0} \right|. \quad (3.58)$$

W celu dalszych przekształceń, funkcję logarytmiczną rozwijamy w szereg potęgowy:

$$\ln \left| \frac{T}{T_0} \right| = \left(\frac{T}{T_0} - 1 \right) - \frac{\left(\frac{T}{T_0} - 1 \right)^2}{2!} + \dots = \frac{\theta}{T_0} - \frac{1}{2} \left(\frac{\theta}{T_0} \right)^2 + \dots \quad (3.59)$$

Z uwagi na przyjęte wcześniej założenie o małej zmianie temperatury, tj. $|\theta/T_0| \ll 1$, możemy pozostawić w powyższym rozwinięciu jedynie pierwszy człon:

$$\ln \left| \frac{T}{T_0} \right| = \frac{T}{T_0} - 1. \quad (3.60)$$

Zależność (3.60) podstawiamy do (3.57)₂, w celu wyznaczenia funkcji $G(T)$:

$$\begin{aligned} G(T) &= -c_{\varepsilon,c} \int_{T_0}^T \left(\frac{T}{T_0} - 1 \right) dT = -c_{\varepsilon,c} \left(\frac{T^2}{2T_0} - T \right) \Big|_{T_0}^T = \\ &= -c_{\varepsilon,c} \left(\frac{T^2}{2T_0} - T - \frac{T_0^2}{2T_0} + T_0 \right) = \frac{-c_{\varepsilon,c}}{2T_0} (T^2 - 2T_0 T + T_0^2) = \\ &= \frac{-c_{\varepsilon,c}}{2T_0} (T - T_0)^2. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

Powyższe wyrażenia (3.60) i (3.61) podstawiamy do wzoru na energię swobodną (3.49) i entropię (3.58), otrzymując:

$$\begin{aligned}
 F(\varepsilon_{ij}, T, C) &= \mu\varepsilon_{ij}\varepsilon_{ij} + \frac{\lambda}{2}e^2 - \gamma_T e(T - T_0) - \gamma_C e(C - C_0) + \\
 &\quad -b(T - T_0)(C - C_0) + \frac{1}{2}s(C - C_0)^2 - \frac{c_{\varepsilon,c}}{2T_0}(T - T_0)^2, \\
 S(\varepsilon_{ij}, T, C) &= \gamma_T e + b(C - C_0) + c_{\varepsilon,c} \left(\frac{T}{T_0} - 1 \right).
 \end{aligned} \tag{3.62}$$

Otrzymane zależności możemy zapisać w skróconej postaci, wykorzystując wyrażenia (3.44)_{7,8}:

$$\begin{aligned}
 F(\varepsilon_{ij}, \theta, c) &= \mu\varepsilon_{ij}\varepsilon_{ij} + \frac{\lambda}{2}e^2 - \gamma_T e\theta - \gamma_C ec - b\theta c + \frac{1}{2}sc^2 - \frac{c_{\varepsilon,c}}{2T_0}\theta^2, \\
 S(\varepsilon_{ij}, \theta, c) &= \gamma_T e + bc + c_{\varepsilon,c} \frac{\theta}{T_0}.
 \end{aligned} \tag{3.63}$$

W równaniu entropii (3.63)₂ pierwszy człon obrazuje wpływ pola deformacji, drugi człon – wpływ pola dyfuzji, a trzeci – wpływ pola temperatury.

3.3.3. Rozszerzone równanie przewodnictwa cieplnego

Drugą zasadę termodynamiki opisano w punkcie 3.2.4. Źródło entropii, charakteryzujące szybkość tworzenia się entropii, sformułowano we wzorze (3.33). Zależność tę możemy zapisać w następującej postaci:

$$\begin{aligned}
 \sigma &= -\frac{q_i T_{,i}}{T^2} - \eta_i \left(\frac{M}{T} \right)_{,i} + \frac{W}{T} - \frac{M\tau}{T} = \\
 &= \frac{1}{T} \left(-\frac{q_i T_{,i}}{T} - \eta_i T \left(\frac{M}{T} \right)_{,i} + W - M\tau \right) = \\
 &= \frac{1}{T} \left(-q_i X_i^{(q)} - \eta_i X_i^{(\eta)} + W - M\tau \right).
 \end{aligned} \tag{3.64}$$

W równaniu tym wielkości $X_i^{(q)}$ oraz $X_i^{(\eta)}$ są to bodźce termodynamiczne, wielkości intensywne opisane następującymi zależnościami [Nowacki 1972]:

$$\begin{aligned}
 X_i^{(q)} &= -\frac{T_{,i}}{T}, \\
 X_i^{(\eta)} &= -T \left(\frac{M}{T} \right)_{,i}.
 \end{aligned} \tag{3.65}$$

Zatem źródło entropii jest sumą iloczynów bodźców termodynamicznych $X_i^{(q)}$, $X_i^{(\eta)}$ oraz sprzężonych z nimi przepływów termodynamicznych q_i , η_i . W termodynamice procesów nieodwracalnych, dla przepływów laminarnych przyjmuje

się, że przepływy termodynamiczne są liniowymi funkcjami bodźców termodynamicznych [Nowacki 1991]:

$$\begin{aligned} q_i &= L^{(qq)}X_i^{(q)} + L^{(q\eta)}X_i^{(\eta)}, \\ \eta_i &= L^{(\eta q)}X_i^{(q)} + L^{(\eta\eta)}X_i^{(\eta)}. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Wielkości $L^{(qq)}$, $L^{(q\eta)}$, $L^{(\eta q)}$, $L^{(\eta\eta)}$ występujące w równaniach (3.66) są to operatory liniowe, które w myśl postulatu Onsagera spełniają następujące warunki [Nowacki 1991]:

$$\begin{aligned} L^{(q\eta)} &= L^{(\eta q)}, \text{ dla } q \neq \eta, \\ \begin{vmatrix} L^{(qq)} & L^{(q\eta)} \\ L^{(\eta q)} & L^{(\eta\eta)} \end{vmatrix} &> 0. \end{aligned} \quad (3.67)$$

Równania (3.66) opisują interferencję pomiędzy dwoma jednoczesnymi procesami nieodwracalnymi, zachodzącymi w przypadku termodyfuzji. W równaniach tych $L^{(qq)}$ jest współczynnikiem przewodnictwa cieplnego, $L^{(\eta\eta)}$ - współczynnikiem dyfuzji, natomiast $L^{(q\eta)}$ i $L^{(\eta q)}$ są współczynnikami interferencji [Fung 1969]. Współczynnik $L^{(\eta q)}$ jest związany z tzw. efektem Soreta, czyli pojawieniem się gradientu stężenia substancji dyfundującej na skutek powstania gradientu temperatur. Z kolei współczynnik $L^{(q\eta)}$ jest związany z procesem odwrotnym, tzw. efektem Dufoura, czyli pojawieniem się gradientu temperatur na skutek zaistnienia gradientu stężenia substancji. Zatem równanie (3.66)₁ jest rozszerzonym równaniem Fouriera z uwzględnieniem efektu Dufoura, a zależność (3.66)₂ jest modyfikacją prawa Ficka, uwzględniającą efekt Soreta [Fung 1969]. Podstawiając wielkości intensywne (3.65) do (3.66), otrzymujemy:

$$\begin{aligned} q_i &= -\frac{T_{,i}}{T}L^{(qq)} - T\left(\frac{M}{T}\right)_{,i}L^{(q\eta)}, \\ \eta_i &= -\frac{T_{,i}}{T}L^{(\eta q)} - T\left(\frac{M}{T}\right)_{,i}L^{(\eta\eta)}. \end{aligned} \quad (3.68)$$

Z zależności (3.68)₂ wyznaczamy wyrażenie $T\left(\frac{M}{T}\right)_{,i}$ i otrzymane równanie podstawiamy do (3.68)₁:

$$\begin{aligned} T\left(\frac{M}{T}\right)_{,i} &= \frac{-\eta_i - \frac{T_{,i}}{T}L^{(\eta q)}}{L^{(\eta\eta)}}, \\ q_i &= -\frac{T_{,i}}{T}L^{(qq)} + \frac{\eta_i L^{(q\eta)}}{L^{(\eta\eta)}} + \frac{\frac{T_{,i}}{T}L^{(q\eta)}L^{(\eta q)}}{L^{(\eta\eta)}} = \\ &= -\frac{T_{,i}}{T}\left(L^{(qq)} - \frac{L^{(q\eta)^2}}{L^{(\eta\eta)}}\right) + \frac{\eta_i L^{(q\eta)}}{L^{(\eta\eta)}} = -kT_{,i} + \alpha\eta_i, \end{aligned} \quad (3.69)$$

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

gdzie:

k – współczynnik przewodnictwa cieplnego [$\frac{W}{m K}$],

α – współczynnik uwzględniający efekt Dufoura [$\frac{J}{kg}$].

Równanie (3.69)₂ jest rozszerzonym prawem Fouriera. Z warunku (3.67)₂ wynika, że wartość współczynnika przewodnictwa cieplnego k jest zawsze dodatnia, tj. $k > 0$.

W celu przekształcenia zależności (3.68)₂, korzystamy ze wzoru na obliczanie pochodnej ilorazu:

$$\left(\frac{M}{T}\right)_{,i} = \frac{M_{,i}T - MT_{,i}}{T^2} = \frac{M_{,i}}{T} - \frac{MT_{,i}}{T^2}. \quad (3.70)$$

Zatem:

$$\begin{aligned} \eta_i &= -\frac{T_{,i}}{T}L(\eta q) - T\frac{M_{,i}}{T}L(\eta\eta) + T\frac{MT_{,i}}{T^2}L(\eta\eta) = \\ &= -\frac{T_{,i}}{T}(L(\eta q) - ML(\eta\eta)) - M_{,i}L(\eta\eta). \end{aligned} \quad (3.71)$$

Następnie wyznaczamy wzór na potencjał chemiczny, korzystając z zależności (3.38)₃ oraz (3.63)₁:

$$\begin{aligned} M &= \frac{\partial F}{\partial c} = -\gamma_c e - b\theta + sc, \\ M_{,i} &= -\gamma_c e_{,i} - b\theta_{,i} + sc_{,i}. \end{aligned} \quad (3.72)$$

Otrzymaną zależność (3.72)₂ wstawiamy do równania (3.71), otrzymując:

$$\eta_i = -\frac{T_{,i}}{T}(L(\eta q) - ML(\eta\eta)) + \gamma_c e_{,i}L(\eta\eta) + b\theta_{,i}L(\eta\eta) - sc_{,i}L(\eta\eta). \quad (3.73)$$

Wyrażenie $MT_{,i}$ jest członem nieliniowym, zatem linearyzując, można tę wielkość pominąć. Ponadto wykorzystujemy zależność:

$$T_{,i} = (\theta + T_0)_{,i} = \theta_{,i}. \quad (3.74)$$

Otrzymując:

$$\eta_i = -\frac{\theta_{,i}}{T}L(\eta q) + \gamma_c e_{,i}L(\eta\eta) + b\theta_{,i}L(\eta\eta) - sc_{,i}L(\eta\eta). \quad (3.75)$$

Wprowadzamy oznaczenia [Nowacki 1972]:

$$\begin{aligned} D_T &= \frac{1}{T}(L(\eta q) - bL(\eta\eta)), \\ D_\varepsilon &= -L(\eta\eta)\gamma_c, \\ D_C &= L(\eta\eta)s, \end{aligned} \quad (3.76)$$

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

Zatem równanie (3.75) przyjmie postać:

$$\eta_i = -D_T \theta_{,i} - D_\varepsilon e_{,i} - D_C c_{,i}. \quad (3.77)$$

Wracamy do równania opisującego drugą zasadę termodynamiki (3.29). Do związku tego podstawiamy zależność (3.69)₂:

$$T\dot{S} = kT_{,ii} - \alpha\eta_{i,i} + M\eta_{i,i} + W - M\tau. \quad (3.78)$$

W wyrażeniu $M\eta_{i,i}$ występują człony nieliniowe, a wielkości $\alpha\eta_{i,i}$ i $M\tau$ są małe w stosunku do pierwszego członu po prawej stronie równania (3.78). Zatem nie popełni się większego błędu, pomijając te wyrażenia. W ten sposób otrzymamy:

$$T\dot{S} = kT_{,ii} + W. \quad (3.79)$$

Do otrzymanego wyrażenia podstawiamy zależność (3.63)₂:

$$\begin{aligned} kT_{,ii} + W &= T\gamma_T \dot{e} + Tb\dot{c} + \dot{T}c_{\varepsilon,c}, \\ k(\theta + T_0)_{,ii} + W &= (\theta + T_0)(\gamma_T \dot{e} + b\dot{c}) + \frac{d(\theta + T_0)}{dt} c_{\varepsilon,c}, \\ k\theta_{,ii} + W &= T_0 \left(\frac{\theta}{T_0} + 1 \right) (\gamma_T \dot{e} + b\dot{c}) + \dot{\theta} c_{\varepsilon,c}. \end{aligned} \quad (3.80)$$

Powyższe równanie możemy zlinearyzować, z uwagi na przyjęte założenie $|\theta/T_0| \ll 1$. W ten sposób otrzymujemy właściwą postać równania przewodnictwa cieplnego:

$$k\theta_{,ii} - \dot{\theta} c_{\varepsilon,c} - T_0(\gamma_T \dot{e} + b\dot{c}) + W = 0. \quad (3.81)$$

3.3.4. Rozszerzone równanie dyfuzji

Równanie dyfuzji wyprowadzimy, podstawiając zależność (3.77) do równania (3.28):

$$\dot{C} = D_T \theta_{,ii} + D_\varepsilon e_{,ii} + D_C c_{,ii} + \tau. \quad (3.82)$$

Wykorzystując zależność:

$$\dot{C} = \frac{d(c + C_0)}{dt} = \dot{c}, \quad (3.83)$$

otrzymujemy właściwą postać równania dyfuzji:

$$D_T \theta_{,ii} + D_\varepsilon e_{,ii} + D_C c_{,ii} - \dot{c} + \tau = 0. \quad (3.84)$$

3.4. ZESTAWIENIE RÓWNAŃ TERMODYFUZJI SPRZEŻONEJ

3.4.1. Równania równowagi

Równania równowagi, opisujące zależność pomiędzy naprężeniami, siłami masowymi i siłami bezwładności, zostały przedstawione zależnością (3.13). Równania te możemy zapisać w innej, równoważnej postaci:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij,i} + \rho f_j - \rho \ddot{u}_j &= 0, \\ (\mathbf{X}, T, C, t) &\in \mathcal{B} \times \langle T_0, T_1 \rangle \times \langle C_0, C_1 \rangle \times \langle 0, \infty \rangle, \\ i, j &= 1, 2, 3, \end{aligned} \quad (3.85)$$

gdzie:

- σ_{ij} – składowa tensora naprężeń $[\frac{N}{m^2}]$,
- ρ – gęstość objętościowa ciała $[\frac{kg}{m^3}]$,
- f_j – składowa wektora intensywności obciążenia przypadającego na jednostkę masy $[\frac{N}{kg}]$,
- \ddot{u}_j – składowa wektora przyspieszeń przemieszczeń $[\frac{m}{s^2}]$.

3.4.2. Równania geometryczne

Równania geometryczne opisano zależnością (3.22)₁:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij} &= \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}), \\ (\mathbf{X}, T, C, t) &\in \mathcal{B} \times \langle T_0, T_1 \rangle \times \langle C_0, C_1 \rangle \times \langle 0, \infty \rangle, \\ i, j &= 1, 2, 3, \end{aligned} \quad (3.86)$$

gdzie:

- u_i – składowa wektora przemieszczeń [m],
- ε_{ij} – składowa tensora odkształceń [-].

3.4.3. Równania fizyczne (konstrytutywne)

Równania fizyczne (konstrytutywne) termodyfuzji sprzężonej dla ciała jednorodnego izotropowego opisano wzorem (3.47)₃:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= 2\mu\varepsilon_{ij} + (\lambda e - \gamma_T \theta - \gamma_C c)\delta_{ij}, \\ &\text{w którym (3.48):} \\ \gamma_T &= (3\lambda + 2\mu)\alpha_t = 3K\alpha_t, \\ \gamma_C &= (3\lambda + 2\mu)\alpha_c = 3K\alpha_c, \\ (\mathbf{X}, T, C, t) &\in \mathcal{B} \times \langle T_0, T_1 \rangle \times \langle C_0, C_1 \rangle \times \langle 0, \infty \rangle, \\ i, j &= 1, 2, 3, \end{aligned} \quad (3.87)$$

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

gdzie:

- μ, λ – stałe materiałowe Lamé'go [$\frac{N}{m^2}$],
- ε_{ij} – składowa tensora odkształceń [-],
- σ_{ij} – składowa tensora naprężeń [$\frac{N}{m^2}$],
- e – dylatacja, I niezmiennik stanu odkształcenia, względna zmiana objętości [-],
- θ – zmiana temperatury [deg],
- c – zmiana stężenia substancji dyfundującej [$\frac{kg}{m^3}$],
- $\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{dla } i = j \\ 0, & \text{dla } i \neq j \end{cases}$ – delta Kroneckera [-],
- α_t – współczynnik liniowej rozszerzalności termicznej [$\frac{1}{K}$],
- α_c – współczynnik liniowej rozszerzalności dyfuzyjnej [$\frac{m^3}{kg}$],
- K – moduł ściśliwości [$\frac{N}{m^2}$].

3.4.4. Rozszerzone równanie przewodnictwa cieplnego

Rozszerzone równanie przewodnictwa cieplnego zostało opisane wzorem (3.81):

$$k\theta_{,ii} - \theta c_{\varepsilon,c} - T_0(\gamma_T \dot{e} + b\dot{c}) + W = 0,$$

w którym (3.48):

$$\gamma_T = (3\lambda + 2\mu)\alpha_t = 3K\alpha_t, \quad (3.88)$$

$$(X, T, C, t) \in \mathcal{B} \times \langle T_0, T_1 \rangle \times \langle C_0, C_1 \rangle \times \langle 0, \infty \rangle,$$

$$i = 1, 2, 3,$$

gdzie:

- μ, λ – stałe materiałowe Lamé'go [$\frac{N}{m^2}$],
- e – dylatacja, I niezmiennik stanu odkształcenia, względna zmiana objętości [-],
- θ – zmiana temperatury [deg],
- c – zmiana stężenia substancji dyfundującej [$\frac{kg}{m^3}$],
- α_t – współczynnik liniowej rozszerzalności termicznej [$\frac{1}{K}$],
- K – moduł ściśliwości [$\frac{N}{m^2}$],
- k – współczynnik przewodnictwa cieplnego [$\frac{W}{m K}$],
- $c_{\varepsilon,c}$ – ciepło właściwe przy ustalonej deformacji i koncentracji [$\frac{J}{K m^3}$],
- W – wydajność wewnętrznych źródeł ciepła [$\frac{W}{m^3}$],
- b – stała materiałowa [$\frac{J}{kg K}$].

3.4.5. Rozszerzone równanie dyfuzji

Rozszerzone równanie dyfuzji zostało opisane zależnością (3.84):

$$\begin{aligned} D_T \theta_{,ii} + D_\varepsilon e_{,ii} + D_C c_{,ii} - \dot{c} + \tau &= 0, \\ (\mathbf{X}, T, C, t) \in \mathcal{B} \times \langle T_0, T_1 \rangle \times \langle C_0, C_1 \rangle \times \langle 0, \infty \rangle, \\ i &= 1, 2, 3, \end{aligned} \quad (3.89)$$

gdzie:

- e – dylatacja, I niezmiennik stanu odkształcenia, względna zmiana objętości [–],
- θ – zmiana temperatury [deg],
- c – zmiana stężenia substancji dyfundującej [$\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$],
- D_C – współczynnik dyfuzji [$\frac{\text{m}^2}{\text{s}}$],
- α_t – współczynnik liniowej rozszerzalności termicznej [$\frac{1}{\text{K}}$],
- α_c – współczynnik liniowej rozszerzalności dyfuzyjnej [$\frac{\text{m}^3}{\text{kg}}$],
- τ – wydajność wewnętrznych źródeł masy [$\frac{\text{kg}}{\text{m}^3 \cdot \text{s}}$].

3.4.6. Warunki początkowe

Równania równowagi (3.85) są równaniami różniczkowymi II rzędu względem czasu, natomiast rozszerzone równanie przewodnictwa cieplnego (3.88) i równanie dyfuzji (3.89) to równania różniczkowe I rzędu względem czasu. Zatem w celu jednoznacznego rozwiązania wspomnianych równań, należy wprowadzić łącznie cztery warunki początkowe. Z przyjętych założeń wynika, że warunki te mogą mieć następującą postać:

$$\begin{aligned} u_i(\mathbf{X}, t) &= u_{0i}(\mathbf{X}, t), \\ \dot{u}_i(\mathbf{X}, t) &= \dot{u}_{0i}(\mathbf{X}, t), \\ T(\mathbf{X}, t) &= T_0(\mathbf{X}, t), \\ C(\mathbf{X}, t) &= C_0(\mathbf{X}, t), \\ (\mathbf{X}, t) &\in \mathcal{B} \times \{0\}, \\ i &= 1, 2, 3. \end{aligned} \quad (3.90)$$

3.4.7. Warunki brzegowe typu statycznego

Warunki brzegowe typu statycznego opisują zależność pomiędzy składowymi wektora sił powierzchniowych a składowymi tensora naprężeń na powierzchni granicznej, na której znane są obciążenia ($\partial \mathcal{B}_p$). Możemy je zapisać w następującej postaci:

$$\begin{aligned} \hat{p}_i(\mathbf{X}, t) &= \sigma_{ji}(\mathbf{X}, t) n_j, \\ (\mathbf{X}, t) &\in \partial \mathcal{B}_p \times \langle 0, \infty \rangle, \\ i, j &= 1, 2, 3, \end{aligned} \quad (3.91)$$

gdzie:

- \hat{p}_i – znana składowa wektora sił powierzchniowych na powierzchni granicznej ciała $[\frac{N}{m^2}]$,
- σ_{ij} – składowa tensora naprężeń $[\frac{N}{m^2}]$,
- n_j – kosinus kierunkowy orientujący powierzchnię graniczną ∂B [-].

3.4.8. Warunki brzegowe typu geometrycznego

Warunki brzegowe typu geometrycznego określają wartość wektora przemieszczeń, na powierzchni granicznej, na której znane są przemieszczenia (∂B_u). Zapiszemy je następująco:

$$\begin{aligned} u_i(\mathbf{X}, t) &= \hat{u}_i(\mathbf{X}, t), \\ (\mathbf{X}, t) &\in \partial B_u \times \langle 0, \infty \rangle, \\ i &= 1, 2, 3, \end{aligned} \quad (3.92)$$

gdzie:

- u_i – składowa wektora przemieszczeń [m],
- \hat{u}_i – znana składowa wektora przemieszczeń na powierzchni granicznej ciała [m].

3.4.9. Warunki brzegowe typu termicznego

Warunki brzegowe typu termicznego mogą przyjmować różną postać: może być znany rozkład temperatury na powierzchni granicznej ciała (warunek I rodzaju), określona może zostać wartość natężenia strumienia ciepła na powierzchni granicznej ciała (warunek II rodzaju) lub warunkiem brzegowym typu termicznego może być warunek swobodnej wymiany ciepła pomiędzy ciałem a otaczającym ośrodkiem (warunek III rodzaju):

- warunek I rodzaju:

$$\begin{aligned} T(\mathbf{X}, t) &= \hat{T}(\mathbf{X}, t), \\ (\mathbf{X}, t) &\in \partial B_{T1} \times \langle 0, \infty \rangle, \end{aligned} \quad (3.93)$$

gdzie:

- T – temperatura [K],
- \hat{T} – znana temperatura na powierzchni granicznej ciała [K].

- warunek II rodzaju:

$$\begin{aligned} q_i(\mathbf{X}, t) &= \hat{q}_i(\mathbf{X}, t), \\ (\mathbf{X}, t) &\in \partial B_{T2} \times \langle 0, \infty \rangle, \\ i &= 1, 2, 3, \end{aligned} \quad (3.94)$$

gdzie:

- q_i – składowa wektora gęstości strumienia ciepła $[\frac{W}{m^2}]$,

\hat{q}_i – znana składowa wektora gęstości strumienia ciepła na powierzchni granicznej ciała $[\frac{W}{m^2}]$.

➤ warunek III rodzaju:

$$q(\mathbf{X}, t) = \beta_T(T_s(\mathbf{X}, t) - T_p(\mathbf{X}, t)), \quad (3.95)$$
$$(\mathbf{X}, t) \in \partial B_{T3} \times \langle 0, \infty \rangle,$$

gdzie:

q – gęstość strumienia ciepła przyjmowanego przez ośrodek w kierunku prostopadłym do powierzchni ciała stałego $[\frac{W}{m^2}]$,

β_T – współczynnik proporcjonalności, współczynnik przyjmowania ciepła $[\frac{W}{m^2 \cdot K}]$,

T_s – znana temperatura powierzchni granicznej ciała [K],

T_p – znana temperatura ośrodka otaczającego ciało [K].

3.4.10. Warunki brzegowe typu dyfuzyjnego

Warunki brzegowe typu dyfuzyjnego, podobnie jak warunki brzegowe typu termicznego, mogą mieć analogiczną strukturę, tj.: może być znany rozkład stężenia substancji dyfundującej na powierzchni granicznej ciała (warunek I rodzaju), określona może zostać wartość natężenia przepływu substancji dyfundującej na powierzchni granicznej ciała (warunek II rodzaju) lub warunkiem brzegowym typu dyfuzyjnego może być warunek swobodnego przepływu substancji dyfundującej pomiędzy ciałem a otaczającym ośrodkiem (warunek III rodzaju):

➤ warunek I rodzaju:

$$C(\mathbf{X}, t) = \hat{C}(\mathbf{X}, t), \quad (3.96)$$
$$(\mathbf{X}, t) \in \partial B_{C1} \times \langle 0, \infty \rangle,$$

gdzie:

C – stężenie substancji dyfundującej $[\frac{kg}{m^3}]$,

\hat{C} – znane stężenie substancji dyfundującej na powierzchni granicznej ciała $[\frac{kg}{m^3}]$.

➤ warunek II rodzaju:

$$\eta_i(\mathbf{X}, t) = \hat{\eta}_i(\mathbf{X}, t), \quad (3.97)$$
$$(\mathbf{X}, t) \in \partial B_{C2} \times \langle 0, \infty \rangle,$$
$$i = 1, 2, 3,$$

gdzie:

η_i – składowa wektora przepływu substancji dyfundującej $[\frac{kg}{m^2 \cdot s}]$,

$\hat{\eta}_i$ – znana składowa wektora przepływu substancji dyfundującej na powierzchni granicznej ciała $[\frac{kg}{m^2 \cdot s}]$.

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

➤ warunek III rodzaju:

$$\begin{aligned} \eta(\mathbf{X}, t) &= \beta_C (C_s(\mathbf{X}, t) - C_p(\mathbf{X}, t)), \\ (\mathbf{X}, t) &\in \partial B_{C3} \times \langle 0, \infty \rangle, \end{aligned} \quad (3.98)$$

gdzie:

η – przepływ substancji dyfundującej przyjmowany przez ośrodek w kierunku prostopadłym do powierzchni ciała stałego $[\frac{\text{kg}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}}]$,

β_C – współczynnik proporcjonalności, współczynnik przyjmowania masy $[\frac{\text{m}}{\text{s}}]$,

C_s – znane stężenie substancji dyfundującej na powierzchni granicznej ciała $[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}]$,

C_p – znane stężenie substancji dyfundującej w ośrodku otaczającym ciało $[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}]$.

4. RÓWNANIA CZASOPRACY WIRTUALNEJ

4.1. WPROWADZENIE

Układ równań sformułowany w pkt. 3.4., na bazie teorii mechaniki ośrodków ciągłych i termodynamiki procesów nieodwracalnych, opisujący zagadnienie początkowo – brzegowe termodyfuzji sprzężonej, jest układem sprzężonych równań różniczkowych cząstkowych względem zmiennych przestrzennych i czasu. Rozwiązanie takiego zagadnienia można uzyskać na drodze metod analitycznych lub numerycznych. Rozwiązanie ściśle – analityczne – na ogół wymaga przyjęcia szeregu uproszczeń, co w rezultacie prowadzi do rozprzężenia układu równań. Rozwiązania analityczne ograniczają się na ogół do dość prostych, elementarnych przypadków i przeważnie nie mają praktycznego odniesienia. Jednakże dzięki tym metodom możliwe jest np. wyprowadzenie ogólnych zależności pomiędzy parametrami zadania oraz przeprowadzenie analiz jakościowych.

Z uwagi na wspomniane wyżej ograniczenia obliczeniowe metod analitycznych, przy rozwiązywaniu praktycznych zagadnień technicznych stosuje się obecnie niemalże wyłącznie metody numeryczne. Wyprowadzone we wcześniejszych rozdziałach równania geometryczne, fizyczne, równania równowagi, rozszerzone równanie przewodnictwa cieplnego i dyfuzji oraz warunki początkowe i brzegowe stanowią lokalne sformułowanie zagadnienia początkowo – brzegowego termodyfuzji sprzężonej. W celu rozwiązania tego zagadnienia z użyciem metody numerycznej, jak np. metoda elementów czasoprzestrzennych, konieczne jest sformułowanie globalne, obejmujące cały rozpatrywany obszar danego ciała i cały przedział czasowy. Jednym ze sposobów przekształcenia sformułowania lokalnego w globalne jest zastosowanie metody analogicznej do równania pracy wirtualnej, tj. równania czasopracy wirtualnej. Równanie to definiuje się następująco [Kleiber 1995]: „*Uogólnione siły rozłożone na hiperpowierzchni ograniczającej obiekt czasoprzestrzenny oraz siły masowe działające w czterowymiarowym obszarze obiektu wykonują na wirtualnych przemieszczeniach czasopracę równą czasoenergii wirtualnej zgromadzonej w rozpatrywanym obiekcie*”.

4.2. WYPROWADZENIE RÓWNAŃ CZASOPRACY WIRTUALNEJ TERMODYFUZJI SPRZĘŻONEJ

Punktem wyjścia do wyprowadzenia równań czasopracy wirtualnej jest równanie ruchu (3.85). Zależność tę mnożymy przez wariację przemieszczenia δu_i , którą należy rozumieć jako dowolne funkcje przemieszczeń spełniające kinematyczne warunki brzegowe oraz różniczkowalne po zmiennych przestrzennych, jak i po czasie. Ponadto całkujemy otrzymaną zależność po całym obszarze \mathcal{B} oraz po czasie t :

$$\int_t \int_{\mathcal{B}} \delta u_i (\sigma_{ij,j} + \rho f_i - \rho \ddot{u}_i) d\mathcal{B} dt = 0. \quad (4.1)$$

W pierwszej kolejności przekształćmy pierwszy człon równania (4.1), wykorzystując zależność na pochodną iloczynu oraz przekształcenie Gaussa – Ostrogradskiego:

$$\begin{aligned} \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta u_i \sigma_{ij,j} d\mathcal{B} dt &= \int_t \int_{\mathcal{B}} (\delta u_i \sigma_{ij})_{,j} d\mathcal{B} dt - \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta u_{i,j} \sigma_{ij} d\mathcal{B} dt = \\ &= \int_t \int_{\partial \mathcal{B}} \delta u_i \sigma_{ij} n_j d(\partial \mathcal{B}) dt - \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta u_{i,j} \sigma_{ij} d\mathcal{B} dt. \end{aligned} \quad (4.2)$$

W celu dalszych przekształceń, rozdzielono powierzchnię graniczną: na powierzchnię graniczną, na której znane są przemieszczenia $\partial \mathcal{B}_u$ oraz powierzchnie graniczną, na której znane są obciążenia $\partial \mathcal{B}_p$, otrzymując:

$$\begin{aligned} \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta u_i \sigma_{ij,j} d\mathcal{B} dt &= \int_t \int_{\partial \mathcal{B}_p} \delta u_i \sigma_{ij} n_j d(\partial \mathcal{B}_p) dt + \\ &+ \int_t \int_{\partial \mathcal{B}_u} \delta u_i \sigma_{ij} n_j d(\partial \mathcal{B}_u) dt - \int_t \int_{\mathcal{B}} \sigma_{ij} \delta u_{i,j} d\mathcal{B} dt = \\ &= \int_t \int_{\partial \mathcal{B}_p} \delta u_i \sigma_{ij} n_j d(\partial \mathcal{B}_p) dt - \int_t \int_{\mathcal{B}} \sigma_{ij} \delta u_{i,j} d\mathcal{B} dt. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Następnie, do otrzymanej w ten sposób zależności, wstawiono warunki brzegowe typu statycznego (3.91), a funkcję wariacji przemieszczeń podzielono na część symetryczną i antysymetryczną:

$$\begin{aligned} \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta u_i \sigma_{ij,j} d\mathcal{B} dt &= \int_t \int_{\partial \mathcal{B}_p} \delta u_i \hat{p}_i d(\partial \mathcal{B}_p) dt + \\ &- \int_t \int_{\mathcal{B}} \sigma_{ij} \left(\frac{1}{2} (\delta u_{i,j} + \delta u_{j,i}) + \frac{1}{2} (\delta u_{i,j} - \delta u_{j,i}) \right) d\mathcal{B} dt = \\ &= \int_t \int_{\partial \mathcal{B}_p} \delta u_i \hat{p}_i d(\partial \mathcal{B}_p) dt - \int_t \int_{\mathcal{B}} (\sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} + \sigma_{ij} \delta \omega_{ij}) d\mathcal{B} dt. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Tensor naprężeń, podobnie jak tensor odkształceń, to tensory symetryczne (tzn. $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$, $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ dla $i \neq j$). Natomiast tensor obrotu odkształceń jest antysymetryczny (tzn. $\omega_{ij} = -\omega_{ji}$, dla $i \neq j$). Wiedząc, że iloczyn tensora symetrycznego i antysymetrycznego jest równy zeru, możemy zapisać ostateczną postać równania (4.4):

$$\int_t \int_{\mathcal{B}} \delta u_i \sigma_{ij,j} d\mathcal{B} dt = \int_t \int_{\partial \mathcal{B}_p} \delta u_i \hat{p}_i d(\partial \mathcal{B}_p) dt - \int_t \int_{\mathcal{B}} \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} d\mathcal{B} dt. \quad (4.5)$$

Otrzymaną zależność (4.5) wprowadzamy ostatecznie do równania (4.1), otrzymując:

$$\begin{aligned} & \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta u_i \rho f_i d\mathcal{B} dt - \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta u_i \rho \ddot{u}_i d\mathcal{B} dt + \\ & + \int_t \int_{\partial \mathcal{B}_p} \hat{p}_i \delta u_i d(\partial \mathcal{B}_p) dt - \int_t \int_{\mathcal{B}} \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} d\mathcal{B} dt = 0. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Następnie przekształcamy drugą całkę równania (4.6), wykorzystując całkowanie przez części w odniesieniu do czasu:

$$\int_t \int_{\mathcal{B}} \delta u_i \rho \ddot{u}_i d\mathcal{B} dt = \int_{\mathcal{B}} \rho \dot{u}_i \delta u_i d\mathcal{B} \Big|_{t_0}^{t_1} - \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta \dot{u}_i \rho \dot{u}_i d\mathcal{B} dt. \quad (4.7)$$

W równaniu (4.7) $t = \langle t_0, t_1 \rangle$ oznacza czas obserwacji: początek obserwacji (warunek początkowy) i chwilę końcową. Podstawiamy następnie zależność (4.7) do wzoru (4.6), otrzymując równanie czasopracy wirtualnej w postaci:

$$\begin{aligned} & \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta u_i \rho f_i d\mathcal{B} dt + \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta \dot{u}_i \rho \dot{u}_i d\mathcal{B} dt - \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta \varepsilon_{ij} \sigma_{ij} d\mathcal{B} dt + \\ & + \int_t \int_{\partial \mathcal{B}_p} \delta u_i \hat{p}_i d(\partial \mathcal{B}_p) dt - \int_{\mathcal{B}} \delta u_i \rho \dot{u}_i d\mathcal{B} \Big|_{t_0}^{t_1} = 0. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Równanie (4.8) stanowi uogólnienie zasady czasopracy wirtualnej na zagadnienie termodyfuzji, gdyż funkcja naprężeń zależy już nie tylko od odkształceń, ale również od temperatury i stężenia substancji dyfundującej, tzn. $\sigma_{ij} = \sigma_{ij}(\varepsilon_{ij}, T, C)$. Przedstawione równanie byłoby kompletne dla zagadnienia termodyfuzji, gdyby znana była temperatura i stężenie substancji dyfundującej, co odpowiadałoby zagadnieniu termodyfuzji niesprężonej. W przypadku termodyfuzji sprzężonej, temperatura i stężenie substancji dyfundującej nie są znane, stąd konieczne jest wyprowadzenie dodatkowych członów równania, uwzględniających zjawisko przepływu ciepła i masy.

W przypadku pola temperatury wykorzystamy rozszerzone równanie przewodnictwa cieplnego (3.88) oraz funkcję g , która związany jest ze zmianą temperatury następującą zależnością [Kączkowski 1982, Podhorecki 2005]:

$$\theta \stackrel{\text{def}}{=} T_0 \dot{g}, \quad (4.9)$$

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

stąd:

$$g = \frac{1}{T_0} \int_t \theta dt + g(0). \quad (4.10)$$

W odniesieniu do rozszerzonego równania dyfuzji, wykorzystana zostanie natomiast następująca zależność, związana ze zmianą stężenia substancji dyfundującej:

$$c \stackrel{\text{def}}{=} C_0 h, \quad (4.11)$$

stąd:

$$h = \frac{c}{C_0}. \quad (4.12)$$

Rozszerzone równanie przewodnictwa cieplnego (3.88) mnożymy przez wariację funkcji g i całkujemy po całym obszarze \mathcal{B} oraz po czasie t :

$$\int_t \int_{\mathcal{B}} \delta g (k\theta_{,ii} - \dot{\theta} c_{\varepsilon,c} - T_0(\gamma_T \dot{e} + b\dot{c}) + W) d\mathcal{B} dt = 0. \quad (4.13)$$

Pierwszy człon powyższego wyrażenia przekształcamy, korzystając z zależności na pochodną iloczynu oraz przekształcenia Gaussa – Ostrogradskiego:

$$\begin{aligned} \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta g k \theta_{,ii} d\mathcal{B} dt &= \int_t \int_{\mathcal{B}} (\delta g k \theta_{,i})_{,i} d\mathcal{B} dt - \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta g_{,i} k \theta_{,i} d\mathcal{B} dt \\ &= \int_t \int_{\partial \mathcal{B}_T} \delta g k \theta_{,i} n_i d(\partial \mathcal{B}_T) dt - \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta g_{,i} k \theta_{,i} d\mathcal{B} dt. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Przedstawione w pkt. 3.4.9 warunki brzegowe typu termicznego są wzajemnie równoważne. Znając np. warunek brzegowy I rodzaju, można bez problemów przekształcić go w warunek II lub III rodzaju. Zatem by skrócić zapis, ograniczono się jedynie do przedstawienia w sposób jawny w równaniach czasopracy wirtualnej jednego z tych warunków. Do otrzymanej zależności (4.14) podstawiono warunek brzegowy typu termicznego II rodzaju (3.94):

$$k\theta_{,i} = -\hat{q}_i, \quad (4.15)$$

zatem:

$$\begin{aligned} \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta g k \theta_{,ii} d\mathcal{B} dt &= \\ &= - \int_t \int_{\partial \mathcal{B}_T} \delta g \hat{q}_i n_i d(\partial \mathcal{B}_T) dt - \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta g_{,i} k \theta_{,i} d\mathcal{B} dt. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

Powyższe równanie podstawiamy do zależności (4.13) i porządkujemy, korzystając ponownie z podstawień (4.9) i (4.11):

$$\begin{aligned}
 & - \int_t \int_{\partial \mathcal{B}_T} \delta g \hat{q}_i n_i d(\partial \mathcal{B}_T) dt - \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta g_{,i} k T_0 \dot{g}_{,i} d\mathcal{B} dt + \\
 & - \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta g T_0 \ddot{g} c_{\varepsilon,c} d\mathcal{B} dt - \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta g T_0 \gamma_T \dot{e} d\mathcal{B} dt + \\
 & - \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta g T_0 b C_0 \dot{h} d\mathcal{B} dt + \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta g W d\mathcal{B} dt = 0.
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

Na koniec przekształcamy poszczególne całki równania (4.17), wykorzystując całkowanie przez części w odniesieniu do czasu:

$$\begin{aligned}
 & \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta g T_0 \ddot{g} c_{\varepsilon,c} d\mathcal{B} dt = \\
 & = \int_{\mathcal{B}} \delta g T_0 \dot{g} c_{\varepsilon,c} d\mathcal{B} \Big|_{t_0}^{t_1} - \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta \dot{g} T_0 \dot{g} c_{\varepsilon,c} d\mathcal{B} dt.
 \end{aligned} \tag{4.18}$$

$$\begin{aligned}
 & \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta g T_0 b C_0 \dot{h} d\mathcal{B} dt = \\
 & = \int_{\mathcal{B}} \delta g T_0 b C_0 h d\mathcal{B} \Big|_{t_0}^{t_1} - \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta \dot{g} T_0 b C_0 h d\mathcal{B} dt.
 \end{aligned} \tag{4.19}$$

$$\begin{aligned}
 & \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta g T_0 \gamma_T \dot{e} d\mathcal{B} dt = \\
 & = \int_{\mathcal{B}} \delta g T_0 \gamma_T e d\mathcal{B} \Big|_{t_0}^{t_1} - \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta \dot{g} T_0 \gamma_T e d\mathcal{B} dt.
 \end{aligned} \tag{4.20}$$

Po uporządkowaniu otrzymujemy ostateczną postać równania czasopracy wirtualnej przewodnictwa cieplnego:

$$\begin{aligned}
 & \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta \dot{g} T_0 c_{\varepsilon,c} \dot{g} d\mathcal{B} dt - \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta g_{,i} k T_0 \dot{g}_{,i} d\mathcal{B} dt + \\
 & + \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta \dot{g} T_0 C_0 b h d\mathcal{B} dt + \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta \dot{g} T_0 \gamma_T e d\mathcal{B} dt + \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta g W d\mathcal{B} dt + \\
 & - \int_t \int_{\partial \mathcal{B}_T} \delta g \hat{q}_i n_i d(\partial \mathcal{B}_T) dt + \\
 & - \int_{\mathcal{B}} \delta g T_0 c_{\varepsilon,c} \dot{g} d\mathcal{B} \Big|_{t_0}^{t_1} - \int_{\mathcal{B}} \delta g T_0 C_0 b h d\mathcal{B} \Big|_{t_0}^{t_1} - \int_{\mathcal{B}} \delta g T_0 \gamma_T e d\mathcal{B} \Big|_{t_0}^{t_1} = 0.
 \end{aligned} \tag{4.21}$$

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

Celem wyprowadzenia ostatniej części równania czasopracy wirtualnej, związanej z przepływem masy, korzystamy z rozszerzonego równania dyfuzji (3.89), które mnożymy przez współczynnik dyfuzji D_C oraz wariację nowej wielkości h , opisaną zależnością (4.12) i całkujemy po całym obszarze \mathcal{B} oraz po czasie t :

$$\int_t \int_{\mathcal{B}} \delta h (D_C D_T \theta_{,ii} + D_C D_\varepsilon e_{,ii} + D_C^2 c_{,ii} - D_C \dot{c} + D_C \tau = 0) d\mathcal{B} dt = 0. \quad (4.22)$$

Pierwszy, drugi i trzeci człon powyższego wyrażenia przekształcamy, korzystając z zależności na pochodną iloczynu oraz przekształcenia Gaussa – Ostrogradskiego:

$$\begin{aligned} \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta h D_C D_T \theta_{,ii} d\mathcal{B} dt &= \int_t \int_{\mathcal{B}} (\delta h D_C D_T \theta_{,i})_{,i} d\mathcal{B} dt + \\ &\quad - \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta h_{,i} D_C D_T \theta_{,i} d\mathcal{B} dt = \\ &= \int_t \int_{\partial \mathcal{B}_C} \delta h D_C D_T \theta_{,i} n_i d(\partial \mathcal{B}_C) dt - \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta h_{,i} D_C D_T \theta_{,i} d\mathcal{B} dt. \end{aligned} \quad (4.23)$$

$$\begin{aligned} \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta h D_C D_\varepsilon e_{,ii} d\mathcal{B} dt &= \int_t \int_{\mathcal{B}} (\delta h D_C D_\varepsilon e_{,i})_{,i} d\mathcal{B} dt + \\ &\quad - \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta h_{,i} D_C D_\varepsilon e_{,i} d\mathcal{B} dt = \\ &= \int_t \int_{\partial \mathcal{B}_C} \delta h D_C D_\varepsilon e_{,i} n_i d(\partial \mathcal{B}_C) dt - \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta h_{,i} D_C D_\varepsilon e_{,i} d\mathcal{B} dt. \end{aligned} \quad (4.24)$$

$$\begin{aligned} \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta h D_C^2 c_{,ii} d\mathcal{B} dt &= \int_t \int_{\mathcal{B}} (\delta h D_C^2 c_{,i})_{,i} d\mathcal{B} dt - \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta h_{,i} D_C^2 c_{,i} d\mathcal{B} dt = \\ &= \int_t \int_{\partial \mathcal{B}_C} \delta h D_C^2 c_{,i} n_i d(\partial \mathcal{B}_C) dt - \int_t \int_{\mathcal{B}} \delta h_{,i} D_C^2 c_{,i} d\mathcal{B} dt. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Przedstawione w pkt. 3.4.10 warunki brzegowe typu dyfuzyjnego są wzajemnie równoważne. Znając np. warunek brzegowy I rodzaju, można bez problemów przekształcić go w warunek II lub III rodzaju. Zatem by skrócić zapis, ograniczono się jedynie do przedstawienia w sposób jawny w równaniach czasopracy wirtualnej jednego z tych warunków. Do otrzymanej zależności (4.25) podstawiono warunek brzegowy typu dyfuzyjnego II rodzaju (3.97), korzystając z zależności (3.77):

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

$$\hat{\eta}_i = -D_T \theta_{,i} - D_\varepsilon e_{,i} - D_C c_{,i}, \quad (4.26)$$

zatem:

$$\begin{aligned} & \int_t^{\mathcal{B}} \int (-\delta h_{,i} D_C D_T \theta_{,i} - \delta h_{,i} D_C D_\varepsilon e_{,i} - \delta h_{,i} D_C^2 c_{,i} - \delta h D_C \dot{c} \\ & + \delta h D_C \tau) d\mathcal{B} dt - \int_t^{\mathcal{B}} \int \delta h D_C \hat{\eta}_i n_i d(\partial \mathcal{B}_C) dt = 0. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Powyższe równanie porządkujemy, korzystając ponownie z podstawień (4.9) i (4.11):

$$\begin{aligned} & \int_t^{\mathcal{B}} \int (-\delta h_{,i} D_C D_T T_0 \dot{g}_{,i} - \delta h_{,i} D_C D_\varepsilon e_{,i} - \delta h_{,i} D_C^2 C_0 h_{,i} - \delta h D_C C_0 \dot{h} \\ & + \delta h D_C \tau) d\mathcal{B} dt - \int_t^{\mathcal{B}} \int \delta h D_C \hat{\eta}_i n_i d(\partial \mathcal{B}_C) dt = 0. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Na koniec przekształcamy czwartą całkę równania (4.28), wykorzystując całkowanie przez części w odniesieniu do czasu:

$$\begin{aligned} & \int_t^{\mathcal{B}} \int \delta h D_C C_0 \dot{h} d\mathcal{B} dt = \\ & = \int_{\mathcal{B}} \delta h D_C C_0 h d\mathcal{B} \Big|_{t_0}^{t_1} - \int_t^{\mathcal{B}} \int \delta \dot{h} D_C C_0 h d\mathcal{B} dt. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Po uporządkowaniu otrzymujemy ostateczną postać równania czasopracy wirtualnej dyfuzji:

$$\begin{aligned} & \int_t^{\mathcal{B}} \int \delta h D_C \tau d\mathcal{B} dt - \int_t^{\mathcal{B}} \int \delta h_{,i} D_C D_T T_0 \dot{g}_{,i} d\mathcal{B} dt + \\ & - \int_t^{\mathcal{B}} \int \delta h_{,i} D_C D_\varepsilon e_{,i} d\mathcal{B} dt - \int_t^{\mathcal{B}} \int \delta h_{,i} D_C^2 C_0 h_{,i} d\mathcal{B} dt + \\ & + \int_t^{\mathcal{B}} \int \delta \dot{h} D_C C_0 h d\mathcal{B} dt - \int_t^{\mathcal{B}} \int \delta h D_C \hat{\eta}_i n_i d(\partial \mathcal{B}_C) dt \\ & - \int_{\mathcal{B}} \delta h D_C C_0 h d\mathcal{B} \Big|_{t_0}^{t_1} = 0. \end{aligned} \quad (4.30)$$

4.3. ROZSZERZENIE ZASADY HAMILTONA NA ZAGADNIENIE TERMODYFUZJI SPRĘŻONEJ

Zasada Hamiltona stanowi uogólnienie zasady minimum energii potencjalnej na przypadek liniowej dynamiki [Kleiber 1995]. Uogólnienie to polega na zbudowaniu pewnego funkcjonału i następnie na żądaniu, aby ten funkcjonał spełniał odpowiednie warunki minimum. W klasycznym podejściu przyjmuje się, że na końcach czasu obserwacji, wariacje przemieszczeń zerują się, a to uniemożliwia wyprowadzenie z zasady Hamiltona warunków początkowych ruchu. Można jednakże ominąć etap budowania funkcjonału, korzystając przez analogię z zasady czasopracy wirtualnej [Kleiber 1995, Podhorecki 2005]. Tematyka rozszerzenia zasady Hamiltona jest cały czas aktualna. Próby uogólnienia tej zasady poruszono m.in. w pracach Ji-Huan He [He 2017] i J. Kim [Kim 2016, Kim 2017].

Poszczególne całki równań (4.8), (4.21), (4.30) oznaczają wielkości wyrażone w $J \cdot s = N \cdot m \cdot s$. Takie wielkości nazywamy czasopracą lub czasoenegią [Kleiber 1995]. Zależności te stanowią zasadę czasopracy wirtualnej, widoczne są sprzężenia odkształceń ε_{ij} , temperatury θ (opisywanej funkcją g) i dyfuzji c (opisywanej funkcją h). Celem uogólnienia zasady Hamiltona, wprowadzamy następujące oznaczenia [Sosnowska 2019]:

$$\mathcal{T}_u = \frac{1}{2} \int_B \dot{u}_i \rho \dot{u}_i d\mathcal{B}; \quad (4.31)$$

$$\mathcal{V}_u = \frac{1}{2} \int_B \varepsilon_{ij} \sigma_{ij} d\mathcal{B}; \quad (4.32)$$

$$\mathcal{W}_u = \int_B u_i \rho f_i d\mathcal{B} + \int_{\partial B_p} u_i \hat{p}_i d(\partial B_p); \quad (4.33)$$

$$\mathcal{T}_T = \frac{1}{2} \int_B \dot{g} T_0 c_{\varepsilon, c} \dot{g} d\mathcal{B}; \quad (4.34)$$

$$\mathcal{V}_T = \frac{1}{2} \int_B (g_{,ik} T_0 \dot{g}_{,i} - \dot{g} T_0 \gamma_T e - \dot{g} T_0 C_0 b h) d\mathcal{B}; \quad (4.35)$$

$$\mathcal{W}_T = \int_B g W d\mathcal{B} - \int_{\partial B_T} g \hat{q}_i n_i d(\partial B_T); \quad (4.36)$$

$$\mathcal{T}_c = \frac{1}{2} \int_B \dot{h} D_c C_0 h d\mathcal{B}; \quad (4.37)$$

$$\mathcal{V}_c = \frac{1}{2} \int_B h_{,i} (T_0 D_c D_T \dot{g}_{,i} + D_c D_\varepsilon e_{,i} + C_0 D_c^2 h_{,i}) d\mathcal{B}; \quad (4.38)$$

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

$$\mathcal{W}_C = \int_{\mathcal{B}} hD_C \tau d\mathcal{B} - \int_{\partial\mathcal{B}_C} hD_C \hat{\eta}_i n_i d(\partial\mathcal{B}_C). \quad (4.39)$$

Powyższe oznaczenia wprowadzamy do równań (4.8), (4.21), (4.30), otrzymując:

$$\delta\chi_u = \delta \int_t (\mathcal{J}_u - \mathcal{V}_u + \frac{1}{2}\mathcal{W}_u) dt - \frac{1}{2} \int_{\mathcal{B}} \delta u_i \rho \dot{u}_i d\mathcal{B} \Big|_{t_0}^{t_1} = 0; \quad (4.40)$$

$$\begin{aligned} \delta\chi_T = & \delta \int_t (\mathcal{J}_T - \mathcal{V}_T + \frac{1}{2}\mathcal{W}_T) dt + \\ & - \frac{1}{2} \int_{\mathcal{B}} \delta g (T_0 c_{\varepsilon, c} \dot{g} + T_0 C_0 b h + T_0 \gamma_T e) d\mathcal{B} \Big|_{t_0}^{t_1} = 0; \end{aligned} \quad (4.41)$$

$$\delta\chi_C = \delta \int_t (\mathcal{J}_C - \mathcal{V}_C + \frac{1}{2}\mathcal{W}_C) dt - \frac{1}{2} \int_{\mathcal{B}} \delta h D_C C_0 h d\mathcal{B} \Big|_{t_0}^{t_1}. \quad (4.42)$$

Uogólniona zasada Hamiltona dla termodyfuzji ciała stałego ma zatem następującą postać:

$$\begin{aligned} \delta\chi(u, \theta, c) = & \delta\chi_u + \delta\chi_T + \delta\chi_C = \delta \int_t (\mathcal{J} - \mathcal{V} + \frac{1}{2}\mathcal{W}) dt \\ & - \frac{1}{2} \int_{\mathcal{B}} (\delta u_i \rho \dot{u}_i + \delta g (T_0 c_{\varepsilon, c} \dot{g} + T_0 C_0 b h + T_0 \gamma_T e) \\ & + \delta h D_C C_0) d\mathcal{B} \Big|_{t_0}^{t_1} = 0. \end{aligned} \quad (4.43)$$

gdzie:

$$\mathcal{J} = \mathcal{J}_u + \mathcal{J}_T + \mathcal{J}_C, \quad (4.44)$$

$$\mathcal{V} = \mathcal{V}_u + \mathcal{V}_T + \mathcal{V}_C, \quad (4.45)$$

$$\mathcal{W} = \mathcal{W}_u + \mathcal{W}_T + \mathcal{W}_C. \quad (4.46)$$

Często w wariacyjnych sformułowaniach równań ruchu wprowadza się ograniczenie, że wariacje przemieszczeń na końcach przedziału czasu zanikają (np. [Kleiber 1995]). To założenie można przez analogię przenieść także na wariacje δg i δh . W takim przypadku równanie (4.43) przyjmuje postać przypominającą klasyczną zasadę Hamiltona:

$$\delta\chi(u, \theta, c) = \delta \int_t (\mathcal{J} - \mathcal{V} + \frac{1}{2}\mathcal{W}) dt = 0, \quad (4.47)$$

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

gdzie χ jest minimalizowanym funkcjonałem, tzw. funkcją Lagrange'a. Równania czasopracy wirtualnej (4.8), (4.21), (4.30), a więc także zasada Hamiltona (4.43), (4.47) nie dadzą się wyrazić prosto jako minimum dobrze określonego funkcjonału. Wiadomo jednak, że takie sformułowania dopuszczają stosowanie metod bezpośrednich (np. [Nowacki 1991]). Można wykazać, że taką metodą może być np. metoda elementów czasoprzestrzennych (MECZ) lub metoda elementów skończonych (MES) i dowolna inna metoda do rozwiązywania układu równań różniczkowych zwyczajnych sprzężonych.

5. METODA ELEMENTÓW CZASOPRZESTRZENNICH DO ROZWIĄZYWANIA ZAGADNIENIA TERMODYFUZJI SPRĘŻONEJ

5.1. ISTOTA METODY ELEMENTÓW CZASOPRZESTRZENNICH

Metoda elementów czasoprzestrzennych (MECZ) jest jedną z metod komputerowych, numerycznych. Cechą wyróżniającą tą metodę jest traktowanie czasu t jako czwartej współrzędnej, na równi ze współrzędnymi przestrzennymi \mathbf{X} [Podhorecki 2005]. To sprawia, że w ogólnym przypadku, powstają czterowymiarowe obiekty czasoprzestrzenne. Konsekwencją jest również charakterystyczna aproksymacja równania różniczkowego [Bajer 2009, Podhorecki 2005]. Klasycznie stosuje się dwuetapową dyskretyzację, niezależnie względem zmiennych przestrzennych \mathbf{X} oraz względem czasu t . Sprowadza się to na ogół do zastosowania najpopularniejszej metody numerycznej – metody elementów skończonych (MES) wraz z jedną z metod bezpośredniego całkowania równań ruchu. W pierwszym etapie, w wyniku zastosowania dyskretyzacji przestrzennej, układ sprzężonych równań różniczkowych cząstkowych, opisujących dane zagadnienie początkowo – brzegowe, przekształca się w układ sprzężonych równań różniczkowych zwyczajnych względem zmiennej czasowej. Następnie, w celu rozwiązania tego układu (liczba równań najczęściej wyraża się w tysiącach lub nawet milionach), konieczne jest zastosowanie dodatkowo jednej z metod bezpośredniego całkowania, jak np. metoda Newmarka, metoda różnic skończonych (MRS) lub metoda Zienkiewicza-Wooda (SSpj), albo metody transformacji własnej. Z kolei w przypadku zastosowania metody elementów czasoprzestrzennych do rozwiązania zagadnienia początkowo – brzegowego, układ sprzężonych równań różniczkowych cząstkowych przekształca się wprost w układ sprzężonych równań algebraicznych, dzięki jednoetapowej dyskretyzacji czasu i przestrzeni.

Jak już wspomniano, w przypadku stosowania klasycznych metod numerycznych, takich jak MES, dokonuje się wyłącznie dyskretyzacji przestrzennej, niezależnie od tego, czy rozpatruje się problem statyczny, czy dynamiczny. W wyniku dyskretyzacji powstaje szereg podobszarów, które nazywamy elementami skończonymi (ES). Dla każdego z tych obszarów można wyrazić wartość funkcji przemieszczeń i innych funkcji w analizowanym obszarze w zależności od parametrów węzłowych (np. r_α), dzięki zastosowaniu funkcji aproksymujących, tzw. funkcji kształtu $\phi_{i\alpha}$ [Zienkiewicz 1972]. Dla przykładu, przemieszczenia w obszarze dowolnego elementu skończonego e można opisać następująco:

$$u_i^e(\mathbf{X}, t) = \phi_{i\alpha}^e(\mathbf{X})r_\alpha^e(t). \quad (5.1)$$

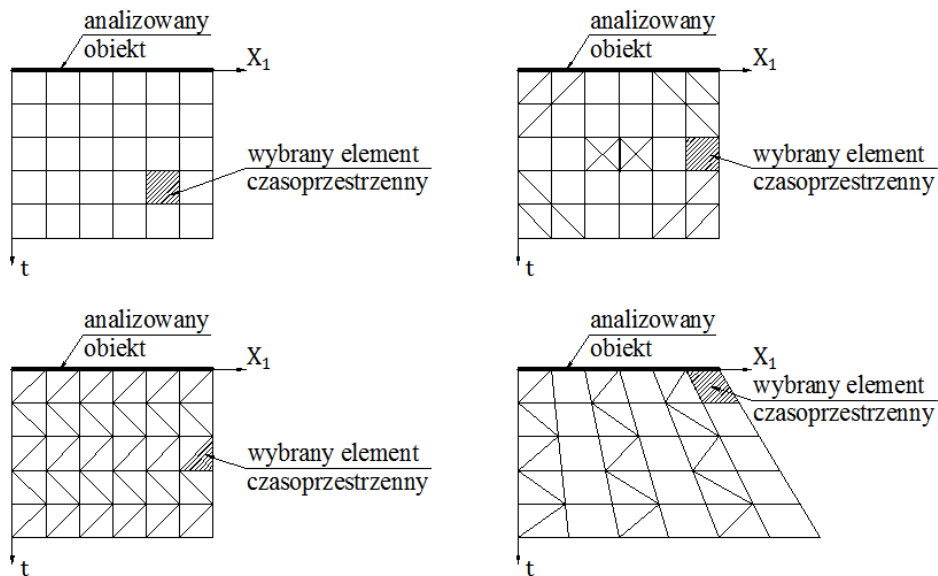
Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

Parametry węzłowe są funkcjami czasu $r_\alpha^e(t)$, natomiast $\phi_{i\alpha}^e(\mathbf{X})$ są funkcjami zależnymi od współrzędnych przestrzennych.

W przypadku metody elementów czasoprzestrzennych, dokonuje się jednocześnie dyskretyzacji przestrzennej i czasowej (rys. 5.1), co prowadzi do podziału analizowanego obszaru czasoprzestrzennego na tzw. skończone elementy czasoprzestrzenne (SKECZ). Dla każdego z nich, analogicznie do zależności (5.1), możemy zapisać następujące równanie:

$$u_i^e(\mathbf{X}, t) = \phi_{i\alpha}^e(\mathbf{X}, t)r_\alpha^e. \quad (5.2)$$

Tym razem parametry węzłowe nie są funkcjami czasu r_α^e , ustalone są dla punktów określonych w czasoprzestrzeni, są wartościami funkcji u_i^e w węzłach SKECZ. Zatem w przypadku zagadnień początkowo – brzegowych wygodnie jest stosować MECZ, gdyż wspomniany układ równań różniczkowych cząstkowych przekształca się wprost w układ równań algebraicznych.



Rys. 5.1. Przykłady dyskretyzacji czasoprzestrzennej elementu prętowego

Kolejną niedogodnością klasycznych metod numerycznych, w stosunku do metody elementów czasoprzestrzennych, jest konieczność stosowania w zasadzie stacjonarnego (niezmiennego w czasie) podziału rozpatrywanego obszaru. Utrudnione jest wówczas np. dostosowanie lokalne siatki podziału na podobszary w zależności od zachodzących procesów. Choć tworzone są metody adaptacyjne, jak np. metoda wielosiatkowa (*multigrid*) lub ruchomych siatek (*moving meshes*), to posiadają one pewne ograniczenia [Bajer 2009]. W metodzie elementów czasoprzestrzennych nieskrępowana dyskretyzacja stwarza

możliwości dostosowania siatki podziału do zachodzących procesów, np. [Bajer 2009]:

- dopasowanie dyskretyzacji do zmiennego w czasie obciążenia;
- rozwiązywanie zagadnień nieliniowych, w których drgania układu spełniają wraz z upływem czasu różne równania różniczkowe;
- możliwość formułowania sposobu całkowania w czasie indywidualnie dla każdego podobszaru;
- przesuwanie strefy lokalnego zagęszczenia siatki podziału na podobszary wraz z przesuwanym się w czasie brzegiem;
- możliwość dostosowania dyskretyzacji do linii charakterystycznych wyznaczonych w analizowanym obszarze czasoprzestrzennym, jak np. granica zmiany fazy materiału, strefy uplastycznionej itp.

Doskonałe podsumowanie metody elementów czasoprzestrzennych przedstawił Witkowski: „Metoda elementów czasoprzestrzennych stała się obecnie metodą badawczą, której konkurencyjność w stosunku do innych podejść zależy od charakteru rozważanych zagadnień. Ogólnie można powiedzieć, że atrakcyjność metody wzrasta wraz z komplikacją modeli obliczeniowych, uwzględniających szybkie zmiany kształtu obiektu, nieliniowości fizyczne, zmienne w czasie koncentracje naprężeń, zmieniające się warunki brzegowe...”

5.2. OKREŚLENIE CHARAKTERYSTYKI ELEMENTU CZASOPRZESTRZENNEGO (SKECZ) W ZAGADNIENIACH TERMODYFUZJI SPRĘŻONEJ

Rozpatruje się dowolny skończony element czasoprzestrzenny (SKECZ) o w_e węzłach i s_e stopniach swobody w każdym węźle. Przyjęto takie sformułowanie metody elementów czasoprzestrzennych, że podstawowymi niewiadomymi w rozpatrywanym zagadnieniu początkowo – brzegowym termodyfuzji sprzężonej będą przemieszczenia $u_i(\mathbf{X}, t)$ oraz funkcje $g(\mathbf{X}, t)$ i $h(\mathbf{X}, t)$. W obszarze SKECZ Ω_e , funkcja przemieszczeń $u_i^e(\mathbf{X}, t)$ opisana będzie przemieszczeniami (parametrami) węzłowymi r_α^e , za pośrednictwem aproksymacyjnej funkcji kształtu $\phi_{i\alpha}^e(\mathbf{X}, t)$, gdzie „e” oznacza numer skończonego elementu czasoprzestrzennego. Dodatkowo, z uwagi na niewiadome w postaci temperatury i stężenia substancji dyfundującej, wprowadzone zostaną parametry węzłowe zależne od temperatury $g_\alpha^e(T)$ oraz parametry węzłowe zależne od stężenia substancji dyfundującej $h_\alpha^e(C)$. Do opisu stanu temperatury i stężenia substancji dyfundującej wykorzystane zostaną funkcje kształtu: $\phi_{T\alpha}^e(\mathbf{X}, t)$ oraz $\phi_{C\alpha}^e(\mathbf{X}, t)$. Za pomocą parametrów węzłowych wyrażone zostaną wszystkie pozostałe wielkości opisujące rozważane zagadnienie. W Rozdziale 4 wyprowadzono następujące równania czasopracy wirtualnej:

$$\begin{aligned} & \int_t^{\cdot} \int_{\mathcal{B}} \delta u_i \rho f_i d\mathcal{B} dt - \int_{\mathcal{B}} \delta u_i \rho \dot{u}_i d\mathcal{B} |_{t_0}^{t_1} + \int_t^{\cdot} \int_{\mathcal{B}} \delta \dot{u}_i \rho \dot{u}_i d\mathcal{B} dt + \\ & + \int_t^{\cdot} \int_{\partial \mathcal{B}_p} \delta u_i \hat{p}_i d(\partial \mathcal{B}_p) dt - \int_t^{\cdot} \int_{\mathcal{B}} \delta \varepsilon_{ij} \sigma_{ij} d\mathcal{B} dt = 0; \end{aligned} \quad (5.3)$$

$$\begin{aligned} & \int_t^{\cdot} \int_{\mathcal{B}} \delta g W d\mathcal{B} dt + \int_t^{\cdot} \int_{\mathcal{B}} \delta \dot{g} T_0 c_{\varepsilon, c} \dot{g} d\mathcal{B} dt + \int_t^{\cdot} \int_{\mathcal{B}} \delta \dot{g} T_0 C_0 b h d\mathcal{B} dt + \\ & + \int_t^{\cdot} \int_{\mathcal{B}} \delta \dot{g} T_0 \gamma_T e d\mathcal{B} dt - \int_t^{\cdot} \int_{\mathcal{B}} \delta g_{,i} k T_0 \dot{g}_{,i} d\mathcal{B} dt + \\ & - \int_t^{\cdot} \int_{\partial \mathcal{B}_T} \delta g \hat{q}_i n_i d(\partial \mathcal{B}_T) dt \\ & - \int_{\mathcal{B}} \delta g T_0 c_{\varepsilon, c} \dot{g} d\mathcal{B} |_{t_0}^{t_1} - \int_{\mathcal{B}} \delta g T_0 C_0 b h d\mathcal{B} |_{t_0}^{t_1} - \int_{\mathcal{B}} \delta g T_0 \gamma_T e d\mathcal{B} |_{t_0}^{t_1} = 0; \end{aligned} \quad (5.4)$$

$$\begin{aligned} & \int_t^{\cdot} \int_{\mathcal{B}} \delta h D_C \tau d\mathcal{B} dt - \int_t^{\cdot} \int_{\mathcal{B}} \delta h_{,i} D_C D_T T_0 \dot{g}_{,i} d\mathcal{B} dt + \\ & - \int_t^{\cdot} \int_{\mathcal{B}} \delta h_{,i} D_C D_{\varepsilon} e_{,i} d\mathcal{B} dt - \int_t^{\cdot} \int_{\mathcal{B}} \delta h_{,i} D_C^2 C_0 h_{,i} d\mathcal{B} dt + \\ & + \int_t^{\cdot} \int_{\mathcal{B}} \delta \dot{h} D_C C_0 h d\mathcal{B} dt - \int_t^{\cdot} \int_{\partial \mathcal{B}_C} \delta h D_C \hat{\eta}_i n_i d(\partial \mathcal{B}_C) dt \\ & - \int_{\mathcal{B}} \delta h D_C C_0 h d\mathcal{B} |_{t_0}^{t_1} = 0. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Poniżej przedstawia się opis poszczególnych funkcji występujących w równaniach czasoprzestrzennych z wykorzystaniem parametrów węzłowych dla dowolnego elementu czasoprzestrzennego e :

- Opis funkcji przemieszczeń $u_i(\mathbf{X}, t, T, C)$ i prędkości przemieszczeń $\dot{u}_i(\mathbf{X}, t, T, C)$:

$$\begin{aligned} u_i^e(\mathbf{X}, t, T, C) &= \phi_{i\alpha}^e(\mathbf{X}, t) r_{\alpha}^e(T, C), \\ \dot{u}_i^e(\mathbf{X}, t, T, C) &= \dot{\phi}_{i\alpha}^e(\mathbf{X}, t) r_{\alpha}^e(T, C), \\ (\mathbf{X}, t, T, C) &\in \Omega_e \times \langle T_0, T_1 \rangle \times \langle C_0, C_1 \rangle, \\ & i = 1, 2, 3, \\ & e = 1, 2, \dots, E, \\ & \alpha = 1, 2, \dots, A_e = w_e s_e. \end{aligned} \quad (5.6)$$

- Opis funkcji wariacji przemieszczeń $\delta u_i(\mathbf{X}, t, T, C)$ i wariacji prędkości przemieszczeń $\delta \dot{u}_i(\mathbf{X}, t, T, C)$:

$$\begin{aligned}\delta u_i^e(\mathbf{X}, t, T, C) &= \phi_{i\alpha}^e(\mathbf{X}, t) \delta r_\alpha^e(T, C), \\ \delta \dot{u}_i^e(\mathbf{X}, t, T, C) &= \dot{\phi}_{i\alpha}^e(\mathbf{X}, t) \delta r_\alpha^e(T, C), \\ (\mathbf{X}, t, T, C) &\in \Omega_e \times \langle T_0, T_1 \rangle \times \langle C_0, C_1 \rangle, \\ i &= 1, 2, 3, \\ e &= 1, 2, \dots, E, \\ \alpha &= 1, 2, \dots, A_e = w_e s_e.\end{aligned}\quad (5.7)$$

- Opis funkcji odkształceń $\varepsilon_{ij}(\mathbf{X}, t, T, C)$:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{ij}^e &= \frac{1}{2}(u_{i,j}^e + u_{j,i}^e) = \frac{1}{2}[(\phi_{i\alpha}^e r_\alpha^e)_{,j} + (\phi_{j\alpha}^e r_\alpha^e)_{,i}] = \\ &= \frac{1}{2}(\phi_{i\alpha,j}^e + \phi_{j\alpha,i}^e) r_\alpha^e.\end{aligned}\quad (5.8)$$

Po wprowadzeniu oznaczenia:

$$B_{ij\alpha}^e = \frac{1}{2}(\phi_{i\alpha,j}^e + \phi_{j\alpha,i}^e), \quad (5.9)$$

otrzymamy efektywny opis funkcji odkształceń:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{ij}^e(\mathbf{X}, t, T, C) &= B_{ij\alpha}^e(\mathbf{X}, t) r_\alpha^e(T, C), \\ (\mathbf{X}, t, T, C) &\in \Omega_e \times \langle T_0, T_1 \rangle \times \langle C_0, C_1 \rangle, \\ i, j &= 1, 2, 3, \\ e &= 1, 2, \dots, E, \\ \alpha &= 1, 2, \dots, A_e = w_e s_e.\end{aligned}\quad (5.10)$$

- Opis funkcji wariacji odkształceń $\delta \varepsilon_{ij}(\mathbf{X}, t, T, C)$:

$$\begin{aligned}\delta \varepsilon_{ij}^e(\mathbf{X}, t, T, C) &= B_{ij\alpha}^e(\mathbf{X}, t) \delta r_\alpha^e(T, C), \\ (\mathbf{X}, t, T, C) &\in \Omega_e \times \langle T_0, T_1 \rangle \times \langle C_0, C_1 \rangle, \\ i, j &= 1, 2, 3, \\ e &= 1, 2, \dots, E, \\ \alpha &= 1, 2, \dots, A_e = w_e s_e.\end{aligned}\quad (5.11)$$

- Opis aksjatora odkształceń $e(\mathbf{X}, t, T, C)$ i wariacji aksjatora odkształceń $\delta e^e(\mathbf{X}, t, T, C)$:

$$\begin{aligned}e^e(\mathbf{X}, t, T, C) &= \varepsilon_{kk}^e(\mathbf{X}, t, T, C) = B_{kk\alpha}^e(\mathbf{X}, t) r_\alpha^e(T, C), \\ \delta e^e(\mathbf{X}, t, T, C) &= \delta \varepsilon_{kk}^e(\mathbf{X}, t, T, C) = B_{kk\alpha}^e(\mathbf{X}, t) \delta r_\alpha^e(T, C), \\ (\mathbf{X}, t, T, C) &\in \Omega_e \times \langle T_0, T_1 \rangle \times \langle C_0, C_1 \rangle, \\ k &= 1, 2, 3, \\ e &= 1, 2, \dots, E, \\ \alpha &= 1, 2, \dots, A_e = w_e s_e.\end{aligned}\quad (5.12)$$

- Opis funkcji $g^e(\mathbf{X}, t, T)$ i wariacji funkcji $\delta g^e(\mathbf{X}, t, T)$:

$$\begin{aligned} g^e(\mathbf{X}, t, T) &= \phi_{T\alpha'}^e(\mathbf{X}, t)g_{\alpha'}^e(T), \\ \delta g^e(\mathbf{X}, t, T) &= \phi_{T\alpha'}^e(\mathbf{X}, t)\delta g_{\alpha'}^e(T), \\ (\mathbf{X}, t, T) &\in \Omega_e \times \langle T_0, T_1 \rangle, \\ e &= 1, 2, \dots, E, \\ \alpha' &= 1, 2, \dots, A_e = w_e. \end{aligned} \quad (5.13)$$

- Opis różnicy temperatur $\theta^e(\mathbf{X}, t, T)$ i wariacji różnicy temperatur $\delta\theta^e(\mathbf{X}, t, T)$:

$$\begin{aligned} \theta &\stackrel{\text{def}}{=} T_0 \dot{g}, \\ \theta^e(\mathbf{X}, t, T) &= T_0^e \dot{\phi}_{T\alpha'}^e(\mathbf{X}, t)g_{\alpha'}^e(T), \\ \delta\theta^e(\mathbf{X}, t, T) &= T_0^e \dot{\phi}_{T\alpha'}^e(\mathbf{X}, t)\delta g_{\alpha'}^e(T), \\ (\mathbf{X}, t, T) &\in \Omega_e \times \langle T_0, T_1 \rangle, \\ e &= 1, 2, \dots, E, \\ \alpha' &= 1, 2, \dots, A_e = w_e. \end{aligned} \quad (5.14)$$

- Opis funkcji $h(\mathbf{X}, t, C)$ oraz wariacji funkcji $\delta h(\mathbf{X}, t, C)$:

$$\begin{aligned} h^e(\mathbf{X}, t, C) &= \phi_{C\alpha''}^e(\mathbf{X}, t)h_{\alpha''}^e(C), \\ \delta h^e(\mathbf{X}, t, C) &= \phi_{C\alpha''}^e(\mathbf{X}, t)\delta h_{\alpha''}^e(C), \\ (\mathbf{X}, t, C) &\in \Omega_e \times \langle C_0, C_1 \rangle, \\ e &= 1, 2, \dots, E, \\ \alpha'' &= 1, 2, \dots, A_e = w_e. \end{aligned} \quad (5.15)$$

- Opis zmiany stężenia substancji dyfundującej $c(\mathbf{X}, t, C)$ oraz wariacji zmiany stężenia substancji dyfundującej $\delta c(\mathbf{X}, t, C)$:

$$\begin{aligned} c &\stackrel{\text{def}}{=} C_0 h \\ c^e(\mathbf{X}, t, C) &= C_0 \phi_{C\alpha''}^e(\mathbf{X}, t)h_{\alpha''}^e(C), \\ \delta c^e(\mathbf{X}, t, C) &= C_0 \phi_{C\alpha''}^e(\mathbf{X}, t)\delta h_{\alpha''}^e(C), \\ (\mathbf{X}, t, C) &\in \Omega_e \times \langle C_0, C_1 \rangle, \\ e &= 1, 2, \dots, E, \\ \alpha'' &= 1, 2, \dots, A_e = w_e. \end{aligned} \quad (5.16)$$

- Opis naprężeń $\sigma_{ij}(\mathbf{X}, t, T, C)$:

Zapisując zależność (3.87) dla dowolnego elementu czasoprzestrzennego, otrzymujemy:

$$\sigma_{ij}^e = 2\mu^e \varepsilon_{ij}^e + (\lambda^e e^e - \gamma_T^e \theta^e - \gamma_C^e c^e) \delta_{ij}, \quad (5.17)$$

Po wprowadzeniu oznaczeń (5.10), (5.12), (5.14) i (5.16), otrzymamy właściwą postać wyrażenia (5.17):

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}^e(\mathbf{X}, t, T, C) &= 2\mu^e B_{ij\alpha}^e(\mathbf{X}, t)r_{\alpha}^e(T, C) + \\ &+ (\lambda^e B_{kk\alpha}^e(\mathbf{X}, t)r_{\alpha}^e(T, C) - \gamma_T^e T_0^e \dot{\phi}_{T\alpha'}^e(\mathbf{X}, t)g_{\alpha'}^e(T) + \\ &- \gamma_C^e C_0 \phi_{C\alpha''}^e(\mathbf{X}, t)h_{\alpha''}^e(C)) \delta_{ij}, \end{aligned} \quad (5.18)$$

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

$$\begin{aligned}
 (\mathbf{X}, t, T, C) &\in \Omega_e \times \langle T_0, T_1 \rangle \times \langle C_0, C_1 \rangle, \\
 i, j &= 1, 2, 3, \\
 e &= 1, 2, \dots, E, \\
 \alpha &= 1, 2, \dots, A_e = w_e s_e, \\
 \alpha' &= 1, 2, \dots, A_e = w_e, \\
 \alpha'' &= 1, 2, \dots, A_e = w_e.
 \end{aligned}$$

5.3. RÓWNANIA METODY ELEMENTÓW CZASOPRZESTRZENNYCH

Przedstawione powyżej zależności od (5.6) do (5.18) podstawiamy do równań czasopracy wirtualnej (5.3) ÷ (5.5), otrzymując następujące zależności:

$$\begin{aligned}
 &\iint_{\Omega_e} (\phi_{i\alpha}^e \delta r_\alpha^e \rho^e f_i^e + \dot{\phi}_{i\alpha}^e \delta r_\alpha^e \rho^e \dot{\phi}_{i\beta}^e r_\beta^e - B_{ij\alpha}^e \delta r_\alpha^e 2\mu^e B_{ij\beta}^e r_\beta^e \\
 &- B_{ij\alpha}^e \delta r_\alpha^e \lambda^e B_{kk\beta}^e r_\beta^e \delta_{ij} + B_{ij\alpha}^e \delta r_\alpha^e \gamma_T^e T_0^e \dot{\phi}_{T\beta}^e g_{\beta'}^e \delta_{ij} \\
 &+ B_{ij\alpha}^e \delta r_\alpha^e \gamma_C^e C_0^e \phi_{C\beta''}^e h_{\beta''}^e \delta_{ij}) d\Omega + \iint_{\partial\Omega_{pe}} \phi_{i\alpha}^e \delta r_\alpha^e \hat{p}_i^e d(\partial\Omega_p) \\
 &- \int_{\mathcal{B}} \phi_{i\alpha}^e \delta r_\alpha^e \rho^e \dot{u}_i^e d\mathcal{B} \Big|_{t_0^e}^{t_1^e} = 0.
 \end{aligned} \tag{5.19}$$

$$\begin{aligned}
 &\iint_{\Omega_e} (\phi_{T\alpha'}^e \delta g_{\alpha'}^e W^e + \dot{\phi}_{T\alpha'}^e \delta g_{\alpha'}^e T_0^e c_{\varepsilon,c}^e \dot{\phi}_{T\beta'}^e g_{\beta'}^e \\
 &+ \dot{\phi}_{T\alpha}^e \delta g_{\alpha}^e T_0^e C_0^e b^e \phi_{C\beta''}^e h_{\beta''}^e + \dot{\phi}_{T\alpha'}^e \delta g_{\alpha'}^e T_0^e \gamma_T^e B_{kk\beta}^e r_\beta^e \\
 &- \phi_{T\alpha',i}^e \delta g_{\alpha'}^e k^e T_0^e \dot{\phi}_{T\beta',i}^e g_{\beta'}^e) d\Omega - \iint_{\partial\Omega_{Te}} \phi_{T\alpha'}^e \delta g_{\alpha'}^e \hat{q}_i^e n_i^e d(\partial\Omega_T) \\
 &- \int_{\mathcal{B}} (\phi_{T\alpha'}^e \delta g_{\alpha'}^e c_{\varepsilon,c}^e \theta^e + \dot{\phi}_{T\alpha'}^e \delta g_{\alpha'}^e T_0^e b^e c^e + \phi_{T\alpha'}^e \delta g_{\alpha'}^e T_0^e \gamma_T^e e^e) d\mathcal{B} \Big|_{t_0^e}^{t_1^e} \\
 &= 0.
 \end{aligned} \tag{5.20}$$

$$\begin{aligned}
 & \iint_{\Omega_e} (\phi_{C\alpha',i}^e \delta h_{\alpha'}^e D_C^e \tau^e - \phi_{C\alpha',i}^e \delta h_{\alpha'}^e D_C^e D_T^e T_0^e \dot{\phi}_{T\beta',i}^e \mathcal{G}_{\beta'}^e \\
 & - \phi_{C\alpha',i}^e \delta h_{\alpha'}^e D_C^e D_\varepsilon^e B_{kk\beta,i}^e r_\beta^e - \phi_{C\alpha',i}^e \delta h_{\alpha'}^e (D_C^e)^2 C_0^e \phi_{C\beta'',i}^e h_{\beta''}^e \\
 & + \phi_{C\alpha',i}^e \delta h_{\alpha'}^e D_C^e C_0^e \phi_{C\beta'',i}^e h_{\beta''}^e) d\Omega - \iint_{\partial\Omega_{Ce}} \phi_{C\alpha',i}^e \delta h_{\alpha'}^e D_C^e \hat{\eta}_i^e n_i^e d(\partial\Omega_C) \quad (5.21) \\
 & - \int_B \phi_{C\alpha',i}^e \delta h_{\alpha'}^e D_C^e c^e dB \Big|_{t_0^e}^{t_1^e} = 0.
 \end{aligned}$$

W równaniach (5.19) ÷ (5.21) występują wyrażenia zależne od wewnętrznych źródeł ciepła (W) oraz wewnętrznych źródeł masy (τ). Aby opisać te wyrażenia, należałoby dokładniej określić te wielkości, przeanalizować je dla konkretnego przykładu. Stąd na tym etapie, wartości te zostaną pominięte. Poniżej dokonano odpowiedniego pogrupowania równań (5.19) ÷ (5.21):

$$\begin{aligned}
 & \delta r_\alpha^e \left\{ \iint_{\Omega_e} [r_\beta^e (\dot{\phi}_{i\alpha}^e \rho^e \dot{\phi}_{i\beta}^e - B_{ij\alpha}^e 2\mu^e B_{ij\beta}^e - B_{ij\alpha}^e \lambda^e B_{kk\beta}^e \delta_{ij}) \right. \\
 & + g_{\beta'}^e B_{ij\alpha}^e \gamma_T^e T_0^e \dot{\phi}_{T\beta',i}^e \delta_{ij} + h_{\beta''}^e B_{ij\alpha}^e \gamma_C^e C_0^e \phi_{C\beta'',i}^e \delta_{ij} + \phi_{i\alpha}^e \rho^e f_i^e] d\Omega \quad (5.22) \\
 & \left. + \iint_{\partial\Omega_{pe}} \phi_{i\alpha}^e \hat{p}_i^e d(\partial\Omega_p) - \int_B \phi_{i\alpha}^e \rho^e \dot{u}_i^e dB \Big|_{t_0^e}^{t_1^e} \right\} = 0;
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \delta g_{\alpha'}^e \left\{ \iint_{\Omega_e} [r_\beta^e \dot{\phi}_{T\alpha'}^e T_0^e \gamma_T^e B_{kk\beta}^e \right. \\
 & + g_{\beta'}^e (\dot{\phi}_{T\alpha'}^e T_0^e c_{\varepsilon,c}^e \dot{\phi}_{T\beta'}^e - \phi_{T\alpha',i}^e k^e T_0^e \dot{\phi}_{T\beta',i}^e) \\
 & + h_{\beta''}^e \dot{\phi}_{T\alpha'}^e T_0^e C_0^e b^e \phi_{C\beta'',i}^e] d\Omega - \iint_{\partial\Omega_{Te}} \phi_{T\alpha'}^e \hat{q}_i^e n_i^e d(\partial\Omega_T) \quad (5.23) \\
 & \left. - \int_B (\phi_{T\alpha'}^e c_{\varepsilon,c}^e \theta^e + \phi_{T\alpha'}^e T_0^e b^e c^e + \phi_{T\alpha'}^e T_0^e \gamma_T^e e^e) dB \Big|_{t_0^e}^{t_1^e} \right\} = 0;
 \end{aligned}$$

$$\delta h_{\alpha''}^e \left\{ \iint_{\Omega_e} [-r_{\beta}^e \phi_{C\alpha'',i}^e D_C^e D_{\varepsilon}^e B_{kk\beta,i}^e - g_{\beta'}^e \phi_{C\alpha'',i}^e D_C^e D_T^e T_0^e \dot{\phi}_{T\beta',i}^e + h_{\beta''}^e (\dot{\phi}_{C\alpha''}^e D_C^e C_0^e \phi_{C\beta''}^e - \phi_{C\alpha'',i}^e (D_C^e)^2 C_0^e \phi_{C\beta'',i}^e)] d\Omega - \iint_{\partial\Omega_{C_e}} \phi_{C\alpha''}^e D_C^e \hat{\eta}_i^e n_i^e d(\partial\Omega_C) - \int_B \phi_{C\alpha''}^e D_C^e c^e d\mathcal{B} \Big|_{t_0^e}^{t_1^e} \right\} = 0. \quad (5.24)$$

Do równań (5.22) ÷ (5.24) wprowadzamy następujące oznaczenia:

$$K_{\alpha\beta}^e = \iint_{\Omega_e} (\dot{\phi}_{i\alpha}^e \rho^e \dot{\phi}_{i\beta}^e - B_{ij\alpha}^e 2\mu^e B_{ij\beta}^e - B_{ij\alpha}^e \lambda^e B_{kk\beta}^e \delta_{ij}) d\Omega, \quad (5.25)$$

$$K_{\alpha\beta'}^e = \iint_{\Omega_e} B_{ij\alpha}^e \gamma_T^e T_0^e \dot{\phi}_{T\beta'}^e \delta_{ij} d\Omega, \quad (5.26)$$

$$K_{\alpha\beta''}^e = \iint_{\Omega_e} B_{ij\alpha}^e \gamma_C^e C_0^e \phi_{C\beta''}^e \delta_{ij} d\Omega, \quad (5.27)$$

$$P_{\alpha}^e = \iint_{\Omega_e} \phi_{i\alpha}^e \rho^e f_i^e d\Omega + \iint_{\partial\Omega_{pe}} \phi_{i\alpha}^e \hat{p}_i^e d(\partial\Omega_p) - \int_B \phi_{i\alpha}^e \rho^e \dot{u}_i^e d\mathcal{B} \Big|_{t_0^e}^{t_1^e}, \quad (5.28)$$

$$K_{\alpha'\beta}^e = \iint_{\Omega_e} \dot{\phi}_{T\alpha'}^e T_0^e \gamma_T^e B_{kk\beta}^e d\Omega, \quad (5.29)$$

$$K_{\alpha'\beta'}^e = \iint_{\Omega_e} (\dot{\phi}_{T\alpha'}^e T_0^e c_{\varepsilon,c}^e \dot{\phi}_{T\beta'}^e - \phi_{T\alpha',i}^e k^e T_0^e \dot{\phi}_{T\beta',i}^e) d\Omega, \quad (5.30)$$

$$K_{\alpha'\beta''}^e = \iint_{\Omega_e} \dot{\phi}_{T\alpha'}^e T_0^e C_0^e b^e \phi_{C\beta''}^e d\Omega, \quad (5.31)$$

$$P_{\alpha'}^e = - \iint_{\partial\Omega_{Te}} \phi_{T\alpha'}^e \hat{q}_i^e n_i^e d(\partial\Omega_T) + \int_B (\phi_{T\alpha'}^e c_{\varepsilon,c}^e \theta^e + \phi_{T\alpha'}^e T_0^e b^e c^e + \phi_{T\alpha'}^e T_0^e \gamma_T^e e^e) d\mathcal{B} \Big|_{t_0^e}^{t_1^e}, \quad (5.32)$$

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

$$K_{\alpha''\beta}^e = - \iint_{\Omega_e} \phi_{C\alpha'',i}^e D_C^e D_\varepsilon^e B_{kk\beta,i}^e d\Omega, \quad (5.33)$$

$$K_{\alpha''\beta'}^e = - \iint_{\Omega_e} \phi_{C\alpha'',i}^e D_C^e D_T^e T_0^e \dot{\phi}_{T\beta',i}^e d\Omega, \quad (5.34)$$

$$K_{\alpha''\beta''}^e = \iint_{\Omega_e} (\dot{\phi}_{C\alpha'',i}^e D_C^e C_0^e \phi_{C\beta'',i}^e - \phi_{C\alpha'',i}^e (D_C^e)^2 C_0^e \phi_{C\beta'',i}^e) d\Omega \quad (5.35)$$

$$P_{\alpha''}^e = - \iint_{\partial\Omega_{Ce}} \phi_{C\alpha'',i}^e D_C^e \hat{n}_i^e n_i^e d(\partial\Omega_C) - \int_B \phi_{C\alpha''}^e D_C^e c^e dB \Big|_{t_0^e}^{t_1^e}, \quad (5.36)$$

otrzymując równania ważne dla SKECZ:

$$\begin{aligned} \delta r_\alpha^e (K_{\alpha\beta}^e r_\beta^e + K_{\alpha\beta'}^e g_{\beta'}^e + K_{\alpha\beta''}^e h_{\beta''}^e + P_\alpha^e) &= 0; \\ \delta g_{\alpha'}^e (K_{\alpha'\beta}^e r_\beta^e + K_{\alpha'\beta'}^e g_{\beta'}^e + K_{\alpha'\beta''}^e h_{\beta''}^e + P_{\alpha'}^e) &= 0; \\ \delta h_{\alpha''}^e (K_{\alpha''\beta}^e r_\beta^e + K_{\alpha''\beta'}^e g_{\beta'}^e + K_{\alpha''\beta''}^e h_{\beta''}^e + P_{\alpha''}^e) &= 0. \end{aligned} \quad (5.37)$$

Wariacje δr_α^e , $\delta g_{\alpha'}^e$, $\delta h_{\alpha''}^e$ mogą przyjmować dowolne niezerowe wartości (tzn., że $\delta r_\alpha^e \neq 0$, $\delta g_{\alpha'}^e \neq 0$, $\delta h_{\alpha''}^e \neq 0$), zatem spełnienie równań (5.37) jest równoznaczne ze spełnieniem następujących warunków:

$$\begin{aligned} K_{\alpha\beta}^e r_\beta^e + K_{\alpha\beta'}^e g_{\beta'}^e + K_{\alpha\beta''}^e h_{\beta''}^e + P_\alpha^e &= 0. \\ K_{\alpha'\beta}^e r_\beta^e + K_{\alpha'\beta'}^e g_{\beta'}^e + K_{\alpha'\beta''}^e h_{\beta''}^e + P_{\alpha'}^e &= 0. \\ K_{\alpha''\beta}^e r_\beta^e + K_{\alpha''\beta'}^e g_{\beta'}^e + K_{\alpha''\beta''}^e h_{\beta''}^e + P_{\alpha''}^e &= 0. \end{aligned} \quad (5.38)$$

Zależności (5.38) przedstawiają układ równań algebraicznych liniowych, ważny dla elementu czasoprzestrzennego (SKECZ). Wskaźniki α i β zależą od liczby węzłów elementu czasoprzestrzennego (w_e) oraz liczby stopni swobody w węźle (s_e), tj. $\alpha, \beta = 1, 2, \dots, A_e = w_e s_e$, $\alpha', \beta' = 1, 2, \dots, A_e = w_e$, $\alpha'', \beta'' = 1, 2, \dots, A_e = w_e$. Otrzymany układ równań można zapisać w formie macierzowej:

$$\begin{bmatrix} K_{\alpha\beta}^e & K_{\alpha\beta'}^e & K_{\alpha\beta''}^e \\ K_{\alpha'\beta}^e & K_{\alpha'\beta'}^e & K_{\alpha'\beta''}^e \\ K_{\alpha''\beta}^e & K_{\alpha''\beta'}^e & K_{\alpha''\beta''}^e \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_\beta^e \\ g_{\beta'}^e \\ h_{\beta''}^e \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} P_\alpha^e \\ P_{\alpha'}^e \\ P_{\alpha''}^e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (5.39)$$

zatem:

$$\mathbf{K}^e \mathbf{X}^e + \mathbf{P}^e = \mathbf{0} \quad (5.40)$$

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

Otrzymany układ równań jest słuszny dla każdego elementu czasoprzestrzennego $e = 1, 2, \dots, E$ (E – liczba SKECZ). Z uwagi na wprowadzoną dyskretyzację obszaru czasoprzestrzennego, należy dokonać scalenia poszczególnych elementów czasoprzestrzennych w całość, tzw. agregacji. W tym celu stosuje się podejście analogiczne do klasycznej metody elementów skończonych (np. [Zienkiewicz 1972]). W wyniku uwzględnienia wszystkich SKECZ, układ równań (5.40) przyjmie następującą postać:

$$\sum_{e=1}^E (K^e X^e + P^e) = \mathbf{0} \quad (5.41)$$

W wyniku sumowania macierze przekształcą się w układy o charakterze globalnym, tj.

- w globalną macierz sztywności czasoprzestrzennej \mathbf{K} będącą odpowiednią sumą macierzy sztywności wszystkich SKECZ;
- w globalny wektor niezależnych parametrów węzłowych SKECZ \mathbf{X} obejmujący wszystkie parametry w poszczególnych węzłach zdyskretyzowanego obszaru czasoprzestrzennego;
- w globalny wektor obciążeń \mathbf{P} stanowiący sumę wektorów obciążeń poszczególnych SKECZ w węzłach.

W efekcie powstanie równanie ruchu metody elementów czasoprzestrzennych:

$$\mathbf{KX} + \mathbf{P} = \mathbf{0}. \quad (5.42)$$

Do zależności (5.42) należy wprowadzić warunki brzegowe oraz początkowe. Rozwiązanie tego układu równań algebraicznych odbywa się jednoetapowo, co jest istotną zaletą metody elementów czasoprzestrzennych.

5.4. REKURENCYJNY CHARAKTER RÓWNAŃ METODY ELEMENTÓW CZASOPRZESTRZENNICH

Ogólną postać równania ruchu metody elementów czasoprzestrzennych w formie macierzowej przedstawiono w zależności (5.42). Niezależnie od sposobu dyskretyzacji, równania (5.42) mają strukturę pasmową (rys. 5.2). Zatem układ równań metody elementów czasoprzestrzennych ma następującą strukturę (niezależnie od sposobu dyskretyzacji):

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}_0 & \mathbf{B}_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{C}_1 & \mathbf{D}_1 + \mathbf{A}_1 & \mathbf{B}_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \mathbf{C}_i & \mathbf{D}_i + \mathbf{A}_i & \mathbf{B}_i & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{C}_{n-1} & \mathbf{D}_{n-1} + \mathbf{A}_{n-1} & \mathbf{B}_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{C}_n & \mathbf{D}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{X}_0 \\ \mathbf{X}_1 \\ \dots \\ \mathbf{X}_i \\ \dots \\ \mathbf{X}_{n-1} \\ \mathbf{X}_n \end{bmatrix} + \quad (5.43)$$

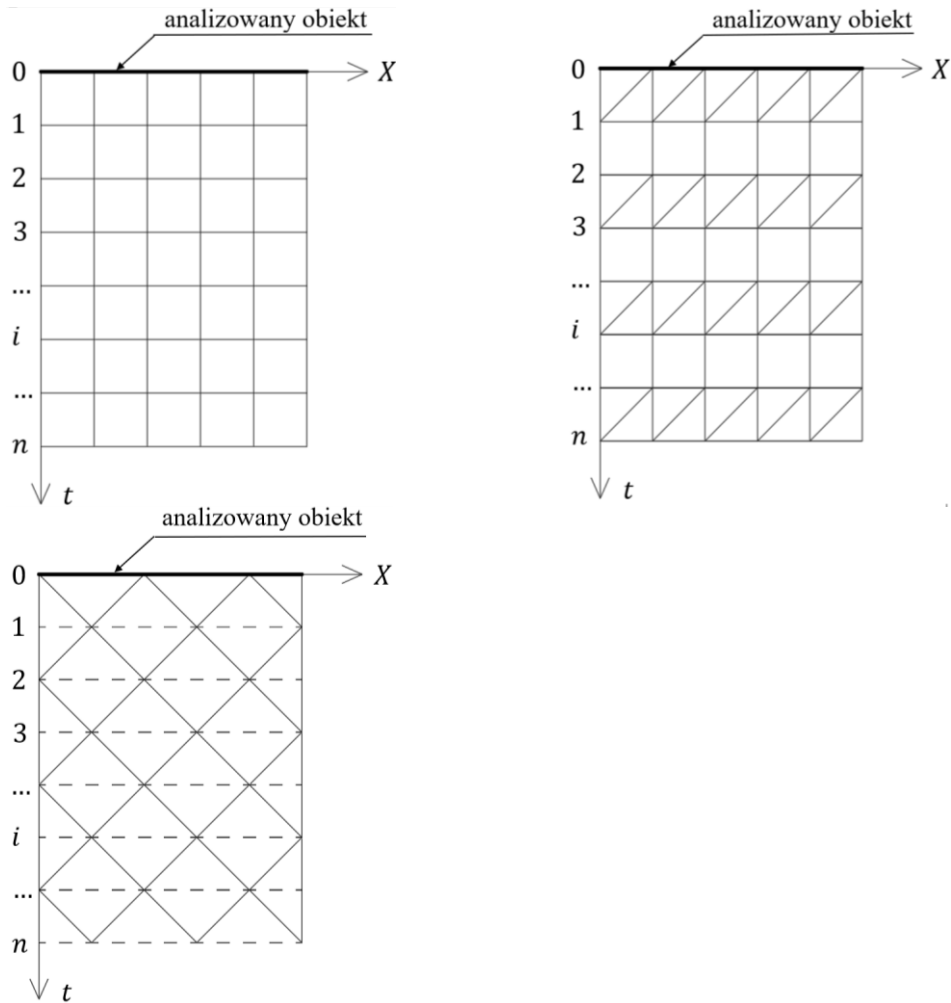
Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

$$+ \begin{bmatrix} \mathbf{P}_0 \\ \mathbf{P}_1 \\ \dots \\ \mathbf{P}_i \\ \dots \\ \mathbf{P}_{n-1} \\ \mathbf{P}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \dots \\ \mathbf{0} \\ \dots \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

gdzie $\mathbf{A}_i, \mathbf{B}_i, \mathbf{C}_i, \mathbf{D}_i$ są kwadratowymi podmacierzami macierzy sztywności czasoprzestrzennej \mathbf{K} . Jeżeli rozpiszemy poszczególne równania układu równań (5.43), to uzyskamy równania równowagi dla kolejnych chwil:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_0 \mathbf{X}_0 + \mathbf{B}_0 \mathbf{X}_1 + \mathbf{P}_0 &= 0 \\ \mathbf{C}_1 \mathbf{X}_0 + (\mathbf{D}_1 + \mathbf{A}_1) \mathbf{X}_1 + \mathbf{B}_1 \mathbf{X}_2 + \mathbf{P}_1 &= 0 \\ &\dots \\ \mathbf{C}_i \mathbf{X}_{i-1} + (\mathbf{D}_i + \mathbf{A}_i) \mathbf{X}_i + \mathbf{B}_i \mathbf{X}_{i+1} + \mathbf{P}_i &= 0 \quad (5.44) \\ &\dots \\ \mathbf{C}_{n-1} \mathbf{X}_{n-2} + (\mathbf{D}_{n-1} + \mathbf{A}_{n-1}) \mathbf{X}_{n-1} + \mathbf{B}_{n-1} \mathbf{X}_n + \mathbf{P}_{n-1} &= 0 \\ \mathbf{C}_n \mathbf{X}_{n-1} + \mathbf{D}_n \mathbf{X}_n + \mathbf{P}_n &= 0. \end{aligned}$$

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych



Rys. 5.2. Interpretacja graficzna pasmowej struktury równań na przykładach dyskretyzacji czasoprzestrzennej elementu prętowego

Do tych równań wprowadzamy warunki brzegowe, tak jak w metodzie elementów skończonych. Przy znanych warunkach brzegowych, równania (5.44) przekształcają się w równania rekurencyjne:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{X}_1 &= -(\mathbf{B}_0)^{-1}(\mathbf{A}_0\mathbf{X}_0 + \mathbf{P}_0) \\
 \mathbf{X}_2 &= -(\mathbf{B}_1)^{-1}[\mathbf{C}_1\mathbf{X}_0 + (\mathbf{D}_1 + \mathbf{A}_1)\mathbf{X}_1 + \mathbf{P}_1] \\
 &\quad \dots \\
 \mathbf{X}_{i+1} &= -(\mathbf{B}_i)^{-1}[\mathbf{C}_i\mathbf{X}_{i-1} + (\mathbf{D}_i + \mathbf{A}_i)\mathbf{X}_i + \mathbf{P}_i] \\
 &\quad \dots \\
 \mathbf{X}_n &= -(\mathbf{B}_{n-1})^{-1}[\mathbf{C}_{n-1}\mathbf{X}_{n-2} + (\mathbf{D}_{n-1} + \mathbf{A}_{n-1})\mathbf{X}_{n-1} + \mathbf{P}_{n-1}] \\
 &\quad i = 1, 2, 3, \dots, n.
 \end{aligned} \tag{5.45}$$

5.5. KRYTERIA DOBORU FUNKCJI KSZTAŁTU ORAZ STABILNOŚĆ METODY ELEMENTÓW CZASOPRZESTRZENNICH

Istotnym zagadnieniem metody elementów czasoprzestrzennych jest odpowiedni dobór elementów czasoprzestrzennych, z uwagi na ich wielkość, kształt oraz proporcje wymiarów. Wymienione parametry jakościowe SKECZ mają bezpośredni wpływ na dokładność metody oraz, co istotne, na stabilność MECZ. W odniesieniu do wymiarów przestrzennych, reguły dotyczące optymalnej dyskretyzacji są analogiczne do zasad obowiązujących w przypadku stosowania metody elementów skończonych (np. [Zienkiewicz 1972]).

MECZ jest metodą warunkowo stabilną, której stabilność zależy w głównej mierze od wymiaru elementu czasoprzestrzennego wzdłuż osi czasu, zatem należy uwzględnić dodatkowo pewne ograniczenia dotyczące wymiaru czasowego SKECZ. W niniejszych rozważaniach stosowana jest procedura rekurencyjna. Przez błąd aproksymacji zostanie zdefiniowana niedokładność, jaką wnosi metoda w pojedynczym kroku obliczeniowym. Można przyjąć, że metoda jest stabilna wówczas, gdy niewielkim zaburzeniom odpowiadają mało zaburzone rozwiązania.

Poniżej przeanalizujemy, w jaki sposób niewielki, „nieunikniony” błąd w chwili początkowej δ_0 wpłynie na proces rekurencyjny [Podhorecki 1989]:

$$X_0 = \delta_0, \quad \dot{X}_0 = \mathbf{0} \quad \text{oraz} \quad P_i = \mathbf{0} \quad \text{dla} \quad i = 1, 2, 3, \dots, n. \quad (5.46)$$

Korzystając z równań (5.45), można określić stan układu dla poszczególnych chwil:

$$X_1 = T_0 \delta_0, \quad (5.47)$$

gdzie:

$$T_0 = -(B_0)^{-1} A_0, \quad (5.48)$$

jest macierzą przeniesienia z warstwy (chwili) 0 do 1.

$$X_{i+1} = T_i \delta_0, \quad (5.49)$$

natomiast:

$$T_i = -(B_i)^{-1} [C_i T_{i-2} + (D_i + A_i) T_{i-1}] \quad (5.50) \\ i = 1, 2, 3, \dots, n.$$

jest ogólną postacią macierzy przeniesienia z dowolnej warstwy (chwili) i do warstwy $i + 1$.

Proces rekurencyjny będzie stabilny, jeżeli wszystkie wartości własne λ_i macierzy T_i będą mniejsze lub równe jedności, co jest równoznaczne z warunkiem:

$$|\lambda_{max}| \leq 1. \quad (5.51)$$

Przy spełnionym warunku (5.51), początkowy błąd δ_0 będzie miał w kolejnych krokach rekurencyjnych tendencję malejącą. Pozwala to oszacować przybliżoną wartość macierzy przeniesienia, wykorzystywaną w praktycznych obliczeniach:

$$\mathbf{T}_i \approx -(\mathbf{B}_i)^{-1}[\mathbf{C}_i + \mathbf{D}_i + \mathbf{A}_i] \quad (5.52)$$

$i = 1, 2, 3, \dots, n.$

Powyższy zapis macierzy przeniesienia znacząco upraszcza badanie stabilności. Wartości własne macierzy (5.52) muszą spełniać warunek (5.51).

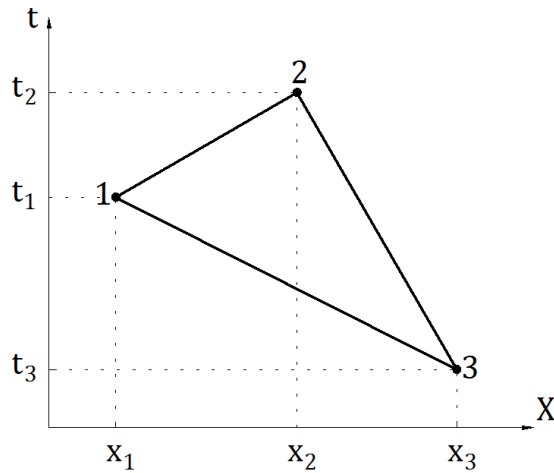
Z przedstawionych rozważań jednoznacznie wynika, że metoda elementów czasoprzestrzennych w podanej w niniejszej pracy wersji jest metodą warunkowo stabilną. Na element czasoprzestrzenny nałożone jest bowiem ograniczenie (5.51). Problem stabilności metody elementów czasoprzestrzennych był przedmiotem wielu prac, m.in. Langer [Langer 1979], Cyganeckiego [Cyganecki 1979, Cyganecki 1980], Bajera [Bajer 1987, Bajer 2009] i Podhoreckiego [Podhorecki 1989, Podhorecki 2005]. Z rozważań tych wynika także, że stosowanie elementów czasoprzestrzennych o kształcie trójkąta, czworościanu lub hiperczworościanu (tzw. elementów symplektycznych) i odpowiedni dobór funkcji kształtu, umożliwiają sformułowanie MECZ w wersji bezwarunkowo stabilnej.

Czasoprzestrzenne funkcje kształtu powinny spełniać trzy kryteria właściwego doboru tych zależności, sformułowane dla przestrzennych funkcji kształtu w metodzie elementów skończonych, dostosowane do czasoprzestrzennego wnętrza i brzegów elementu czasoprzestrzennego, tj. [Zienkiewicz 1972]:

- kryterium zgodności przemieszczeń – odpowiednio dobrane funkcje kształtu zapewniają ciągłość pola przemieszczeń oraz spełnienie warunków zgodności przemieszczeń wzdłuż brzegów elementów czasoprzestrzennych;
- kryterium stałego odkształcenia – prawidłowo dobrane funkcje kształtu umożliwiają powstanie jednorodnego stanu odkształcenia wewnątrz elementu czasoprzestrzennego;
- kryterium ruchu sztywnego – w przypadku właściwie dobranych funkcji kształtu, przemieszczenia węzłów, które powodują ruch elementu jako bryły sztywnej, nie generują odkształceń wewnątrz SKECZ; należy jednak podkreślić, że w przypadku MECZ ruch sztywny powoduje deformację elementu czasoprzestrzennego (w przeciwieństwie do MES) – tylko całkowity bezruch analizowanego ciała gwarantuje brak deformacji elementu.

Poniżej przedstawia się przykłady liniowych funkcji kształtu ϕ_i dla kilku wybranych elementów czasoprzestrzennych (przez analogię do elementów skończonych, np. [Zienkiewicz 1972]):

➤ Element trójkątny:

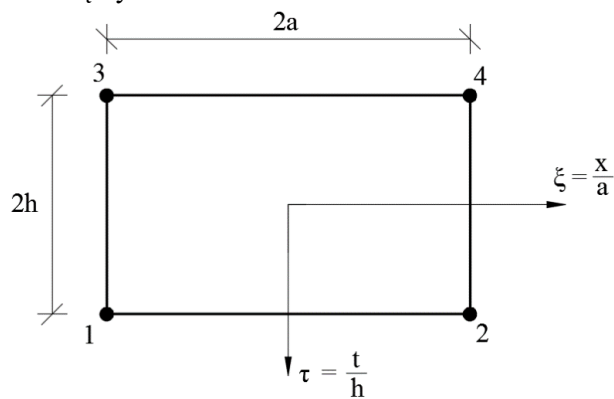


Rys. 5.3. Przykład elementu trójkątnego

$$\begin{aligned}
 \phi_1 &= \frac{1}{2A} [(X_2 t_3 - t_2 X_3) + (t_2 - t_3)(X_3 - X_2)t], \\
 \phi_2 &= \frac{1}{2A} [(X_3 t_1 - t_3 X_1) + (t_3 - t_1)(X_1 - X_3)t], \\
 \phi_3 &= \frac{1}{2A} [(X_1 t_2 - t_1 X_2) + (t_1 - t_2)(X_2 - X_1)t],
 \end{aligned} \tag{5.53}$$

$$A = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & X_1 & t_1 \\ 1 & X_2 & t_2 \\ 1 & X_3 & t_3 \end{vmatrix}.$$

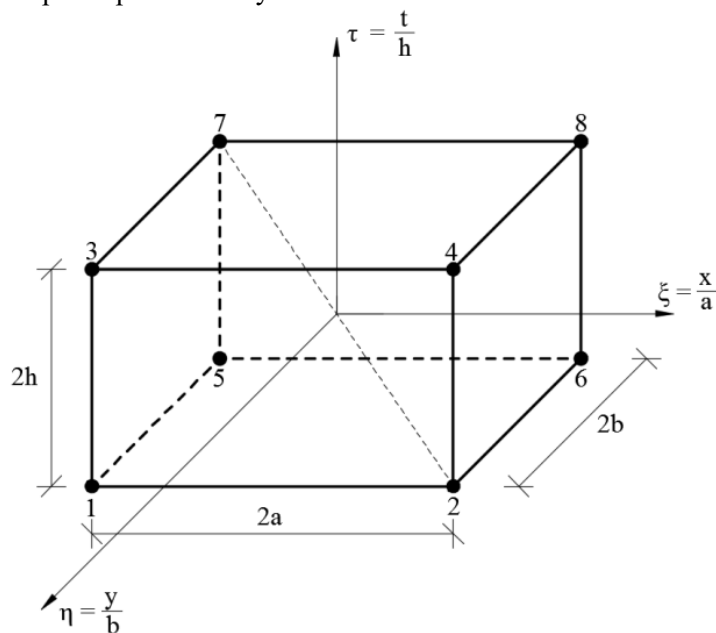
➤ Element prostokątny:



Rys. 5.4. Przykład elementu prostokątnego

$$\begin{aligned}
 \phi_i &= \frac{1}{4}(1 + \xi_i \xi)(1 + \tau_i \tau), \\
 \xi_i &= \begin{cases} 1 & \text{dla } i = 2, 4 \\ -1 & \text{dla } i = 1, 3 \end{cases} \\
 \tau_i &= \begin{cases} 1 & \text{dla } i = 1, 2 \\ -1 & \text{dla } i = 3, 4 \end{cases} \\
 & -1 \leq \xi \leq 1, \\
 & -1 \leq \tau \leq 1, \\
 & i = 1, 2, 3, 4.
 \end{aligned}
 \tag{5.54}$$

➤ Element prostokątny:



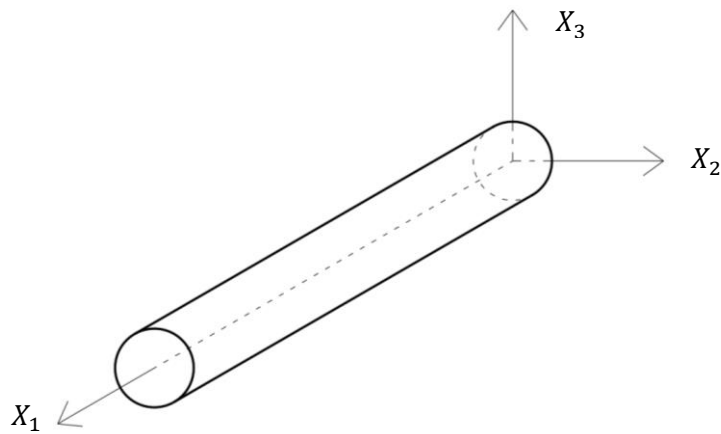
Rys. 5.5. Przykład elementu prostokątnego

$$\begin{aligned}
 \phi_i &= \frac{1}{8}(1 + \xi_i \xi)(1 + \eta_i \eta)(1 + \tau_i \tau), \\
 \xi_i &= \begin{cases} 1 & \text{dla } i = 2, 4, 6, 8 \\ -1 & \text{dla } i = 1, 3, 5, 7 \end{cases} \\
 \eta_i &= \begin{cases} 1 & \text{dla } i = 1, 2, 3, 4 \\ -1 & \text{dla } i = 5, 6, 7, 8 \end{cases} \\
 \tau_i &= \begin{cases} 1 & \text{dla } i = 3, 4, 7, 8 \\ -1 & \text{dla } i = 1, 2, 5, 6 \end{cases} \\
 & -1 \leq \xi \leq 1, \\
 & -1 \leq \eta \leq 1, \\
 & -1 \leq \tau \leq 1, \\
 & i = 1, 2, \dots, 8.
 \end{aligned}
 \tag{5.55}$$

6. PRZYKŁADY OBLICZENIOWE

6.1. PRĘT PROSTY PODDANY DZIAŁANIU OBCIĄŻENIA, CIEPŁA I DYFUZJI

Rozważa się pręt prosty o stałym profilu przekroju poprzecznego, będący w osiowym stanie naprężenia, otoczony osłoną izolacyjną, która uniemożliwia wymianę ciepła i wilgoci z otoczeniem. Wymiary poprzeczne pręta są znacznie mniejsze od jego długości, stąd można przyjąć, że temperatura w przecie jest funkcją tylko jednej współrzędnej X_1 skierowanej wzdłuż osi pręta (rys. 6.1).



Rys. 6.1. Rozpatrywany pręt

Korzystając z ogólnej postaci równań czasopracy wirtualnej (4.1) ÷ (4.30), wyprowadzono równania czasopracy wirtualnej rozważanego elementu prętowego:

$$\int_t \int_l \delta u \left(\frac{\partial N}{\partial X} + \rho A f - \rho A \ddot{u} \right) dX dt = 0. \quad (6.1)$$

$$\int_t \int_l \delta g \left(Ak \frac{\partial \theta^2}{\partial X^2} - A \dot{\theta} c_{\varepsilon, c} - AT_0 (\gamma_T \dot{e} + b \dot{c}) + AW \right) dX dt = 0. \quad (6.2)$$

$$\int_t \int_l \delta h \left(AD_C D_T \frac{\partial \theta^2}{\partial X^2} + AD_C D_\varepsilon \frac{\partial e^2}{\partial X^2} + AD_C^2 \frac{\partial c^2}{\partial X^2} - AD_C \dot{c} + AD_C \tau \right) dX dt = 0. \quad (6.3)$$

Modyfikując poszczególne całki powyższego wyrażenia z wykorzystaniem przekształcenia Gaussa-Ostrogradskiego oraz całkowania przez części (por. pkt. 4.2 Rozprawy), otrzymano ostateczną postać równań czasopracy wirtualnej elementu prętowego:

$$\int_t^t \int_l^l \delta u \rho A f dX dt - \int_l^l \delta u \rho A \dot{u} |_{t_0}^{t_1} dX + \int_t^t \int_l^l \delta \dot{u} \rho A \dot{u} dX dt + \int_t^t \delta u \hat{P} |_0^l dt - \int_t^t \int_l^l \delta \varepsilon N dX dt = 0. \quad (6.4)$$

$$\begin{aligned} & \int_t^t \int_l^l \delta g A W dX dt + \int_t^t \int_l^l \delta \dot{g} A T_0 c_{\varepsilon, c} \dot{g} dX dt + \\ & + \int_t^t \int_l^l \delta \dot{g} A T_0 C_0 b h dX dt + \int_t^t \int_l^l \delta \dot{g} A T_0 \gamma_T e dX dt + \\ & - \int_t^t \int_l^l \frac{\partial(\delta g)}{\partial X} A k T_0 \frac{\partial \dot{g}}{\partial X} dX dt - \int_t^t \delta g A \hat{q} |_0^l dt + \\ & - \int_l^l \delta g A T_0 c_{\varepsilon, c} \dot{g} |_{t_0}^{t_1} dX - \int_l^l \delta g A T_0 C_0 b h |_{t_0}^{t_1} dX - \int_l^l \delta g A T_0 \gamma_T e |_{t_0}^{t_1} dX = 0. \end{aligned} \quad (6.5)$$

$$\begin{aligned} & \int_t^t \int_l^l \delta h A D_C \tau dX dt - \int_t^t \int_l^l \frac{\partial(\delta h)}{\partial X} A D_C D_T T_0 \frac{\partial \dot{g}}{\partial X} dX dt + \\ & - \int_t^t \int_l^l \frac{\partial(\delta h)}{\partial X} A D_C D_\varepsilon \frac{\partial e}{\partial X} dX dt - \int_t^t \int_l^l \frac{\partial(\delta h)}{\partial X} A D_C^2 C_0 \frac{\partial h}{\partial X} dX dt + \\ & + \int_t^t \int_l^l \delta \dot{h} A D_C C_0 h dX dt - \int_t^t \delta h A D_C \hat{\eta} |_0^l dt - \int_l^l \delta h A D_C C_0 h |_{t_0}^{t_1} dX = 0. \end{aligned} \quad (6.6)$$

Poniżej przedstawia się opis poszczególnych wielkości występujących w równaniach czasopracy wirtualnej przedmiotowego elementu prętowego z wykorzystaniem parametrów węzłowych dla dowolnego elementu czasoprzestrzennego e :

- Opis funkcji przemieszczeń $u(X, t, T, C)$ i prędkości przemieszczeń $\dot{u}(X, t, T, C)$:

$$\begin{aligned} u^e(X, t, T, C) &= \phi_\alpha^e(X, t) r_\alpha^e(T, C), \\ \dot{u}^e(X, t, T, C) &= \dot{\phi}_\alpha^e(X, t) r_\alpha^e(T, C), \\ (X, t, T, C) &\in \Omega_e \times \langle T_0, T_1 \rangle \times \langle C_0, C_1 \rangle, \\ e &= 1, 2, \dots, E, \\ \alpha &= 1, 2, \dots, A_e = w_e s_e = w_e. \end{aligned} \quad (6.7)$$

- Opis funkcji wariacji przemieszczeń $\delta u(X, t, T, C)$ i wariacji prędkości przemieszczeń $\delta \dot{u}(X, t, T, C)$:

$$\begin{aligned} \delta u^e(X, t, T, C) &= \phi_\alpha^e(X, t) \delta r_\alpha^e(T, C), \\ \delta \dot{u}^e(X, t, T, C) &= \dot{\phi}_\alpha^e(X, t) \delta r_\alpha^e(T, C), \\ (X, t, T, C) &\in \Omega_e \times \langle T_0, T_1 \rangle \times \langle C_0, C_1 \rangle, \end{aligned} \quad (6.8)$$

$$\begin{aligned} e &= 1, 2, \dots, E, \\ \alpha &= 1, 2, \dots, A_e = w_e s_e = w_e. \end{aligned}$$

- Opis funkcji odkształceń $\varepsilon(X, t, T, C)$:

$$\begin{aligned} \varepsilon^e(X, t, T, C) &= \frac{\partial u}{\partial X} = \frac{\partial \phi_{\alpha}^e(X, t)}{\partial X} r_{\alpha}^e(T, C), \\ (X, t, T, C) &\in \Omega_e \times \langle T_0, T_1 \rangle \times \langle C_0, C_1 \rangle, \\ e &= 1, 2, \dots, E, \\ \alpha &= 1, 2, \dots, A_e = w_e s_e = w_e. \end{aligned} \quad (6.9)$$

- Opis funkcji wariacji odkształceń $\delta\varepsilon(X, t, T, C)$:

$$\begin{aligned} \delta\varepsilon^e(X, t, T, C) &= \frac{\partial \phi_{\alpha}^e(X, t)}{\partial X} \delta r_{\alpha}^e(T, C), \\ (X, t, T, C) &\in \Omega_e \times \langle T_0, T_1 \rangle \times \langle C_0, C_1 \rangle, \\ e &= 1, 2, \dots, E, \\ \alpha &= 1, 2, \dots, A_e = w_e s_e = w_e. \end{aligned} \quad (6.10)$$

- Opis aksjatora odkształceń $e(X, t, T, C)$ i wariacji aksjatora odkształceń $\delta e^e(X, t, T, C)$:

$$\begin{aligned} e^e(X, t, T, C) &= (1 - 2\nu^e)\varepsilon^e = (1 - 2\nu^e) \frac{\partial \phi_{\alpha}^e(X, t)}{\partial X} r_{\alpha}^e(T, C), \\ \delta e^e(X, t, T, C) &= (1 - 2\nu^e) \frac{\partial \phi_{\alpha}^e(X, t)}{\partial X} \delta r_{\alpha}^e(T, C), \\ (X, t, T, C) &\in \Omega_e \times \langle T_0, T_1 \rangle \times \langle C_0, C_1 \rangle, \\ k &= 1, 2, 3, \\ e &= 1, 2, \dots, E, \\ \alpha &= 1, 2, \dots, A_e = w_e s_e = w_e. \end{aligned} \quad (6.11)$$

- Opis funkcji $g^e(X, t, T)$ i wariacji funkcji $\delta g^e(X, t, T)$:

$$\begin{aligned} g^e(X, t, T) &= \phi_{T\alpha'}^e(X, t) g_{\alpha'}^e(T), \\ \delta g^e(X, t, T) &= \phi_{T\alpha'}^e(X, t) \delta g_{\alpha'}^e(T), \\ (X, t, T) &\in \Omega_e \times \langle T_0, T_1 \rangle, \\ e &= 1, 2, \dots, E, \\ \alpha' &= 1, 2, \dots, A_e = w_e. \end{aligned} \quad (6.12)$$

- Opis różnicy temperatur $\theta^e(X, t, T)$ i wariacji tej różnicy $\delta\theta^e(X, t, T)$:

$$\begin{aligned} \theta^e(X, t, T) &= T_0^e \phi_{T\alpha'}^e(X, t) g_{\alpha'}^e(T), \\ \delta\theta^e(X, t, T) &= T_0^e \phi_{T\alpha'}^e(X, t) \delta g_{\alpha'}^e(T), \\ (X, t, T) &\in \Omega_e \times \langle T_0, T_1 \rangle, \\ e &= 1, 2, \dots, E, \\ \alpha' &= 1, 2, \dots, A_e = w_e. \end{aligned} \quad (6.13)$$

- Opis funkcji $h(X, t, C)$ oraz wariacji funkcji $\delta h(X, t, C)$:

$$\begin{aligned} h^e(X, t, C) &= \phi_{C\alpha''}^e(X, t) h_{\alpha''}^e(C), \\ \delta h^e(X, t, C) &= \phi_{C\alpha''}^e(X, t) \delta h_{\alpha''}^e(C), \end{aligned} \quad (6.14)$$

$$\begin{aligned}(X, t, C) &\in \Omega_e \times \langle C_0, C_1 \rangle, \\ e &= 1, 2, \dots, E, \\ \alpha'' &= 1, 2, \dots, A_e = w_e.\end{aligned}$$

- Opis zmiany stężenia substancji dyfundującej $c(X, t, C)$ oraz wariacji zmiany stężenia substancji dyfundującej $\delta c(X, t, C)$:

$$\begin{aligned}c^e(X, t, C) &= C_0 \phi_{C\alpha''}^e(X, t) h_{\alpha''}^e(C), \\ \delta c^e(X, t, C) &= C_0 \phi_{C\alpha''}^e(X, t) \delta h_{\alpha''}^e(C), \\ (X, t, C) &\in \Omega_e \times \langle C_0, C_1 \rangle, \\ e &= 1, 2, \dots, E, \\ \alpha'' &= 1, 2, \dots, A_e = w_e.\end{aligned} \quad (6.15)$$

- Opis naprężeń $\sigma(X, t, T, C)$ / siły normalnej $N(X, t, T, C)$:

$$\begin{aligned}\sigma^e(X, t, T, C) &= E^e \varepsilon^e - \gamma_T^e \theta^e - \gamma_C^e c^e = \\ &= E^e \frac{\partial \phi_\alpha^e(X, t)}{\partial X} r_\alpha^e(T, C) - \gamma_T^e T_0^e \dot{\phi}_{T\alpha'}^e(X, t) g_{\alpha'}^e(T) + \\ &\quad - \gamma_C^e C_0 \phi_{C\alpha''}^e(X, t) h_{\alpha''}^e(C), \\ N &= A^e (E^e \frac{\partial \phi_\alpha^e(X, t)}{\partial X} r_\alpha^e(T, C) + \\ &\quad - \gamma_T^e T_0^e \dot{\phi}_{T\alpha'}^e(X, t) g_{\alpha'}^e(T) - \gamma_C^e C_0 \phi_{C\alpha''}^e(X, t) h_{\alpha''}^e(C)) \\ (X, t, T, C) &\in \Omega_e \times \langle T_0, T_1 \rangle \times \langle C_0, C_1 \rangle, \\ e &= 1, 2, \dots, E, \\ \alpha &= 1, 2, \dots, A_e = w_e s_e = w_e, \\ \alpha' &= 1, 2, \dots, A_e = w_e, \\ \alpha'' &= 1, 2, \dots, A_e = w_e.\end{aligned} \quad (6.16)$$

Przedstawione powyżej zależności od (6.7) do (6.16) podstawiamy do równań czasopracy wirtualnej elementu prętowego, pomijając wewnętrzne źródła ciepła (W) oraz wewnętrzne źródła masy (τ):

$$\begin{aligned}&\delta r_\alpha^e \left\{ \int_t^l \int \phi_\alpha^e \rho^e A^e f^e dX dt - \int_l^l \phi_\alpha^e \rho^e A^e \dot{u}|_{t_0}^{t_1} dX \right. \\ &+ \int_t^l \int \dot{\phi}_\alpha^e \rho^e A^e \dot{\phi}_\beta^e r_\beta^e dX dt \\ &\quad \left. + \int_t^l \phi_\alpha^e \hat{p}|_0^l dt - \int_t^l \int_l^l \left(\frac{\partial \phi_\alpha^e}{\partial X} A^e E^e \frac{\partial \phi_\beta^e}{\partial X} r_\beta^e - \frac{\partial \phi_\alpha^e}{\partial X} A^e \gamma_T^e T_0^e \dot{\phi}_{T\beta}^e g_{\beta'}^e, \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{\partial \phi_\alpha^e}{\partial X} A^e \gamma_C^e C_0 \phi_{C\beta''}^e h_{\beta''}^e \right) dX dt \right\} = 0.\end{aligned} \quad (6.17)$$

$$\begin{aligned}
 & \delta g_{\alpha'}^e \left\{ \int_t \int_l \dot{\phi}_{T\alpha'}^e A^e T_0^e c_{\varepsilon,c}^e \dot{\phi}_{T\beta'}^e g_{\beta'}^e dX dt \right. \\
 & + \int_t \int_l \dot{\phi}_{T\alpha'}^e A^e T_0^e C_0^e b^e \phi_{C\beta''}^e h_{\beta''}^e dX dt \\
 & + \int_t \int_l \dot{\phi}_{T\alpha'}^e A^e T_0^e \gamma_T^e (1 - 2\nu^e) \frac{\partial \phi_{\beta'}^e}{\partial X} r_{\beta'}^e dX dt \\
 & - \int_t \int_l \frac{\partial \phi_{T\alpha'}^e}{\partial X} A^e k^e T_0^e \frac{\partial \dot{\phi}_{T\beta'}^e}{\partial X} g_{\beta'}^e dX dt - \int_t \phi_{T\alpha'}^e A^e \hat{q}^e |_0^l dt \\
 & - \int_l \phi_{T\alpha'}^e A^e c_{\varepsilon,c}^e \theta^e |_{t_0}^{t_1} dX - \int_l \phi_{T\alpha'}^e A^e T_0^e b^e c^e |_{t_0}^{t_1} dX \\
 & \left. - \int_l \phi_{T\alpha'}^e A^e T_0^e \gamma_T^e e^e |_{t_0}^{t_1} dX \right\} = 0.
 \end{aligned} \tag{6.18}$$

$$\begin{aligned}
 & \delta h_{\alpha''}^e \left\{ - \int_t \int_l \frac{\phi_{C\alpha''}^e}{\partial X} A^e D_C^e D_T^e T_0^e \frac{\partial \dot{\phi}_{T\beta'}^e}{\partial X} g_{\beta'}^e dX dt \right. \\
 & - \int_t \int_l \frac{\phi_{C\alpha''}^e}{\partial X} A^e D_C^e D_{\varepsilon}^e (1 - 2\nu^e) \frac{\partial^2 \phi_{\beta'}^e(X,t)}{\partial X^2} r_{\beta'}^e dX dt \\
 & - \int_t \int_l \frac{\phi_{C\alpha''}^e}{\partial X} A^e (D_C^e)^2 C_0^e \frac{\phi_{C\beta''}^e}{\partial X} h_{\beta''}^e dX dt \\
 & + \int_t \int_l \dot{\phi}_{C\alpha''}^e A^e D_C^e C_0^e \phi_{C\beta''}^e h_{\beta''}^e dX dt - \int_t \phi_{C\alpha''}^e A^e D_C^e \hat{\eta}^e |_0^l dt \\
 & \left. - \int_l \phi_{C\alpha''}^e A^e D_C^e c^e |_{t_0}^{t_1} dX \right\} = 0.
 \end{aligned} \tag{6.19}$$

Wariacje δr_{α}^e , $\delta g_{\alpha'}^e$, $\delta h_{\alpha''}^e$ przyjmują dowolne niezerowe wartości, zatem ostatecznie można zapisać:

$$\begin{bmatrix} K_{\alpha\beta}^e & K_{\alpha\beta'}^e & K_{\alpha\beta''}^e \\ K_{\alpha'\beta}^e & K_{\alpha'\beta'}^e & K_{\alpha'\beta''}^e \\ K_{\alpha''\beta}^e & K_{\alpha''\beta'}^e & K_{\alpha''\beta''}^e \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_{\beta}^e \\ g_{\beta'}^e \\ h_{\beta''}^e \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} P_{\alpha}^e \\ P_{\alpha'}^e \\ P_{\alpha''}^e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{6.20}$$

gdzie:

$$K_{\alpha\beta}^e = \int_t \int_l \left(\dot{\phi}_{\alpha}^e \rho^e A^e \dot{\phi}_{\beta}^e - \frac{\partial \phi_{\alpha}^e}{\partial X} A^e E^e \frac{\partial \phi_{\beta}^e}{\partial X} \right) dX dt, \tag{6.21}$$

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

$$K_{\alpha\beta'}^e = \int_t \int_l \frac{\partial \phi_\alpha^e}{\partial X} A^e \gamma_T^e T_0^e \dot{\phi}_{T\beta'}^e dX dt, \quad (6.22)$$

$$K_{\alpha\beta''}^e = \int_t \int_l \frac{\partial \phi_\alpha^e}{\partial X} A^e \gamma_C^e C_0^e \phi_{C\beta''}^e dX dt, \quad (6.23)$$

$$K_{\alpha'\beta}^e = \int_t \int_l \dot{\phi}_{T\alpha'}^e A^e T_0^e \gamma_T^e (1 - 2\nu^e) \frac{\partial \phi_\beta^e}{\partial X} dX dt, \quad (6.24)$$

$$K_{\alpha'\beta'}^e = \int_t \int_l \left(\dot{\phi}_{T\alpha'}^e A^e T_0^e c_{\varepsilon,c}^e \dot{\phi}_{T\beta'}^e - \frac{\partial \phi_{T\alpha'}^e}{\partial X} A^e k^e T_0^e \frac{\partial \phi_{T\beta'}^e}{\partial X} \right) dX dt, \quad (6.25)$$

$$K_{\alpha'\beta''}^e = \int_t \int_l \dot{\phi}_{T\alpha'}^e A^e T_0^e C_0^e b^e \phi_{C\beta''}^e dX dt, \quad (6.26)$$

$$K_{\alpha''\beta}^e = - \int_t \int_l \frac{\phi_{C\alpha''}^e}{\partial X} A^e D_C^e D_\varepsilon^e (1 - 2\nu^e) \frac{\partial^2 \phi_\beta^e(X, t)}{\partial X^2} dX dt, \quad (6.27)$$

$$K_{\alpha''\beta'}^e = - \int_t \int_l \frac{\phi_{C\alpha''}^e}{\partial X} A^e D_C^e D_T^e T_0^e \frac{\partial \dot{\phi}_{T\beta'}^e}{\partial X} dX dt, \quad (6.28)$$

$$K_{\alpha''\beta''}^e = \int_t \int_l \dot{\phi}_{C\alpha''}^e A^e D_C^e C_0^e \phi_{C\beta''}^e - \frac{\phi_{C\alpha''}^e}{\partial X} A^e (D_C^e)^2 C_0^e \frac{\phi_{C\beta''}^e}{\partial X} dX dt, \quad (6.29)$$

$$P_\alpha^e = \int_t \int_l \phi_{\alpha\rho}^e A^e f^e dX dt + \int_t \phi_\alpha^e \hat{P}|_0^l dt - \int_l \phi_{\alpha\rho}^e A^e \dot{u}|_{t_0}^{t_1} dX, \quad (6.30)$$

$$P_{\alpha'}^e = - \int_t \phi_{T\alpha'}^e A^e \hat{q}^e|_0^l dt + \\ - \int_l (\phi_{T\alpha'}^e A^e c_{\varepsilon,c}^e \theta^e + \phi_{T\alpha'}^e A^e T_0^e b^e c^e + \phi_{T\alpha'}^e A^e T_0^e \gamma_T^e e^e)|_{t_0}^{t_1} dX, \quad (6.31)$$

$$P_{\alpha''}^e = - \int_t \phi_{C\alpha''}^e A^e D_C^e \hat{\eta}^e|_0^l dt - \int_l \phi_{C\alpha''}^e A^e D_C^e c^e|_{t_0}^{t_1} dX. \quad (6.32)$$

Zależność (6.20) przedstawia układ równań algebraicznych liniowych, ważny dla elementu czasoprzestrzennego (SKECZ). Wskaźniki α i β zależą od liczby

węzłów elementu czasoprzestrzennego (w_e) oraz liczby stopni swobody w węźle (s_e), tj. w przypadku przyjętego układu prętowego: $\alpha, \beta = 1, 2, \dots, w_e$, $\alpha', \beta' = 1, 2, \dots, w_e$, $\alpha'', \beta'' = 1, 2, \dots, w_e$.

6.2. ROZWAŻANE PROBLEMY

W ramach niniejszej rozprawy, opracowany model obliczeniowy termodyfuzji sprzężonej zaimplementowano do autorskiego programu komputerowego w języku programowania C++. Analizowane zagadnienie jest zjawiskiem bardzo złożonym. Warto podkreślić, że w przypadku układu prętowego o trzech stopniach swobody w węźle, macierz sztywności czasoprzestrzennej jednego elementu czasoprzestrzennego K^e ma wymiar 24x24. Stąd jako pierwszy, testowy przykład wybrano prosty, elementarny przypadek, aby móc efektywnie zweryfikować poprawność opracowanego modelu obliczeniowego oraz jego implementację do autorskiego programu komputerowego. Rozpatruje się stalowy pręt prosty sztywno zamocowany na jednym końcu, a na drugim poddany wydłużeniu początkowemu o wartości $u(t = 0) = 0,02 \text{ m}$. Obliczenia wykonuje się dla układu niesprężonego. Celem obliczeń jest wyznaczenie funkcji przemieszczeń podłużnych $u(X, t)$ oraz weryfikacja i analiza otrzymanych wyników (por. pkt. 6.3 niniejszej rozprawy).

W Przykładzie Nr 2 rozpatruje się stalowy pręt prosty sztywno zamocowany na jednym końcu, a na drugim obciążony siłą osiowo rozciągającą. Celem obliczeń jest wyznaczenie funkcji przemieszczeń podłużnych $u(X, t)$ i okresu podstawowych drgań własnych T w zależności od przyjętych wymiarów elementu czasoprzestrzennego. Umożliwi to weryfikację tego, czy i w jakim stopniu przyjęta gęstość dyskretyzacji ma wpływ na dokładność wyników. Obliczenia wykonuje się dla układu niesprężonego (por. pkt. 6.4 niniejszej rozprawy).

W przykładach Nr 3, 4, 5 i 6 rozpatruje się proces sprzężony. Analizuje się stalowy pręt prosty pod wpływem kolejno następujących oddziaływań:

- siła osiowo ściskająca (por. pkt. 6.5 niniejszej rozprawy);
- źródło ciepła (por. pkt. 6.6 niniejszej rozprawy);
- źródło substancji dyfundującej (por. pkt. 6.7 niniejszej rozprawy);
- łączny wpływ oddziaływań (por. pkt. 6.8 niniejszej rozprawy).

Celem obliczeń jest wyznaczenie funkcji przemieszczeń podłużnych $u(X, t)$, zmian temperatury $\theta(X, t)$ i zmian stężenia substancji dyfundującej $c(X, t)$ oraz analiza otrzymanych wyników, czyli walidacja modelu obliczeniowego.

We wszystkich analizowanych przykładach przyjmuje się następujące dane liczbowe:

- długość pręta $l = 2 \text{ m}$;
- pole przekroju poprzecznego $A = 0,01 \text{ m}^2$;
- moduł Younga $E = 205 \cdot 10^9 \text{ Pa}$;
- współczynnik Poissona $\nu = 0,30$;

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

- gęstość objętościowa $\rho = 7850 \frac{kg}{m^3};$
- ciepło właściwe przy ustalonej deformacji $c_{\epsilon,c} = 3,53 \cdot 10^6 \frac{J}{K m^3};$
- współczynnik przewodnictwa cieplnego $k = 50 \frac{W}{m K};$
- moduł ściśliwości $K = 166 \cdot 10^9 Pa;$
- współ. liniowej rozszerzalności termicznej $\alpha_t = 1,2 \cdot 10^{-5} \frac{1}{K};$
 $\gamma_T = 597,6 \cdot 10^4 \frac{Pa}{K};$
- współ. liniowej rozszerzalności dyfuzyjnej $\alpha_c = 1,25 \cdot 10^{-5} \frac{m^3}{kg};$
 $\gamma_C = 622,5 \cdot 10^4 \frac{m^2}{s^2};$
- współczynniki dyfuzji $D_\epsilon = 1,5 \cdot 10^{-15} \frac{kg}{m \cdot s};$
 $D_T = 1,4 \cdot 10^{-14} \frac{kg}{m \cdot s \cdot K};$
 $D_C = 1,2 \cdot 10^{-12} \frac{m^2}{s};$
- warunki początkowe $u(x, t = 0) = 0;$
 $\dot{u}(x, t = 0) = 0;$
 $T(x, t = 0) = 288 K;$
 $\theta(x, t = 0) = 0;$
 $C(x, t = 0) = 5 \frac{kg}{m^3};$
 $c(x, t = 0) = 0.$

Przyjmuje się równomierną dyskretyzację pręta z prostokątnymi elementami czasoprzestrzennymi (rys. 6.2). Wymiar przestrzenny elementu czasoprzestrzennego ($2a$) przyjęto o wartości 0,2 m (10 elementów czasoprzestrzennych na długości pręta). Z kolei wymiar czasowy SKECZ ($2h$) musi spełniać warunek stabilności:

- w analizowanym przykładzie dominującą częstość własną można oszacować następująco:

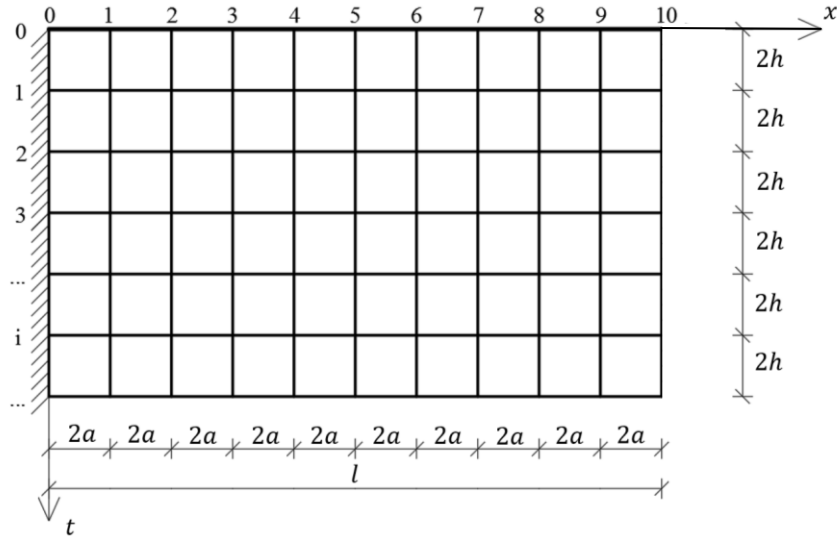
$$\omega = \frac{\pi}{2a} \sqrt{\frac{E}{\rho}} = \frac{\pi}{2 \cdot 0,1} \sqrt{\frac{205 \cdot 10^9}{7850}} = 80271,6 \frac{1}{s}, \quad (6.33)$$

- zatem w elemencie czasoprzestrzennym wymiar czasowy h musi spełnić następujący warunek [Podhorecki 1989]:

$$h < \frac{\sqrt{3}}{\omega} = \frac{\sqrt{3}}{80271,6} = 2,16 \cdot 10^{-5} s. \quad (6.34)$$

Ostatecznie przyjęto wymiar czasowy elementu czasoprzestrzennego o wartości $2h = 4 \cdot 10^{-6} s.$

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych



Rys. 6.2. Zastosowana dyskretyzacja pręta w czasoprzestrzeni

Przyjęto prostokątne elementy czasoprzestrzenne z węzłami pośrednimi (rys. 6.3). Dobrano kwadratowe funkcje kształtu w następującej postaci [Zienkiewicz 1972]:

➤ węzły narożne:

$$\phi_{\alpha} = \phi_{T\alpha} = \phi_{C\alpha} = \frac{1}{4}(1 + \xi_{\alpha}\xi)(1 + \tau_{\alpha}\tau)(\xi_{\alpha}\xi + \tau_{\alpha}\tau - 1)$$

$$\xi_{\alpha} = \begin{cases} -1 & \text{dla } \alpha = 1, 6 \\ 1 & \text{dla } \alpha = 3, 8 \end{cases}$$

$$\tau_{\alpha} = \begin{cases} -1 & \text{dla } \alpha = 1, 3 \\ 1 & \text{dla } \alpha = 6, 8 \end{cases}$$
(6.35)

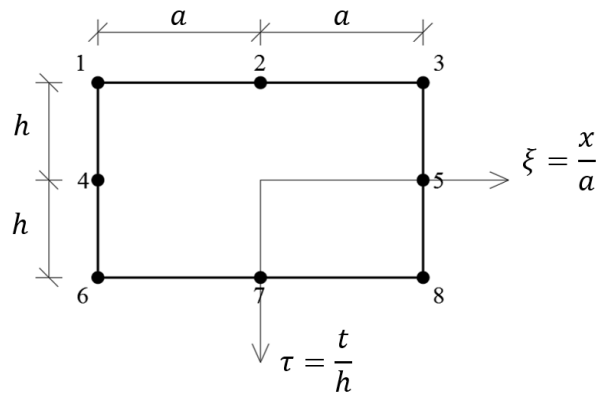
➤ węzły pośrednie:

$$\phi_{\alpha} = \phi_{T\alpha} = \phi_{C\alpha} = \frac{1}{2}(1 - \xi^2)(1 + \tau_{\alpha}\tau) \text{ dla } \xi_{\alpha} = 0$$

$$\tau_{\alpha} = \begin{cases} -1 & \text{dla } \alpha = 2 \\ 1 & \text{dla } \alpha = 7 \end{cases}$$
(6.36)

$$\phi_{\alpha} = \phi_{T\alpha} = \phi_{C\alpha} = \frac{1}{2}(1 + \xi_{\alpha}\xi)(1 - \tau^2) \text{ dla } \tau_{\alpha} = 0$$

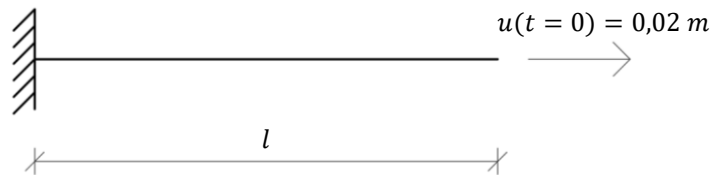
$$\xi_{\alpha} = \begin{cases} -1 & \text{dla } \alpha = 4 \\ 1 & \text{dla } \alpha = 5 \end{cases}$$
(6.37)



Rys. 6.3. Element czasoprzestrzenny stosowany w obliczeniach

6.3. PRZYKŁAD NR 1 – DRGANIA PODŁUŻNE PRĘTA WYWOŁANE WYMUSZENIEM KINEMATYCZNYM

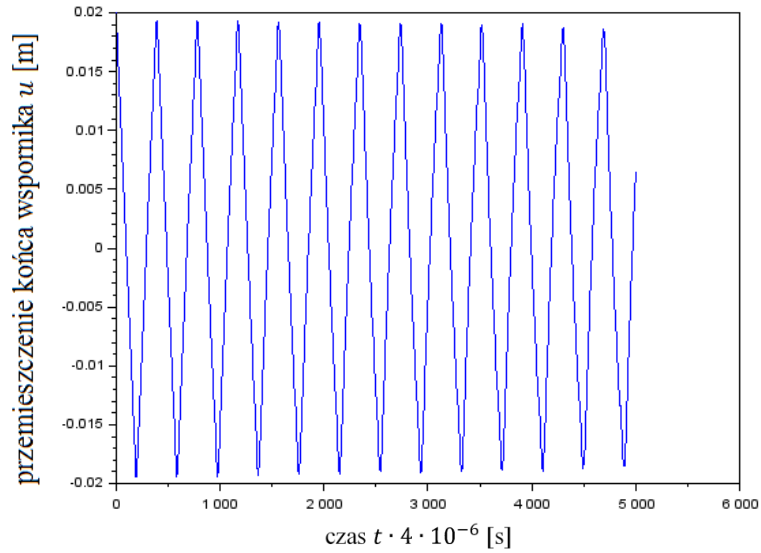
Rozpatruje się stalowy pręt prosty (rys. 6.4) sztywno zamocowany na jednym końcu, a na drugim poddany wydłużeniu początkowemu o wartości $u(t = 0) = 0,02 \text{ m}$. Celem poniższych obliczeń jest wyznaczenie funkcji przemieszczeń podłużnych $u(X, t)$ oraz weryfikacja i analiza otrzymanych wyników.



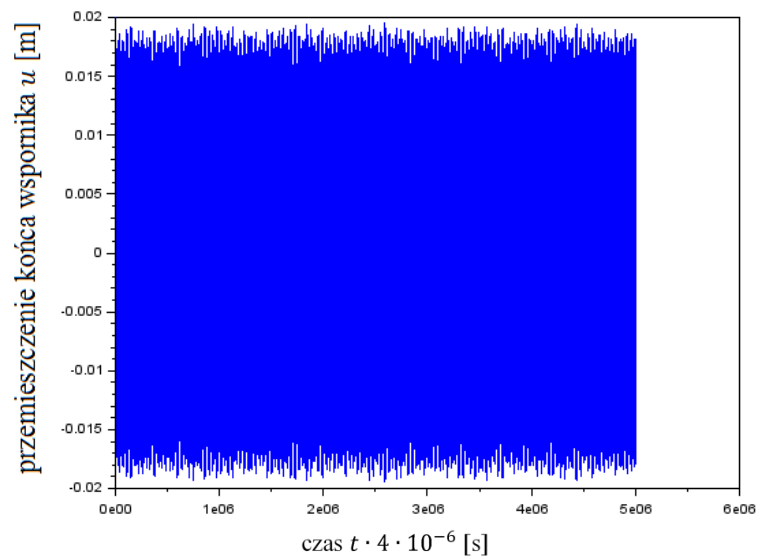
Rys. 6.4. Analizowany pręt

Na rys. 6.5 i 6.6 przedstawiono wykres przemieszczeń końca wspornika. Wykres ten porównano z wykresem przemieszczeń końca wspornika otrzymanym przy wykorzystaniu metody elementów skończonych i metody bezpośredniego całkowania równań ruchu, metody Newmarka (rys. 6.7).

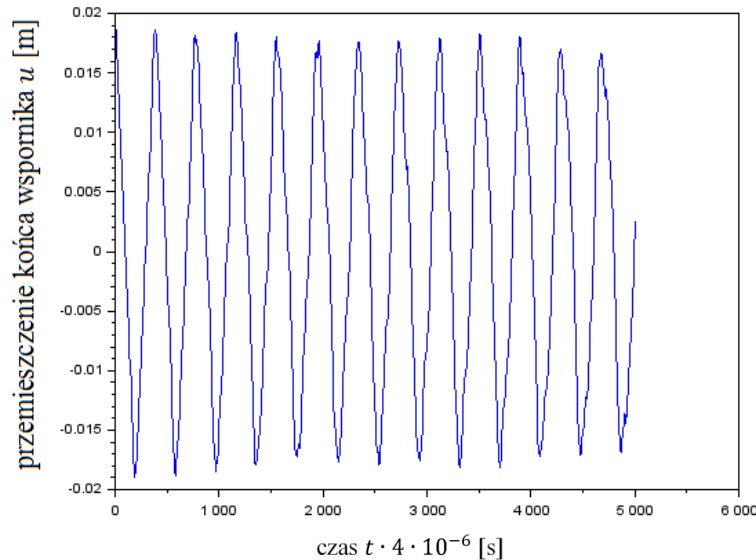
Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych



Rys. 6.5. Wykres przemieszczeń końca wspornika obliczonych metodą elementów czasoprzestrzennych



Rys. 6.6. Wykres przemieszczeń końca wspornika obliczonych metodą elementów czasoprzestrzennych (dłuższy okres obserwacji)



Rys. 6.7. Wykres przemieszczeń końca wspornika obliczonych metodą elementów skończonych z metodą Newmarka

Poniżej formułuje się następujące wnioski wynikające z analizy Przykładu Nr 1:

- Przykład Nr 1 dobrano w taki sposób, aby w prosty sposób można było zweryfikować przyjęty model obliczeniowy i jego implementację do autorskiego programu komputerowego w metodzie elementów czasoprzestrzennych. Wykres przemieszczeń końca wspornika obliczonych metodą elementów czasoprzestrzennych ma prawidłową strukturę, dla porównania przedstawiono również analogiczny wykres w metodzie elementów skończonych w połączeniu z metodą Newmarka. Weryfikacja wypadła pozytywnie. Na rys. 6.6 przedstawiono także znacznie dłuższy okres obserwacji, pozwoliło to pozytywnie zweryfikować stabilność rozwiązania.
- Wykres przemieszczeń końca wspornika obliczonych metodą elementów czasoprzestrzennych jest bardziej regularny niż wykres w metodzie elementów skończonych. Wynika to z faktu, że w metodzie elementów czasoprzestrzennych przyjęto bardziej zaawansowaną funkcję kształtu (zastosowano elementy czasoprzestrzenne z węzłami pośrednimi).
- Podczas wykonywania powyższych obliczeń zwrócono uwagę na stosunkowo dużą wrażliwość wyników na przyjmowaną gęstość dyskretyzacji. Stąd w Przykładzie Nr 2 przeanalizowana zostanie dokładność wyników w zależności od przyjętych wymiarów elementu czasoprzestrzennego.
- Ze ścisłego rozwiązania równania różniczkowego wynika w takim przypadku amplituda drgań wynosząca $\pm 0,02$ m.

6.4. PRZYKŁAD NR 2 – WPŁYW DYSKRETYZACJI CZASOPRZESTRZENNEJ NA STABILNOŚĆ I DOKŁADNOŚĆ MECZ

Celem poniższych obliczeń jest wyznaczenie funkcji przemieszczeń podłużnych $u(X, t)$ i okresu podstawowych drgań własnych T w zależności od przyjętych wymiarów elementu czasoprzestrzennego oraz weryfikacja i analiza otrzymanych wyników. Rozpatruje się stalowy pręt prosty (rys. 6.8) sztywno zamocowany na jednym końcu, a na drugim obciążony siłą osiowo rozciągającą opisaną następującą zależnością:

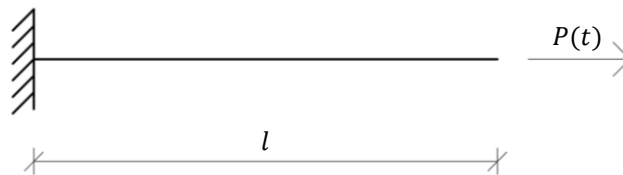
$$P(t) = P_0 H(t), \quad (6.38)$$

gdzie:

$$P_0 = 50 \text{ kN},$$

$H(t)$ jest funkcją Heaviside'a o następujących właściwościach:

$$H(t) = \begin{cases} 0 & \text{dla } t < 0 \\ 1 & \text{dla } t \geq 0 \end{cases} \quad (6.39)$$



Rys. 6.8. Analizowany pręt

Sprężysty pręt rozciągany osiową siłą nagle przyłożoną charakteryzuje następujące rozwiązanie analityczne (ściśle rozwiązanie równania różniczkowego):

- amplituda przemieszczeń końca wspornika:

$$\Delta l = 2 \cdot \Delta l_{stat.} = 2 \cdot \frac{Pl}{EA} = 2 \cdot \frac{50 \cdot 10^3 \cdot 2}{205 \cdot 10^9 \cdot 0,01} = 9,76 \cdot 10^{-5} \text{ m}; \quad (6.40)$$

- podstawowa częstość drgań własnych:

$$\omega = \frac{\pi}{2l} \sqrt{\frac{E}{\rho}} = \frac{\pi}{2 \cdot 2} \sqrt{\frac{205 \cdot 10^9}{7850}} = 4013,6 \frac{1}{s}; \quad (6.41)$$

- okres podstawowych drgań własnych:

$$T = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{2 \cdot \pi}{4013,6} = 1,57 \cdot 10^{-3} \text{ s}. \quad (6.42)$$

Z szacunkowych ustaleń dotyczących stabilności metody elementów czasoprzestrzennych wynika, że wymiar czasowy SKECZ (h) powinien spełniać następu-

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

jący warunek (w zależności od przyjętego wymiaru przestrzennego, por. wzory 6.33 i 6.34):

- $h < 2,16 \cdot 10^{-4} \text{ s}$ dla $a = 1,0 \text{ m}$;
- $h < 2,16 \cdot 10^{-5} \text{ s}$ dla $a = 0,1 \text{ m}$;
- $h < 1,08 \cdot 10^{-5} \text{ s}$ dla $a = 0,05 \text{ m}$.

Wyniki otrzymanych obliczeń przy różnej gęstości dyskretyzacji oraz ich porównanie z powyższymi wynikami analitycznymi zestawiono w Tabeli 1. Koloriem zielonym zaznaczono optymalny stosunek wymiaru przestrzennego do wymiaru czasowego SKECZ wynikający z przeprowadzonych analiz. Na rys. 6.9÷6.14 przedstawiono poglądowo wybrane wykresy.

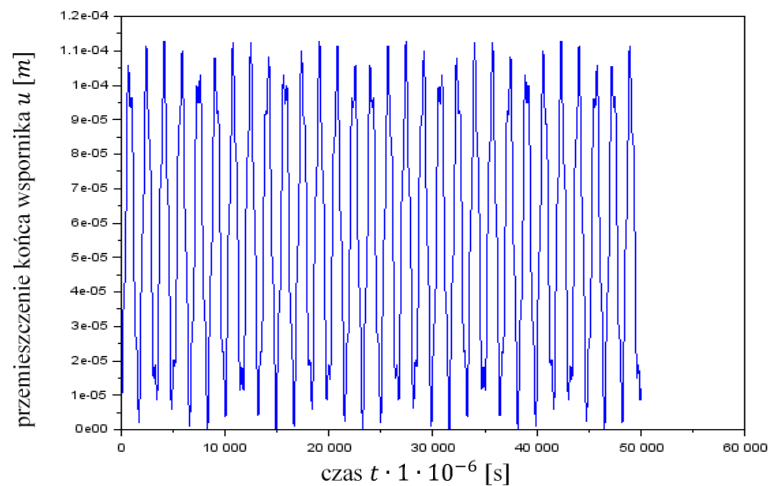
Tabela 1. Amplitudy przemieszczeń końca wspornika oraz okres podstawowych drgań własnych przy różnych wymiarach elementów czasoprzestrzennych

L.p.	Wymiar przestrzenny SKECZ $a [m]$	Wymiar czasowy SKECZ $h [s]$	Amplituda przemieszczeń końca wspornika		Okres podstawowych drgań własnych	
			$u_{MECZ} [m]$	błąd względny [%]	$T_{MECZ} [s]$	błąd względny [%]
1	1,0	$5 \cdot 10^{-7}$	$11,29 \cdot 10^{-5}$	15,7	$1,66 \cdot 10^{-3}$	5,7
2	1,0	$1 \cdot 10^{-6}$	$10,07 \cdot 10^{-5}$	3,2	$1,58 \cdot 10^{-3}$	0,6
3	1,0	$5 \cdot 10^{-6}$	$9,76 \cdot 10^{-5}$	0,0	$1,58 \cdot 10^{-3}$	0,6
4	1,0	$1 \cdot 10^{-5}$	$9,76 \cdot 10^{-5}$	0,0	$1,57 \cdot 10^{-3}$	0,0
5	1,0	$5 \cdot 10^{-5}$	$9,79 \cdot 10^{-5}$	0,3	$1,59 \cdot 10^{-3}$	1,3
6	1,0	$1 \cdot 10^{-4}$	$10,14 \cdot 10^{-5}$	3,9	$1,59 \cdot 10^{-3}$	1,3
7	1,0	$5 \cdot 10^{-4}$	∞ (nie spełnia warunku stabilności)			
8	0,1	$5 \cdot 10^{-7}$	$10,31 \cdot 10^{-5}$	5,6	$1,63 \cdot 10^{-3}$	3,8

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

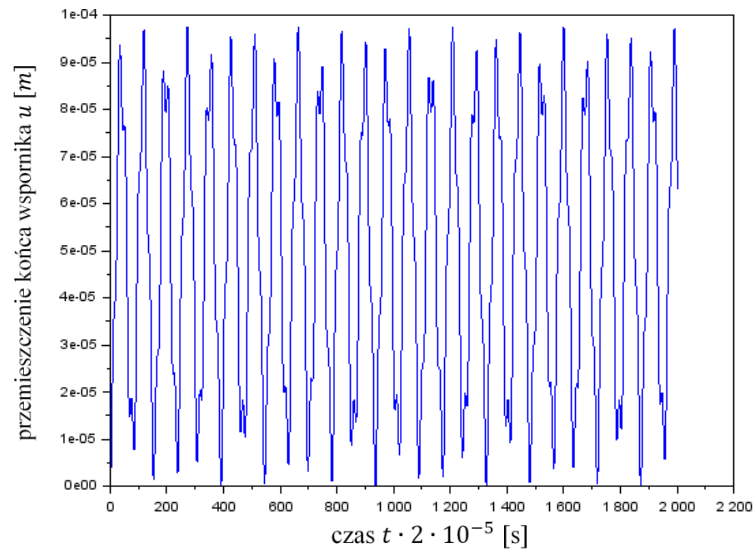
Cd. Tabeli 1.

9	0,1	$1 \cdot 10^{-6}$	$9,65 \cdot 10^{-5}$	1,1	$1,58 \cdot 10^{-3}$	0,6
10	0,1	$2 \cdot 10^{-6}$	$9,74 \cdot 10^{-5}$	0,2	$1,57 \cdot 10^{-3}$	0,0
11	0,1	$5 \cdot 10^{-6}$	$9,63 \cdot 10^{-5}$	1,3	$1,58 \cdot 10^{-3}$	0,6
12	0,1	$1 \cdot 10^{-5}$	∞			
13	0,05	$2 \cdot 10^{-7}$	$10,33 \cdot 10^{-5}$	5,8	$1,55 \cdot 10^{-3}$	1,3
14	0,05	$3 \cdot 10^{-7}$	$9,88 \cdot 10^{-5}$	1,2	$1,55 \cdot 10^{-3}$	1,3
15	0,05	$4 \cdot 10^{-7}$	$9,75 \cdot 10^{-5}$	0,1	$1,56 \cdot 10^{-3}$	0,6
16	0,05	$5 \cdot 10^{-7}$	$9,63 \cdot 10^{-5}$	1,3	$1,56 \cdot 10^{-3}$	0,6
16	0,05	$1 \cdot 10^{-6}$	$9,81 \cdot 10^{-5}$	5,1	$1,56 \cdot 10^{-3}$	0,6
17	0,05	$5 \cdot 10^{-6}$	∞			

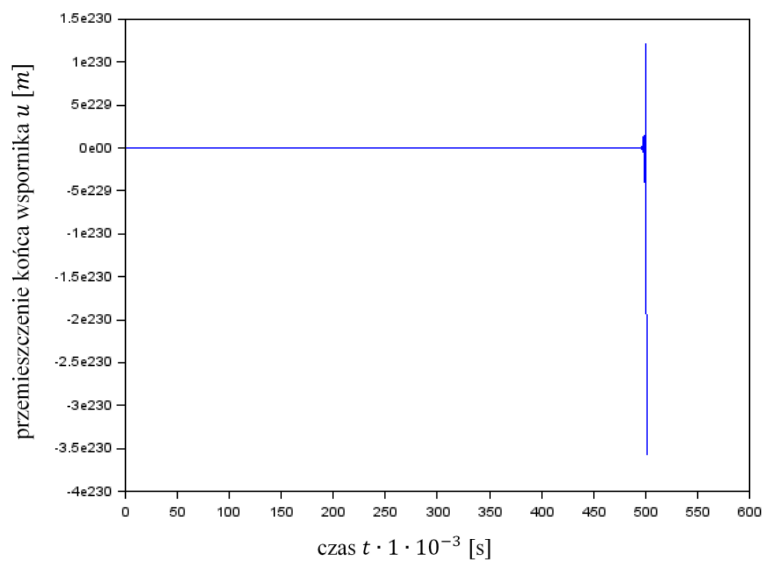


Rys. 6.9. Wykres przemieszczeń końca wspornika przy następujących wymiarach SKECZ: $a = 1,0 \text{ m}$; $h = 5 \cdot 10^{-7} \text{ s}$ (por. L.p. 1 w Tabeli 1) – mała dokładność wyników przy zbyt małym wymiarze czasowym elementu w stosunku do wymiaru przestrzennego

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

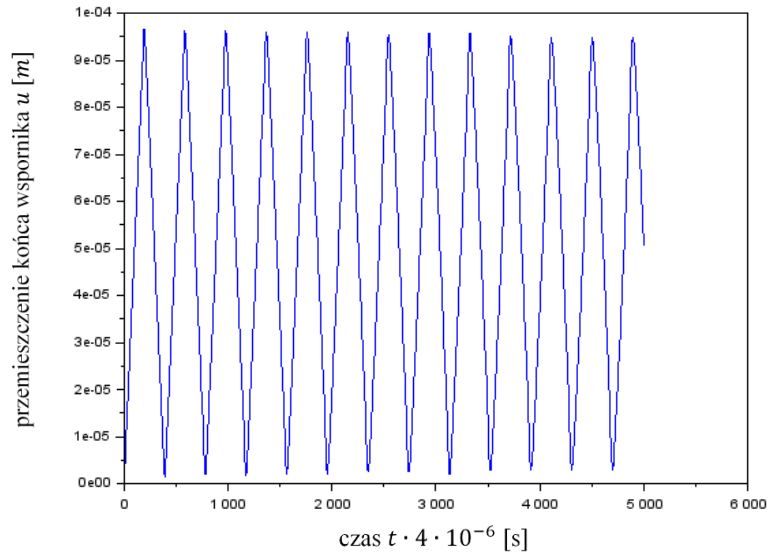


Rys. 6.10. Wykres przemieszczeń końca wspornika przy następujących wymiarach SKECZ: $a = 1,0\text{ m}$; $h = 1 \cdot 10^{-5}\text{ s}$ (por. L.p. 4 w Tabeli 1) – optymalny stosunek wymiarów elementu czasoprzestrzennego (przy jednym elemencie czasoprzestrzennym na długości pręta)

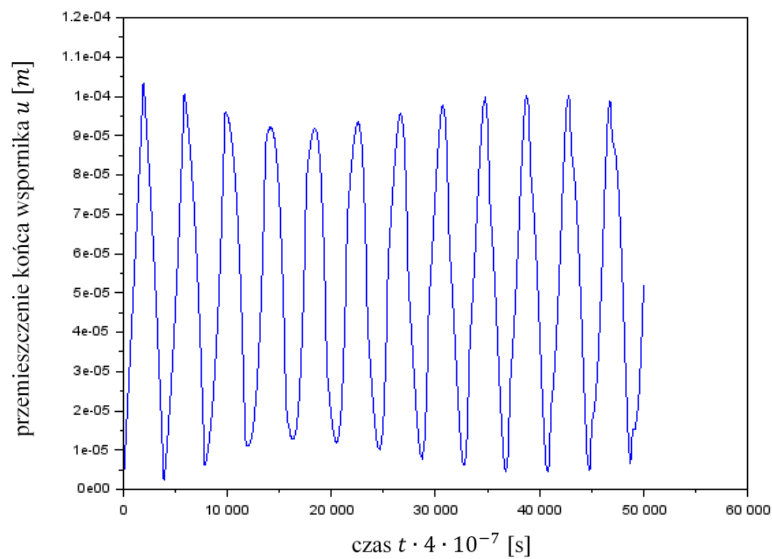


Rys. 6.11. Wykres przemieszczeń końca wspornika przy następujących wymiarach SKECZ: $a = 1,0\text{ m}$; $h = 5 \cdot 10^{-4}\text{ s}$ (por. L.p. 7 w Tabeli 1) – nieprawidłowość wyników przy zbyt dużym wymiarze czasowym elementu, który nie spełnia warunku stabilności metody (por. pkt. 6.2 niniejszej rozprawy)

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

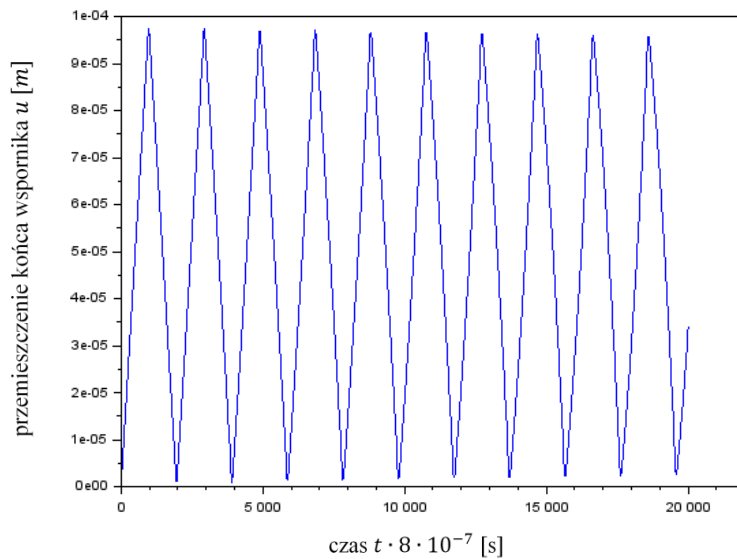


Rys. 6.12. Wykres przemieszczeń końca wspornika przy następujących wymiarach SKECZ: $a = 0,1$ m; $h = 2 \cdot 10^{-6}$ s (por. L.p. 10 w Tabeli 1) – optymalny stosunek wymiarów elementu czasoprzestrzennego (przy dziesięciu elementach czasoprzestrzennym na długości pręta)



Rys. 6.13. Wykres przemieszczeń końca wspornika przy następujących wymiarach SKECZ: $a = 0,05$ m; $h = 2 \cdot 10^{-7}$ s (por. L.p. 13 w Tabeli 1) – mała dokładność wyników przy zbyt małym wymiarze czasowym elementu w stosunku do wymiaru przestrzennego

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych



Rys. 6.14. Wykres przemieszczeń końca wspornika przy następujących wymiarach SKECZ: $a = 0,05 \text{ m}$; $h = 4 \cdot 10^{-7} \text{ s}$ (por. L.p. 15 w Tabeli 1) – optymalny stosunek wymiarów elementu czasoprzestrzennego (przy dwudziestu elementami czasoprzestrzennymi na długości pręta)

Poniżej formułuje się następujące wnioski wynikające z analizy Przykładu Nr 2:

- W przykładzie wyznaczono amplitudy przemieszczeń końca wspornika oraz okres podstawowych drgań własnych przy różnych wymiarach elementów czasoprzestrzennych. Otrzymane wyniki porównano z wartościami wynikającymi z rozwiązania analitycznego (ściśłego rozwiązania równania różniczkowego).
- W wyniku weryfikacji wykazano, że gęstość dyskretyzacji ma wpływ na dokładność wyników. Z przeprowadzonych analiz wynika, że poza spełnieniem warunku stabilności, istotny jest również odpowiedni stosunek wymiaru przestrzennego do wymiaru czasowego SKECZ. Zatem zagęszczanie przestrzennego podziału na elementy czasoprzestrzenne, musi być korelowane z zagęszczaniem dyskretyzacji w wymiarze czasowym.
- Dla analizowanego układu prętowego, podział przestrzenny nie ma znaczącego wpływu na dokładność wyników. Satysfakcjonujące wyniki można uzyskać przy podziale na jeden element przestrzenny. Z powyższych rozważań wynika natomiast, że wymiar czasowy SKECZ nie może być ani zbyt mały ani zbyt duży w stosunku do wymiaru przestrzennego elementu. Ponadto w miarę jak zwiększa się liczba elementów w wymiarze przestrzennym, wrażliwość na odpowiednio dobrany wymiar czasowy rośnie i zawęża się przedział, który pozwala na uzyskanie zadowalających rezultatów. Taka obserwacja zachęca do pogłębionej analizy tego zagadnienia.

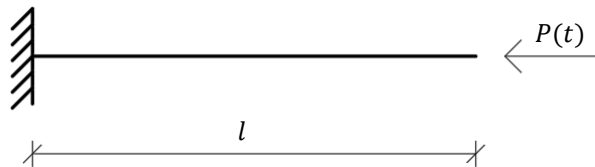
**6.5. PRZYKŁAD NR 3 – OBCIĄŻENIE PRĘTA SIŁĄ
PODŁUŻNĄ WYWOŁUJĄCE DRGANIA PRĘTA,
POWSTANIE ZMIENNEJ TEMPERATURY
I ZMIENNEGO STĘŻENIA SUBSTANCJI
DYFUNDUJĄCEJ**

Celem poniższych obliczeń jest wyznaczenie funkcji przemieszczeń podłużnych $u(X, t)$, zmian temperatury $\theta(X, t)$ i zmian stężenia substancji dyfundującej $c(X, t)$ oraz analiza otrzymanych wyników. Rozpatruje się stałowy pręt prosty (rys. 6.15) w osłonie izolacyjnej, sztywno zamocowany na jednym końcu, a na drugim obciążony siłą osiowo ściskającą opisaną następującą zależnością:

$$P(t) = P_0 H(t), \quad (6.43)$$

gdzie $H(t)$ jest funkcją Heaviside'a o następujących właściwościach:

$$H(t) = \begin{cases} 0 & \text{dla } t < 0 \\ 1 & \text{dla } t \geq 0 \end{cases} \quad (6.44)$$



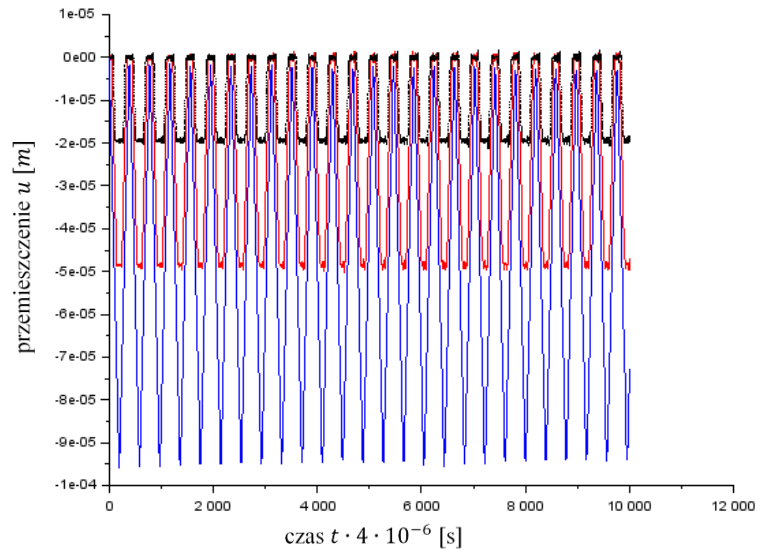
Rys. 6.15. Analizowany pręt

Przyjęto kolejno następujące wartości siły ściskającej:

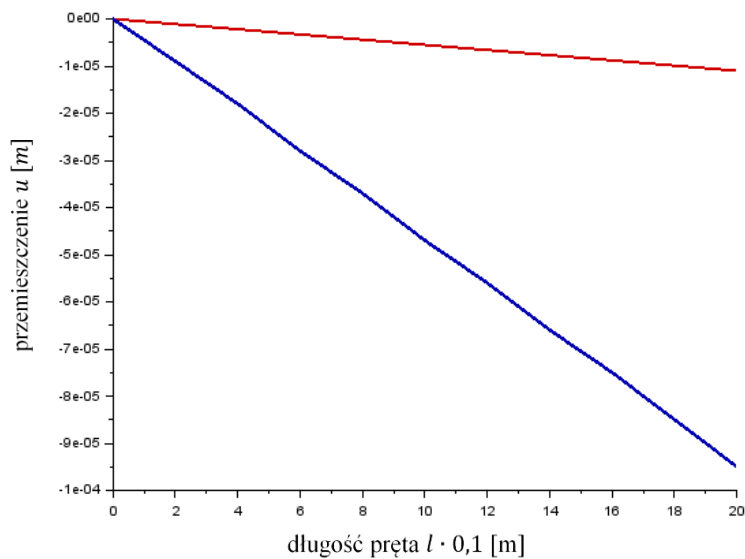
- $P_0 = 50 \text{ kN}$;
- $P_0 = 100 \text{ kN}$;
- $P_0 = 200 \text{ kN}$.

Wyniki obliczeń dla 10 tys. chwil obserwacji (0,04 s) przedstawiono na rys. 6.16÷6.34.

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

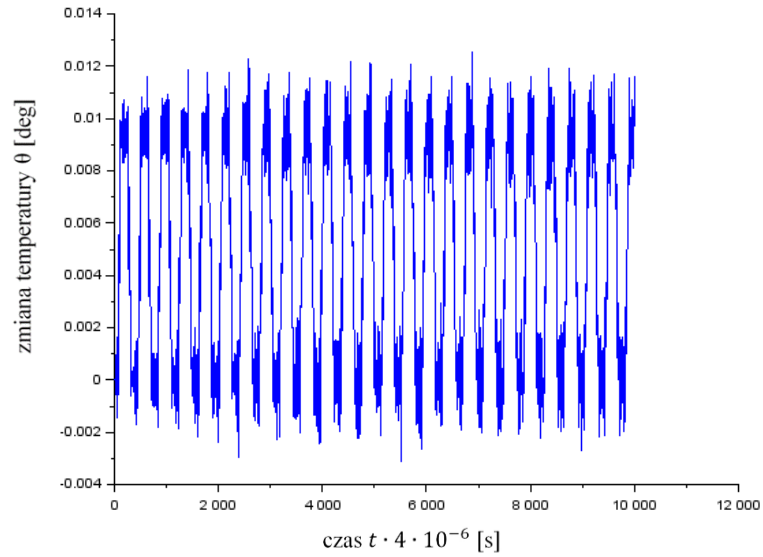


Rys. 6.16. Wykres przemieszczeń wybranych punktów wspornika przy obciążeniu o wartości 50 kN (kolor niebieski – punkt na swobodnym końcu wspornika; kolor czerwony – punkt w połowie długości wspornika; kolor czarny – punkt w odległości 0,2 m od miejsca zamocowania)

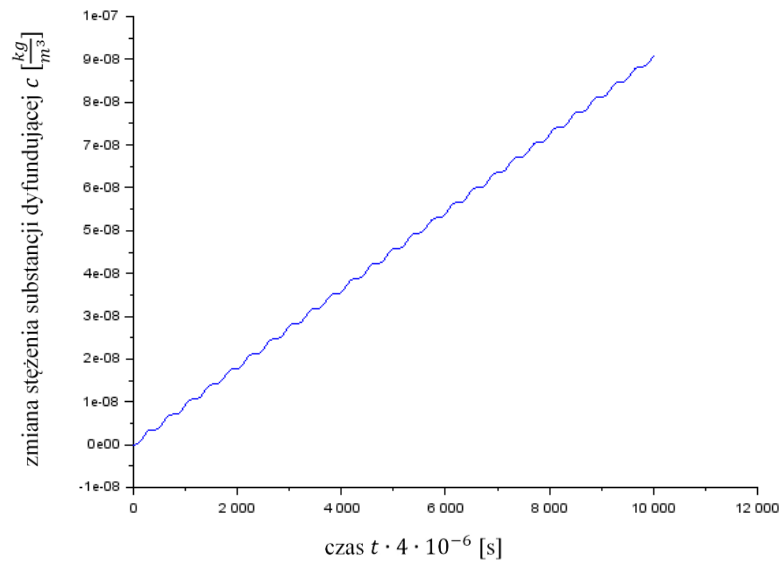


Rys. 6.17. Wykres przemieszczeń wspornika przy obciążeniu o wartości 50 kN w dwóch wybranych chwilach (kolor niebieski – wykres przemieszczeń w chwili $t = 0,0399$ s; kolor czerwony – wykres przemieszczeń w chwili $t = 0,02$ s)

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

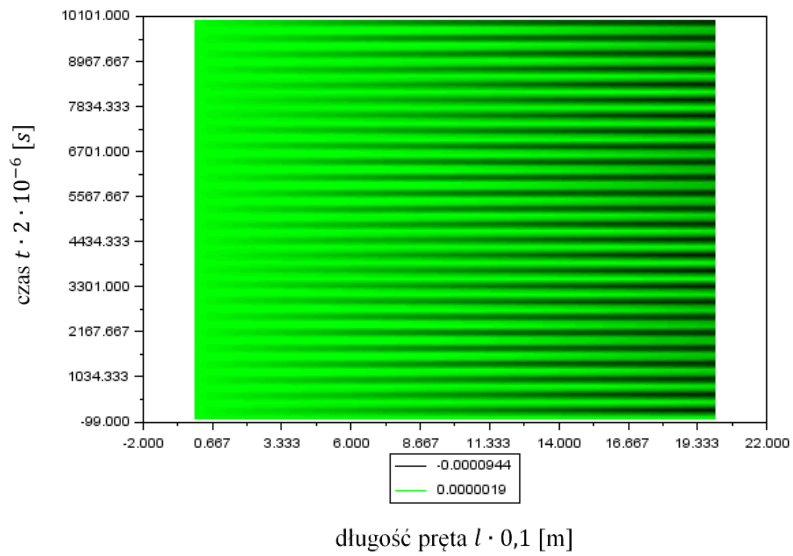


Rys. 6.18. Wykres zmian temperatury w punkcie końcowym wspornika przy obciążeniu o wartości 50 kN

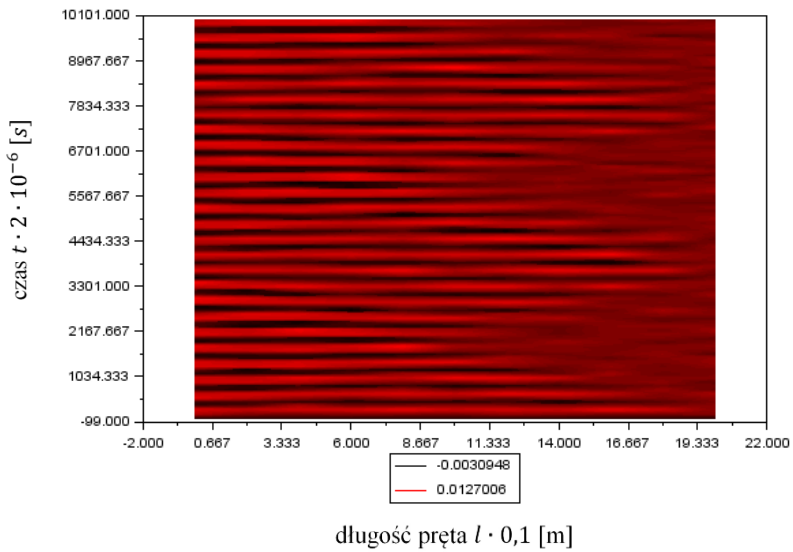


Rys. 6.19. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej w punkcie końcowym wspornika przy obciążeniu o wartości 50 kN

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

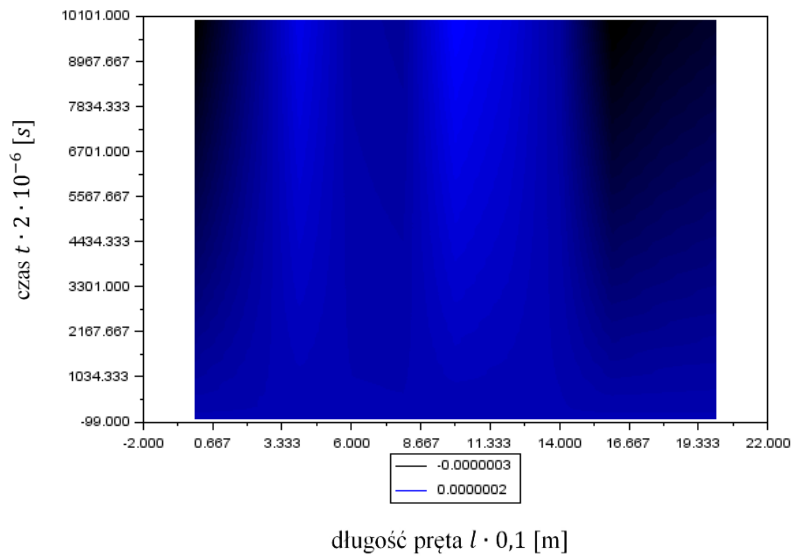


Rys. 6.20. Wykres zmian przemieszczeń wspornika u [m] w czasie przy obciążeniu o wartości 50 kN

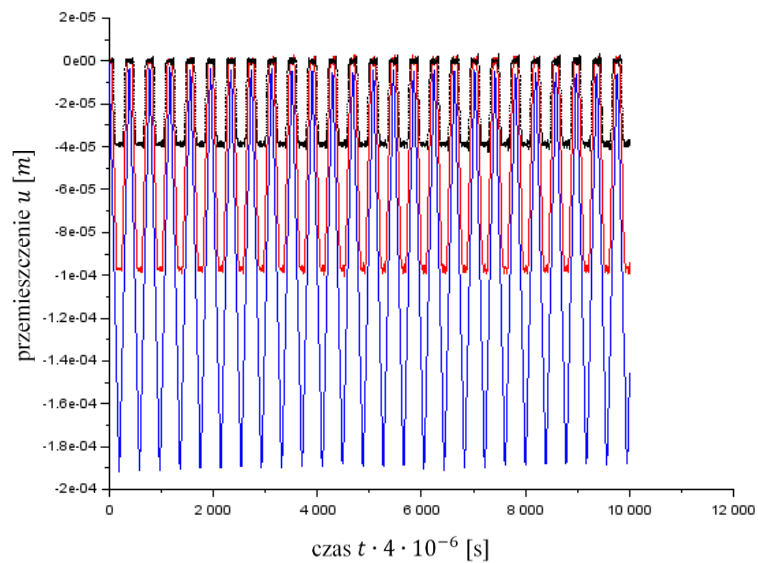


Rys. 6.21. Wykres zmian temperatury wspornika θ [deg] w czasie przy obciążeniu o wartości 50 kN

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

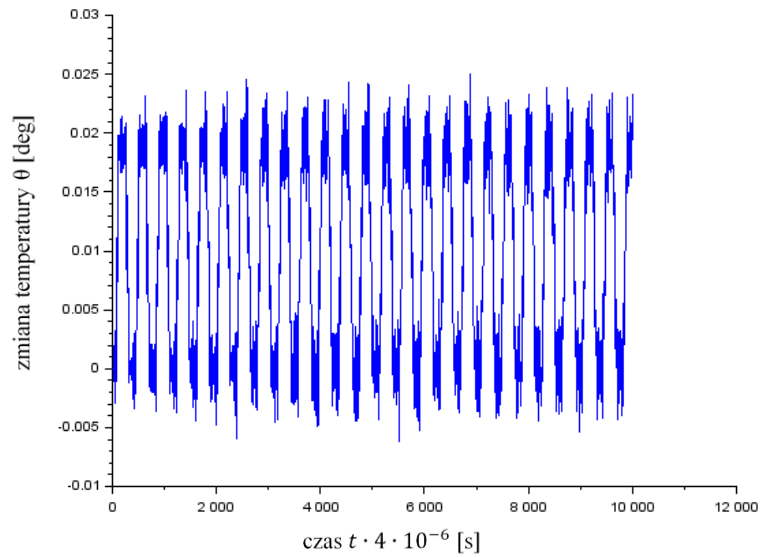


Rys. 6.22. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej wspornika $c \left[\frac{kg}{m^3} \right]$ w czasie przy obciążeniu o wartości 50 kN

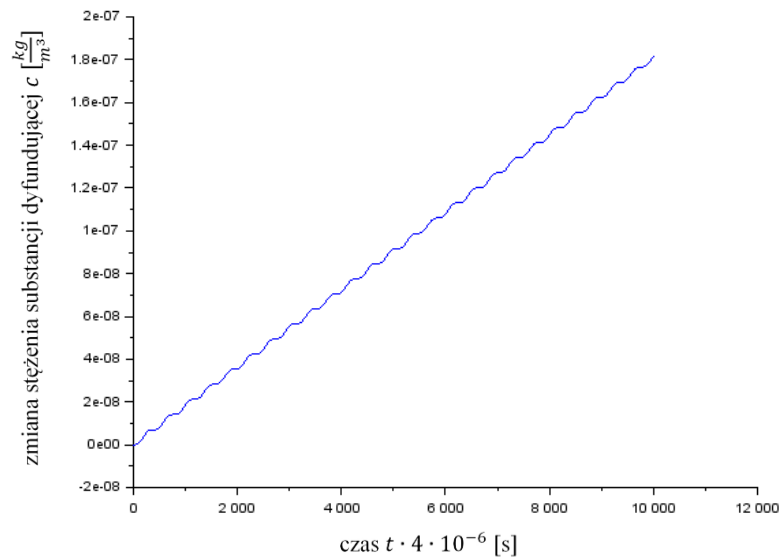


Rys. 6.23. Wykres przemieszczeń wybranych punktów wspornika przy obciążeniu o wartości 100 kN (kolor niebieski – punkt na swobodnym końcu wspornika; kolor czerwony – punkt w połowie długości wspornika; kolor czarny – punkt w odległości 0,2 m od miejsca zamocowania)

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

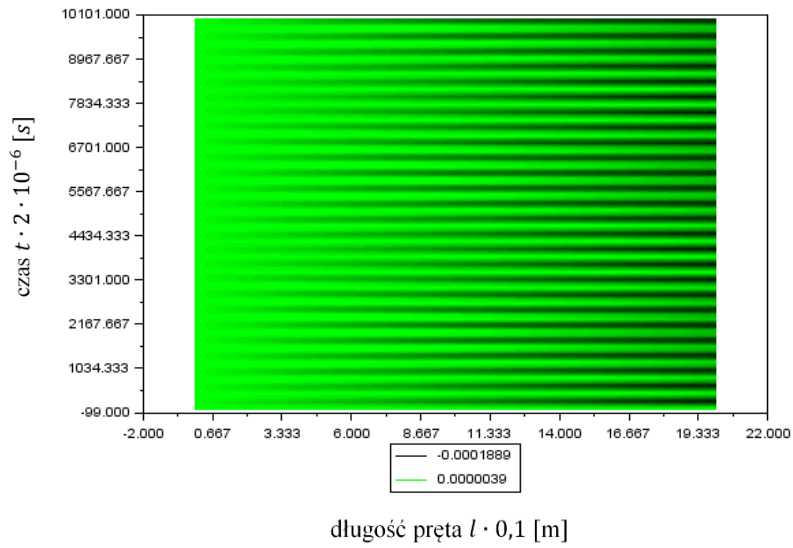


Rys. 6.24. Wykres zmian temperatury w punkcie końcowym wspornika przy obciążeniu o wartości 100 kN

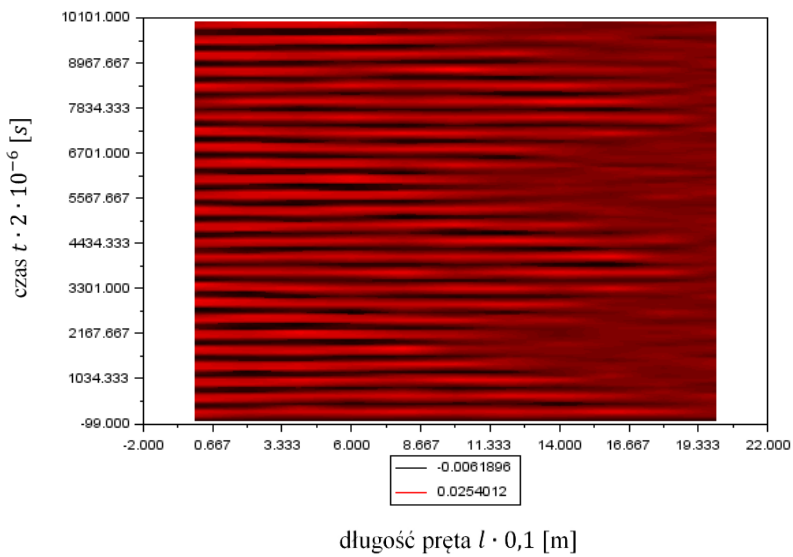


Rys. 6.25. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej w punkcie końcowym wspornika przy obciążeniu o wartości 100 kN

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

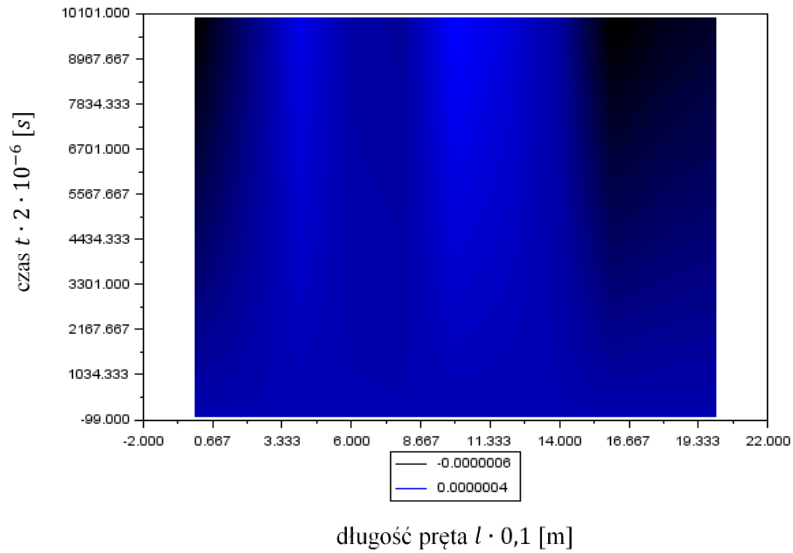


Rys. 6.26. Wykres zmian przemieszczeń wspornika u [m] w czasie przy obciążeniu o wartości 100 kN

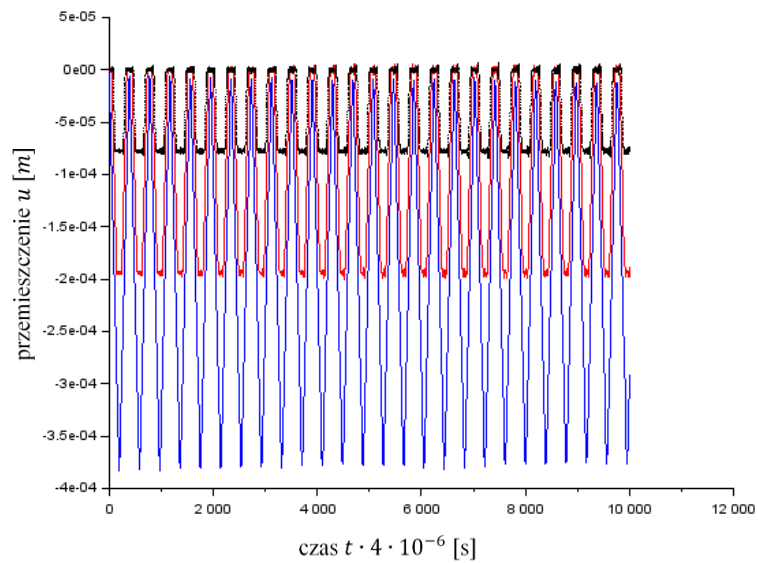


Rys. 6.27. Wykres zmian temperatury wspornika θ [deg] w czasie przy obciążeniu o wartości 100 kN

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

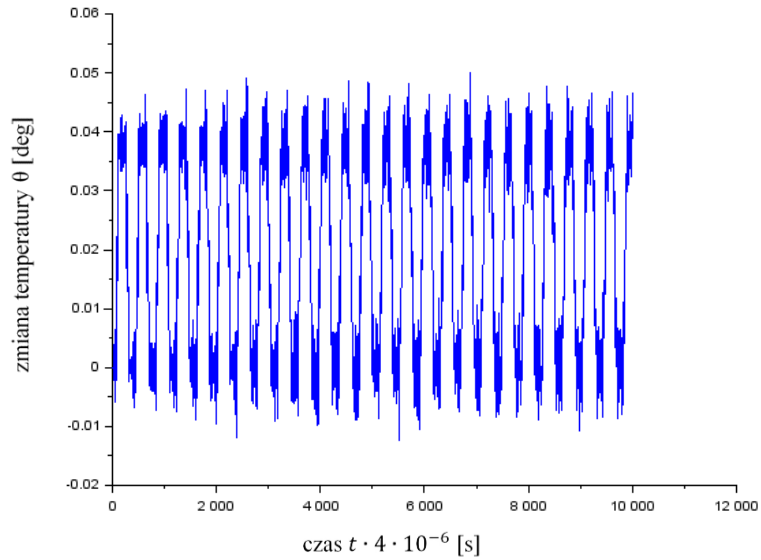


Rys. 6.28. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej wspornika $c \left[\frac{kg}{m^3} \right]$ w czasie przy obciążeniu o wartości 100 kN

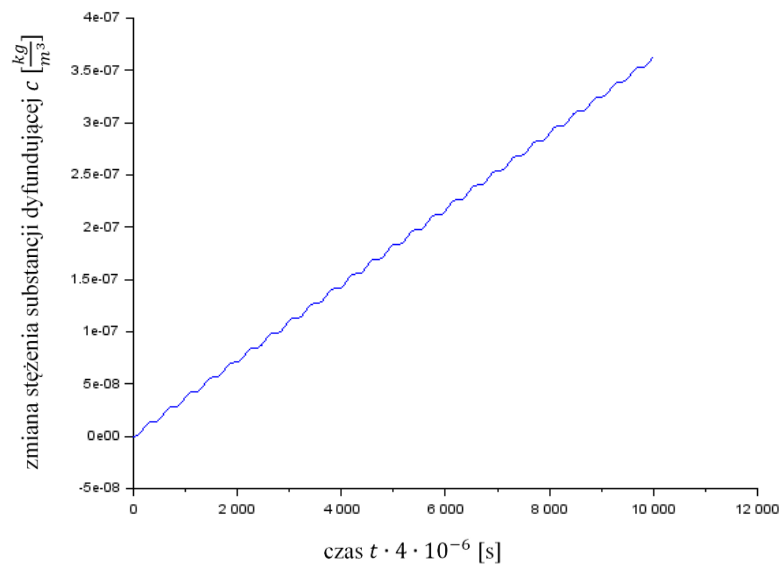


Rys. 6.29. Wykres przemieszczeń wybranych punktów wspornika przy obciążeniu o wartości 200 kN (kolor niebieski – punkt na swobodnym końcu wspornika; kolor czerwony – punkt w połowie długości wspornika; kolor czarny – punkt w odległości 0,2 m od miejsca zamocowania)

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

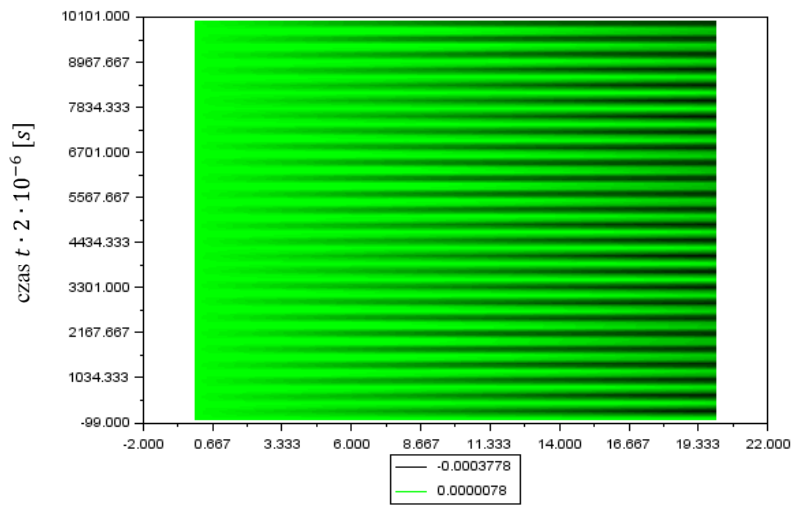


Rys. 6.30. Wykres zmian temperatury w punkcie końcowym wspornika przy obciążeniu o wartości 200 kN



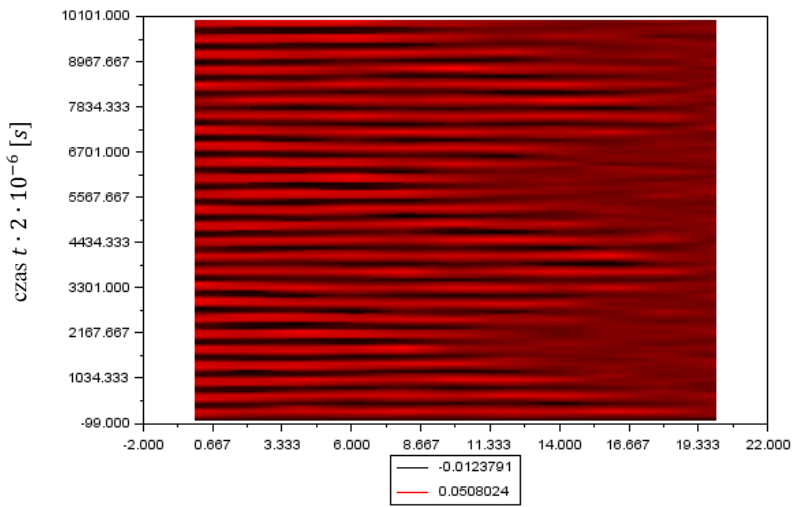
Rys. 6.31. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej w punkcie końcowym wspornika przy obciążeniu o wartości 200 kN

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych



dlugość pręta $l \cdot 0,1$ [m]

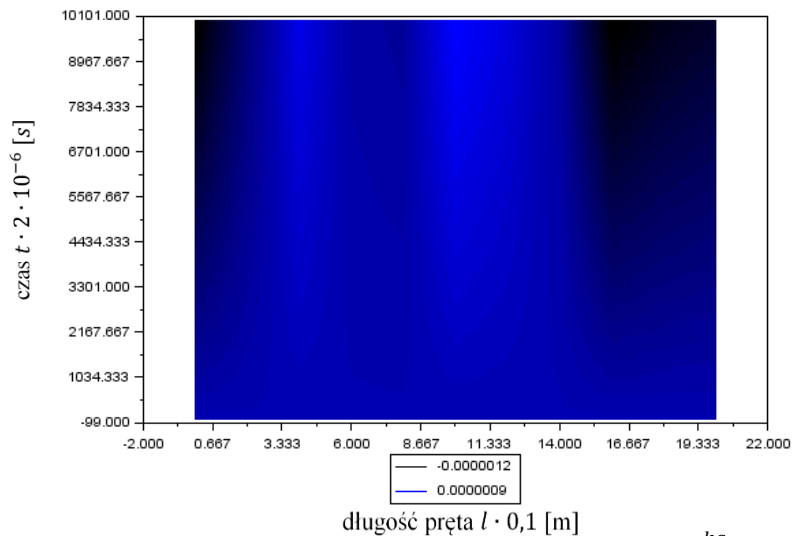
Rys. 6.32. Wykres zmian przemieszczeń wspornika u [m] w czasie przy obciążeniu o wartości 200 kN



dlugość pręta $l \cdot 0,1$ [m]

Rys. 6.33. Wykres zmian temperatury wspornika θ [deg] w czasie przy obciążeniu o wartości 200 kN

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych



Rys. 6.34. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej współnika c [$\frac{kg}{m^3}$] w czasie przy obciążeniu o wartości 200 kN

Poniżej formułuje się następujące wnioski wynikające z analizy Przykładu Nr 3:

- Obliczenia przeprowadzono dla pręta sztywno zamocowanego na jednym końcu, a na drugim końcu obciążonego siłą ściskającą. Do pręta nie przyłożono źródeł ciepła ani substancji dyfundującej. W przykładzie rozpatruje się proces sprzężony. Celem obliczeń było ustalenie wpływu obciążenia zewnętrznego na generowanie i rozkład temperatury i stężenia substancji dyfundującej w pręcie oraz wpływu sprzężenia na rozkład przemieszczeń.
- Z przeprowadzonych analiz wynika, że pod wpływem obciążenia zewnętrznego temperatura i stężenie substancji dyfundującej w pręcie zmieniają się w sposób harmoniczny. Okresy zmian temperatury i stężenia substancji dyfundującej są takie same jak okres drgań. Jest to uzasadnione, ponieważ oscylacje temperatury i stężenia substancji dyfundującej towarzyszące drganiom ciała są bezpośrednio związane ze zmianami objętości tego ciała.
- Przyrosty temperatury i stężenia substancji dyfundującej są proporcjonalne do wzrostu wartości obciążenia zewnętrznego (przy dwukrotnie zwiększonej wartości obciążenia zewnętrznego obserwuje się dwukrotnie większą zmianę temperatury i stężenia substancji dyfundującej).
- W celu określenia wpływu sprzężenia na rozkład przemieszczeń, porównano wartość amplitudy przemieszczeń końca współnika obciążonego siłą 50 kN w układzie bez uwzględnia sprzężenia ($u = 9,74 \cdot 10^{-5}$ m, por. Przykład Nr 2) z wartością otrzymaną przy uwzględnieniu sprzężenia ($u = 9,68 \cdot 10^{-5}$ m). Analiza ta oznacza względną różnicę wynoszącą 0,6%.

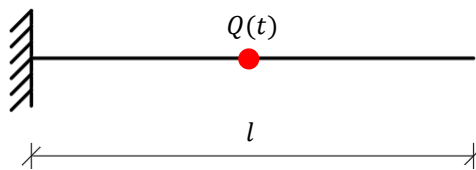
6.6. PRZYKŁAD NR 4 – ŹRÓDŁO CIEPŁA WYWOŁUJĄCE DRGANIA PRĘTA, POWSTANIE ZMIENNEJ TEMPERATURY I ZMIENNEGO STĘŻENIA SUBSTANCJI DYFUNDUJĄCEJ

Celem poniższych obliczeń jest wyznaczenie funkcji przemieszczeń podłużnych $u(X,t)$, zmian temperatury $\theta(X,t)$ i zmian stężenia substancji dyfundującej $c(X,t)$ oraz analiza otrzymanych wyników. Rozpatruje się stalowy pręt prosty (rys. 6.35) w osłonie izolacyjnej, sztywno zamocowany na jednym końcu, a w połowie długości przyłożono źródło ciepła opisaną następującą zależnością:

$$Q(t) = Q_0 H(t), \quad (6.45)$$

gdzie $H(t)$ jest funkcją Heaviside'a o następujących właściwościach:

$$H(t) = \begin{cases} 0 & \text{dla } t < 0 \\ 1 & \text{dla } t \geq 0 \end{cases} \quad (6.46)$$



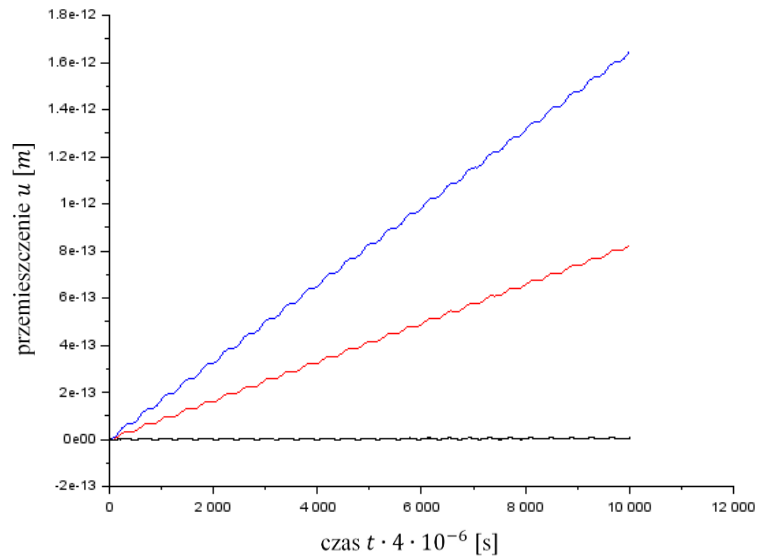
Rys. 6.35. Analizowany pręt

Przyjęto kolejno następujące moce źródła ciepła:

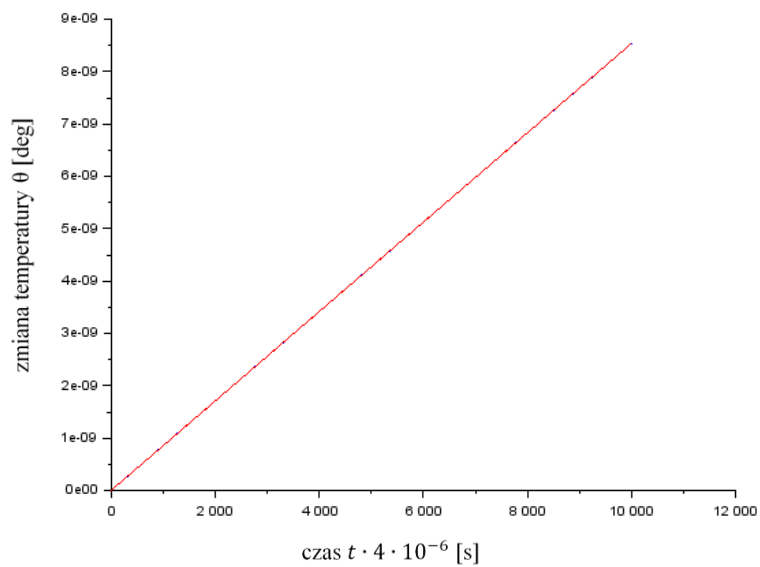
- $Q_0 = 500 \text{ W}$;
- $Q_0 = 1000 \text{ W}$;
- $Q_0 = 2000 \text{ W}$.

Wyniki obliczeń dla 10 tys. chwil obserwacji (0,04 s) przedstawiono na rys. 6.36÷6.57.

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

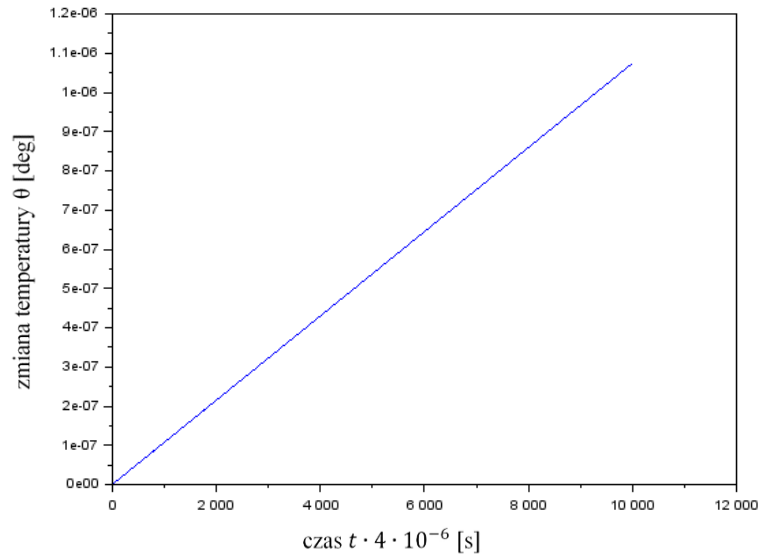


Rys. 6.36. Wykres przemieszczeń wybranych punktów wspornika przy źródle ciepła o mocy 500 W (kolor niebieski – punkt na swobodnym końcu wspornika; kolor czerwony – punkt w połowie długości wspornika; kolor czarny – punkt w odległości 0,2 m od miejsca zamocowania)

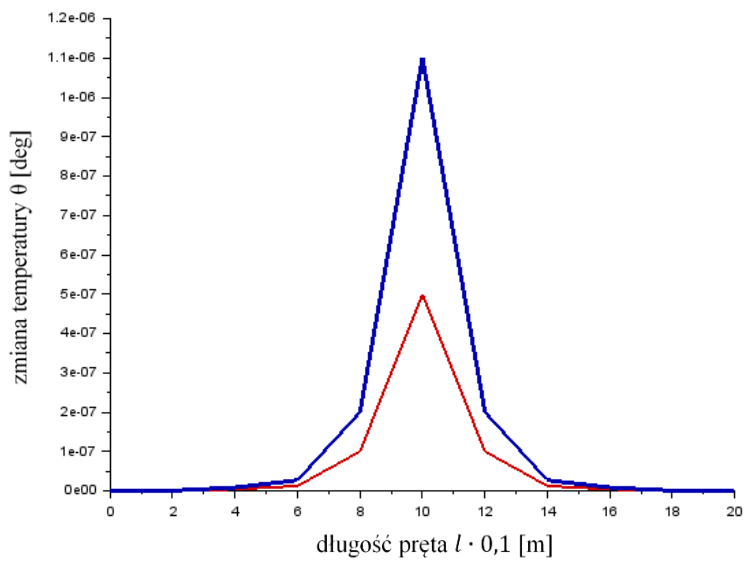


Rys. 6.37. Wykres zmian temperatury na końcach wspornika przy źródle ciepła o mocy 500 W

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

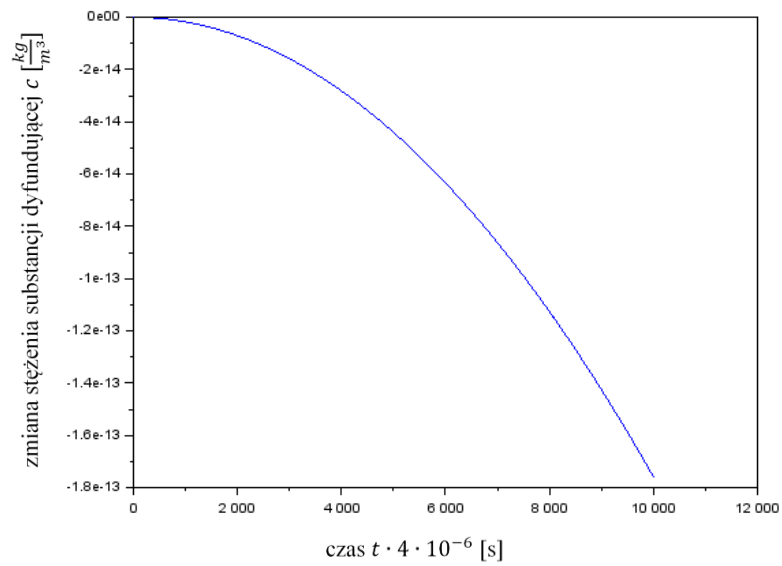


Rys. 6.38. Wykres zmian temperatury w połowie długości wspornika przy źródle ciepła o mocy 500 W

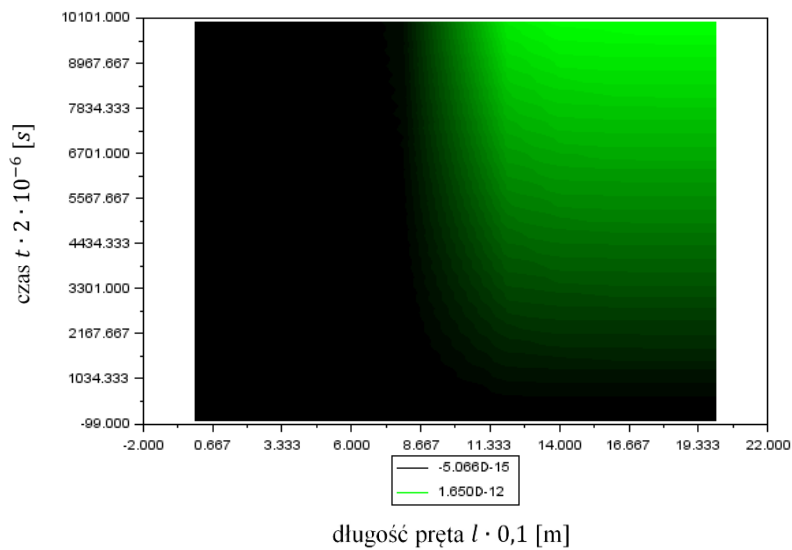


Rys. 6.39. Wykres zmian temperatury wspornika przy źródle ciepła o mocy 500 W w dwóch wybranych chwilach (kolor niebieski – wykres zmian temperatury w chwili $t = 0,04$ s; kolor czerwony – wykres zmian temperatury w chwili $t = 0,02$ s)

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

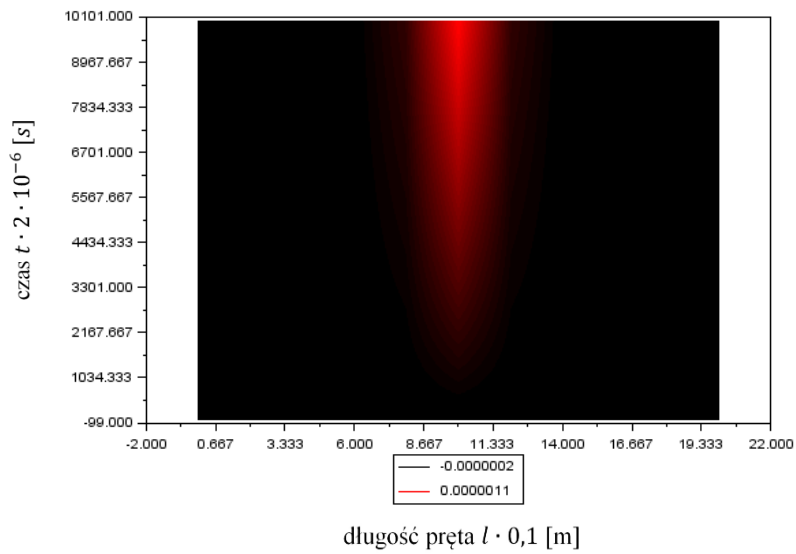


Rys. 6.40. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej w połowie długości wspornika przy źródle ciepła o mocy 500 W

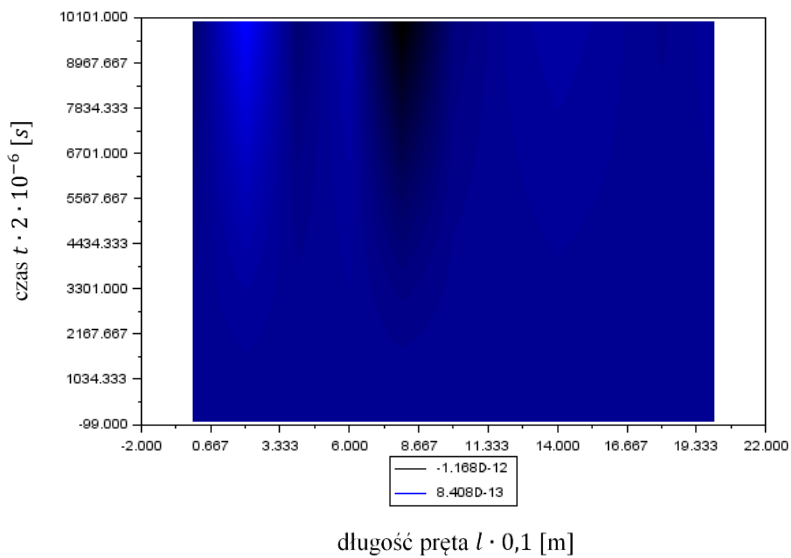


Rys. 6.41. Wykres zmian przemieszczeń wspornika u [m] w czasie źródle ciepła o mocy 500 W

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

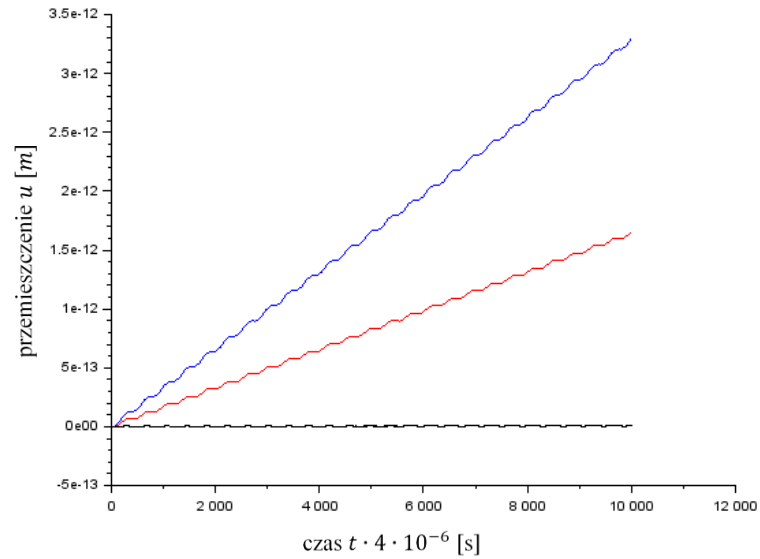


Rys. 6.42. Wykres zmian temperatury współnika θ [deg] w czasie przy źródle ciepła o mocy 500 W

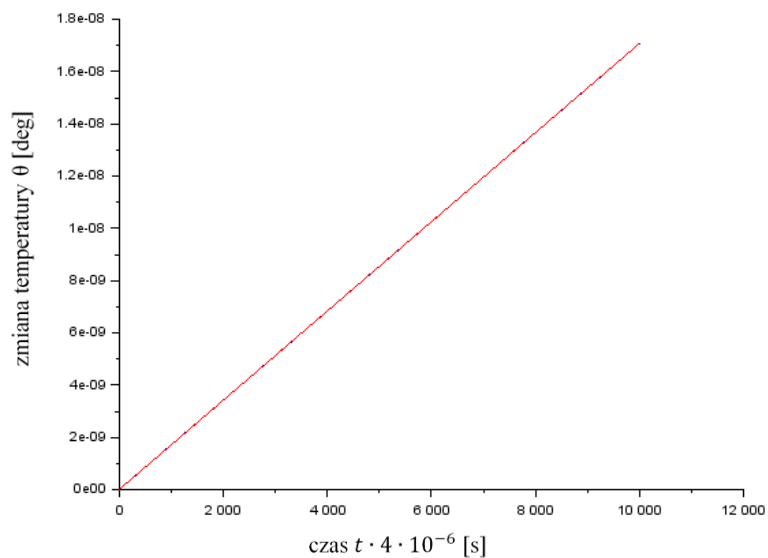


Rys. 6.43. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej współnika c [$\frac{kg}{m^3}$] w czasie przy źródle ciepła o mocy 500 W

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

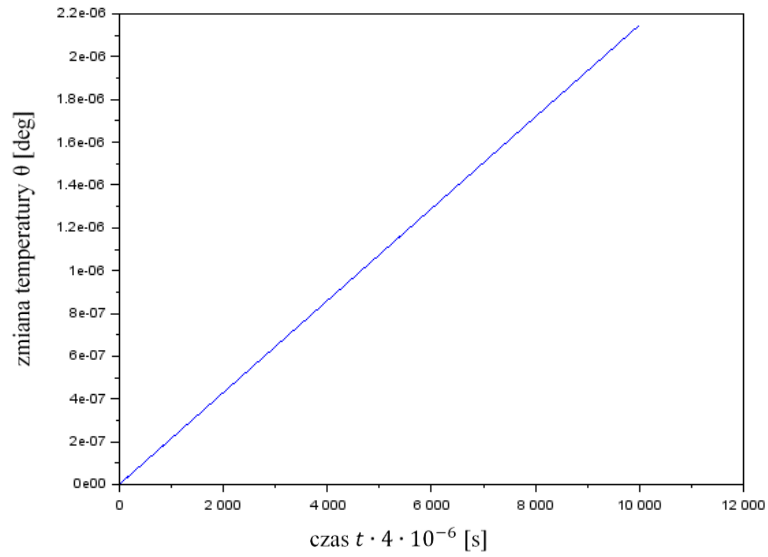


Rys. 6.44. Wykres przemieszczeń wybranych punktów wspornika przy źródle ciepła o mocy 1000 W (kolor niebieski – punkt na swobodnym końcu wspornika; kolor czerwony – punkt w połowie długości wspornika; kolor czarny – punkt w odległości 0,2 m od miejsca zamocowania)

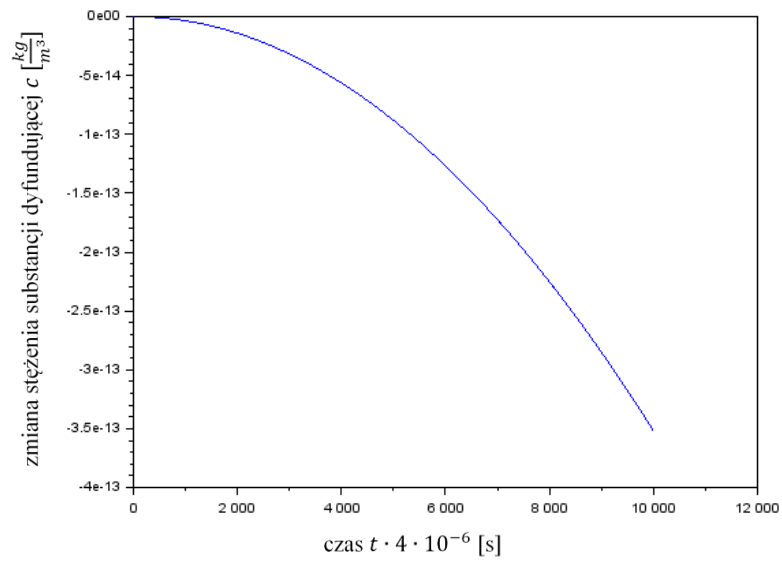


Rys. 6.45. Wykres zmian temperatury na końcach wspornika przy źródle ciepła o mocy 1000 W

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

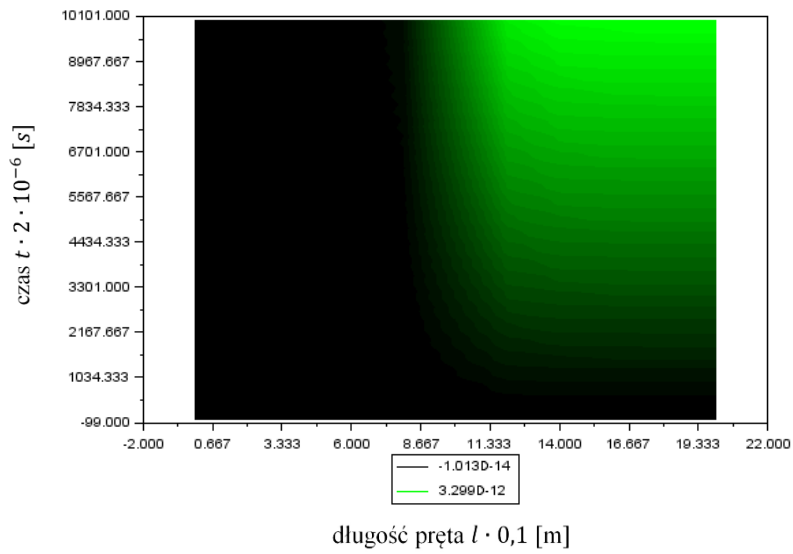


Rys. 6.46. Wykres zmian temperatury w połowie długości wspornika przy źródle ciepła o mocy 1000 W

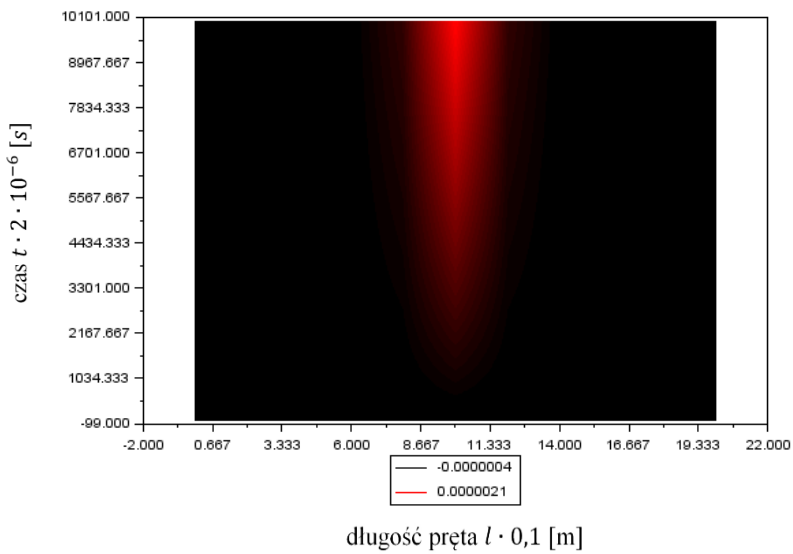


Rys. 6.47. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej w połowie długości wspornika przy źródle ciepła o mocy 1000 W

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

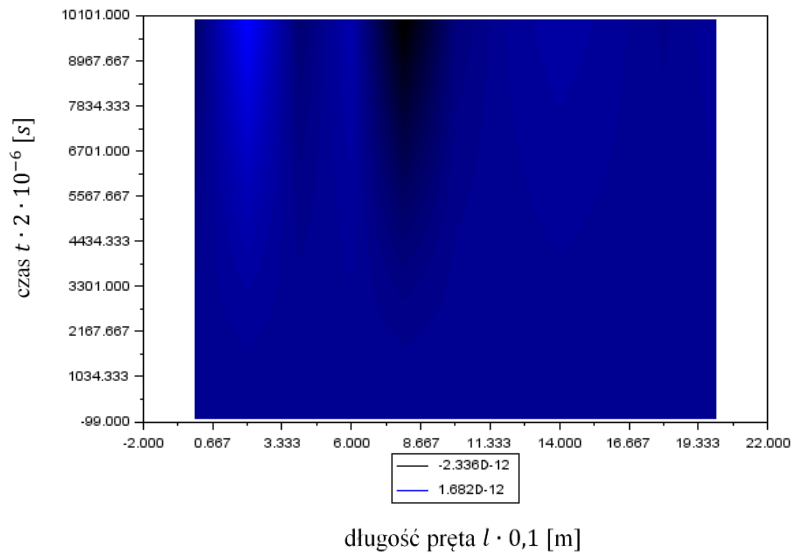


Rys. 6.48. Wykres zmian przemieszczeń wspornika u [m] w czasie źródle ciepła o mocy 1000 W

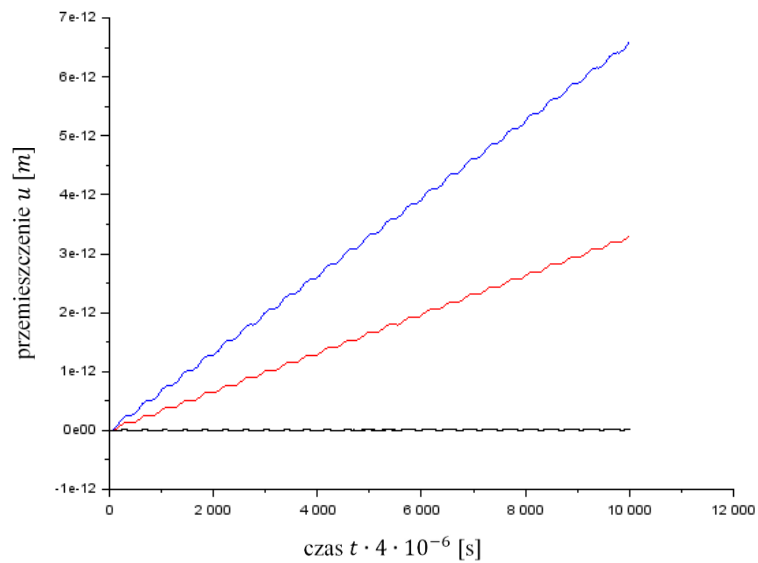


Rys. 6.49. Wykres zmian temperatury wspornika θ [deg] w czasie przy źródle ciepła o mocy 1000 W

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

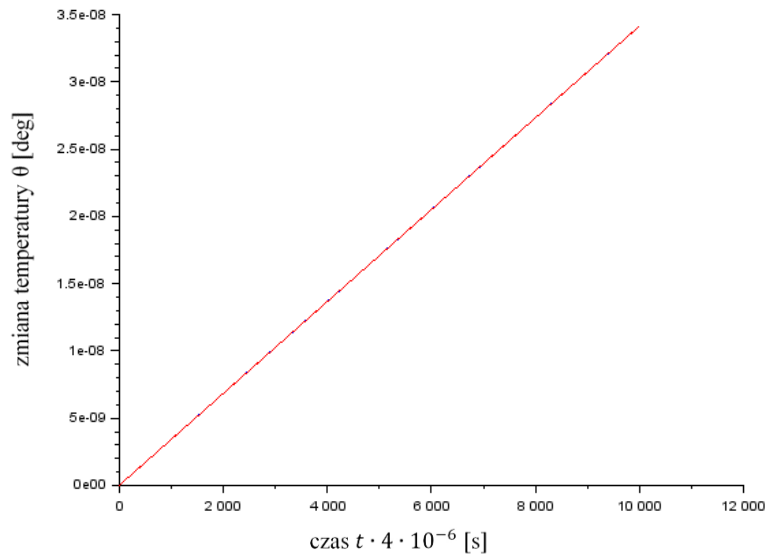


Rys. 6.50. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej c [$\frac{kg}{m^3}$] w czasie przy źródle ciepła o mocy 1000 W

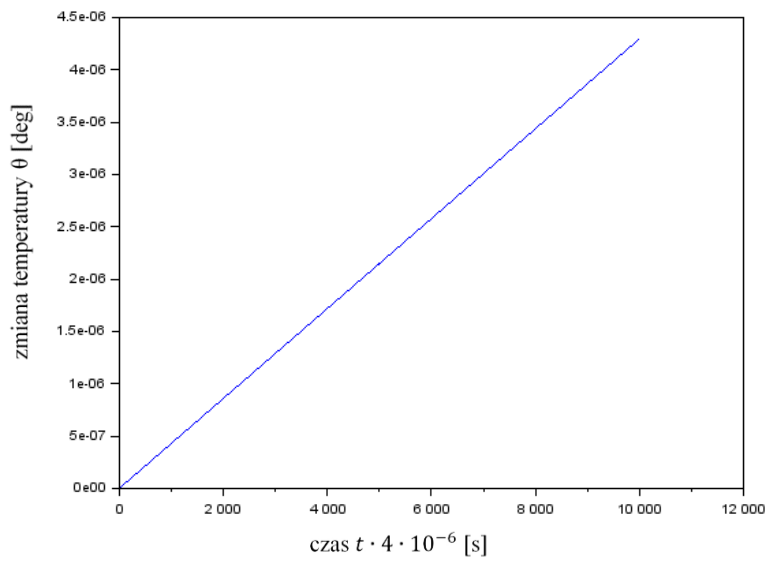


Rys. 6.51. Wykres przemieszczeń wybranych punktów współnika przy źródle ciepła o mocy 2000 W (kolor niebieski – punkt na swobodnym końcu współnika; kolor czerwony – punkt w połowie długości współnika; kolor czarny – punkt w odległości 0,2 m od miejsca zamocowania)

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

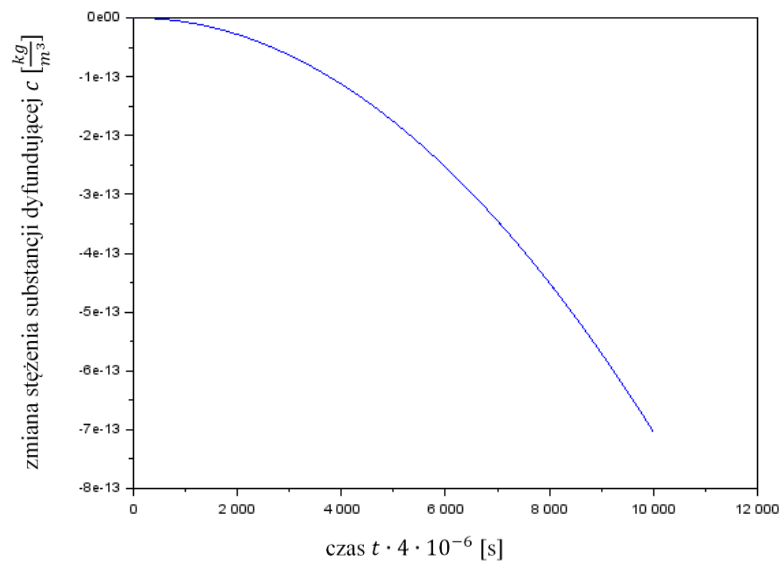


Rys. 6.52. Wykres zmian temperatury na końcach wspornika przy źródle ciepła o mocy 2000 W

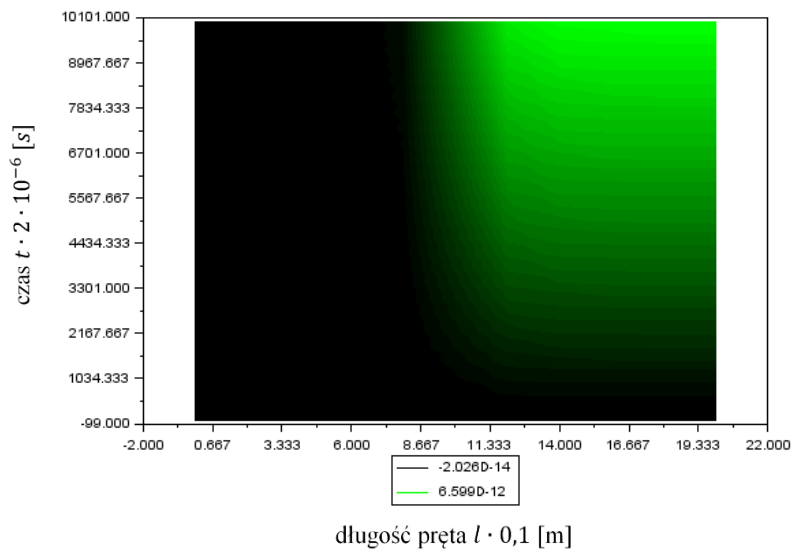


Rys. 6.53. Wykres zmian temperatury w połowie długości wspornika przy źródle ciepła o mocy 2000 W

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

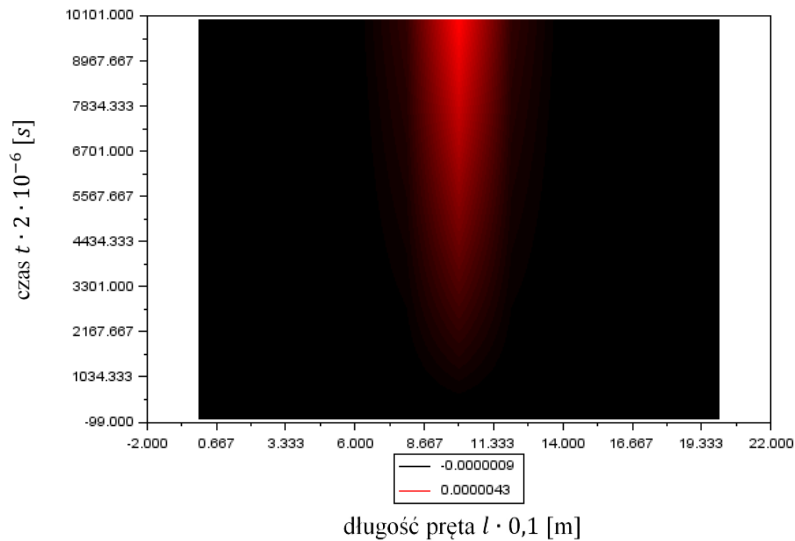


Rys. 6.54. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej w połowie długości wspornika przy źródle ciepła o mocy 2000 W

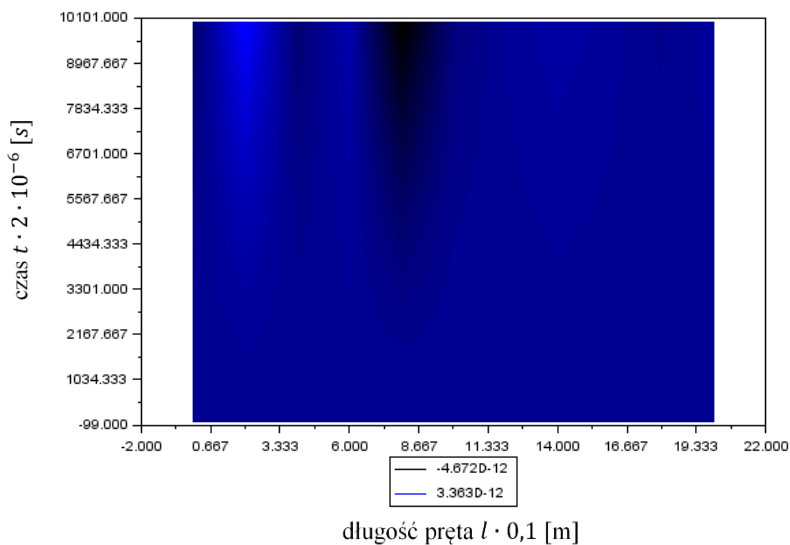


Rys. 6.55. Wykres zmian przemieszczeń wspornika u [m] w czasie źródle ciepła o mocy 2000 W

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych



Rys. 6.56. Wykres zmian temperatury współnika θ [deg] w czasie przy źródle ciepła o mocy 2000 W



Rys. 6.57. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej współnika c [$\frac{kg}{m^3}$] w czasie przy źródle ciepła o mocy 2000 W

Poniżej formułuje się następujące wnioski wynikające z analizy Przykładu Nr 4:

- Obliczenia przeprowadzono dla pręta sztywno zamocowanego na jednym końcu, a w połowie długości pręta przyłożono źródło ciepła o określonej mocy. Do pręta nie przyłożono obciążeń zewnętrznych ani źródeł substancji dyfundującej. W przykładzie rozpatruje się proces sprzężony. Celem obliczeń było ustalenie wpływu źródła ciepła na

generowanie i rozkład przemieszczeń oraz stężenia substancji dyfundującej w pręcie.

- Na skutek działania źródła ciepła, w pręcie wygenerowały się gradienty temperatury, przy czym najmocniej nagrzewa się punkt w miejscu przyłożenia źródła ciepła a najslabiej nagrzewają się końce pręta. Źródło ciepła przyłożono dokładnie w połowie pręta, stąd na obu końcach przyrosty temperatur pokrywają się. Potwierdza to również to, że przepływ ciepła nie zależy od sposobu zamocowania pręta (wykres zmian temperatury po długości pręta jest symetryczny względem punktu przyłożenia źródła ciepła, zarówno na końcu zamocowanym, jak i na końcu swobodnym uzyskano identyczne wartości przyrostu temperatury).
- Z porównania wykresów dla różnych mocy źródła ciepła wynika jednoznacznie, że proces dyfuzji zachodzi szybciej w wyższej temperaturze.
- Z przeprowadzonych analiz wynika, że przyrosty przemieszczeń, temperatury i stężenia substancji dyfundującej zmieniają się wprost proporcjonalnie do wzrostu mocy źródła ciepła.

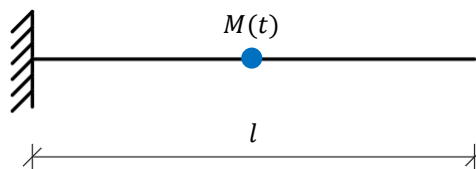
6.7. PRZYKŁAD NR 5 – ŹRÓDŁO SUBSTANCJI DYFUNDUJĄCEJ WYWOŁUJĄCE DRGANIA PRĘTA, POWSTANIE ZMIENNEJ TEMPERATURY I ZMIENNEGO STĘŻENIA SUBSTANCJI DYFUNDUJĄCEJ

Celem poniższych obliczeń jest wyznaczenie funkcji przemieszczeń podłużnych $u(X, t)$, zmian temperatury $\theta(X, t)$ i zmian stężenia substancji dyfundującej $c(X, t)$ oraz analiza otrzymanych wyników. Rozpatruje się stalowy pręt prosty (rys. 6.58) w osłonie izolacyjnej, sztywno zamocowany na jednym końcu, a w połowie długości przyłożono źródło substancji dyfundującej opisane następującą zależnością:

$$M(t) = M_0 H(t), \quad (6.47)$$

gdzie $H(t)$ jest funkcją Heaviside'a o następujących właściwościach:

$$H(t) = \begin{cases} 0 & \text{dla } t < 0 \\ 1 & \text{dla } t \geq 0 \end{cases} \quad (6.48)$$



Rys. 6.58. Analizowany pręt

Przyjęto kolejno następujące wydajności źródła substancji dyfundującej:

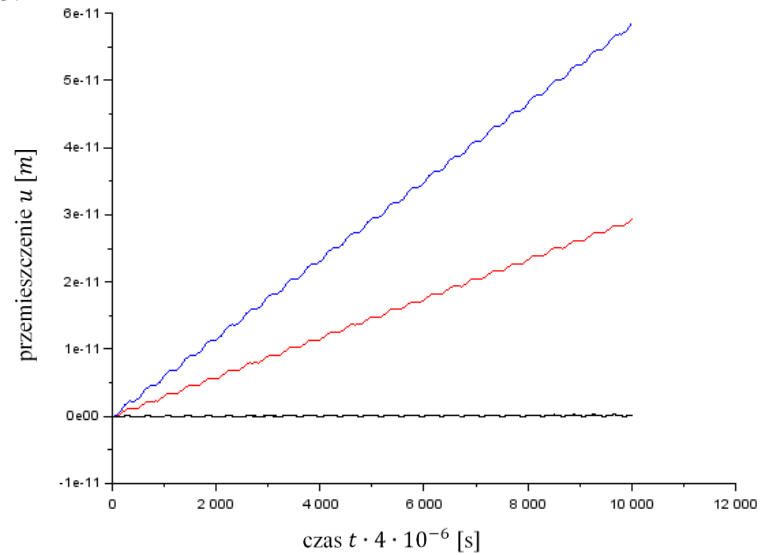
- $M_0 = 5 \text{ g/s}$;

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

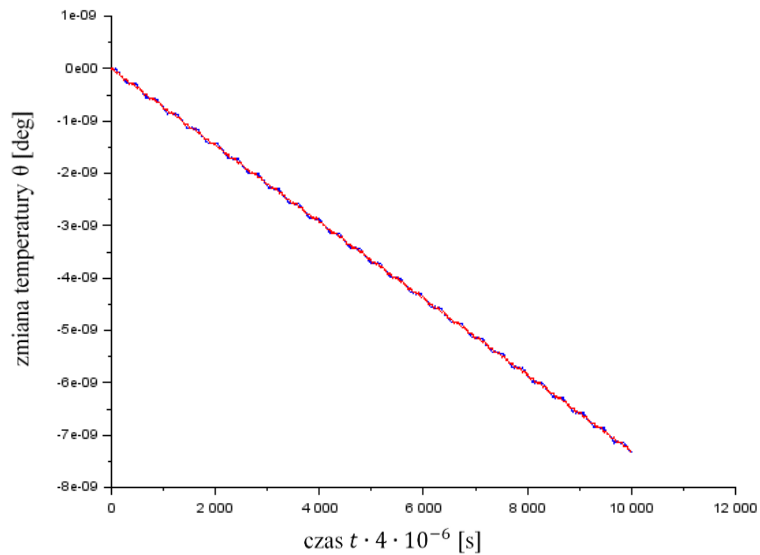
➤ $M_0 = 10 \text{ g/s}$;

➤ $M_0 = 20 \text{ g/s}$.

Wyniki obliczeń dla 10 tys. chwil obserwacji (0,04 s) przedstawiono na rys. 6.59÷6.83.

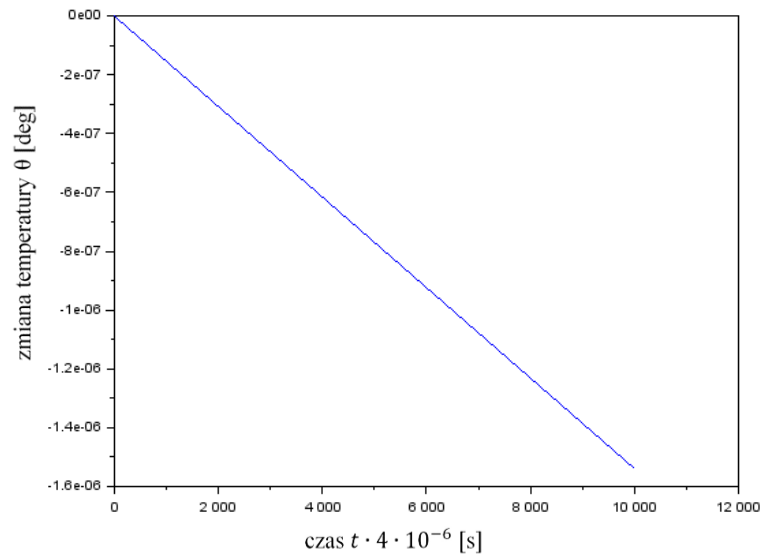


Rys. 6.59. Wykres przemieszczeń wybranych punktów wspornika przy źródle masy o wydajności 5 g/s (kolor niebieski – punkt na swobodnym końcu wspornika; kolor czerwony – punkt w połowie długości wspornika; kolor czarny – punkt w odległości 0,2 m od miejsca zamocowania)

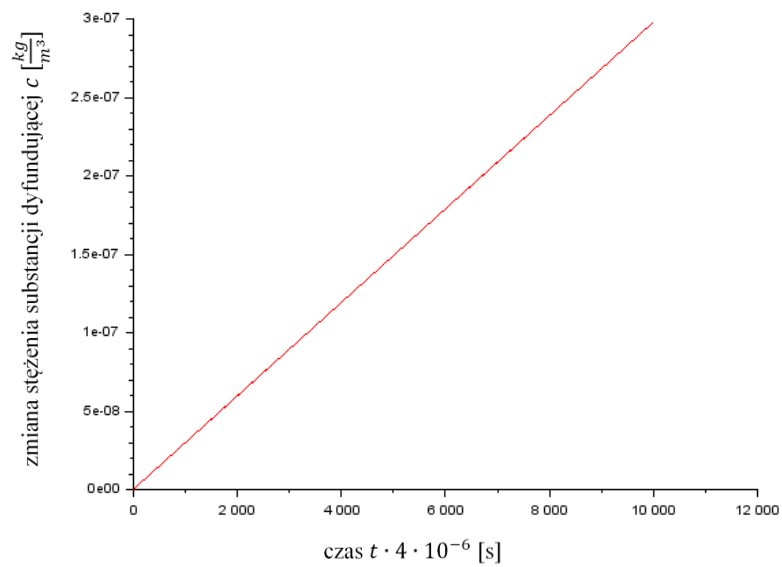


Rys. 6.60. Wykres zmian temperatury na końcach wspornika przy źródle masy o wydajności 5 g/s

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

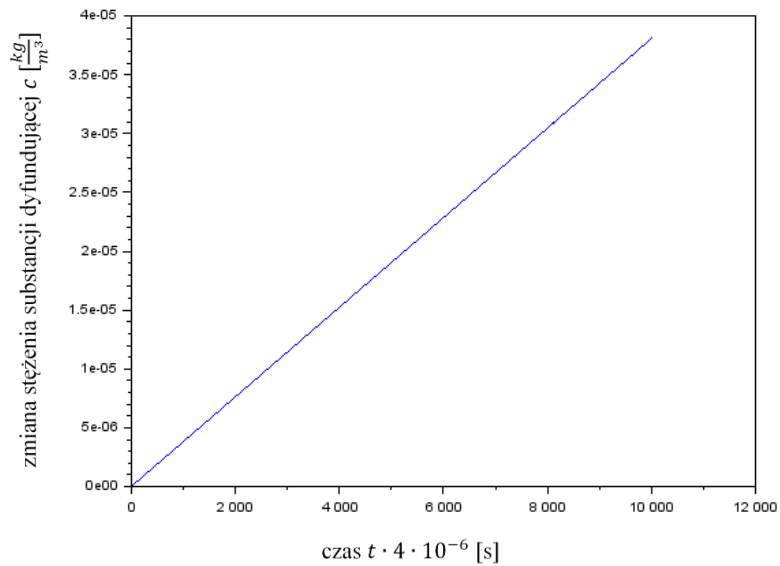


Rys. 6.61. Wykres zmian temperatury w połowie długości wspornika przy źródle masy o wydajności 5 g/s

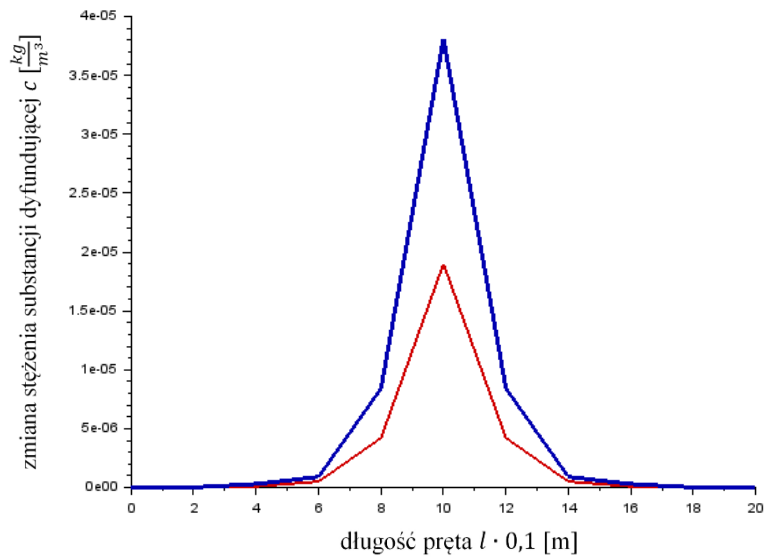


Rys. 6.62. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej na końcach wspornika przy źródle masy o wydajności 5 g/s

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

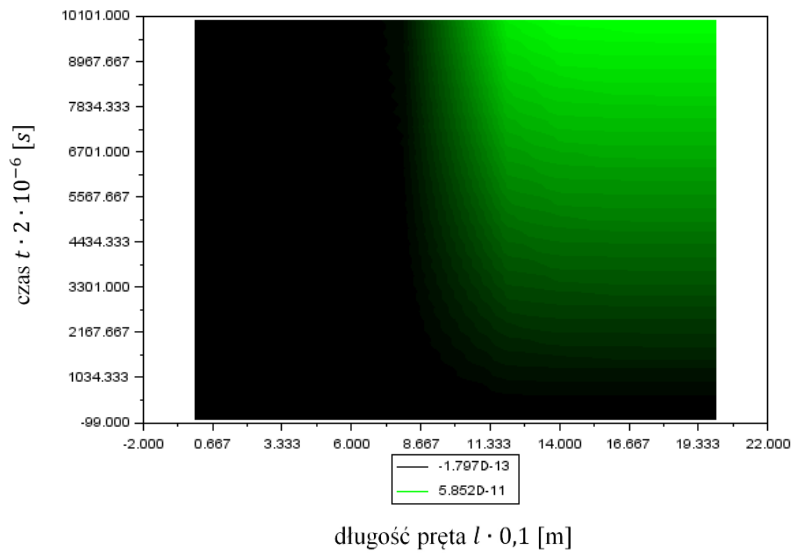


Rys. 6.63. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej w połowie długości wspornika przy źródle masy o wydajności 5 g/s

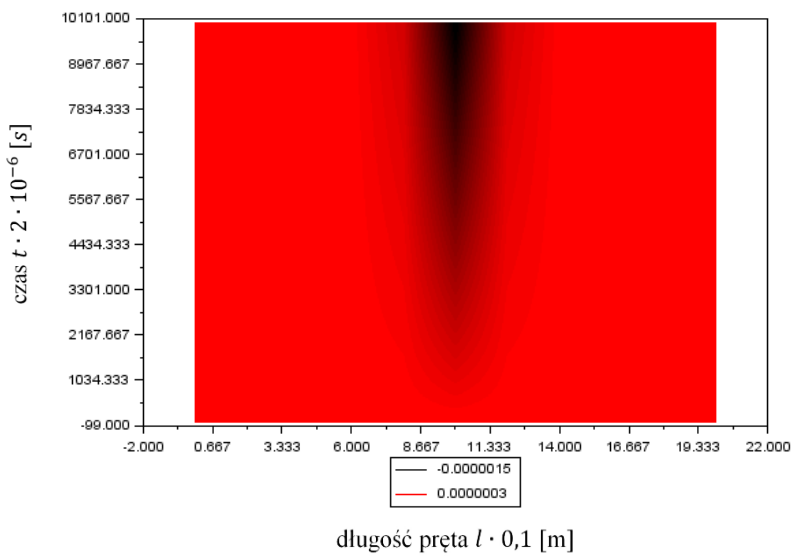


Rys. 6.64. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej wspornika przy źródle masy o wydajności 5 g/s w dwóch wybranych chwilach (kolor niebieski – wykres zmian stężenia substancji dyfundującej w chwili $t = 0,04$ s; kolor czerwony – wykres zmian stężenia substancji dyfundującej w chwili $t = 0,02$ s)

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

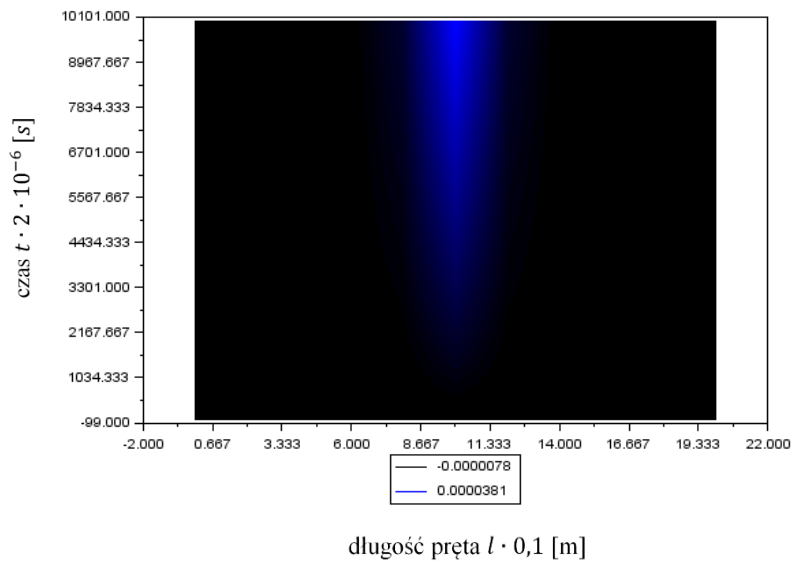


Rys. 6.65. Wykres zmian przemieszczeń wspornika u [m] w czasie przy źródle masy o wydajności 5 g/s

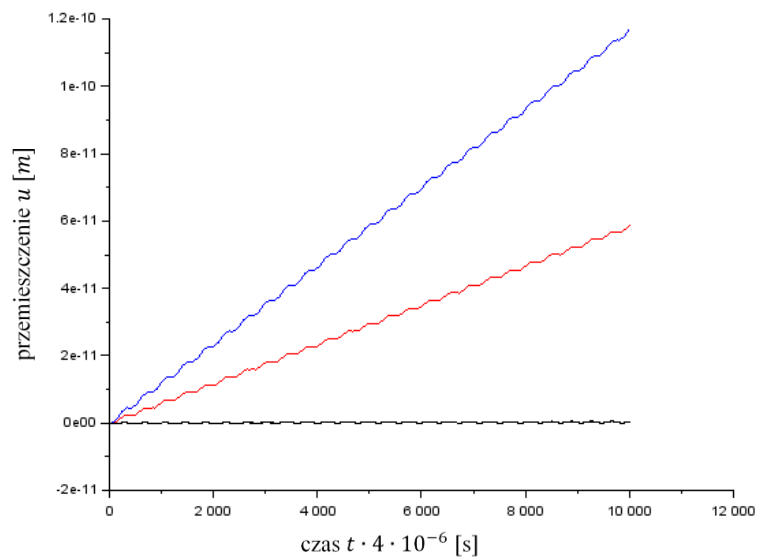


Rys. 6.66. Wykres zmian temperatury wspornika θ [deg] w czasie przy źródle masy o wydajności 5 g/s

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

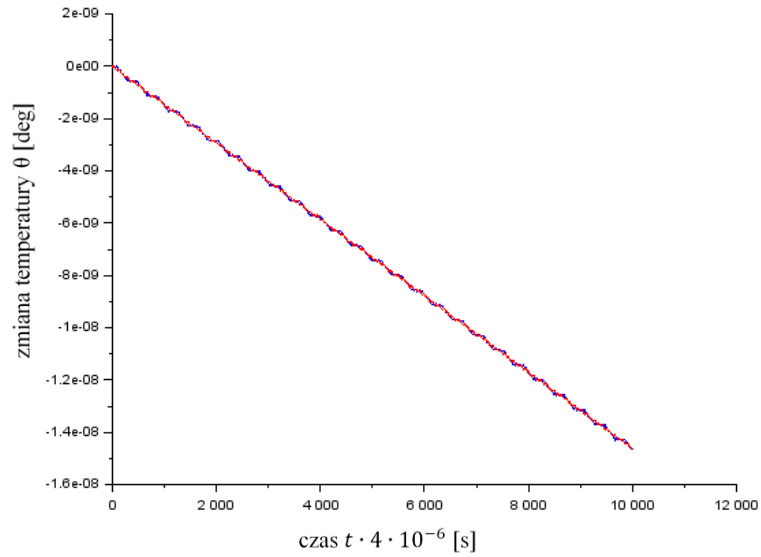


Rys. 6.67. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej współnika $c \left[\frac{kg}{m^3} \right]$ w czasie przy źródle masy o wydajności 5 g/s

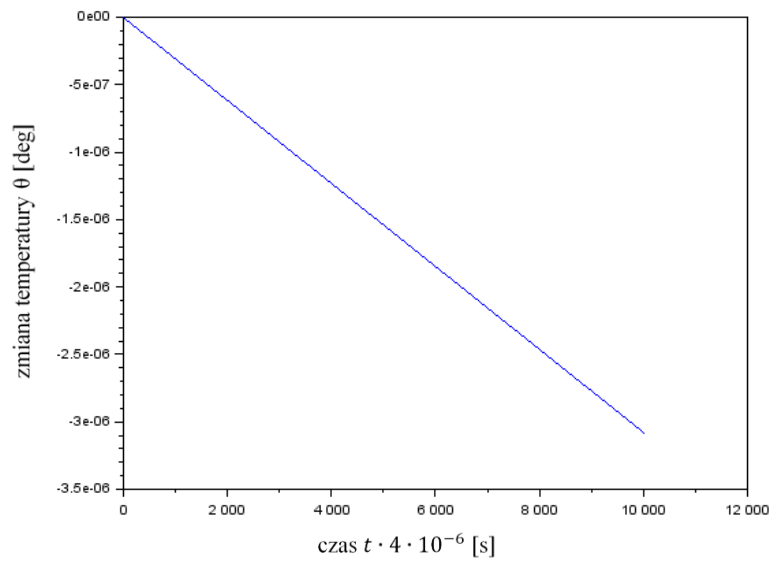


Rys. 6.68. Wykres przemieszczeń wybranych punktów współnika przy źródle masy o wydajności 10 g/s (kolor niebieski – punkt na swobodnym końcu współnika; kolor czerwony – punkt w połowie długości współnika; kolor czarny – punkt w odległości 0,2 m od miejsca zamocowania)

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

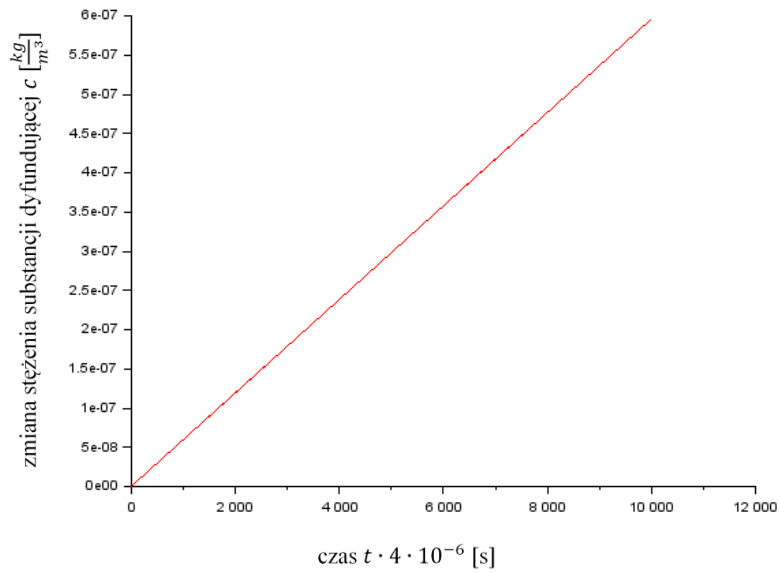


Rys. 6.69. Wykres zmian temperatury na końcach wspornika przy źródle masy o wydajności 10 g/s

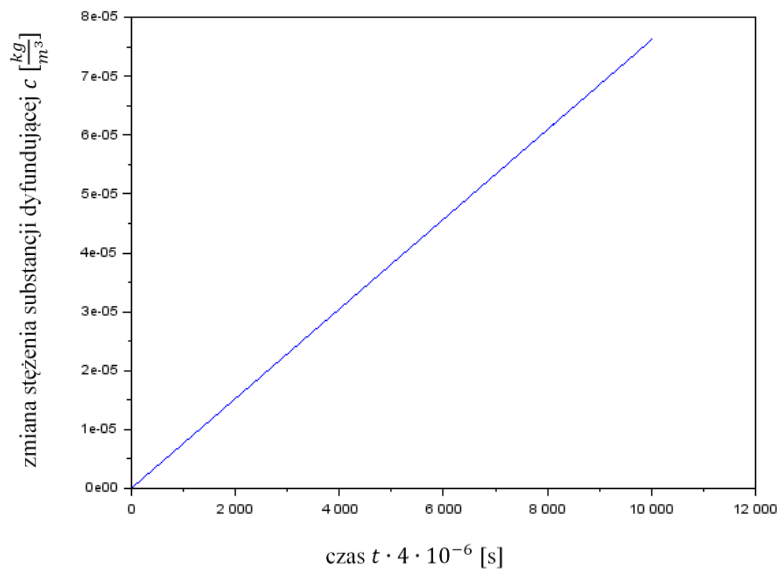


Rys. 6.70. Wykres zmian temperatury w połowie długości wspornika przy źródle masy o wydajności 10 g/s

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

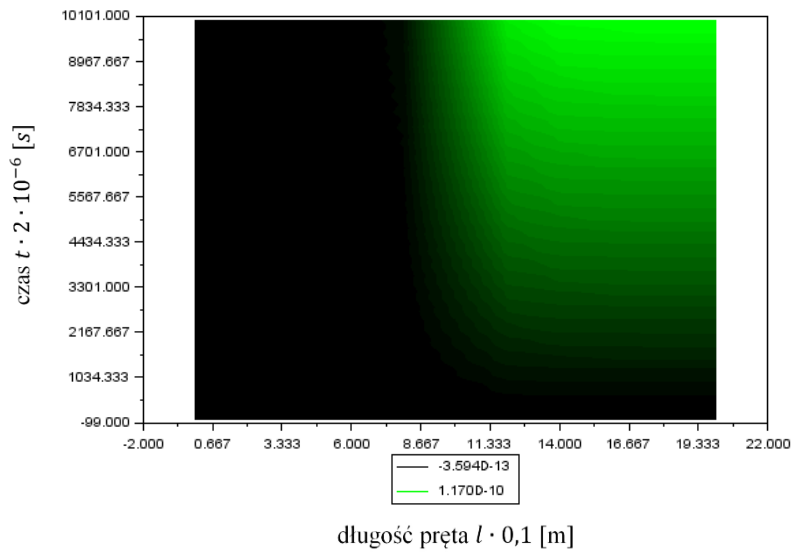


Rys. 6.71. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej na końcach wspornika przy źródle masy o wydajności 10 g/s

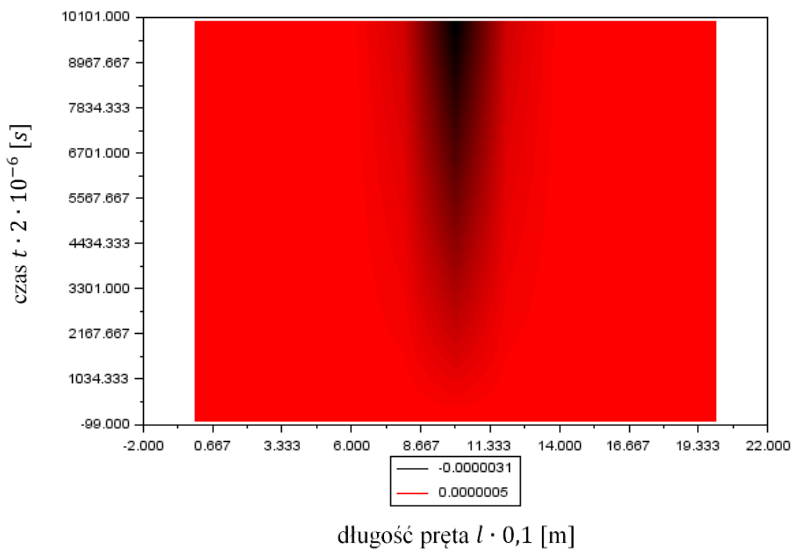


Rys. 6.72. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej w połowie długości wspornika przy źródle masy o wydajności 10 g/s

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

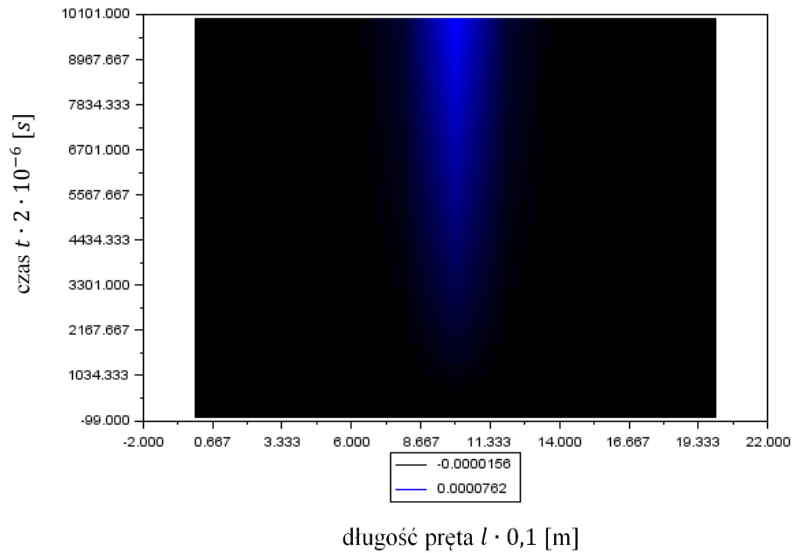


Rys. 6.73. Wykres zmian przemieszczeń wspornika u [m] w czasie przy źródle masy o wydajności 10 g/s

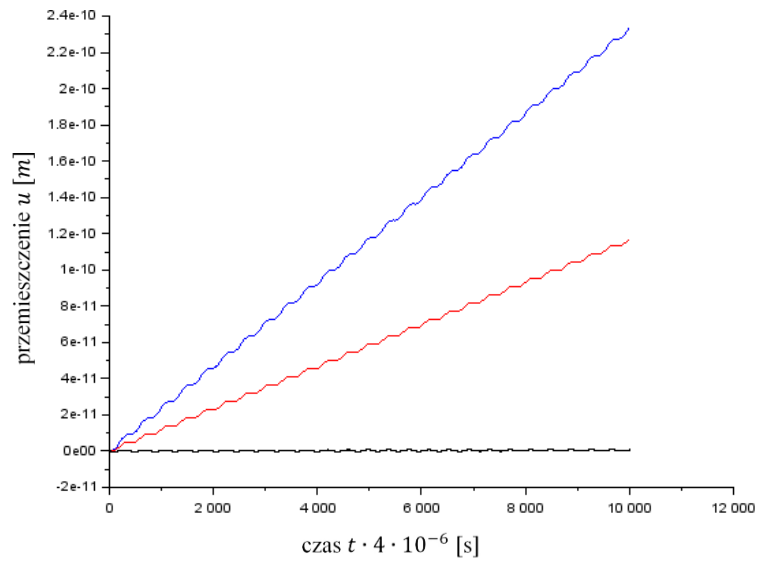


Rys. 6.74. Wykres zmian temperatury wspornika θ [deg] w czasie przy źródle masy o wydajności 10 g/s

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

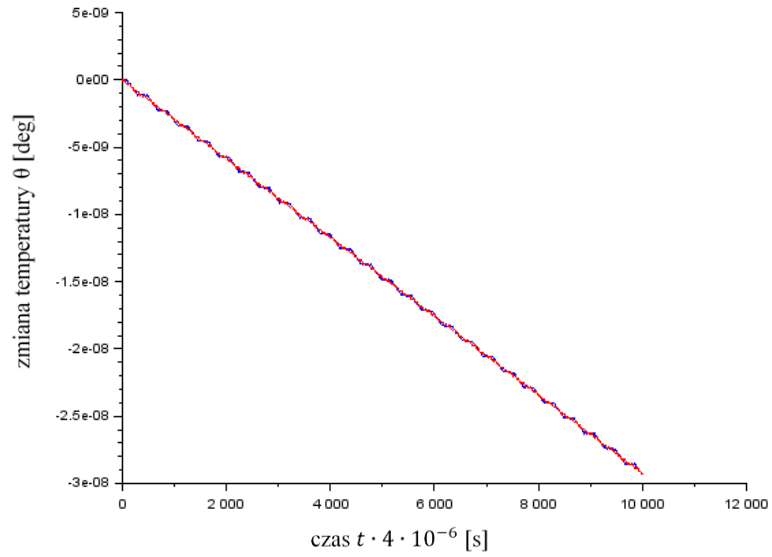


Rys. 6.75. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej wspornika c [$\frac{kg}{m^3}$] w czasie przy źródle masy o wydajności 10 g/s

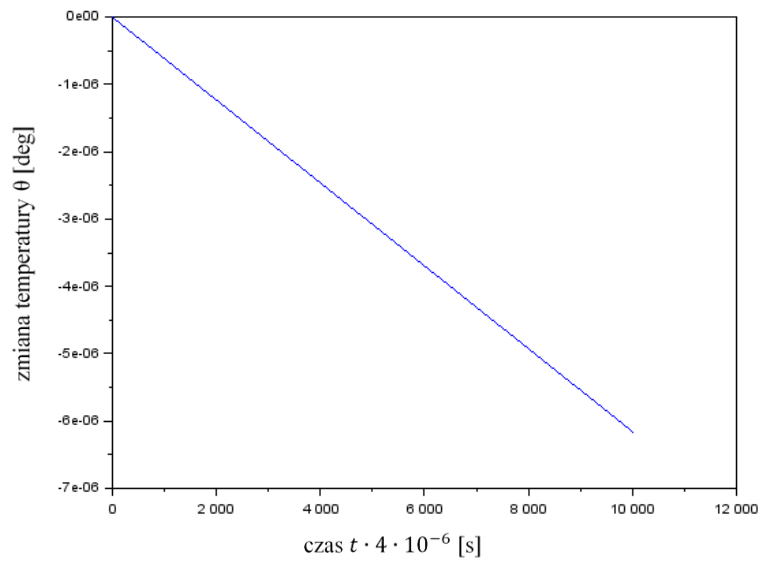


Rys. 6.76. Wykres przemieszczeń wybranych punktów wspornika przy źródle masy o wydajności 20 g/s (kolor niebieski – punkt na swobodnym końcu wspornika; kolor czerwony – punkt w połowie długości wspornika; kolor czarny – punkt w odległości 0,2 m od miejsca zamocowania)

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

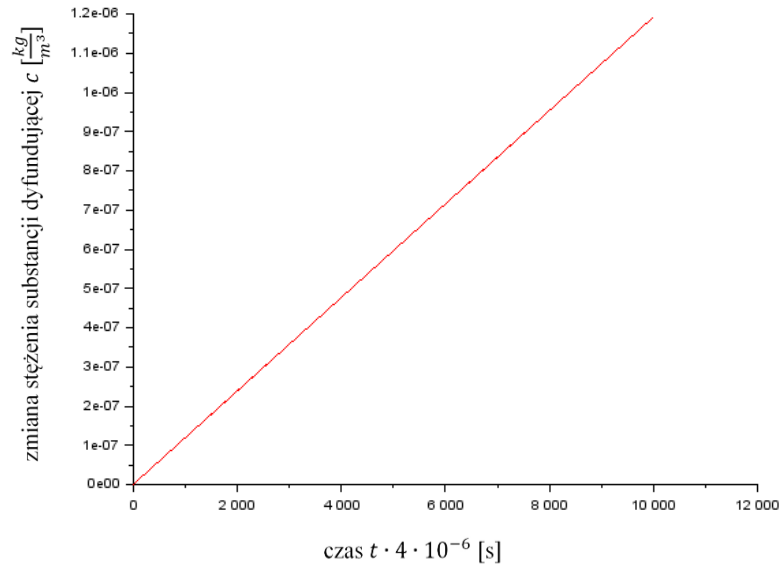


Rys. 6.77. Wykres zmian temperatury na końcach wspornika przy źródle masy o wydajności 20 g/s

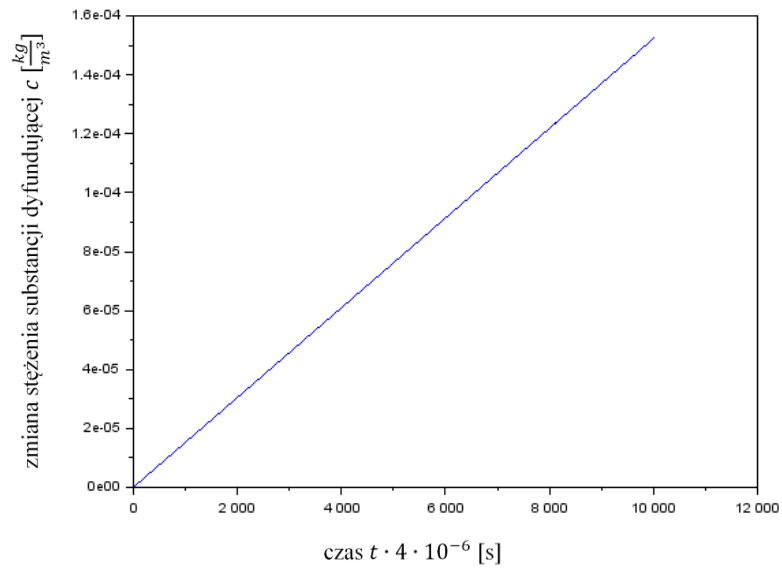


Rys. 6.78. Wykres zmian temperatury w połowie długości wspornika przy źródle masy o wydajności 20 g/s

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

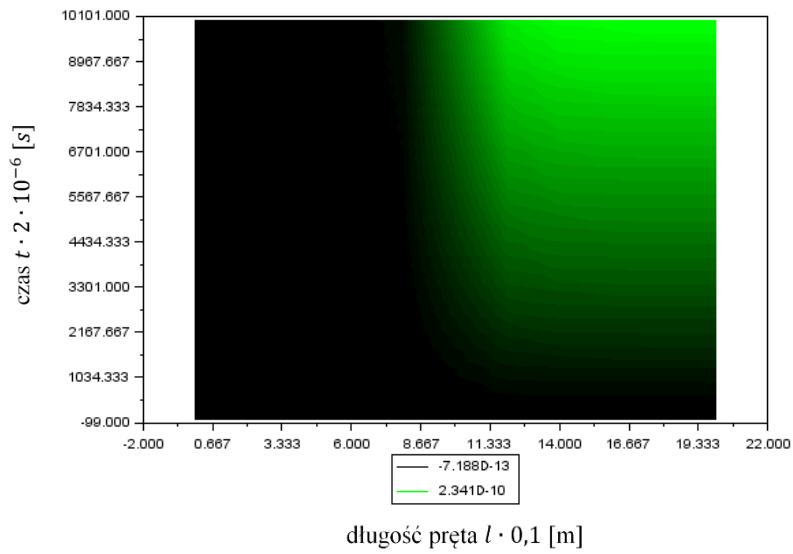


Rys. 6.79. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej na końcach wspornika przy źródle masy o wydajności 20 g/s

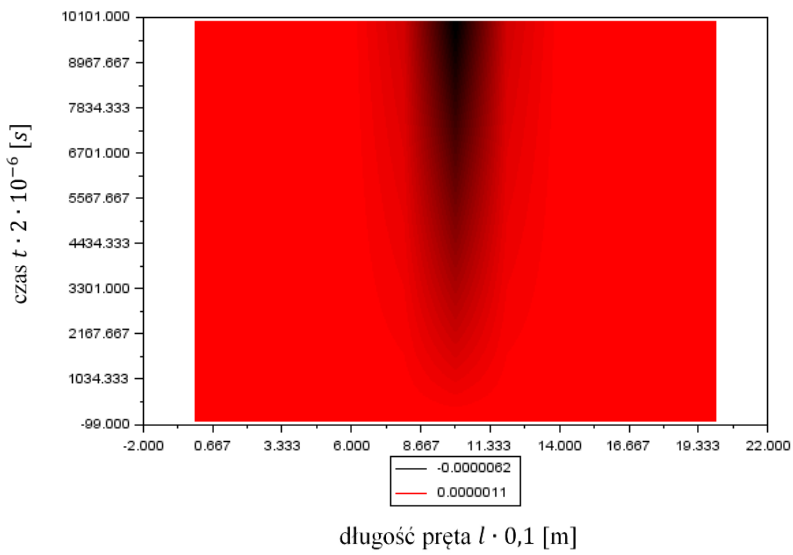


Rys. 6.80. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej w połowie długości wspornika przy źródle masy o wydajności 20 g/s

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

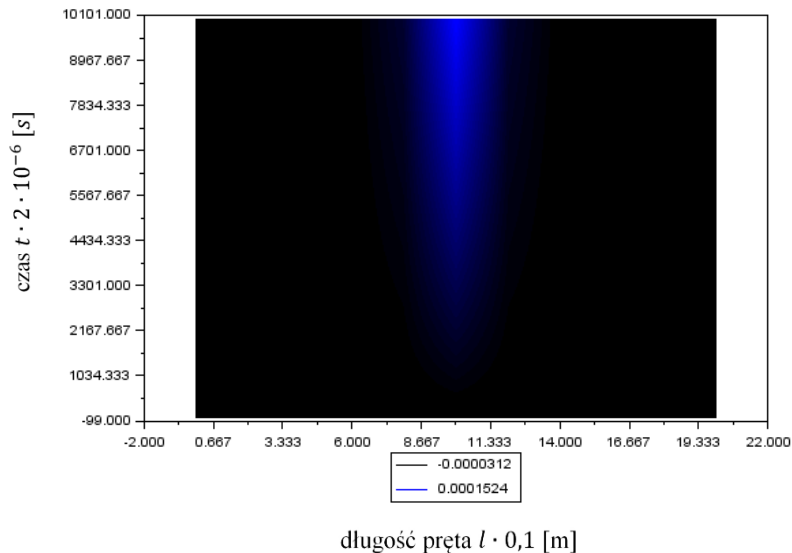


Rys. 6.81. Wykres zmian przemieszczeń wspornika u [m] w czasie przy źródle masy o wydajności 20 g/s



Rys. 6.82. Wykres zmian temperatury wspornika θ [deg] w czasie przy źródle masy o wydajności 20 g/s

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych



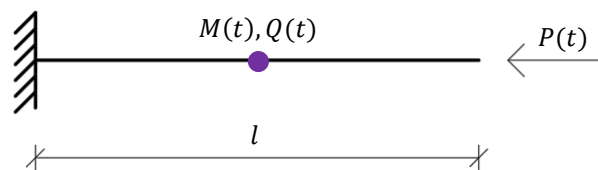
Rys. 6.83. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej współnika c [$\frac{kg}{m^3}$] w czasie przy źródle masy o wydajności 20 g/s

Poniżej formułuje się następujące wnioski wynikające z analizy Przykładu Nr 5:

- Obliczenia przeprowadzono dla pręta sztywno zamocowanego na jednym końcu, a w połowie długości pręta przyłożono źródło masy o określonej wydajności. Do pręta nie przyłożono obciążeń zewnętrznych ani źródeł ciepła. W przykładzie rozpatruje się proces sprzężony. Celem obliczeń było ustalenie wpływu źródła masy na generowanie i rozkład przemieszczeń oraz temperatury w pręcie.
- Na skutek działania źródła masy, w pręcie wygenerowały się gradienty stężenia substancji dyfundującej, przy czym największa różnica stężenia substancji dyfundującej wystąpiła w miejscu przyłożenia źródła masy a najmniejsza – na końcach pręta. Źródło masy przyłożono dokładnie w połowie pręta, stąd na obu końcach przyrosty stężenia substancji dyfundującej pokrywają się. Potwierdza to również to, że przepływ dyfuzyjny nie zależy od sposobu zamocowania pręta (wykres zmian stężenia substancji dyfundującej po długości pręta jest symetryczny, zarówno na końcu zamocowanym, jak i na końcu swobodnym uzyskano identyczne wartości przyrostu stężenia substancji dyfundującej).
- Z przeprowadzonych analiz wynika, że przyrosty przemieszczeń, temperatury i stężenia substancji dyfundującej zmieniają się wprost proporcjonalnie do wzrostu wydajności źródła masy.

**6.8. PRZYKŁAD NR 6 – OBCIĄŻENIE PRĘTA SIŁĄ
PODŁUŻNĄ, ŹRÓDŁEM CIEPŁA I SUBSTANCJI
DYFUNDUJĄCEJ WYWOŁUJĄCE DRGANIA PRĘTA,
POWSTANIE ZMIENNEJ TEMPERATURY
I ZMIENNEGO STĘŻENIA SUBSTANCJI
DYFUNDUJĄCEJ**

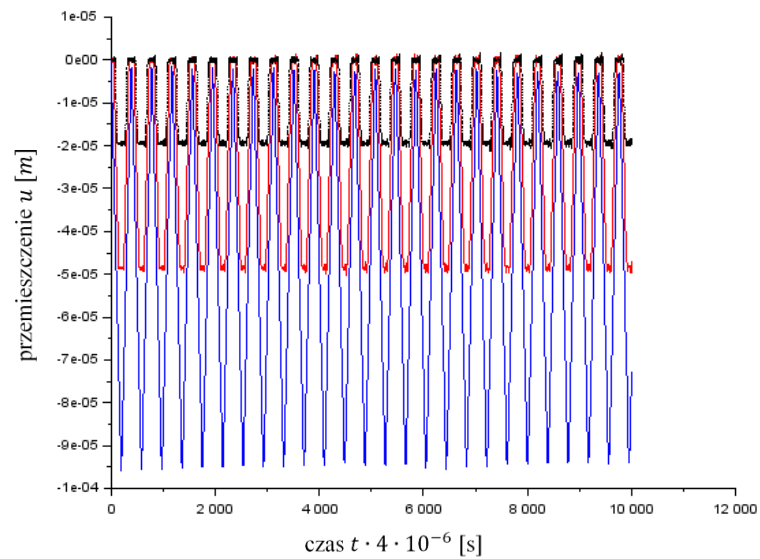
Celem poniższych obliczeń jest wyznaczenie funkcji przemieszczeń podłużnych $u(X, t)$, zmian temperatury $\theta(X, t)$ i zmian stężenia substancji dyfundującej $c(X, t)$ oraz analiza otrzymanych wyników. Rozpatruje się stalowy pręt prosty (rys. 6.84) w osłonie izolacyjnej, sztywno zamocowany na jednym końcu, na drugim obciążony siłą osiowo ściskającą opisaną zależnością (6.43) o wartości 50 kN (por. Przykład Nr 3), w połowie długości przyłożono źródło ciepła opisaną zależnością (6.45) o mocy 500 W (por. Przykład Nr 4) i źródło substancji dyfundującej opisaną zależnością (6.47) o wydajności 5 g/s (por. Przykład Nr 5).



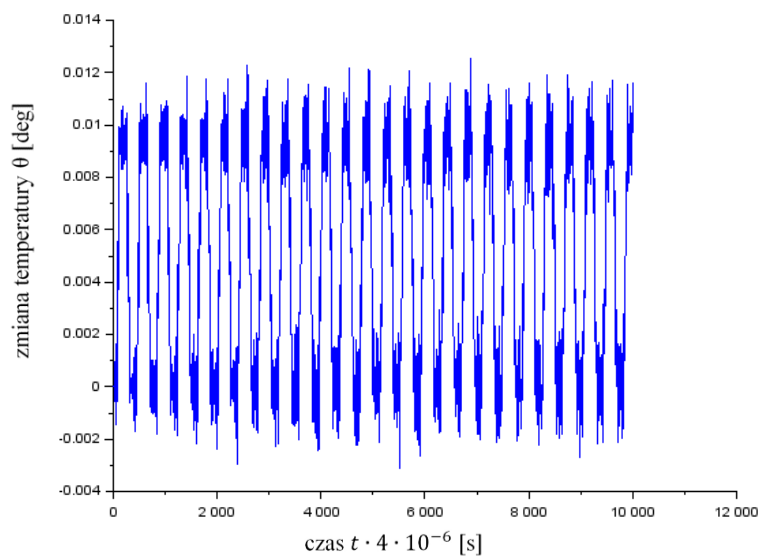
Rys. 6.84. Analizowany pręt

Wyniki obliczeń dla 10 tys. chwil obserwacji (0,04 s) przedstawiono na rys. 6.85÷6.92.

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

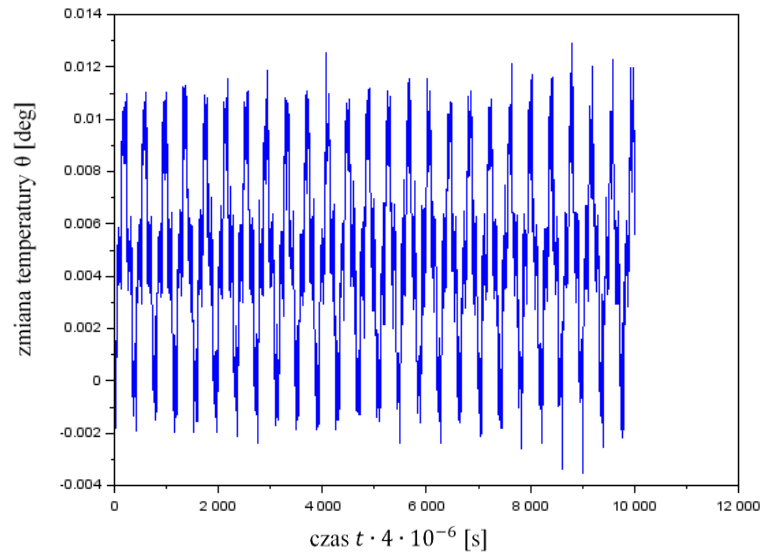


Rys. 6.85. Wykres przemieszczeń wybranych punktów wspornika (kolor niebieski – punkt na swobodnym końcu wspornika; kolor czerwony – punkt w połowie długości wspornika; kolor czarny – punkt w odległości 0,2 m od miejsca zamocowania)

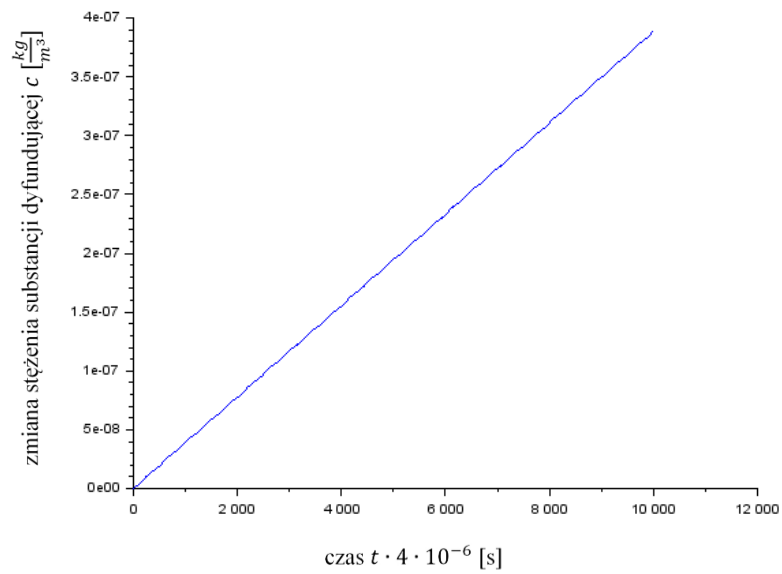


Rys. 6.86. Wykres zmian temperatury na końcu wspornika

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

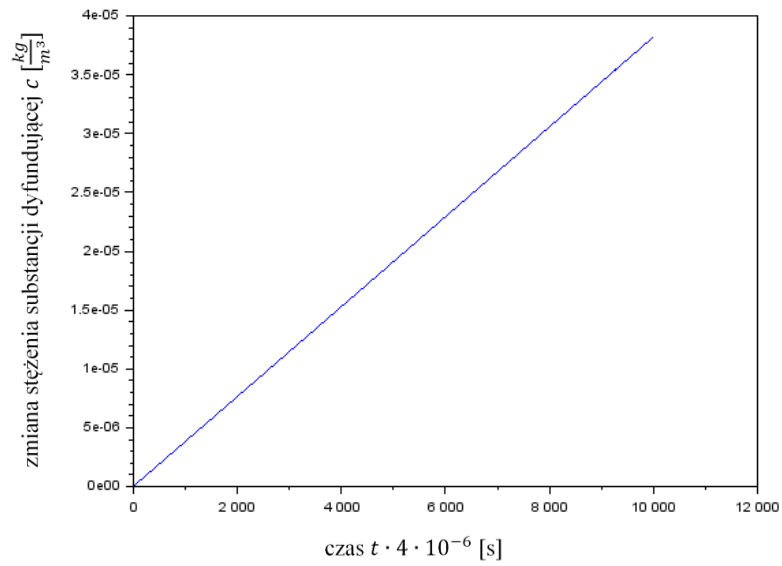


Rys. 6.87. Wykres zmian temperatury w połowie długości wspornika

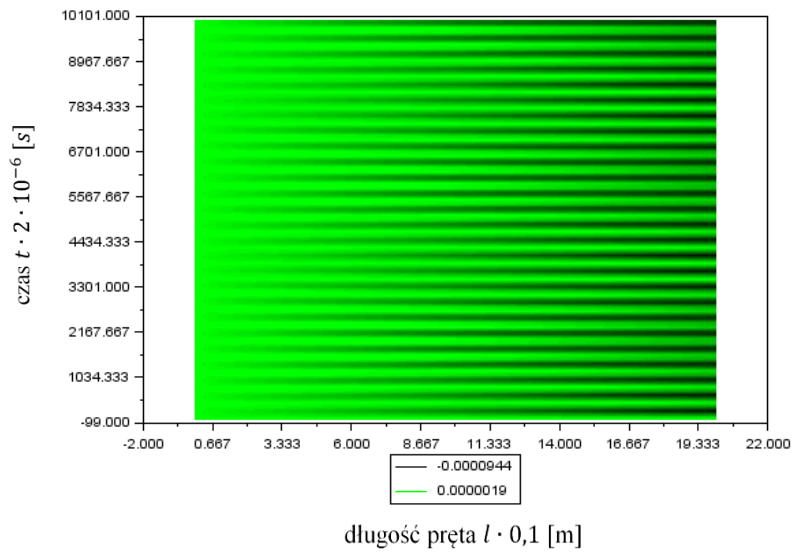


Rys. 6.88. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej na końcu wspornika

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

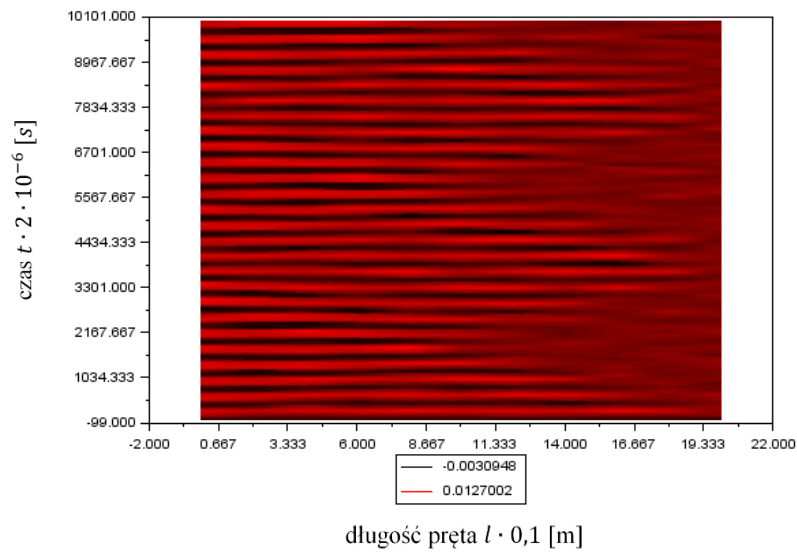


Rys. 6.89. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej w połowie długości wspornika

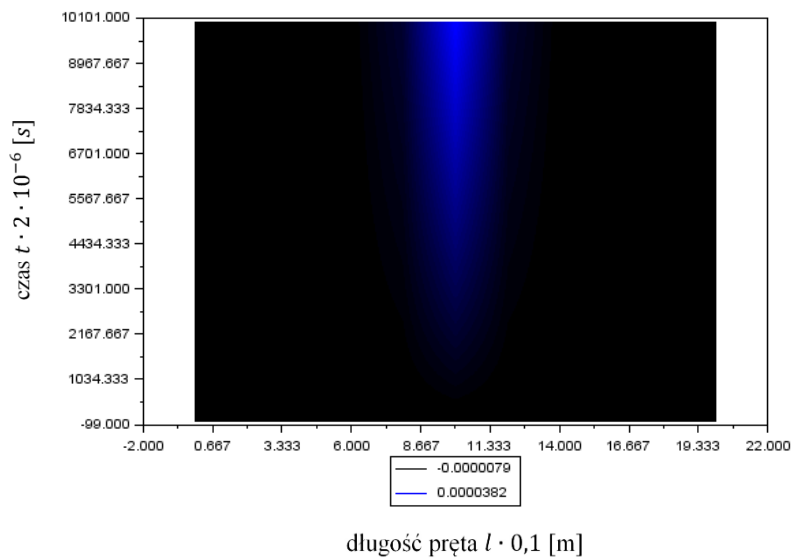


Rys. 6.90. Wykres zmian przemieszczeń wspornika u [m] w czasie

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych



Rys. 6.91. Wykres zmian temperatury współnika θ [deg] w czasie



Rys. 6.92. Wykres zmian stężenia substancji dyfundującej współnika c [kg/m³] w czasie

Poniżej formułuje się następujące wnioski wynikające z analizy Przykładu Nr 6:

- Porównując otrzymane wyniki z wykresami uzyskanymi w Przykładach Nr 3÷5, można zauważyć, że przypadek obciążenia pręta siłą zewnętrzną, źródłem ciepła i źródłem masy jednocześnie jest superpozycją rozwiązań uzyskanych dla każdego z tych oddziaływań niezależnie

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

(uwzględniając każdorazowo sprzężenie pomiędzy poszczególnymi zjawiskami).

- Przy tak dobranych danych i parametrach oraz przy stosunkowo krótkim czasie obserwacji, wpływ procesów termicznych i dyfuzyjnych na przemieszczenia wspornika jest niewielki. Natomiast wpływ obciążenia zewnętrznego (generowanych na skutek drgań zmian temperatury i stężenia substancji dyfundującej) ma istotny wpływ na rozkład substancji dyfundującej i dominujący wpływ na rozkład temperatur. Gdyby znacząco wydłużyć czas obserwacji, proporcje zaczęłyby ulegać zmianie. Wynika to z faktu, iż drgania zachodzą gwałtownie, mają dużą częstotliwość, natomiast procesy termiczne i dyfuzyjne zachodzą wielokrotnie wolniej.

7. WNIOSKI KOŃCOWE

W rozprawie rozważa się zagadnienie termodyfuzji sprzężonej w ciałach stałych. Wzajemnie sprzężone pola deformacji, rozkładu temperatury i stężenia substancji dyfundującej mogą być spowodowane np. obciążeniem zewnętrznym, oddziaływaniem dyfuzyjnym lub/i termicznym ośrodka, który otacza ciało. Rozpatruje się niestacjonarny (nieustalony) przepływ ciepła i substancji dyfundującej, stąd rozkład temperatury i stężenia substancji dyfundującej ulegają zmianie w czasie. W pracy przyjęte zostały następujące założenia:

- rozpatruje się ośrodek ciągły, fizycznie i geometrycznie liniowy;
- zmiana temperatury jest umiarkowana;
- zmiana stężenia substancji dyfundującej jest umiarkowana.

Sformułowano w niniejszym opracowaniu układ równań różniczkowych cząstkowych względem zmiennych przestrzennych i czasu, opisujący zagadnienie początkowo – brzegowe termodyfuzji sprzężonej. Do rozwiązania tej problematyki zastosowano metodą elementów czasoprzestrzennych. Idea MECZ polega na jednoczesnej dyskretyzacji przestrzennej i czasowej. Cechą wyróżniającą tę procedurę od innych metod numerycznych jest traktowanie czasu jako czwartej współrzędnej, na równi ze współzrzednymi przestrzennymi. Zatem w przypadku zagadnień początkowo – brzegowych wygodnie jest stosować MECZ, gdyż wspomniany układ równań różniczkowych cząstkowych przekształca się wprost w układ równań algebraicznych.

Celem rozprawy jest opracowanie modelu ciała stałego geometrycznie i fizycznie liniowego, poddanego działaniu zmiennego w czasie i przestrzeni obciążenia, oddziaływaniom termicznym oraz przepływowi substancji dyfundującej, a także sformułowanie algorytmu rozwiązania tego problemu z użyciem metody elementów czasoprzestrzennych. Natomiast teza badawcza pracy brzmi następująco: **możliwe jest uzyskanie efektywnego rozwiązania zagadnienia początkowo – brzegowego termodyfuzji sprzężonej w ciałach stałych z użyciem metody elementów czasoprzestrzennych**. Stąd zakres rzeczowy pracy obejmuje następującą problematykę:

- przedstawiono znaczenie analizowanego zjawiska w budownictwie, wskazując na mnogość zagadnień z tego zakresu w reprezentowanej dyscyplinie naukowej;
- dokonano przeglądu literatury zarówno z zakresu termodyfuzji, jak i metody elementów czasoprzestrzennych, wykazano przy tym, że są to dziedziny rozwojowe i zasadne jest zastosowanie podejścia czasoprzestrzennego do rozwiązania zagadnienia początkowo-brzegowego termodyfuzji sprzężonej;
- scharakteryzowano zagadnienie początkowo-brzegowe termodyfuzji sprzężonej w rozważanym ośrodku, począwszy od sformułowania problemu i przyjętych założeń, poprzez podstawy teoretyczne zachodzących zjawisk, aż po syntezę równań różniczkowych cząstkowych względem czasu i przestrzeni;

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

- w celu zastosowania przyjętej metody rozwiązania problemu, wyprowadzono równania czasopracy wirtualnej;
- sformułowano niezbędne równania metody elementów czasoprzestrzennych i scharakteryzowano algorytm obliczeń;
- opracowany model obliczeniowy termodyfuzji sprzężonej zaimplementowano do autorskiego programu komputerowego w języku programowania C++ i przedstawiono przykłady obliczeniowe z analizą otrzymanych wyników, pozwoliło to pozytywnie zweryfikować poprawność przyjętej metody rozwiązania rozważanego problemu.

Z powyższego opisu wynika, że cel pracy został osiągnięty a teza badawcza została udowodniona, gdyż:

- opracowano model ciała stałego geometrycznie i fizycznie liniowego, poddanego działaniu zmiennego w czasie i przestrzeni obciążenia, oddziaływaniom termicznym oraz przepływom substancji dyfundującej;
- opracowano model obliczeniowy, tj. sformułowano algorytm rozwiązania rozważanego problemu z użyciem metody elementów czasoprzestrzennych;
- uzyskano efektywne rozwiązanie zagadnienia początkowo – brzegowego termodyfuzji sprzężonej z użyciem metody elementów czasoprzestrzennych.

Do oryginalnych elementów pracy należą:

- sformułowanie równań czasopracy wirtualnej termodyfuzji sprzężonej;
- rozszerzenie zasady Hamiltona na zagadnienie termodyfuzji sprzężonej;
- zastosowanie metody elementów czasoprzestrzennych do rozwiązania zagadnienia początkowo-brzegowego termodyfuzji sprzężonej;
- autorski program komputerowy.

W niniejszej rozprawie opracowano model obliczeniowy, a w szczególności zaproponowano algorytm obliczeniowy, który pozwala na rozwiązywanie zagadnień z zakresu termodyfuzji przy ustalonych założeniach. Z uwagi na złożoność analizowanego zjawiska, w przykładach obliczeniowych ograniczono się jedynie do elementu jednowymiarowego, co pozwoliło w prosty sposób zilustrować wywody teoretyczne i zweryfikować poprawność opracowanego modelu obliczeniowego. Dalsze badania, będące kontynuacją dotychczasowych, mogłyby obejmować przede wszystkim rozszerzenie zakresu analizowanych zagadnień na elementy bardziej złożone, takie jak tarcze, płyty, powłoki, bryły, w tym również o konstrukcji warstwowej. Umożliwiłoby to analizę bardziej praktycznych zagadnień z zakresu budownictwa. Kolejnym interesującym kierunkiem rozwoju wydaje się próba sformułowania modelu termodyfuzji przy dowolnie dużych, gwałtownych zmianach temperatury i stężenia substancji dyfundującej. Wiąże się to z koniecznością przyjęcia nieliniowych równań przewodnictwa cieplnego i dyfuzji. Należałoby również opisać parametry materiałowe za pomocą funkcji zależnych od temperatury i stężenia substancji dyfundującej. Takie podejście wymagałoby z pewnością skojarzenia rozważań teoretycznych z badaniami doświadczalnymi. Z przeglądu literatury wynika

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

również, że stałe materiałowe związane z przepływem substancji dyfundującej (współczynniki dyfuzji) nie są w pełni i jednoznacznie wyznaczone, prowadzone są w tym zakresie liczne badania i analizy, ale często zupełnie ze sobą nieskorelowane. Ten kierunek rozwoju stanowi również ciekawą alternatywę dalszych prac w zakresie termodyfuzji.

LITERATURA

- [Aouadi 2010]: Aouadi M., *A theory of thermoelastic diffusion materials with voids*, Math. Phys., 61, 2010, s. 357–379.
- [Argyris 1969]: Argyris J. H., Scharpf D. W., *Finite elements in space and time*, Nucl. Eng. Design, 10, 1969, s. 456-469.
- [Argyris 1972]: Argyris J. H., Chan A., S., L., *Application of the finite elements in space and time*, Ing. Archiv., 41, 1972, s. 235-257.
- [Bajer 1984]: Bajer Cz., *Modelowanie układów dynamicznych przy pomocy nieprostokątnych czasoprzestrzennych elementów skończonych*, Zeszyty Naukowe Politechniki Świętokrzyskiej, Budownictwo, 18, 1984, s. 5-10.
- [Bajer 1986]: Bajer C. I., *Triangular and tetrahedral space-time finite elements in vibration analysis*, Int. J. Numer. Meth. Eng., 23, 1986, s. 2031-2048.
- [Bajer 1987]: Bajer Cz., *Notes on the stability of non-rectangular space-time finite elements*, Int. J. Numer. Meth. Eng., 24, 1987, s. 1721–1739.
- [Bajer 1988]: Bajer Cz., *Dynamics of contact problem by the adaptive simplex-shaped space-time approximation*, J. de Mec. Theor. et Appl., 1, 7, 1988, s. 235-248.
- [Bajer 1989]: Bajer Cz., *Space-time element method in structural dynamics*, Arch. Mech., 41, 6, 1989, s. 869-893.
- [Bajer 1991]: Bajer Cz., Bogacz R., *On the space-time method applied to the dynamics of vehicle-road interaction*, ZAMM, 71, 1991, s. 213-216.
- [Bajer 1993]: Bajer Cz., Bohatier C., *Solution of thermomechanical problems by the space-time finite elements*, Numerical Methods in Industrial Forming Processes, Balkema 1993, s. 215-219.
- [Bajer 1995]: Bajer Cz., Kosiński W., *Thermal waves in heat conductor and their numerical modeling*, Comp. Ass. Mech. Eng. Sci., 2, 1995, s. 307-319.
- [Bajer 1997]: Bajer Cz., *Numeryczne modelowanie czasoprzestrzenne dynamicznych zagadnień kontaktowych*, IPPT PAN, Warszawa 1997.
- [Bajer 2009]: Bajer Cz., *Metoda elementów czasoprzestrzennych w obliczeniach dynamiki konstrukcji*, PAN, Warszawa 2009.

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

- [Bause 2017]: Bause M., Radu F.A., Köcher U., *Space-time finite element approximation of the Biot poroelasticity system with iterative coupling*, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 320, 2017, s. 745-768.
- [Biot 1956]: Biot M. A., *Thermoelasticity and irreversible thermodynamics*, J. Appl. Phys., 27, 1956.
- [Bohatier 1992]: Bohatier C., *A large deformation formulation and solution with space-time finite elements*, Arch. Mech. 44, 1992, s. 31-41.
- [Bohatier 1995]: Bohatier C., Bajer Cz., *Kinematic approach for dynamic contact problems – the geometrical soft way method*, Eng. Trans., 43, 1995, s. 101-111.
- [Bojczuk 1998]: Bojczuk W., Gaczkiewicz A., Sołodiak M., *Model matematyczny termodyfuzji elektrolitów w ośrodku porowatym z udziałem pól mechanicznych*, Zeszyty Naukowe Politechniki Opolskiej, 42, 1998, s. 167-178.
- [Boley 1960]: Boley B. A., Weiner J. H., *Theory of Thermal Stresses*, John Wiley and Sons, New York – London 1960.
- [Bu 2019]: Bu W., Ji L., Tang Y., Zhou J., *Space-time finite element method for the distributed-order time fractional reaction diffusion equations*, Appl. Numer. Math 152, 2019, s. 446 – 465.
- [Burns 2022]: Burns D.J., Batra R.C., *First failure load of sandwich beams under transient loading using a space-time coupled finite element method*, Thin-Walled Structures 173, 2022.
- [Carslaw 1959]: Carslaw H. S., Jaeger J. C., *Conduction of Heat in Solids*, Oxford 1959.
- [Cheng 2022]: Cheng P., Zhu H., Zhang Y., Jiao Y., Fish J., *Coupled thermo-hydro-mechanical-phase field modeling for fire-induced spalling in concrete*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 389, 2022.
- [Cyganecki 1979]: Cyganecki W., *Kryterium doboru wymiarów elementu czasoprzestrzennego*, Archiwum Inż. Łąd., 25, 3, 1979, 1979, s. 389–397.
- [Cyganecki 1980]: Cyganecki W., *O sposobach doboru wymiarów elementu czasoprzestrzennego*, Archiwum Inż. Łąd., 26, 4, 1980, s. 717–726.
- [Daniłowska 1950]: Daniłowska W. I., *Tiempieraturnyje naprjażenija w uprugom poluprostranstwie, woznikajuszczije*

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

- wsledstwie wniezapnego nagriewa jego granicy, Prikl. Mat. Mech. 14, 3, 1950.*
- [Darrall 2018]: Darrall B. T., Dargush G. F., *Variational principle and time-space finite element method for dynamic thermoelasticity based on mixed convolved action*, European Journal of Mechanics - A/Solids, 71, 2018, s. 351-364.
- [Davarzani 2021]: Davarzani H., Marcoux M., Quintard M., *A local thermal non-equilibrium model for coupled heat and mass transfer with dispersion and thermal diffusion in porous media*, Journal of Porous Media, 24, 11, 2021, s. 37-63.
- [Dobiszewska 2003]: Dobiszewska M., *Dynamika tarcz w termosprężystości sprzężonej*, ATR w Bydgoszczy, Bydgoszcz 2003.
- [Dobiszewska 2004]: Dobiszewska M., *Problem of coupled thermoelasticity in elastic rigid disks*, EJPAU, 7, 2, 2004, s. 14.
- [van Duijn 2020]: van Duijn C.J., Mikelić A., Wick T., *Mathematical theory and simulations of thermoporoelasticity*, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg 366, 2020, s. 1-38.
- [Dumont 2018]: Dumont S., Jourdan F., Madani T., *Space-Time Finite Element Method for elastodynamics problems: elementary examples of 4D remeshing using simplex elements*, Mathematical and computational applications, MDPI, 23, 29, 2018, s. 1-18.
- [Dylla 2009]: Dylla A., *Praktyczna fizyka ciepła budowli*, Wydawnictwo Uczelniane UTP, Bydgoszcz 2009.
- [Frontin 2021]: Frontin C.V., Walters G.S., Witherden F.D., Lee C.W., Williams D.M., Darmofal D. L., *Foundations of space-time finite element methods: Polytopes, interpolation, and integration*, Appl. Numer. Math. 166, 2021, s. 92-113.
- [Fung 1969]: Fung Y. C., *Podstawy mechaniki ciała stałego*, PWN, Warszawa 1969.
- [Gawin 2000]: Gawin D., *Modelowanie sprzężonych zjawisk ciepłno – wilgotnościowych w materiałach i elementach budowlanych*, Zeszyty Naukowe Politechniki Łódzkiej Nr 853, Łódź 2000.
- [Gawin 2007]: Gawin D., *Program komputerowy WUFI i jego zastosowanie w analizach ciepłno – wilgotnościowych*

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

- wych przegród budowlanych, Politechnika Łódzka, Łódź 2007.
- [Gawin 2011]: Gawin D, Pesavento P., Schrefler B. A., *What physical phenomena can be neglected when modeling concrete at high temperature? A comparative study. Part 1: Physical phenomena and Mathematical model*, International Journal of Solids and Structures, 48, 2011, s. 1927-1944.
- [Gawin 2011]: Gawin D, Pesavento P., Schrefler B. A., *What physical phenomena can be neglected when modeling concrete at high temperature? A comparative study. Part 2: Comparison between models*, International Journal of Solids and Structures, 48, 2011, s. 1945-1961.
- [Gimperlein 2019]: Gimperlien H., Stoczek J., *Space-time adaptive finite elements for nonlocal parabolic variational inequalities*, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 352, 2019, s. 137–171.
- [Gurtin 1964]: Gurtin M. E., *Variational principles for linear elastodynamics*, Arch. Rat. Mech. Anal., 16, 1964, s. 34-50.
- [Hasanpour 2018]: Hasanpour K., Mirzaei D., *A fast meshfree technique for the coupled thermoelasticity problem*, Acta Mech. 229, 2018, s. 2657–2673.
- [He 2017]: He J.-H., *Hamilton's principle for dynamical elasticity*, Applied Mathematics Letter, 72, 2017, s. 65-69.
- [Hsu 1986]: Hsu T. R., *The Finite Element Method in thermomechanics*, Allen and Unwin, Boston 1986.
- [Ignaczak 1958]: Ignaczak J., *Thermal Stresses in a Long Cylinder Heated in a Discontinuous Manner over the Lateral Surface*, Arch. Mech. Stos. 1958, 1, 10, 25.
- [Ignaczak 1989]: Ignaczak J., *Termosprężystość ze skończonymi prędkościami falowymi*, Ossolineum, Wrocław 1989.
- [Janiak 2007]: Janiak T., *Analiza dynamiczna płyt włóknokompozytowych metodą elementów czasoprzestrzennych*, UTP, Bydgoszcz 2007.
- [Jankowski 2007]: Jankowski J., *Metoda składników pozornych w termosprężystości*, Wydawnictwo Politechniki Poznańskiej, Poznań 2007.
- [Jaros 2011]: Jaros M., Król K., Woźniak K., Głowacki Sz., *Wyznaczanie współczynnika dyfuzji wody w biomasie*

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

- [Jasielec 2017]: drzewnej zależnego od zawartości wody i temperatury, *Inżynieria Rolnicza* 8, 133, 2011, s. 153-160.
- [Jasielec 2017]: Jasielec J. J., Szyszkiewicz K., Królikowska A., Filipek R., *Wyznaczanie współczynników dyfuzji chlorków w materiałach cementowych – Przegląd metod eksperymentalnych i modelowania: Część II – Metody Migracyjne*, *Cement Wapno Beton* 2, 2017, s. 154-167.
- [Jasielec 2020]: Jasielec J. J., Stec J., Szyszkiewicz-Warzecha K., Łagosz A., Deja J., Lewenstam A., Filipek R., *Effective and apparent diffusion coefficients of chloride ions and chloride binding kinetics parameters in mortars: Non-stationary diffusion–reaction model and the inverse problem*, *Materials*, 13, 23, 2020, s. 5522.
- [Jędrzejczyk-Kubik 1998]: Jędrzejczyk-Kubik J., *Termodyfuzja w ośrodku Kelvina – Voighta*, *Zeszyty Naukowe Politechniki Śląskiej*, 85, 1998, s. 5-16.
- [Jędrzejczyk-Kubik 2006]: Jędrzejczyk-Kubik J., *O termodyfuzji w polu elektrycznym*, *Roczniki Inżynierii Budowlanej*, 6, 2006, s. 41-45.
- [Jiang 2022]: Jiang G.- H., Tan C.-H., Jiang W.-W., Yang K., Wang W.-Z., Gao X.-W., *Shape reconstruction in transient heat conduction problems based on radial integration boundary element method*, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 191, 2022.
- [Kacprzyk 1983]: Kacprzyk Z., Lewiński T., *Comparison of some numerical integration methods for the equations of motion of systems with a finite number of degrees of freedom*, *Eng. Trans.*, 31, 2, 1983, s. 213-240.
- [Kacprzyk 1984]: Kacprzyk Z., *O zastosowaniu funkcji ważonych w metodzie czasoprzestrzennych elementów skończonych*, *Prace Naukowe, Budownictwo, Politechnika Warszawska*, 85, 1984, s. 83-94.
- [Kacprzyk 2017]: Kacprzyk Z., *Non-linear shape functions over time in the space-time finite element method*, *Matec Web of Conferences* 117, 00072, 2017, s. 1-8.
- [Karakashian 1999]: Karakashian O., Makridakis C., *A Space-Time Finite Element Method for the Nonlinear Schrödinger Equation: The Continuous Galerkin Method*, *SIAM J. Numer. Anal.*, 36, 6, 1999, s. 1779–1807.

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

- [Kączkowski 1975]: Kączkowski Z., *The method of finite space-time elements in dynamics of structures*, J. Tech. Phys., 16, 1, 1975, s. 60-84.
- [Kączkowski 1976]: Kączkowski Z., *Metoda czasoprzestrzennych elementów skończonych*, Archiwum Inż. Łąd., 22, 3, 1976, s. 365-378.
- [Kączkowski 1977]: Kączkowski Z., Witkowski M., *Uwzględnienie tłumienia zewnętrznego w metodzie elementów czasoprzestrzennych*, Arch. Inż. Łąd., 23, 1977, s. 243-254.
- [Kączkowski 1978]: Kączkowski Z., Żyszko M., *Drgania giętkie metodą czasoprzestrzennych elementów skończonych*, Arch. Inż. Łąd., 24, 1978, s. 67-78.
- [Kączkowski 1982]: Kączkowski Z., *On variational principles in thermoelasticity*, Bull. Acad. Pol. Sci. Ser. Sci. Techn., 30, 1982, s. 81-86.
- [Kączkowski 1983]: Kączkowski Z., *O stosowaniu nieprostokątnych elementów czasoprzestrzennych*, Mechan. Teor. i Stos., 21, 4, 1983, s. 531-542.
- [Kączkowski 1985]: Kączkowski Z., *O zastosowaniu metody elementów czasoprzestrzennych do zagadnień przewodnictwa cieplnego*, Arch. Inż. Łąd., 31, 3, 1985, s. 361-373.
- [Kączkowski 1989]: Kączkowski Z., *Die Methode der Raum-Zeit-Elemente (MERZE) in Anwendung auf instationäre Wärmeleitungsprobleme*, ZAMM, 69, 1989, s. 179-181.
- [Kączkowski 1995]: Kączkowski Z., *Metoda elementów czasoprzestrzennych*, Komputerowe metody mechaniki ciał stałych, PWN, Warszawa 1995, s. 154-206.
- [Kim 2017]: Kim J., *Extended framework of Hamilton's principle for thermoelastic continua*, Computers & Mathematics with Applications, 73, 7, 2017, s. 1505-1523.
- [Kim 2016]: Kim J., Dargush G. F., Lee H. S., *Extended framework of Hamilton's principle in heat diffusion*, International Journal of Mechanical Sciences, 114, 2016, s. 166-176.
- [Kleiber 1995]: Kleiber M., *Mechanika techniczna, tom XI, Komputerowe metody mechaniki ciał stałych*, PWN, Warszawa 1995.
- [Klemczak 2010]: Klemczak B., *The influence of thermodiffusion cross effect on the temperature and moisture distribution in early age mass concrete*,

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

- Architecture Civil Engineering Environment, 3, 2010, s. 55-62.
- [Kopp 2021]: Kopp P., Calo V., Rank E., Kollmannsberger S., *Space-time hp finite elements for heat evolution in laser-based additive manufacturing*, arXiv:2112.00155, 2021, s. 1-16.
- [Kögl 2003]: Kögl M., Gaul L., *A boundary element method for anisotropic coupled thermoelasticity*, Archive of Applied Mechanics, 2003, 73, s. 591-598.
- [Kubik 1986]: Kubik J., *Thermodyfuzja w sprężystych ciałach lepkosprężystych*, Studia Geot. Mech. VIII, 1986, s. 29-47.
- [Kubik 1999]: Kubik J., Wieczorek B., *Rozwiązania fundamentalne zagadnienia quasi – statycznego stacjonarnej termodyfuzji lepkosprężystej*, Zeszyty Naukowe Politechniki Śląskiej, 86, 1999, s. 131-143.
- [Kubik 2012]: Kubik J., *Odpowiedniość równań mikropolarnej teorii mieszanin i termodyfuzji*, Roczniki Inżynierii Budowlanej, 12/2012, s. 21-24.
- [Kupradze 1950]: Kupradze W. D., *Granicznye zadaczi teorii kolehanija i intiegralnyje uprawnienija*, Moskwa – Leningrad 1950.
- [Kupradze 1970]: Kupradze W. D., Gegelia T. G., Baszeliszwili M. O., Burczuladze T. W., *Wybrane zagadnienia teorii sprężystości i termosprężystości*, Zakład Narodowy Imienia Ossolińskich Wydawnictwo Polskiej Akademii Nauk, Wrocław – Warszawa – Kraków 1970.
- [Lachowicz 2017]: Lachowicz M., *Modelowanie ośrodka lepkosprężystego w metodzie elementów czasoprzestrzennych*, JCEEA, 64, 2017, s. 559-569.
- [Langer 1979]: Langer J., *Thumienie pasożytnicze w komputerowych rozwiązaniach równania różniczkowego ruchu*, Archiwum Inż. Łąd., 25, 3, 1979, s. 359–369.
- [Larsson 2003]: Larsson F., Hansbo P., Runesson K., *Space-time finite elements and an adaptive strategy for the coupled thermoelasticity problem*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 56, 2, 2003, s. 261-293.
- [Lei 2020]: Lei, J., Wang, Q., Liu, X., Gu, Y., Fan, C.-M., *A novel space-time generalized FDM for transient heat conduction problems*, Eng. Anal. Bound. Elem. 119, 2020, s. 1-12.

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

- [Lei 2022]: Lei J., Wei X., Wang Q., Gu Y., Fan C.-M., *A novel space–time generalized FDM for dynamic coupled thermoelasticity problems in heterogeneous plates*, Arch. Appl. Mech. 92, 2022, s. 287–307.
- [Leitner 2021]: Leitner M., Schanz M., *Generalized convolution quadrature based boundary element method for uncoupled thermoelasticity*, Mech. Syst. Signal Process. 150, 2021, s. 107-234.
- [Lord 1967]: Lord H. W., Shulman Y., *A generalized dynamical theory of thermoelasticity*, Journal of the Mech. and Physics of Solids, 15, 1967, s. 299-309.
- [Madureiraa 2021]: Madureiraa R.L.R., Rinconb M.A., Aouadic M., *Numerical analysis for a thermoelastic diffusion problem in moving boundary*, Mathematics and Computers in Simulation 187, 2021, s. 630–655.
- [Majewski 2007]: Majewski S., Klemczak B., *Modelowanie efektów termiczno – wilgotnościowo – mechanicznych w masywach betonowych*, Zeszyty Naukowe Politechniki Śląskiej, 111, 2007, s. 293-304.
- [Majziel 1951]: Majziel W. M., *Tiempieraturnaja zadacza teoriii uprugosti*, Izd, U.A.N., Kijów 1951.
- [Maruszewski 1986]: Maruszewski B., *Termodynamiczne podstawy magneto – termodyfuzji i elektrotermodyfuzji w ośrodku ciągłych*, Zeszyty Naukowe Politechniki Poznańskiej, 178, 1986.
- [Marynowicz 2007]: Marynowicz A., Świrska J., Wyrwał J., *Wyznaczenie współczynnika dyfuzji pary wodnej w ujęciu losowym*, Roczniki Inżynierii Budowlanej, 7, 2007, s. 53-56.
- [Mokryk 1982]: Mokryk R., Olesiak Z., *Termodyfuzja w zagadnieniu kontaktu warstwy i półprzestrzeni sprężystej*, Mechanika Teoretyczna i Stosowana 3/4, 20, 1982, s. 225-236.
- [Nguyen 1999]: Nguyen H. V., *Sprężenia termomechaniczne w procesach dużych odkształceń sprężysto – plastycznych metali*, Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN, Warszawa 1999.
- [Nowacki 1960]: Nowacki W., *Zagadnienia termosprężystości*, PWN, Warszawa 1960.
- [Nowacki 1966]: Nowacki W., *Dynamiczne zagadnienia termosprężystości*, PWN, Warszawa 1966.
- [Nowacki 1972]: Nowacki W., *Termosprężystość*, Zakład Narodowy Imienia Ossolińskich Wydawnictwo Polskie

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

- Akademii Nauk, Wrocław – Warszawa – Kraków – Gdańsk 1972.
- [Nowacki 1981]: Nowacki W., *Teoria niesymetrycznej sprężystości*, PWN, Warszawa 1981.
- [Nowacki 1986]: Nowacki W., *Thermoelasticity*, PWN – Pergamon Press, Warszawa – Oxford 1986.
- [Nowacki 1991]: Nowacki W., Olesiak Z. S., *Termodyfuzja w ciałach stałych*, PWN, Warszawa 1991.
- [Othman 2010]: Othman M. I. A., *Generalized Electro – Magneto – Thermoelasticity in Case of Thermal Shock Plane Waves for Finite Conduction Half-Space with Two Relaxation Times*, *Mechanics and Mechanical Engineering*, 14, 1, 2010, s. 5-30.
- [Pei 2019]: Pei C, Sussman M., Hussaini M. Y., *A Space-Time Discontinuous Galerkin Spectral Element Method for Nonlinear Hyperbolic Problems*, *Int. J. of Comp. Meth.*, 1, 16, 2019, s. 1-48.
- [Piekarski 2005]: Piekarski S., *On the thermodiffusion equation for electrically charged matter*, *Journal of Technical Physics*, 46, 2, 2005, s. 83-95.
- [Podhorecka 1988]: Podhorecka A., *Metoda elementów czasoprzestrzennych w zagadnieniach geometrycznie nieliniowych*, *Mech. Teor. Stos.* 26, 1988, s. 683-699.
- [Podhorecka 1998]: Podhorecka A., Podhorecki A., *Drgania płyt z uwzględnieniem efektów geometrycznie nieliniowych*, *Budownictwo* 30, *Zeszyty Naukowe* Nr 213, Bydgoszcz 1998, s. 5-14.
- [Podhorecki 1985]: Podhorecki A., Podhorecka A., *Lepkosprężysty element czasoprzestrzenny*, *Rozp. Inż.*, 33, 1985, s. 3-22.
- [Podhorecki 1986]: Podhorecki A., *The viscoelastic space-time element*, *Comp. Struct.*, 23, 1986, s. 535-544.
- [Podhorecki 1989]: Podhorecki A., *Stabilność rozwiązań w metodzie elementów czasoprzestrzennych*, *Rozpr. Inż.*, 37, 1, 1989, s. 41–51.
- [Podhorecki 1991]: Podhorecki A., *Metoda elementów czasoprzestrzennych w geometrycznie nieliniowej teorii lepko-sprężystości*, *Rozprawy* 45, Wydawnictwa Uczelniane ATR w Bydgoszczy, Bydgoszcz 1991.
- [Podhorecki 1994]: Podhorecki A., Podhorecka A., *Formulation of the equations of viscoelastic motion in a fibre composite medium*, *Arch. Civil Eng.*, 40, 1994, s. 169-188.

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

- [Podhorecki 2005]: Podhorecki A., *Podstawy teoretyczne metody elementów czasoprzestrzennych*, Wydawnictwo Uczelniane Akademii Techniczno – Rolniczej w Bydgoszczy, Bydgoszcz 2005.
- [Podstrigacz 1960]: Podstrigacz J. S., *Osnownyje rieszenie niestacjonarnej termouprugoj zadaczi*, Prikl. Mech. 2, 6, 1960.
- [Podstrigacz 1961]: Podstrigacz J. S., *Diferencjalni rownania zadaczi termodyfuzii w twierdomu deformowanemu izotropnomu tili*, D. A. N. URSR, 2, 1961.
- [Podstrigacz 1965]: Podstrigacz J. S., Pawlina W. S., *Osnownyje urawnienia plaskoj zadaczi termodyfuzji*, Prikl. Mech. 1, 3, 1965.
- [Quaine 2020]: Quaine K., Gimperlein H., Stoczek J., Lacey A., *Efficient Space-Time Finite Elements for Thermo-Mechanical Problems*, Cranfield Online Research Data CORD, 2019, s. 1-14.
- [Rakowski 1992]: Rakowski G., *Mechanika budowli. Ujęcie komputerowe*, Arkady, Warszawa 1992.
- [Rożnowski 1969]: Rożnowski T., *Niestacjonarne pole temperatury w półprzestrzeni w przypadku ruchomego ogrzania na brzegu*, Rozpr. Inżyn. 1969, 4, 17, 751.
- [Rożnowski 1988]: Rożnowski T., *Ruchome źródła ciepła w termo-sprężystości*, PWN, Warszawa 1988.
- [Runesson 2001]: Runesson K., Larsson F., Hansbo P., *Space-time Finite Elements and Adaptive Strategy for the Coupled Poroelasticity Problem*, SMIA 87, 2001, s. 67-72.
- [Saeed 2020]: Saeed T., Abbas I., Marin M., *A GL model on thermo-elastic interaction in a poroelastic material using finite element method*, Symmetry 12, 3, 488, 2020.
- [Saeedmonir 2022]: Saeedmonir S., Khoei A. R., *Multiscale modeling of coupled thermo-hydro-mechanical analysis of heterogeneous porous media*, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg, 391, 2022, s. 1-34.
- [Shaw 2000]: Shaw S., Whiterman J. R., *Adaptive space-time element solution for Volterra equations arising in viscoelasticity problems*, J. Comp. Appl. Meth., 125, 2000, s. 335-345.
- [Shaw 2019]: Shaw S., *An a priori error estimate for a temporally discontinuous Galerkin space-time finite element method for linear elasto- and visco-*

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

- dynamics*, Computer Methods in Applied Mech. and Engineering, 351, 2019, s. 1-19.
- [Shivay 2019]: Shivay O.N., Mukhopadhyay S., *On the solution of a problem of extended thermoelasticity theory (ETE) by using a complete finite element approach*, CMST 25, 2, 2019, s. 61-70.
- [Shivay 2021]: Shivay O.N., Mukhopadhyay S., *A porothermoelasticity theory for anisotropic medium*, Continuum Mech. Thermodyn. 33, 6, 2021, s. 2515 – 2532.
- [Sneddon 1960]: Sneddon J. N., *On the steady state thermoelastic problem for the half – space and the thick plate*, Quart. Appl. Math. 1960.
- [Sosnowska 2015]: Sosnowska M., *O zjawisku termodyfuzji w budownictwie*, Nauka niejedno ma imię ... Tom III, Wydawnictwa Uczelniane UTP, Bydgoszcz 2015, s. 79-91.
- [Sosnowska 2019]: Sosnowska M., Podhorecki A., *Extension of Hamilton's principle for the problem of thermodiffusion in solid*, AIP Conference Proceedings, 2077, New York 2019, s. 1-5.
- [Stefaniak 1980]: Stefaniak J., Jankowski J., *Plaskie fale harmoniczne i dyfuzja w ciele stałym*, Mech. Teor. Stos., 18, 1980, 3.
- [Stefaniak 1982]: Stefaniak J., *Wpływ pola elektromagnetycznego na termodyfuzję w ośrodku izotropowym*, PWN, Warszawa – Poznań 1982.
- [Stefaniak 1987]: Stefaniak J., Jankowski J., *Numerical methods of the concentrated heat sources control*, Journal of Technical Physics, 1987, 28, s. 87-96.
- [Stefaniak 1998]: Stefaniak J., *The method of concentrated sources in solving thermal stress problem*, J. Thermal Stresses, 1998, 21.
- [Steinbach 2020]: Steinbach O., Zank M., *Coercive space-time finite element methods for initial boundary value problems*, ETNA 52, 2020, s. 154-194.
- [Sternberg 1957]: Sternberg E., Dowell E. L., *On the steady state thermoelastic problem for the half – space and the thick plate*, Quart. Appl. Math. 1957.
- [Szweda 2012]: Szweda Z., Zybura A., *Wyznaczanie współczynnika dyfuzji chlorków w betonie na podstawie badań migracji jonów w polu elektrycznym*, Przegląd Budowlany 6, 2012, s. 60-62.

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych

- [Szweda 2019]: Szweda Z., *Analiza wartości współczynników dyfuzji i migracji w betonie prefabrykowanych płyt stropowych typu HC-500*, Materiały Budowlane 7, 563, 2019, s. 34-35.
- [Śliwa 2014]: Śliwa T., *Analiza odkształcania i pęknięcia materiałów ilastych podczas suszenia konwekcyjnego*, Wydawnictwo Politechniki Poznańskiej, Poznań 2014.
- [Świrska-Perkowska 2015]: Świrska-Perkowska J., Gajda M., *Wyznaczanie współczynnika dyfuzji wilgoci w drewnie sosny zwyczajnej*, Roczniki Inżynierii Budowlanej 15, 2015, s. 17-28.
- [Tanaka 1995]: Tanaka M., Matsumoto T., Moradi M., *Application of boundary element method to 3-D problems of coupled thermoelasticity*, Engineering Analysis with Boundary Elements, 16, 1995.
- [Wakeni 2019]: Wakeni M.F., Reddy B.D., *Space-time Galerkin methods for simulation of laser heating using the generalized nonlinear model*, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 357, 2019, s. 1-18.
- [Wieczorek 2009]: Wieczorek B., *Rozwiązania podstawowe quasi – statycznego zagadnienia termodyfuzji sprzężonej w ośrodku o właściwościach mikropolarnych*, Modelowanie inżynierskie, 38, 2009, s. 279-286.
- [Wierzba 2006]: Wierzba B., *Pole naprężeń generowane dyfuzją w układzie powłoka – podłoże*, Akademia Górniczo – Hutnicza, Kraków 2006.
- [Wiśniewski 2000]: Wiśniewski S., Wiśniewski T.S., *Wymiana ciepła*, WNT, Warszawa 2000.
- [Zhang 2020]: Zhang T., Duan M., *One-level and multilevel space-time finite element method for the viscoelastic Kelvin-Voigt model*, Math. Met. in the App. Sci., 43, 7, 2020, s. 4744-4768.
- [Zheng 2015]: Zheng B.J., Gao X.W., Kai Y., Zhang C.Z., *A novel meshless local Petrov-Galerkin method for dynamic coupled thermoelasticity analysis under thermal and mechanical shock loading*, Eng. Anal. Bound. Elem. 60, 2015, s. 145–161.
- [Zienkiewicz 1972]: Zienkiewicz O.C., *Metoda elementów skończonych*, Arkady, Warszawa 1972.

STRESZCZENIE

Modelowanie termodyfuzji sprzężonej metodą elementów czasoprzestrzennych mgr inż. Magdalena Sosnowska

Słowa kluczowe: metoda elementów czasoprzestrzennych, sprzężona termodyfuzja, mechanika ciała stałego

W niniejszej pracy wykorzystano metodę elementów czasoprzestrzennych, opartą na technice bezpośredniej dyskretyzacji czasoprzestrzennej, w celu rozwiązania problemu sprzężonej termodyfuzji. Traktując czas jako dodatkowy wymiar przestrzenny, dokonuje się jednoczesnej dyskretyzacji czasu i przestrzeni. Pełną aproksymację czasoprzestrzenną można uznać za rozszerzenie metody elementów skończonych w dziedzinie czasu, pozwala to traktować zmienne przestrzenne w taki sam sposób jak zmienną czasową. Rozważano odkształcalne ciało stałe. Pod wpływem obciążeń zewnętrznych i sił masowych, na skutek działania źródeł ciepła i masy wewnątrz ciała lub/i w wyniku zmiany temperatury oraz wyrównywania stężeń substancji dyfundujących w rozpatrywanym obszarze, ciało ulega przemieszczeniom, odkształceniom, zmienia się temperatura i stężenie substancji dyfundującej. Rozważane liniowe zagadnienie początkowo - brzegowe sprzężonej termodyfuzji opisane zostało układem równań różniczkowych cząstkowych. Korzystając z warunków brzegowych i początkowych, równania fizycznego i dokonując odpowiednich przekształceń, otrzymano równania czasopracy wirtualnej, w których widoczne są sprzężenia odkształceń, temperatury i dyfuzji. Rozważania teoretyczne zilustrowano i potwierdzono analizami numerycznymi.

ABSTRACT

Modeling of coupled thermodiffusion using the space-time finite element method

MSc. Magdalena Sosnowska

Key words: space-time finite element method, coupled thermodiffusion, solid mechanics

A space-time finite element method based on the direct space-time discretization technique is developed for solving coupled thermodiffusion problem. By considering the time scale as an additional space dimension, the spatial and temporal domains are simultaneously discretized. The full space-time approximation can be considered as an extension of the finite element method over the time domain and it allows to treat spatial variables in the same way as the time variable. Deformable solid body has been considered. Under the influence of surface forces and mass forces, due to the action of heat and mass sources inside the body and/or as a result of temperature change and equalization of the diffusible substance concentrations in the considered area, the body experiences displacements, deformation, stresses, the temperature and the diffusible substance concentration change. The considered linear initial - boundary issue of coupled thermodiffusion is described by the set of equations. Using the boundary and initial conditions, the physical equation and making appropriate transformations, the equations of the virtual time-work are obtained in which the couplings of deformations, temperature and diffusion are visible. The theoretical analyses are illustrated and confirmed by numerical experiments.