

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Gépészmérnöki Kar Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék

BME₄₀





Kőzetreológiai hullámterjedés szimulációja

TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI DOLGOZAT Készítette: Pozsár Áron

Konzulens: Dr. Fülöp Tamás

Budapest, 2021

Szerzői jog © Pozsár Áron, 2021. Szerzői jog © Dr. Fülöp Tamás 2021.

Kivonat

Számos kőzet esetén tapasztalat, hogy a dinamikus rugalmasságtani együtthatók nagyobbak a statikus értékeknél [1]. A rugalmasságtani leírás reológiai általánosítása nemcsak erre ad magyarázatot, hanem többek között alapul szolgál az Anelastic Strain Recovery *in situ* feszültségmeghatározási módszerhez is.

Kézenfekvő ezek alapján, hogy például a dilatációs rezonanciafrekvencia-módszer [2] kiértékeléséhez is a rugalmasságtani hullámterjedési sebességek helyett reológiai megfelelőik [3] legyenek felhasználva. Ez motiválta az itt bemutatott kutatást.

Kereskedelmi végeselemes programok, a beépítetten felkínált klasszikus (pl. Runge–Kutta) időbeli léptetőkkel már a rugalmas hullámterjedést sem képesek megbízhatóan leírni [4, 5]. Saját fejlesztésű, ún. szimplektikus numerikus végesdifferencia-sémával ellenben kis erőforrásigény mellett is pontosan sikerült szimulálni rugalmas és reológiai hullámterjedést, téglatest geometriájú mintákban [4, 5].

E séma hengerszerű próbatestekre alkalmazható általánosítását valósítottam meg dolgozatomban. Egy megfelelően kialakított szimplektikus séma realizálásával megbízhatóan sikerült rugalmas és reológiai hullámterjedést szimulálni, megnyitva ezzel az utat például a dilatációs rezonanciafrekvencia-módszer reológiai kiértékeléséhez.

Tartalomjegyzék

| 1. | Bevezetés | 1 |
|----|--|--|
| 2. | Szilárd közegek rugalmas és reológiai modelljei2.1. Alap-modellelemek2.2. Kelvin-modell2.3. Maxwell-modell2.4. Poynting–Thomson–Zener-modell2.5. Kluitenberg–Verhás-modell2.6. Az anyagtörvény termodinamikai alapjai2.7. Gömbi-deviatorikus felbontás | 3 4 5 5 5 6 7 |
| 3. | Szimplektikus numerikus módszerek | 9 |
| 4. | Hullámterjedés reológiai közegben 4.1. A hullámterjedést leíró kontinuum modell 4.2. A módszer hengerkoordináta-rendszerben 4.2.1. Konzervatív rendszer: Hooke eset 4.2.2. Disszipatív rendszer: Poynting–Thomson–Zener eset | 11 11 13 17 21 |
| 5. | Hengeres test szimulációja 5.1. Hooke eset. | 23 24 31 |
| 6. | Összefoglalás | 41 |

1. fejezet Bevezetés

A kőzeteken gyakorta figyelhetünk meg a tiszta rugalmasságon messze túlmutató viselkedést. Vélhetően a belső szerkezetük bonyolultsága eredményezi azokat a jelenségeket, melyeket a matematika nyelvén időfüggőnek nevezünk. Külső beavatkozás hatására egészen különböző – másodpercektől akár évekig terjedő – időskálákon tapasztalhatunk késleltetett, vagy csillapított anyagi reakciót, melyek figyelembevétele sokszor igen kritikus lehet.

Egy kőzet állapotának időfüggésének (más szóval reológiai viselkedésének) megfigyelésére jó példa az Anelastic Strain Recovery (ASR) módszer, mely *in situ* feszültséget határoz meg abból, hogy az adott kőzetminta hogyan – és milyen kezdeti állapotból – relaxálódik azután, hogy



1.1. ábra. A statikus és dinamikus térfogati rugalmassági modulus kapcsolata különböző kőzettípusokra [1].

feszültségmentes állapotba került. A legegyszerűbb reológiai modell, mely ennek a feladatnak a megfelelő kezeléséhez bizonyítottan szükséges, az ún. Kluitenberg–Verhás-modell, melyet a Kelvin–Voigt és a Poynting–Thomson–Zener-modellek általánosításának tekintünk.¹

Míg a Kluitenberg–Verhás-modell például a fentebb említett ASR módszerben alkalmazható kiválóan, számos gyakorlati esetben a dolgozat fókuszában álló Poynting–Thomson–Zener-modell is kielégítőnek bizonyul (ez a viselkedés a kőzeteken túl jól megfigyelhető például az aszfaltnál, műanyagoknál, gumiknál stb.). Ez az anyagtörvény – a termodinamika második főtételének következményeként – már előrevetíti, hogy a dinamikus rugalmasságtani együtthatók értéke mindig nagyobb a statikusnál. Ezt a tulajdonságot számos különböző kőzettípusra vonatkozóan igazolták [1].

A dolgozat célja egy megbízható numerikus módszer kialakítása Poynting–Thomson–Zenermodellel leírható hengeres testekben történő hullámterjedés szimulációjára. Bemutatásra kerülnek a szilárd közegek rugalmas és reológiai (viszkoelasztikus) anyagviselkedésének alapjai, a legfontosabb jelenségek, szemléltetésük és a matematikai leírásuk, illetve termodinamikai konzisztenciájuk. Szó esik a szimplektikus végesdifferencia módszerekről és előnyeikről a nem szimplektikus módszerekhez képest. Az ismertetett alapokra és korábbi eredményekre [5] építve megvalósítunk egy hullámterjedés leírására szolgáló numerikus módszert három térdimenziós hengerkoordináta-rendszerre. A megalkotott modellre *Python* programkörnyezetben szimulációkat végzünk és nyomon követjük a rendszer viselkedését.

¹Ezekről a későbbiekben részletesebben is szót ejtünk.

2. fejezet

Szilárd közegek rugalmas és reológiai modelljei

A testek mechanikai anyagmodelljei – ún. konstitutív egyenletek – a feszültség és az alakváltozás között teremtenek kapcsolatot. Ez az összefüggés gyakorlatilag tetszőlegesen bonyolult alakot felvehet. A dolgozatban a homogén, izotrop anyagok időfüggő reológiai (viszkoelasztikus) modelljeit vizsgáljuk, azonban számos esetben szükség lehet például anizotrop anyagi viselkedés figyelembevételére is (például polimer kompozitok esetén irányfüggés).

A legegyszerűbb esetben, rugalmas modell esetén a kapcsolat lineáris. Ez a jól ismert Hooketörvény. A rugalmas testek a terhelés megszűnése után teljes mértékben visszatérnek alapállapotukba. Annak ellenére, hogy ezek a feltételezések nagymértékű egyszerűsítést jelentenek, a lineárisan rugalmas számítások remekül összeegyeztethetőek a tapasztalati megfigyelésekkel. A mindennapokban használatos anyagok közül nagyon sok leírható ezen anyagmodellel (fémek, műanyagok egy része, kerámiák, stb.) [6]. Minden rugalmas anyagnál azonban a kezdeti lineáris viselkedés egy ponton véget ér. Ezt a határt folyáshatárnak nevezzük. Egyes esetekben rendkívül könnyen meghatározható, azonban előfordul, hogy nincs éles határ, mely elválasztja a rugalmas és nem rugalmas szakaszt. Ezen elmélet használatának mindig szigorú korlátai vannak, ezért gyakran fordulunk bonyolultabb, de nagyobb általánosságban használható modellekhez.

Reológiáról akkor beszélhetünk, ha az anyagban a folyási tulajdonságok leírása is megjelenik. A mérnöki gyakorlatban ezen az elméleten alapuló modellek használata széleskörűen elterjedt. Gondoljuk csak a kúszásra, vagy a relaxációra. Egy testet ugrásszerűen megterhelve, majd a terhelést állandóan tartva a deformáció fokozatosan egy állandósult értéket vesz fel: ez a kúszás. Egy testet ugrásszerűen deformálva, majd a deformációt állandóan tartva a feszültség fokozatosan egy állandósult értéket vesz fel: ez a relaxáció. Ezek a jelenségek a rugalmasságon túlmutatnak. Általában az előbb leírt két alapjelenség egyetlen modell keretein belül történő leírása okoz nehézséget [7].

A reológiai modellek fizikai tartalma egészen egyszerűen szemléltethető is rugók és olajfékek használatával. A kapcsolások alapján felírhatók a rendszert jellemző lineáris differenciálegyenletek. Összetett esetekben különböző kapcsolásokkal is hasonló (csak paramétereikben eltérő) egyenleteket származtathatunk, ezért a rendszerek megkülönböztetését – a szemlélettől elszakadva – inkább a modelleket paraméteresen leíró differenciálegyenletek csoportosításával érdemes végezni. Emellett azonban a következőkben egy példa a kapcsolási összeállításra is bemutatásra kerül minden esetben.

2.1. Alap-modellelemek

Az alap-modellelemek segítségével olyan rendszereket építhetünk, melyek az általunk leírni kívánt jelenséget egyszerűen, valós fizikai tartalomhoz köthetően előállítják. Ehhez legtöbbször kétféle elemet használunk:

- ideális rugó: ún. Hooke-elem, mely a feszültség és deformáció közötti lineáris kapcsolatot modellezi;
- ideálisan viszkózus elem: ún. Newton-elem, melyet egy viszkózus folyadékkal töltött hengerben mozgó perforált dugattyú (olajfék) reprezentál, a feszültség és a deformációsebesség közötti lineáris kapcsolatot modellezi.



2.1. ábra. Kapcsolási vázlatok. *Balra:* Hooke-test. *Jobbra:* Newton-test [8].

A Hooke-elemet a

$$\sigma = E\varepsilon, \tag{2.1}$$

míg a Newton-elemet a

$$\sigma = \hat{E}\dot{\varepsilon} \tag{2.2}$$

egyenlettel szokás jellemezni, ahol σ a feszültség, ε az alakváltozás, E a rugalmassági modulus, \hat{E} pedig a viszkozitási együttható. A változó feletti pont (például $\dot{\varepsilon}$) az idő szerinti deriváltat jelöli.

2.2. Kelvin-modell

Ezen modell segítségével reprezentálhatjuk a kúszás jelenségét.



2.2. ábra. A Kelvin-test kapcsolási vázlata [8].

A Kelvin-testet a

$$\sigma = E\varepsilon + \hat{E}\dot{\varepsilon} \tag{2.3}$$

egyenlettel jellemezhetjük.

2.3. Maxwell-modell

Ezen modell segítségével a feszültségrelaxáció jelenségét reprezentálhatjuk.

2.3. ábra. A Maxwell-test kapcsolási vázlata [8].

A Maxwell-testet a

$$\sigma + \tau \dot{\sigma} = \hat{E} \dot{\varepsilon} \tag{2.4}$$

egyenlettel jellemezhetjük, ahol megjelent egy új paraméter, a feszültség időderiváltjának együtthatója, a τ relaxációs idő.

2.4. Poynting–Thomson–Zener-modell

A Kelvin-modell által jósolt kúszást és a Maxwell-modellben megjelenő feszültségrelaxációt egyesíti a Poynting–Thomson–Zener-féle úgynevezett "standard" modell [8].



2.4. ábra. A Poynting-Thomson-Zener-test kapcsolási vázlatára két lehetőség [8].

A Poynting–Thomson–Zener-testet a

$$\sigma + \tau \dot{\sigma} = E\varepsilon + \hat{E}\dot{\varepsilon} \tag{2.5}$$

egyenlettel jellemezhetjük.

2.5. Kluitenberg–Verhás-modell

Az előzőekben ismertetett alapelemekből számos magasabb időderiváltat tartalmazó reológiai anyagmodell származtatható, azonban egy fontos, termodinamikailag legitim eset pusztán rugók és olajfékek alkalmazásával nem előállítható. Az ún. Kluitenberg–Verhás-féle reológiai modellcsalád a

$$\sigma + \tau \dot{\sigma} = E\varepsilon + \hat{E}\dot{\varepsilon} + \hat{E}\ddot{\varepsilon} \tag{2.6}$$

egyenlettel írható fel. Ezen modellnek csak egy részét tudjuk előállítani az előző alapelemek soros illetve párhuzamos kapcsolásával, viszont az ún. túltehetetlen anyagi viselkedés – melynek következtében elméletileg reológiai rezonancia léphet fel [9]– leírásához egy új elemet kell bevezetni. Ez az új elem az alakváltozás második időderiváltjához kötődik, melyet Verhás vezetett be [10].



2.5. ábra. A Verhás-elem [10].

A Verhás-elemet a

$$\sigma = \hat{E}\ddot{\varepsilon} \tag{2.7}$$

egyenlettel jellemezhetjük.

A mechanikában a rugalmas és reológiai eseteken túl a képlékeny anyagviselkedés is nagy jelentőséggel bír. A számos képlékenységi elmélet közül az ún. ideálisan rugalmas-képlékeny elméletet hasonlóan előző elemeinkhez, az ún. St Venant-elemmel reprezentálhatjuk [11]. A dolgozatban a képlékeny viselkedéssel nem foglalkozunk.

2.6. Az anyagtörvény termodinamikai alapjai

Köztudott, hogy mechanikai folyamatoknál nem lehet megakadályozni a hő keletkezését. A termikus hatás megjelenése elkerülhetetlen, ha vannak energiaváltozások. Ebből következik, hogy önmagukban a mechanikai kölcsönhatások nem tárgyalhatók korrektül, számításba kell vennünk a termikus jelenségeket is. Ha ezt szeretnénk minél jobban figyelmen kívül hagyni, akkor vagy biztosítanunk kell a gyors hőelvezetést az állandó hőmérsékleten tartás céljából, vagy a termikus munkavégzést kell zérusra redukálnunk [8].

Mechanikai kölcsönhatásoknál a tömeg-, az impulzus- és az energiamérlegek az alapvető összefüggéseink. Ezeken felül azonban létezik még egy további – az előzőektől nem független – fizikai mennyiség, az entrópia. A termodinamika második főtétele (mely fizikai tartalmát tekintve az anyag stabilitásának elve) szerint az összes entrópia elszigetelt rendszerben nem csökkenhet. Ez az entrópia mérlegében úgy jelenik meg, hogy van egy forrástag, amely nemnegatív (és csak egyensúly esetén nulla). Az entrópia a nemegyensúlyi termodinamika alapvető anyagfüggvénye, és minden más anyagfüggvényt vagy közvetlenül belőle származtathatunk (intenzívek és deriváltjaik), vagy az entrópiatermeléshez köthetünk (hővezetés, belső súrlódás, stb.). Elmondható, hogy a termodinamika második főtétele (ezáltal az entrópianövekedés elve) jelentősen megszorítja, bizonyos egyszerű további feltevések mellett teljesen meghatározza az anyagtörvényt [11].

Ezek szerint a termodinamika elméleti szerepe kiemelkedő, azonban a dolgozatban bemutatott numerikus módszert is nagyban motiválja.

2.7. Gömbi-deviatorikus felbontás

Izotrop anyagok esetén különös jelentőséggel bír a tenzorok gömbi-deviatorikus felbontása, ugyanis ekkor ahelyett, hogy a feszültség- és alakváltozási tenzorok között egy negyedrendű (fő- és mellékszimmetriákkal egyaránt rendelkező) tenzor teremtene kapcsolatot, a gömbi- és deviatorikus részek egy-egy konstanssal való lineáris kombinációja elegendő. Ezeken felül izotrop anyagok disszipatív folyamatai esetén az entrópiaprodukcióban Curie elve értelmében [12] csak az azonos tenzori rendű és karakterű tagok csatolódnak (skalár skalárral, vektor vektorral, deviatorikus tenzor deviatorikus tenzorral, stb.).

A felbontást a feszültség és az alakváltozás estére is egyszerűen megtehetjük

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{S}} = \frac{1}{3} (\mathrm{tr}\boldsymbol{\sigma}) \mathbf{1}, \qquad \boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{D}} = \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{S}}, \qquad (2.8)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{S}} = \frac{1}{3} (\mathrm{tr}\boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{1}, \qquad \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{D}} = \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{S}}$$

$$(2.9)$$

felírásával, ahol σ a feszültségtenzor, ε az alakváltozási tenzor, 1 az egységtenzor, ^S indexek utalnak a gömbi (angolul Spherical), ^D indexek pedig a deviatorikus részre. Kontinuumok anyagtörvényét így felírhatjuk két egyenletre bontva: egy gömbi és egy deviatorikus részre vonatkozó egyenlettel. Kis deformációs feltételezés mellett a tenzorok rendelkeznek azzal a tulajdonsággal, hogy a gömbi rész írja le a deformálódás térfogati részét, a deviatorikus rész pedig az állandó térfogatú részét. Ez mind fizikai értelmezés, mind alkalmazás szempontjából értékes jellemző. Egyes anyagi viselkedések csupán a test belső szerkezetének torzulásához köthetők, a térfogatváltozáshoz nem. Gondolhatunk ezalatt a súrlódásos jelenségekre, melyeket reológiai egyenletekben időfüggő tagok alkalmazásával vehetünk figyelembe. Ezt a gondolatmenetet követve kézenfekvő lehet eltérő modelleket alkalmazni a két egyenlethez [7, 8].

A felbontás a számítások nehézségét nem növeli, hiszen ugyanannyi független tenzorkomponenst kell számítanunk.

3. fejezet Szimplektikus numerikus módszerek

Bonyolult jelenségek vizsgálatakor gyakran fordulunk numerikus módszerekhez. Sokszor az analitikus megoldás előállítása rendkívül komplikált, így sok munkát igényel, vagy egyáltalán nem is lehetséges. Az eredmények pontosságával kapcsolatban támasztott követelmények nem is mindig igénylik a zárt alakú megoldás által elérhető precizitást. A numerikus megközelítés választásakor azonban rendkívül nehéz dolgunk van például abban az esetben, amikor a dolgozatban ismertetetthez hasonló, disszipatív jelenséggel foglalkozunk, ugyanis az esetleges nagy mértékű numerikus hibát¹ olyan jelenségnek tudhatjuk be, melynek valós fizikai tartalma van. Jelen dolgozatban egy olyan – esetünkben konzervatív rendszerre kiépített, majd disszipatív esetre kiterjesztett – módszer kerül bemutatásra, amely a hosszan tartó folyamatok szimulációja esetén is nagyon megbízhatóan működik. Ilyen ún. szimplektikus módszereket alkalmaznak többek között a csillagászatban, kvantumfizikában, stb.

Ahhoz, hogy a szimplektikus numerikus módszerekről beszélhessünk, először szót kell ejteni a Hamilton-rendszerekről, ezért tekintsük ([13] alapján), hogy hogyan áll elő egy egyszerű, egy szabadságfokú mechanikai rendszer Hamilton-függvénye. Vegyük a

$$L = T - U \tag{3.1}$$

Lagrange-függvényt, ahol $T = T(q, \dot{q})$ a kinetikus energia, U = U(q) a potenciális energia, q a rendszert leíró általános koordináta, \dot{q} pedig az általános koordinátasebesség. A rendszer mozgását a

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0 \tag{3.2}$$

másodfajú Lagrange-féle mozgásegyenlet írja le. Bevezetve a

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \left(q, \dot{q} \right) \tag{3.3}$$

ún. kanonikus impulzust, definiálhatjuk a mechanikai összenergiának megfelelő

$$H(q,p) = [\dot{q}p - L(q,\dot{q})]\Big|_{\dot{q}=\dot{q}(q,p)}$$
(3.4)

¹Beszélhetünk disszipatív és diszperziós hibáról. Előző az összenergia numerikus csökkenését vagy növekedését jelentheti, míg utóbbit hullámterjedési feladatok esetén a numerikus megoldásban jelentkező extra oszcillációként láthatjuk. Mindkét hibatípus a módszer paramétereinek megfelelő megválasztásával csökkenthető, akár ki is küszöbölhető [4].

Hamilton-függvényt. Belátható, hogy a

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p},\tag{3.5}$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q},\tag{3.6}$$

ún. Hamilton-féle kanonikus egyenletek a mozgás
egyenlettel ekvivalensek. (3.5)-(3.6)léptetését szimplektikus Euler mód
szerrel

$$q^{j+1} = q^j + \Delta t \cdot \frac{\partial H}{\partial p} \left(q^j, p^{j+1} \right), \qquad (3.7)$$

$$p^{j+1} = p^j - \Delta t \cdot \frac{\partial H}{\partial q} \left(q^j, p^{j+1} \right)$$
(3.8)

szerint tehetjük meg. Általános esetben ez egy implicit módszer, azonban ha a Hamiltonfüggvény szeparábilis (a p szerinti parciális derivált csak p-től függ, a q szerinti pedig csak q-tól), akkor a módszer explicitként léptethető, viszont az implicit módszerek tulajdonságait is használja, ugyanis a második egyenletet az első egyenletből számított új értékkel számoljuk.



3.1. ábra. Egy harmonikus oszcillátor fázistérképe. *Balra:* Szimplektikus megoldó. *Jobbra:* Nem szimplektikus megoldó [14].

A 3.1-es ábrán láthatjuk, hogy egy szimplektikus megoldó a fázistérben megőrzi az összenergiának megfelelő alakzat területét, melynek formája változhat, azonban a határolt terület mindvégig – a számábrázolási hibától eltekintve – állandó marad [14]. Ez több szabadsági fokkal rendelkező, bonyolultabb esetekben is igaz.

4. fejezet

Hullámterjedés reológiai közegben

4.1. A hullámterjedést leíró kontinuum modell

A dolgozatban kis alakváltozásokat feltételezünk. Ekkor a tömegsűrűség állandónak tekinthető, továbbá a szubsztanciális időderivált a parciális időderiválttal azonosítható. A hullámterjedés leírásához a

$$\varrho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \overleftarrow{\nabla} \tag{4.1}$$

impulzussűrűség-mérlegre (a mozgásegyenlet kontinuum megfelelője) és a

$$\frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial t} = \left(\mathbf{v} \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{\text{Sym}} \tag{4.2}$$

kinematikai egyenletre van szükségünk, ahol ρ a sűrűség, **v** a sebességmező, ^{Sym} pedig a tenzorok szimmetrikus részét jelöli. A (4.1) és (4.2) egyenletek anyagtól függetlenül érvényesek szilárd közegekre, azonban a feszültség és alakváltozás kapcsolatának leírásához szükség van az anyagtörvényre is. Az egyszerűség kedvéért homogén, izotrop anyagtulajdonságú testeket veszünk figyelembe. Az esetek elnevezéséhez a daviatorikus tag anyagtörvényét fogjuk használni. Rugalmas esetben a

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{S}} = E^{\mathrm{S}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{S}},\tag{4.3}$$

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{D}} = E^{\mathrm{D}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{D}} \tag{4.4}$$

Hooke-törvényt alkalmazzuk, ahol $E^{\rm S}=3K$ és $E^{\rm D}=2G~(K$ a nyírási, G pedig a kompresszibilitási modulus). Reológiai esetben a

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{S}} = E^{\mathrm{S}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{S}},\tag{4.5}$$

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{D}} + \boldsymbol{\tau}^{\mathrm{D}} \dot{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{D}} = \boldsymbol{E}^{\mathrm{D}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{D}} + \hat{\boldsymbol{E}}^{\mathrm{D}} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{D}}$$
(4.6)

Poynting–Thomson–Zener modellre szorítkozunk. A Hooke modell a legegyszerűbb próbája lehet a módszer működésének, a Poynting–Thomson–Zener-modellen pedig megfigyelhetjük az alapvető viszkoelasztikus viselkedéseket (kúszás, relaxáció).

A fajlagos összenergia Hooke esetben a

$$e_{\text{teljes}} = e_{\text{kinetikus}} + e_{\text{rugalmas}} = \frac{1}{2}\mathbf{v}^2 + \frac{E^{\text{S}}}{2}\operatorname{tr}\left(\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{S}}\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{S}}\right) + \frac{E^{\text{D}}}{2}\operatorname{tr}\left(\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{D}}\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{D}}\right)$$
(4.7)

összegként áll elő. Poynting–Thomson–Zener esetben az összenergia felírásához a [4] egy térdimenziós esetéhez hasonlóan bevezetjük a [9]-ben bemutatott

$$\hat{I}^{\mathrm{D}} = \hat{E}^{\mathrm{D}} - \tau^{\mathrm{D}} E^{\mathrm{D}} \tag{4.8}$$

csillapítási index-et (a termodinamika második főtételének következményeként mindig pozitív), továbbá a

$$s = c_{\sigma} \ln \frac{T}{T_{\rm ref}} \tag{4.9}$$

fajlagos entrópiát, ahol a $T_{\rm ref}$ konstans tetszőleges referenciahőmérséklet, c_{σ} pedig az "izobár" (nulla feszültség melletti) fajhő, amit az egyszerűség kedvéért konstansnak tekintünk. A

$$\frac{\operatorname{tr}\left[\left(\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{D}} - E^{\mathrm{D}}\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{D}}\right)^{2}\right]}{\hat{I}^{\mathrm{D}}}$$
(4.10)

entrópiaprodukció-sűrűség, és a

$$\underline{\varrho}c_{\sigma}\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\operatorname{tr}\left[\left(\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{D}} - E^{\mathrm{D}}\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{D}}\right)^{2}\right]}{\hat{I}^{\mathrm{D}}}$$
(4.11)

hőmérséklet növekedés számítása a [4]-ben leírtak három térdimenziós általánosítása. Így már felírhatjuk a fajlagos összenergiát reológiai esetre, ami

$$e_{\text{teljes}} = e_{\text{kinetikus}} + e_{\text{rugalmas}} + e_{\text{termikus}} + e_{\text{reológiai}}$$
(4.12)

tagokból áll, ahol

$$e_{\rm kinetikus} = \frac{1}{2} \mathbf{v}^2, \tag{4.13}$$

$$e_{\text{rugalmas}} = \frac{E^{\text{S}}}{2} \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{S}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{S}} \right) + \frac{E^{\text{D}}}{2} \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{D}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{D}} \right), \tag{4.14}$$

$$e_{\text{termikus}} = c_{\sigma} T, \tag{4.15}$$

$$e_{\text{reológiai}} = \frac{\tau^{\mathrm{D}}}{2\varrho \hat{I}^{\mathrm{D}}} \operatorname{tr} \left[\left(\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{D}} - E^{\mathrm{D}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{D}} \right)^{2} \right].$$
(4.16)

4.2. A módszer hengerkoordináta-rendszerben

Az általános, három térdimenziós esetben a

$$\mathbf{v} = \begin{bmatrix} v_r \\ v_\varphi \\ v_z \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{rr} & \varepsilon_{r\varphi} & \varepsilon_{rz} \\ \varepsilon_{r\varphi} & \varepsilon_{\varphi\varphi} & \varepsilon_{\varphiz} \\ \varepsilon_{rz} & \varepsilon_{\varphiz} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{rr} & \sigma_{r\varphi} & \sigma_{rz} \\ \sigma_{r\varphi} & \sigma_{\varphi\varphi} & \sigma_{\varphiz} \\ \sigma_{rz} & \sigma_{\varphiz} & \sigma_{zz} \end{bmatrix}.$$
(4.17)

mátrixok összes komponense felvehet nemzérus értéket. A (4.1) mátrixegyenletből a

$$\varrho \frac{\partial v_r}{\partial t} = \frac{\partial \sigma_{rr}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{r\varphi}}{\partial \varphi} + \frac{\partial \sigma_{rz}}{\partial z} + \frac{\sigma_{rr} - \sigma_{\varphi\varphi}}{r},$$
(4.18)

$$\varrho \frac{\partial v_{\varphi}}{\partial t} = \frac{\partial \sigma_{r\varphi}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{\varphi\varphi}}{\partial \varphi} + \frac{\partial \sigma_{\varphi z}}{\partial z} + 2 \frac{\sigma_{r\varphi}}{r},$$
(4.19)

$$\varrho \frac{\partial v_z}{\partial t} = \frac{\partial \sigma_{rz}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{\varphi z}}{\partial \varphi} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} + \frac{\sigma_{rz}}{r}, \qquad (4.20)$$

míg a (4.2)-ből a

$$\frac{\partial \varepsilon_{rr}}{\partial t} = \frac{\partial v_r}{\partial r},\tag{4.21}$$

$$\frac{\partial \varepsilon_{\varphi\varphi}}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial v_{\varphi}}{\partial \varphi} + \frac{v_r}{r},\tag{4.22}$$

$$\frac{\partial \varepsilon_{zz}}{\partial t} = \frac{\partial v_z}{\partial z},\tag{4.23}$$

$$\frac{\partial \varepsilon_{r\varphi}}{\partial t} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_{\varphi}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \varphi} - \frac{v_{\varphi}}{r} \right), \tag{4.24}$$

$$\frac{\partial \varepsilon_{rz}}{\partial t} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \varphi} + \frac{\partial v_\varphi}{\partial z} \right), \tag{4.25}$$

$$\frac{\partial \varepsilon_{\varphi z}}{\partial t} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial z} \right). \tag{4.26}$$

parciális differenciálegyenletek írhatók fel hengerkoordináta-rendszerben.

A klasszikus véges differencia módszerek minden értéket ugyanazon diszkrét helyeken és ugyanazon diszkrét időkben számítanak. Ezen felfogás ellen szól, hogy bizonyos mennyiségek fizikailag térben a tömeghez – a térfogat középpontjához –, míg mások a peremekhez köthetők. Ez indokolja, hogy a sebesség és feszültség térben fél lépéssel el legyenek tolva egymáshoz képest [5]. Továbbá az is belátható, hogy időben is érdemes hasonlóan eljárni. Ezt megérthetjük a hővezetés példáján. A fajlagos belső energia Δt diszkrét idő alatti változása annak a hőáramnak a következménye, amely az adott térrészt Δt alatt hagyja el. Ha az energia számítását kötjük az időbeli középhez, akkor a fluxust ennek a peremeihez tanácsos kapcsolni, $\Delta t/2$ -vel eltolva. Fontos megemlíteni, hogy a hengeres séma a korábban már megalkotott – téglatest-szerű testek szimulációjára kiválóan működő – derékszögű koordinátás kiosztás elgondolásait hordozza magában, amely a fentebb leírt megfontolások szerint készült.



4.1. ábra. A derékszögű koordinátákra alkotott séma elrendezésének (x, y) síkja (a merőleges síkok kiosztása ezzel analóg módon épül fel). A különböző irányba mutató háromszögek jelzik v_x -et és v_y -t, a körök a feszültségi és alakváltozási mátrix diagonális elemeit, míg a négyzetek az offdiagonális (itt xy indexű) komponenseket. A feketére színezett szimbólumok a módszer által számított mennyiségek, míg az üresek a peremfeltétel által vezéreltek [5].

A mennyiségek szomszédságának megőrzésével az imént bemutatott derékszögű kiosztás egyszerűen átalakítható polárkoordinátás elrendezésűvé. A létrehozott rendszerben nemtriviális vonás, hogy a hengerkoordináta-rendszer szinguláris az r = 0 tengely mentén, a tengely kimarad a reguláris koordinátázásból, mesterséges belső peremként jelentkezik. Mivel a tengely mentén semmi külső, extra hatás nem éri a reguláris r > 0 tartományt, a tengely szabad peremként veendő figyelembe. Egy körszelet sugármenti diszkretizálásakor a legtriviálisabb eljárás az egyenlő szélességű gyűrűkre való osztás volna, azonban a bemutatott módszerben nem ezt alkalmazzuk. Olyan rétegeket hozunk létre, melyek területe minden esetben egyenlő. Ez a féllel térben eltolt mennyiségekre is érvényes. Ily módon nagyobb numerikus pontosságra számíthatunk, továbbá az energiák számolása is egyszerűsödik, mivel minden cella térfogata azonos lesz. A vizsgált R sugarú hengeres testet L darabra osztjuk a sugara mentén úgy, hogy

$$r = 0, \dots, R,\tag{4.27}$$

továbbá

$$r = r_0, r_{\frac{1}{2}}, r_1, \dots, r_{l-\frac{1}{2}}, r_l, r_{l+\frac{1}{2}}, r_{l+1}, \dots, r_{L-1}, r_{L-\frac{1}{2}}, r_L$$
(4.28)

(vö. 4.2. ábrával). Az egymást követő egész indexszel ellátott és az egymást követő fél-indexszel ellátott sugarak között is egyenlő

$$A_{\Box} = \frac{\pi \cdot R^2}{L} \tag{4.29}$$

terület akkor lehet, ha egész indexek esetén

$$A_{\Box} = \pi \left(r_{l+1}^2 - r_l^2 \right), \tag{4.30}$$

illetve fél-indexek esetén

$$A_{\Box} = \pi \left(r_{l+\frac{1}{2}}^2 - r_{l-\frac{1}{2}}^2 \right) \tag{4.31}$$

teljesül. Ezekből belátható, hogy a sugarak diszkretizálásának az

$$r_l = R\sqrt{\frac{l}{L}}, \quad \text{illetve az} \quad r_{l+\frac{1}{2}} = R\sqrt{\frac{l+\frac{1}{2}}{L}}$$

$$(4.32)$$

képletek alapján kell történnie. A továbbiakban minden távolságot az R sugárral dimenziótlanítunk. A szög, a z koordináta (a tengelyirány) és az idő szerint

$$\varphi_m = m\Delta\varphi, \quad m = 0, 1, \dots, M,$$

$$(4.33)$$

$$z_n = n\Delta z, \quad n = 0, 1, \dots, N, \tag{4.34}$$

$$t^{j} = j\Delta t, \quad j = 0, 1, \dots, J$$
 (4.35)

alapján diszkretizálunk, ahol

$$\Delta \varphi = \frac{2\pi}{M} \quad \text{és a körszimmetria miatt} \quad \varphi_0 = \varphi_M. \tag{4.36}$$

A feszültség és alakváltozás diagonális elemeinek diszkrét értékei

$$(\sigma_{rr})_{l,m,n}^{j}, (\sigma_{\varphi\varphi})_{l,m,n}^{j}, (\sigma_{zz})_{l,m,n}^{j}, (\varepsilon_{rr})_{l,m,n}^{j}, (\varepsilon_{\varphi\varphi})_{l,m,n}^{j}, (\varepsilon_{zz})_{l,m,n}^{j}$$

$$t^{j} \text{ időpillanatban és } r_{l}, \varphi_{m}, z_{n} \text{ helyen},$$

$$(4.37)$$

az offdiagonális elemeinek diszkrét értékei

$$(\sigma_{r\varphi})_{l+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2},n}^{j}, (\varepsilon_{r\varphi})_{l+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2},n}^{j} \quad t^{j} \text{ id} \tilde{\sigma} \text{ pillanatban és } r_{l+\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{l+\frac{1}{2}}{L}}, \varphi_{m} + \frac{\Delta\varphi}{2}, z_{n} \text{ helyen},$$

$$(4.38)$$

$$(\sigma_{rz})_{l+\frac{1}{2},m,n+\frac{1}{2}}^{j}, (\varepsilon_{rz})_{l+\frac{1}{2},m,n+\frac{1}{2}}^{j} \quad t^{j} \text{ időpillanatban és } r_{l+\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{l+\frac{1}{2}}{L}}, \varphi_{m}, z_{n} + \frac{\Delta z}{2} \text{ helyen},$$
(4.39)

$$(\sigma_{\varphi z})_{l,m+\frac{1}{2},n+\frac{1}{2}}^{j}, (\varepsilon_{\varphi z})_{l,m+\frac{1}{2},n+\frac{1}{2}}^{j} \quad t^{j} \text{ időpillanatban és } r_{l} = \sqrt{\frac{l}{L}}, \varphi_{m} + \frac{\Delta\varphi}{2}, z_{n} + \frac{\Delta z}{2} \text{ helyen},$$

$$(4.40)$$

míg a sebességek diszkrét értékei

$$(v_r)_{l+\frac{1}{2},m,n}^{j-\frac{1}{2}}$$
 $t^j - \frac{\Delta t}{2}$ időpillanatban és $r_{l+\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{l+\frac{1}{2}}{L}}, \varphi_m, z_n$ helyen, (4.41)

$$(v_{\varphi})_{l,m+\frac{1}{2},n}^{j-\frac{1}{2}} \quad t^{j} - \frac{\Delta t}{2} \text{ id} \breve{o} \text{pillanatban és } r_{l} = \sqrt{\frac{l}{L}}, \varphi_{m} + \frac{\Delta\varphi}{2}, z_{n} \text{ helyen},$$
(4.42)

$$(v_z)_{l,m,n+\frac{1}{2}}^{j-\frac{1}{2}} \quad t^j - \frac{\Delta t}{2} \text{ időpillanatban és } r_l = \sqrt{\frac{l}{L}, \varphi_m, z_n + \frac{\Delta z}{2} \text{ helyen}}$$
(4.43)

számolódnak.



4.2. ábra. A hengerkoordinátákra alkotott séma elrendezésének (x, y) síkja. A különböző irányba mutató háromszögek jelzik v_r -et és v_{φ} -t, a körök a feszültségi és alakváltozási mátrix diagonális elemeit, míg a négyzetek a offdiagonális (itt $r\varphi$ indexű) komponenseket. A feketére színezett szimbólumok a módszer által számított mennyiségek, míg az üresek a peremfeltételek által meghatározottak.

4.2.1. Konzervatív rendszer: Hooke eset

A Hooke estet leíró

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{S}} = E^{\mathrm{S}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{S}},\tag{4.44}$$

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{D}} = E^{\mathrm{D}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{D}} \tag{4.45}$$

konstitúciós egyenletekből egészen egyszerűen kifejezhetők a

$$\sigma_{rr} = \frac{E^S + 2E^D}{3} \varepsilon_{rr} + \frac{E^S - E^D}{3} \left(\varepsilon_{\varphi\varphi} + \varepsilon_{zz} \right), \tag{4.46}$$

$$\sigma_{\varphi\varphi} = \frac{E^S + 2E^D}{3} \varepsilon_{\varphi\varphi} + \frac{E^S - E^D}{3} \left(\varepsilon_{rr} + \varepsilon_{zz}\right), \qquad (4.47)$$

$$\sigma_{zz} = \frac{E^S + 2E^D}{3} \varepsilon_{zz} + \frac{E^S - E^D}{3} \left(\varepsilon_{rr} + \varepsilon_{\varphi\varphi} \right), \qquad (4.48)$$

$$\sigma_{r\varphi} = E^D \varepsilon_{r\varphi},\tag{4.49}$$

$$\sigma_{rz} = E^D \varepsilon_{rz},\tag{4.50}$$

$$\sigma_{\varphi z} = E^D \varepsilon_{\varphi z} \tag{4.51}$$

feszültségkomponensek, amiből a diszkretizált

$$(\sigma_{rr})_{l,m,n}^{j+1} = \frac{E^S + 2E^D}{3} (\varepsilon_{rr})_{l,m,n}^{j+1} + \frac{E^S - E^D}{3} \left((\varepsilon_{\varphi\varphi})_{l,m,n}^{j+1} + (\varepsilon_{zz})_{l,m,n}^{j+1} \right), \tag{4.52}$$

$$(\sigma_{\varphi\varphi})_{l,m,n}^{j+1} = \frac{E^{S} + 2E^{D}}{3} (\varepsilon_{\varphi\varphi})_{l,m,n}^{j+1} + \frac{E^{S} - E^{D}}{3} \left((\varepsilon_{rr})_{l,m,n}^{j+1} + (\varepsilon_{zz})_{l,m,n}^{j+1} \right), \tag{4.53}$$

$$(\sigma_{zz})_{l,m,n}^{j+1} = \frac{E^S + 2E^D}{3} (\varepsilon_{zz})_{l,m,n}^{j+1} + \frac{E^S - E^D}{3} \left((\varepsilon_{rr})_{l,m,n}^{j+1} + (\varepsilon_{\varphi\varphi})_{l,m,n}^{j+1} \right), \tag{4.54}$$

$$(\sigma_{r\varphi})_{l-\frac{1}{2},m-\frac{1}{2},n}^{j+1} = E^D \left(\varepsilon_{r\varphi}\right)_{l-\frac{1}{2},m-\frac{1}{2},n}^{j+1}, \qquad (4.55)$$

$$(\sigma_{rz})_{l-\frac{1}{2},m,n-\frac{1}{2}}^{j+1} = E^D(\varepsilon_{rz})_{l-\frac{1}{2},m,n-\frac{1}{2}}^{j+1}, \qquad (4.56)$$

$$(\sigma_{\varphi z})_{l,m-\frac{1}{2},n-\frac{1}{2}}^{j+1} = E^D \left(\varepsilon_{\varphi z}\right)_{l,m-\frac{1}{2},n-\frac{1}{2}}^{j+1}$$
(4.57)

alak is könnyen adódik.

Az előző fejezetben bemutatott numerikus elmélet gyakorlatba való ültetéséhez a (4.18)– (4.26) egyenletek diszkretizálását nemtriviális módon végezzük, mivel a szimplektikusság csak szigorú feltételek teljesülése esetén érvényesül. Konzervatív rendszerre építjük fel a modellt, azonban a későbbiekben disszipatív esetben is az itt kidolgozott megoldást használjuk. A konzervatív rendszer összenergiája a következő két energiafajta összege:

$$E_{\text{kinetikus}} = \frac{\varrho}{2} \left[\sum_{l=1}^{L} \sum_{m=0}^{M-1} \sum_{n=1}^{N-1} (v_r)_{l-\frac{1}{2},m,n}^2 + \sum_{l=1}^{L-1} \sum_{m=1}^{M} \sum_{n=1}^{N-1} (v_\varphi)_{l,m-\frac{1}{2},n}^2 + \right]$$
(4.58)

$$+\sum_{l=0}^{L-1}\sum_{m=0}^{M-1}\sum_{n=1}^{N} (v_z)_{l,m,n-\frac{1}{2}}^2 \bigg] \Delta V, \qquad (4.59)$$

$$E_{\text{rugalmas}} = \sum_{l=1}^{L-1} \sum_{m=0}^{M-1} \sum_{n=1}^{N-1} \left\{ \frac{2E^{\text{D}} + E^{\text{S}}}{6} \left[(\varepsilon_{rr})_{l,m,n}^{2} + (\varepsilon_{\varphi\varphi})_{l,m,n}^{2} + (\varepsilon_{zz})_{l,m,n}^{2} \right] + \frac{E^{\text{S}} - E^{\text{D}}}{3} \left[(\varepsilon_{rr})_{l,m,n} (\varepsilon_{\varphi\varphi})_{l,m,n} + (\varepsilon_{rr})_{l,m,n} (\varepsilon_{zz})_{l,m,n} + (\varepsilon_{\varphi\varphi})_{l,m,n} (\varepsilon_{zz})_{l,m,n} \right] \right\} \Delta V + E^{\text{D}} \left\{ \sum_{l=2}^{L-1} \sum_{m=1}^{M} \sum_{n=1}^{N-1} (\varepsilon_{r\varphi})_{l-\frac{1}{2},m-\frac{1}{2},n}^{2} + \sum_{l=2}^{L-1} \sum_{m=0}^{M-1} \sum_{n=2}^{N-1} (\varepsilon_{\varphiz})_{l,m-\frac{1}{2},n-\frac{1}{2}}^{2} \right\} \Delta V,$$

$$(4.60)$$

ahol ΔV a cellatérfogat (minden cellára megegyezik). Az áttekinthetőség javításának érdekében itt nem foglalkozunk az időpillanatok feltüntetésévél, ezt majd a későbbi összefoglalásnál tesszük meg. A megjelenő többszörös szummák multiindexei a továbbiakban egyszerűsített módon, összevonva szerepelnek α, β, γ jelölésekkel. A kinetikus és rugalmas energia összegéből állóH Hamilton-függvény elmozduláskomponensek szerinti deriváltjai:

$$\frac{\partial H}{\partial (u_r)_{l-\frac{1}{2},m,n}} = \left\{ \sum_{\alpha} \left[(\sigma_{rr})_{l,m,n} \right]_{\alpha} \cdot \frac{\partial (\varepsilon_{rr})_{\alpha}}{\partial (u_r)_{l-\frac{1}{2},m,n}} + \sum_{\beta} \left[(\sigma_{r\varphi})_{l,m,n} \right]_{\beta} \cdot 2 \frac{\partial (\varepsilon_{r\varphi})_{\beta}}{\partial (u_r)_{l-\frac{1}{2},m,n}} + \sum_{\gamma} \left[(\sigma_{rz})_{l,m,n} \right]_{\gamma} \cdot 2 \frac{\partial (\varepsilon_{rz})_{\gamma}}{\partial (u_r)_{l-\frac{1}{2},m,n}} \right\} \Delta V,$$
(4.61)

$$\frac{\partial H}{\partial (u_{\varphi})_{l,m-\frac{1}{2},n}} = \left\{ \sum_{\alpha} \left[(\sigma_{\varphi\varphi})_{l,m,n} \right]_{\alpha} \cdot \frac{\partial (\varepsilon_{\varphi\varphi})_{\alpha}}{\partial (u_{\varphi})_{l,m-\frac{1}{2},n}} + \sum_{\beta} \left[(\sigma_{r\varphi})_{l,m,n} \right]_{\beta} \cdot 2 \frac{\partial (\varepsilon_{r\varphi})_{\beta}}{\partial (u_{\varphi})_{l,m-\frac{1}{2},n}} + \sum_{\gamma} \left[(\sigma_{\varphi z})_{l,m,n} \right]_{\gamma} \cdot 2 \frac{\partial (\varepsilon_{\varphi z})_{\gamma}}{\partial (u_{\varphi})_{l,m-\frac{1}{2},n}} \right\} \Delta V,$$
(4.62)

$$\frac{\partial H}{\partial (u_z)_{l,m,n-\frac{1}{2}}} = \left\{ \sum_{\alpha} \left[(\sigma_{zz})_{l,m,n} \right]_{\alpha} \cdot \frac{\partial (\varepsilon_{zz})_{\alpha}}{\partial (u_z)_{l,m,n-\frac{1}{2}}} + \sum_{\beta} \left[(\sigma_{rz})_{l,m,n} \right]_{\beta} \cdot 2 \frac{\partial (\varepsilon_{rz})_{\beta}}{\partial (u_z)_{l,m,n-\frac{1}{2}}} + \sum_{\gamma} \left[(\sigma_{\varphi z})_{l,m,n} \right]_{\gamma} \cdot 2 \frac{\partial (\varepsilon_{\varphi z})_{\gamma}}{\partial (u_z)_{l,m,n-\frac{1}{2}}} \right\} \Delta V.$$
(4.63)

A kinetikus és rugalmas energia különbségéből álló L Lagrange-függvény sebességkomponensek szerinti deriváltjaiként definiálódnak a megfelelő kanonikus impulzuskomponensek:

$$(p_r)_{l-\frac{1}{2},m,n} = \frac{\partial L}{\partial (v_r)_{l-\frac{1}{2},m,n}} = \rho \Delta V (v_r)_{l-\frac{1}{2},m,n}, \qquad (4.64)$$

$$(p_{\varphi})_{l,m-\frac{1}{2},n} = \frac{\partial L}{\partial (v_{\varphi})_{l,m-\frac{1}{2},n}} = \rho \Delta V (v_{\varphi})_{l,m-\frac{1}{2},n}, \qquad (4.65)$$

$$(p_z)_{l,m,n-\frac{1}{2}} = \frac{\partial L}{\partial (v_z)_{l,m,n-\frac{1}{2}}} = \rho \Delta V (v_z)_{l,m,n-\frac{1}{2}}.$$
(4.66)

Ezekkel, a térben diszkretizált rendszer kanonikus mozgásegyenletei:

$$\frac{\mathrm{d}(u_r)_{l-\frac{1}{2},m,n}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial(p_r)_{l-\frac{1}{2},m,n}} = \frac{(p_r)_{l-\frac{1}{2},m,n}}{\varrho\Delta V} = (v_r)_{l-\frac{1}{2},m,n}, \tag{4.67}$$

$$\frac{\mathrm{d}\left(u_{\varphi}\right)_{l,m-\frac{1}{2},n}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial\left(p_{\varphi}\right)_{l,m-\frac{1}{2},n}} = \frac{\left(p_{\varphi}\right)_{l,m-\frac{1}{2},n}}{\varrho\Delta V} = \left(v_{\varphi}\right)_{l,m-\frac{1}{2},n},\tag{4.68}$$

$$\frac{\mathrm{d}\,(u_z)_{l,m,n-\frac{1}{2}}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial\,(p_z)_{l,m,n-\frac{1}{2}}} = \frac{(p_z)_{l,m,n-\frac{1}{2}}}{\varrho\Delta V} = (v_z)_{l,m,n-\frac{1}{2}}\,,\tag{4.69}$$

$$\frac{\mathrm{d}\left(p_{r}\right)_{l-\frac{1}{2},m,n}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial H}{\partial\left(u_{r}\right)_{l-\frac{1}{2},m,n}},\tag{4.70}$$

$$\frac{\mathrm{d}\left(p_{\varphi}\right)_{l,m-\frac{1}{2},n}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial H}{\partial\left(u_{\varphi}\right)_{l,m-\frac{1}{2},n}},\tag{4.71}$$

$$\frac{\mathrm{d}(p_z)_{l,m,n-\frac{1}{2}}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial H}{\partial(u_z)_{l,m,n-\frac{1}{2}}}.$$
(4.72)

Az imént bemutatott, térben diszkretizált, hamiltoni rendszer időbeli diszkretizálását szimplektikus Euler-módszerrel szeretnénk megvalósítani. Mint azt $Dr.\ Fülöp\ Tamás$ konzulens a fenti hamiltoni egyenletek alapján megállapította, a

$$(u_r)_{l-\frac{1}{2},m,n}^j = (u_r)_{l-\frac{1}{2},m,n}^{j-1} + \Delta t \cdot (v_r)_{l-\frac{1}{2},m,n}^{j-\frac{1}{2}}$$
(4.73)

$$(u_{\varphi})_{l,m-\frac{1}{2},n}^{j} = (u_{\varphi})_{l,m-\frac{1}{2},n}^{j-1} + \Delta t \cdot (v_{\varphi})_{l,m-\frac{1}{2},n}^{j-\frac{1}{2}}$$
(4.74)

$$(u_z)_{l,m,n-\frac{1}{2}}^j = (u_z)_{l,m,n-\frac{1}{2}}^{j-1} + \Delta t \cdot (v_z)_{l,m,n-\frac{1}{2}}^{j-\frac{1}{2}}$$
(4.75)

léptetés és az alakváltozások

$$(\varepsilon_{rr})_{l,m,n}^{j} = \frac{(u_{r})_{l+\frac{1}{2},m,n}^{j} - (u_{r})_{l-\frac{1}{2},m,n}^{j}}{r_{l+\frac{1}{2}} - r_{l-\frac{1}{2}}}$$
(4.76)

$$(\varepsilon_{\varphi\varphi})_{l,m,n}^{j} = \frac{(u_{r})_{l+\frac{1}{2},m,n}^{j}}{2r_{l+\frac{1}{2}}} + \frac{(u_{r})_{l-\frac{1}{2},m,n}^{j}}{2r_{l-\frac{1}{2}}} + \frac{(u_{\varphi})_{l,m+\frac{1}{2},n}^{j} - (u_{\varphi})_{l,m-\frac{1}{2},n}^{j}}{r_{l}\Delta\varphi}$$
(4.77)

$$(\varepsilon_{zz})_{l,m,n}^{j} = \frac{(u_z)_{l,m,n+\frac{1}{2}}^{j} - (u_z)_{l,m,n-\frac{1}{2}}^{j}}{\Delta z}$$
(4.78)

$$(\varepsilon_{r\varphi})_{l-\frac{1}{2},m-\frac{1}{2},n}^{j} = \frac{(u_{r})_{l-\frac{1}{2},m,n}^{j} - (u_{r})_{l-\frac{1}{2},m-1,n}^{j}}{2r_{l-\frac{1}{2}}\Delta\varphi} + \frac{(u_{\varphi})_{l,m-\frac{1}{2},n}^{j} - (u_{\varphi})_{l-1,m-\frac{1}{2},n}^{j}}{2(r_{l} - r_{l-1})} - \frac{1}{4}\left(\frac{1}{r_{l}} + \frac{1}{r_{l-1}}\right)\left[(u_{\varphi})_{l,m-\frac{1}{2},n}^{j} + (u_{\varphi})_{l-1,m-\frac{1}{2},n}^{j}\right]$$
(4.79)

$$(\varepsilon_{rz})_{l-\frac{1}{2},m,n-\frac{1}{2}}^{j} = \frac{(u_{r})_{l-\frac{1}{2},m,n}^{j} - (u_{r})_{l-\frac{1}{2},m,n-1}^{j}}{2\Delta z} + \frac{(u_{z})_{l,m,n-\frac{1}{2}}^{j} - (u_{z})_{l-1,m,n-\frac{1}{2}}^{j}}{2(r_{l} - r_{l-1})}$$
(4.80)

$$\left(\varepsilon_{\varphi z}\right)_{l,m-\frac{1}{2},n-\frac{1}{2}}^{j} = \frac{\left(u_{\varphi}\right)_{l,m-\frac{1}{2},n}^{j} - \left(u_{\varphi}\right)_{l,m-\frac{1}{2},n-1}^{j}}{2\Delta z} + \frac{\left(u_{z}\right)_{l,m,n-\frac{1}{2}}^{j} - \left(u_{z}\right)_{l,m-1,n-\frac{1}{2}}^{j}}{2r_{l}\Delta\varphi}$$
(4.81)

diszkretizálása esetén a sebességek

$$\begin{split} (v_r)_{l-\frac{1}{2},m,n}^{j+\frac{1}{2}} &= (v_r)_{l-\frac{1}{2},m,n}^{j-\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{\varrho} \bigg[\frac{(\sigma_{rr})_{l,m,n}^j}{r_{l+\frac{1}{2}} - r_{l-\frac{1}{2}}} - \frac{(\sigma_{rr})_{l-1,m,n}^j}{r_{l-\frac{1}{2}} - r_{l-\frac{3}{2}}} - \frac{(\sigma_{\varphi\varphi})_{l-1,m,n}^j + (\sigma_{\varphi\varphi})_{l,m,n}^j}{2r_{l-\frac{1}{2}}} + \\ &+ \frac{(\sigma_{r\varphi})_{l-\frac{1}{2},m+\frac{1}{2},n}^j - (\sigma_{r\varphi})_{l-\frac{1}{2},m-\frac{1}{2},n}^j}{r_{l-\frac{1}{2}}\Delta\varphi} + \frac{(\sigma_{rz})_{l-\frac{1}{2},m,n+\frac{1}{2}}^j - (\sigma_{rz})_{l-\frac{1}{2},m,n-\frac{1}{2}}^j}{\Delta z} \bigg], \end{split}$$

$$(v_{\varphi})_{l,m-\frac{1}{2},n}^{j+\frac{1}{2}} = (v_{\varphi})_{l,m-\frac{1}{2},n}^{j-\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{\varrho} \Biggl\{ \left[\frac{1}{r_{l+1} - r_{l}} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r_{l+1}} + \frac{1}{r_{l}} \right) \right] (\sigma_{r\varphi})_{l+\frac{1}{2},m-\frac{1}{2},n}^{j} + \\ + \frac{(\sigma_{\varphi\varphi})_{l,m,n}^{j} + (\sigma_{\varphi\varphi})_{l,m-1,n}^{j}}{r_{l}\Delta\varphi} + \frac{(\sigma_{\varphiz})_{l,m-\frac{1}{2},n+\frac{1}{2}}^{j} - (\sigma_{\varphiz})_{l,m-\frac{1}{2},n-\frac{1}{2}}^{j}}{\Delta z} + \\ + \left[\frac{-1}{r_{l} - r_{l-1}} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r_{l}} + \frac{1}{r_{l-1}} \right) \right] (\sigma_{r\varphi})_{l-\frac{1}{2},m-\frac{1}{2},n}^{j} \Biggr\},$$

$$(v_{z})_{l,m,n-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} = (v_{z})_{l,m,n-\frac{1}{2}}^{j-\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{\varrho} \left[\frac{(\sigma_{zz})_{l,m,n}^{j} - (\sigma_{zz})_{l,m,n-1}^{j}}{\Delta z} + \frac{(\sigma_{rz})_{l+\frac{1}{2},m,n-\frac{1}{2}}^{j} - (\sigma_{rz})_{l+\frac{1}{2},m,n-\frac{1}{2}}^{j} - \\ - \frac{(\sigma_{rz})_{l-\frac{1}{2},m,n-\frac{1}{2}}^{j}}{r_{l} - r_{l-1}} + \frac{(\sigma_{\varphi z})_{l,m+\frac{1}{2},n-\frac{1}{2}}^{j} + (\sigma_{\varphi z})_{l,m-\frac{1}{2},n-\frac{1}{2}}^{j}}{r_{l}\Delta\varphi} \right]$$

$$(4.84)$$

léptetése valósítja meg a szimplektikus Euler-módszert. Mivel a kinetikus energia csak sebességet tartalmaz, a rugalmas energia pedig nem tartalmaz sebességet, az általában implicit szimplektikus Euler-séma esetünkben explicit – ez jelentősen gyorsabb és robosztusabb futtatást tesz lehetővé.

Az ily módon diszkretizált rendszer összenergiáját (4.7) szerint számolhatjuk. Mivel a kinetikus energia értékei a sebességek $\frac{\Delta t}{2}$ -vel való eltolása miatt nem azokban az időpillanatokban számolódnak, mint a rugalmas energia értékei, ezért az egymást követő értékek időbeli átlagolásával érjük el az egybeesést.

4.2.2. Disszipatív rendszer: Poynting–Thomson–Zener eset

Poynting–Thomson–Zener esetben az anyag viselkedését a

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{S}} = E^{\mathrm{S}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{S}},\tag{4.85}$$

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{D}} + \boldsymbol{\tau}^{\mathrm{D}} \dot{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{D}} = \boldsymbol{E}^{\mathrm{D}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{D}} + \hat{\boldsymbol{E}}^{\mathrm{D}} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{D}}$$
(4.86)

konstitúciós egyenletekkel adjuk meg. Itt már célszerűbb a gömbi és deviatorikus részekkel külön számolni és azután venni a

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{S}} + \boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{D}} \tag{4.87}$$

összeget. Ehhez először azonban az alakváltozást fel kell bontanunk $\left(2.9\right)$ szerint. A feszültség gömbi részének

$$\left(\sigma^{\mathrm{S}}\right)_{l,m,n}^{j} = E^{\mathrm{S}}\left(\varepsilon^{\mathrm{S}}\right)_{l,m,n}^{j} \tag{4.88}$$

diszkrét alakja triviális, míg a deviatorikus tag komponenseit

$$\left(\sigma_{rr}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j+1} = \frac{1}{1-\alpha+\frac{\tau}{\Delta t}} \left\{ \left(\frac{\tau}{\Delta t}-\alpha\right) \left(\sigma_{rr}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j} + E^{\mathrm{D}} \left[\alpha \left(\varepsilon_{rr}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j+1} + (1-\alpha) \left(\varepsilon_{rr}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j}\right] + \frac{\hat{E}^{\mathrm{D}}}{\Delta t} \left[\left(\varepsilon_{rr}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j+1} - \left(\varepsilon_{rr}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j}\right] \right\},$$

$$\left(\sigma_{\varphi\varphi}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j+1} = \frac{1}{1-\alpha+\frac{\tau}{\Delta t}} \left\{ \left(\frac{\tau}{\Delta t}-\alpha\right) \left(\sigma_{\varphi\varphi}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j} + E^{\mathrm{D}} \left[\alpha \left(\varepsilon_{\varphi\varphi}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j+1} + (1-\alpha) \left(\varepsilon_{\varphi\varphi\varphi}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j}\right] + \right.$$

$$\left(\sigma_{\varphi\varphi\varphi}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j+1} = \frac{1}{1-\alpha+\frac{\tau}{\Delta t}} \left\{ \left(\frac{\tau}{\Delta t}-\alpha\right) \left(\sigma_{\varphi\varphi\varphi}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j} + E^{\mathrm{D}} \left[\alpha \left(\varepsilon_{\varphi\varphi\varphi}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j+1} + (1-\alpha) \left(\varepsilon_{\varphi\varphi\varphi}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j}\right] + \right.$$

$$+ \frac{\hat{E}^{\mathrm{D}}}{\Delta t} \left[\left(\varepsilon^{\mathrm{D}}_{\varphi\varphi} \right)^{j+1}_{l,m,n} - \left(\varepsilon^{\mathrm{D}}_{\varphi\varphi} \right)^{j}_{l,m,n} \right] \right\},$$
(4.90)

$$\left(\sigma_{zz}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j+1} = \frac{1}{1-\alpha + \frac{\tau}{\Delta t}} \left\{ \left(\frac{\tau}{\Delta t} - \alpha\right) \left(\sigma_{zz}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j} + E^{\mathrm{D}} \left[\alpha \left(\varepsilon_{zz}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j+1} + (1-\alpha) \left(\varepsilon_{zz}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j}\right] + \frac{\hat{E}^{\mathrm{D}}}{\Delta t} \left[\left(\varepsilon_{zz}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j+1} - \left(\varepsilon_{zz}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j}\right] \right\},$$

$$(4.91)$$

$$\left(\sigma_{r\varphi}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j+1} = \frac{1}{1-\alpha + \frac{\tau}{\Delta t}} \left\{ \left(\frac{\tau}{\Delta t} - \alpha\right) \left(\sigma_{r\varphi}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j} + E^{\mathrm{D}} \left[\alpha \left(\varepsilon_{r\varphi}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j+1} + (1-\alpha) \left(\varepsilon_{r\varphi}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j}\right] + \frac{\hat{E}^{\mathrm{D}}}{\Delta t} \left[\left(\varepsilon_{r\varphi}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j+1} - \left(\varepsilon_{r\varphi}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j}\right] \right\},$$

$$(4.92)$$

$$\left(\sigma_{rz}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j+1} = \frac{1}{1-\alpha+\frac{\tau}{\Delta t}} \left\{ \left(\frac{\tau}{\Delta t}-\alpha\right) \left(\sigma_{rz}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j} + E^{\mathrm{D}} \left[\alpha \left(\varepsilon_{rz}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j+1} + (1-\alpha) \left(\varepsilon_{rz}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j}\right] + \frac{\hat{E}^{\mathrm{D}}}{\Delta t} \left[\left(\varepsilon_{rz}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j+1} - \left(\varepsilon_{rz}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j}\right] \right\},$$

$$\left(\left(\sigma_{rz}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j+1} = \frac{1}{1-\alpha+\frac{\tau}{\Delta t}} \left\{ \left(\frac{\tau}{\Delta t}-\alpha\right) \left(\sigma_{rz}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j} + E^{\mathrm{D}} \left[\alpha \left(\varepsilon_{rz}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j+1} + (1-\alpha) \left(\varepsilon_{rz}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j}\right] + \frac{\hat{E}^{\mathrm{D}}}{\Delta t} \left[\left(\varepsilon_{rz}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j+1} - \left(\varepsilon_{rz}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j+1} + \left(1-\alpha\right) \left(\varepsilon_{rz}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j}\right] + \frac{\hat{E}^{\mathrm{D}}}{\Delta t} \left[\left(\varepsilon_{rz}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j+1} - \left(\varepsilon_{rz}^{\mathrm{D}}\right)_{l,m,n}^{j}\right] \right\}$$

$$(4.94)$$

egyenletek formájában vesszük. $\alpha = \frac{1}{2}$ használatával másodrendű pontosság várható [4]. A diszkrét hőmérsékletértékek számításához a feszültségi mátrix offdiagonális komponenseiből adódó növekményeket korrigálni kell. A 4.3 ábrán látható módon a sarokban lévő négy elemet $\frac{1}{4}$ -es súllyal összegezzük, így a diagonális elemekkel egy helyen lévő értéket kapunk.



4.3. ábra. Az $r\varphi$ feszültségkomponensekhez köthető hőmérsékletnövekmény átlagolása cellaközépbe. A többi síkban szintén így történik az átlagolás.

Az átlagolást elvégezve már számíthatók a

$$T_{l,m,n}^{j+1} = T_{l,m,n}^{j} + \frac{\Delta t}{\varrho c_{\sigma} \hat{I}^{\mathrm{D}}} \Biggl\{ \left[\left(\sigma_{rr}^{\mathrm{D}} \right)_{l,m,n}^{j} - E^{\mathrm{D}} \left(\varepsilon_{rr}^{\mathrm{D}} \right)_{l,m,n}^{j} \right]^{2} + \left[\left(\sigma_{\varphi\varphi}^{\mathrm{D}} \right)_{l,m,n}^{j} - E^{\mathrm{D}} \left(\varepsilon_{\varphi\varphi}^{\mathrm{D}} \right)_{l,m,n}^{j} \right]^{2} + \left[\left(\sigma_{\varphi\varphi}^{\mathrm{D}} \right)_{l,m,n}^{j} - E^{\mathrm{D}} \left(\varepsilon_{\varphi\varphi}^{\mathrm{D}} \right)_{l,m,n}^{j} \right]^{2} + \left[\left(\sigma_{r\varphi}^{\mathrm{D}} \right)^{j} - E^{\mathrm{D}} \left(\varepsilon_{r\varphi}^{\mathrm{D}} \right)^{j} \right]_{l,m,n}^{2} + \left[\left(\sigma_{rz}^{\mathrm{D}} \right)^{j} - E^{\mathrm{D}} \left(\varepsilon_{rz}^{\mathrm{D}} \right)^{j} \right]_{l,m,n}^{2} + \left[\left(\sigma_{\varphiz}^{\mathrm{D}} \right)^{j} - E^{\mathrm{D}} \left(\varepsilon_{\varphiz}^{\mathrm{D}} \right)^{j} \right]_{l,m,n}^{2} \Biggr\}$$

$$(4.95)$$

diszkrét hőmérsékletértékek. Az összenergiát (4.12) szerint kapjuk. Az energiák adott időpillanatra történő összegzését a Hooke-esethez képest annyival szükséges kiegészíteni, hogy a kinetikus részhez hasonlóan a termikus részt is átlagoljuk időben.

5. fejezet

Hengeres test szimulációja

A szimulációk kezdetekor a v, ε, σ minden értéke zérusnak van megválasztva. Az R sugarú, z irányban Z hosszúságú 3D-s hengeres modell gerjesztése egy időben $\tau_{\rm b}$ hosszú koszinuszjel a z = 0 sík közepén, mely a gerjesztés lezajlása után szabad végként viselkedik (a feszültség a normális irányban zérus), míg a többi él mindvégig szabad. A gerjesztés:

$$\sigma_{zz}(t, r, \varphi, 0) = \begin{cases} \sigma_{\rm b} \frac{1}{2} \left[1 - \cos\left(2\pi \frac{t}{\tau_{\rm b}}\right) \right], & \text{ha } 0 \le t \le \tau_{\rm b}, \ 0 < r \le R/2 \text{ és } 0 \le \varphi < 360^{\circ} \\ 0, & \text{egyébként.} \end{cases}$$
(5.1)

A választott peremfeltétel nem zárja ki a merevtestszerű mozgás megjelenését. Ez a jelenség a disszipatív esetben megfelelően hosszú idő elteltével meg is figyelhető. A henger palástjához tartozó

$$\mathbf{n}_1 = \begin{bmatrix} 1\\0\\0 \end{bmatrix}, \tag{5.2}$$

valamint a henger véglapjaihoz tartozó

$$\mathbf{n}_2 = \begin{bmatrix} 0\\0\\1 \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{n}_3 = \begin{bmatrix} 0\\0\\-1 \end{bmatrix}$$
(5.3)

normális irányok meghatározzák, hogy mely feszültségkomponenseket szükséges zérusnak tartani, hiszen a szabad peremen

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_i = \mathbf{0}, \quad i = 1, 2, 3 \tag{5.4}$$

feltételnek teljesülnie kell. Ebből következik, hogy

$$\sigma_{rr} = 0, \qquad \text{ha } r = R; \tag{5.5}$$

$$\sigma_{zz} = 0, \qquad \text{ha } z = 0, Z; \tag{5.6}$$

$$\sigma_{r\varphi} = 0, \qquad \text{ha } r = R; \tag{5.7}$$

 $\sigma_{rz} = 0, \qquad \text{ha } r = R \text{ vagy } z = 0, Y; \tag{5.8}$

$$\sigma_{\varphi z} = 0, \qquad \text{ha } z = 0, Z. \tag{5.9}$$

Ne feledkezzünk meg arról, hogy a diszkretizált rendszerben az egyes feszültségkomponensek nem ugyanazon pontokban számolódnak, ezért az előírt peremek betartásánál nincs lehetőség minden zérus értéket pontosan a r = R és z = 0, Z helyekre meghatározni. Ezt úgy kezeljük, hogy a vegyes indexű tagokat a fizikai peremre írjuk elő, míg az azonos indexű tagokat a peremtől fél lépéssel kijjebb adjuk meg (vö. 4.1 és 4.2 ábrákkal).

5.1. Hooke eset

A szimuláció paraméterei:

$$L = 16, \quad M = 20, \quad N = 30, \quad J = 700, \quad R = 1, \quad Z = 4, \quad t_{\text{end}} = 6, \quad \tau_{\text{b}} = \frac{2}{7}, \quad (5.10)$$
$$\sigma_{\text{b}} = 1, \quad E^{\text{S}} = 5, \quad E^{\text{D}} = 3, \quad \varrho = 1. \quad (5.11)$$



5.1. ábra. Az energiák. A jobb szemléltetés érdekében itt $\tau_{\rm b} = \frac{2}{70}$.



5.2. ábra. A feszültséghullám terjedése. *Balra:* A hossztengely mentén. *Jobbra:* A minta végén (N - 1-edik rétegben).



5.3. ábra. Az előző ábra folytatása.



5.4. ábra. Az előző ábra folytatása.



5.5. ábra. A sebességhullám terjedése. Balra: A hossztengely mentén. Jobbra: A minta végén $(N-\frac{1}{2}\text{-edik rétegben}).$



5.6. ábra. Az előző ábra folytatása.



5.7. ábra. Az előző ábra folytatása.

5.2. Poynting–Thomson–Zener eset

A szimuláció paraméterei:

$$L = 16, \quad M = 20, \quad N = 30, \quad J = 700, \quad R = 1, \quad Z = 4, \quad t_{\text{end}} = 6, \quad \tau_{\text{b}} = \frac{2}{7}, \quad (5.12)$$

$$\sigma_{\text{b}} = 1, \quad E^{\text{S}} = 5, \quad E^{\text{D}} = 3, \quad \tau^{\text{D}} = 2, \quad \hat{E}^{\text{D}} = 20, \quad T_0 = 10^{-10}, \quad c_{\sigma} = 0.001, \quad \varrho = 1. \quad (5.13)$$



5.8. ábra. Az energiák. A jobb szemléltetés érdekében itt $\tau_{\rm b} = \frac{2}{70}$.

A hőmérséklet növekedése együtt jár a belső energia növekedésével. A Huber-Mises-Henckyféle (angolban von Mises-ként ismert)

$$\sigma_{\rm VM} = \sqrt{\frac{2}{3} \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\sigma}^{\rm D} \boldsymbol{\sigma}^{\rm D} \right)} \tag{5.14}$$

egyenértékű feszültség időbeli alakulása remekül szemlélteti a disszipációt.



5.9. ábra. A feszültséghullám terjedése. Balra: A hossztengely mentén. Jobbra: A minta végén (N - 1-edik rétegben).



5.10. ábra. Az előző ábra folytatása.



5.11. ábra. Az előző ábra folytatása.



5.12. ábra. A sebességhullám terjedése. Balra: A hossztengely mentén. Jobbra: A minta végén $(N-\frac{1}{2}\text{-edik rétegben}).$



5.13. ábra. Az előző ábra folytatása.



5.14. ábra. Az előző ábra folytatása.



5.15. ábra. A disszipáció szemléltetése. *Balra:* Egyenértékű feszültség. *Jobbra:* Hőmérséklet.



5.16. ábra. Az előző ábra folytatása.



5.17. ábra. Az előző ábra folytatása.

6. fejezet Összefoglalás

A dolgozat fő célja egy termodinamikailag kiterjesztett szimplektikus numerikus módszer kialakítása volt hengeres geometriájú mintákra, az [5]-ben bemutatott derékszögű koordinátarendszeres eredmények általánosításaként. A hullámterjedést leíró kontinuumegyenleteket kis deformációkra fogalmaztuk meg, ezáltal egy egyszerűsített esetet tárgyaltunk. Az alkalmazott módszer a miénkhez hasonló hamiltoni rendszerek esetén – és a diszkretizált egyenletekben szereplő együtthatók megfontolt megválasztásával – kivételesen jó energiamegmaradást képes tartani. A séma pontossága ezen túl a sebesség-, alakváltozás- és feszültségértékek számításának tér- és időbeli átgondolt elrendezésének (egyes változók féllel eltolva másokhoz képest) is köszönhető. Ettől a kiosztástól másodrendű pontosság várható. A megalkotott módszert kétféle anyagyiselkedéssel teszteltük. A Hooke modell az alapvető erősségekre és hibákra volt hivatott rámutatni, a Poynting–Thomson–Zener eset pedig már teljes értékű tesztje volt módszerünknek. A Poynting–Thomson–Zener-modell egy olyan anyagviselkedést fogalmaz meg, mely helyesen írja le a gyakorlati szempontból legfontosabb viszkoelasztikus jelenségeket (kúszás és feszültségrelaxáció). Disszipatív rendszerek szimulációjakor fontos, hogy az esetlegesen felmerülő numerikus disszipációt ne fizikai jelenségként interpretáljuk (félre). Ehhez azonban ismernünk kell, hogy milyen a rendszerünk valós csillapodása. A termodinamikai konzisztenciának köszönhetően a Poynting–Thomson–Zener-modell esetén az energiakomponensek analitikus meghatározás eredményeként ismertek, minden időpillanathoz számíthatóak (rugalmas esetben a komponensek triviálisak). A futtatott szimulációk alapján a konzervatív rendszerre megalkotott módszer disszipatív rendszerre is jól működik, az energiák rugalmas és reológiai anyagmodell esetén is megmaradnak. A hullámterjedés szimulációjának eredményét szemléltettük egy feszültség- és egy sebességkomponenssel, amit csillapításos esetben kiegészítettünk egyenértékű feszültség és hőmérséklet alakulásának ábrázolásával is. A módszer átfogó vizsgálata (a diszperziós hiba, illetve a stabilitás – von Neumann-analízissel történő – és pontosság analitikus vizsgálata, stb.) a jövő feladata.

Az itt bemutatott munka célja, hogy a numerikus sémát fel lehessen használni anyagok karakterizálásakor (dilatációs rezonanciafrekvenciás mérés) a rugalmasságtani együtthatók illesztéséhez, lehetővé téve az egyszerű, tisztán rugalmas elmélettől való elszakadást a valósághűbb eredmények elérésének érdekében.

Irodalomjegyzék

- Davarpanah, S. M., Ván, P., Vásárhelyi, B. Investigation of the relationship between dynamic and static deformation moduli of rocks. Geomechanics and Geophysics for Geo-Energy and Geo-Resources, Switzerland, 2020
- [2] Kovács, L; Mészáros, E; Somodi, G; Horváth T; Kádár, B; Pöszmet, T; Zierkelbach-Kovács, B.(2015). Felső-pannon homokkövek kőzetmechanikai minősítése termálvizek visszasajtolása céljából. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 2015
- [3] Fülöp, T. Wave propagation in rocks investigating the effect of rheology. Periodica Polytechnica Civil Engineering, Budapest, 2021
- [4] Fülöp, T.; Kovács, R.; Szücs, M.; Fawaier, M. Thermodynamically Extended Symplectic Numerical Scheme with Half Space and Time Shift Applied for Rheological Waves in Solids. preprint 2019, https://arxiv.org/pdf/1908.07975.pdf
- [5] Pozsár, A., Szücs, M., Kovács, R., Fülöp, T. Four spacetime dimensional simulation of rheological waves in solids and the merits of thermodynamics. Entropy, 22(12), 2020
- [6] Sadd, M.H. Elasticity Theory, Applications and Numerics. Academic Press, Oxford, 2005.
- [7] Béda, Gy.; Béda, P.; Fülöp, T.; Ván, P.; Vásárhelyi, B. Idő- és térderiváltak anyagtörvényekben. Műegyetemi Kiadó, Budapest, 2010.
- [8] Asszonyi, Cs.; Kertész, P.; Matolcsi, T.; Szarka, Z.; Ván, P.; Vásárhelyi B. Izotróp kontinuumok anyagtörvénye. Műegyetemi Kiadó, Budapest, 2006.
- [9] Asszonyi, Cs.; Fülöp, T.; Ván, P. Distinguished rheological models in the framework of a thermodynamical internal variable theory. Műegyetemi Kiadó, Budapest, 2013.
- [10] Verhás, J. Thermodynamics and Rheology. Akadémiai Kiadó, Budapest, 2017.
- [11] Asszonyi, Cs.; Ván, P.; Szarka, Z.; Fülöp, T.; Horváth, R. Izotróp kontinuumok anyagtulajdonságai. Műegyetemi Kiadó, Budapest, 2008.
- [12] de Groot, S.R.; Mazur, P. Non-equilibrium Thermodynamics. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1962.
- [13] Gantmacher, F. Lectures in Analytical Mechanics. Mir Publishers, Moscow, 1975.
- [14] Denker, J. Basic Properties of a Symplectic Integrator. 2021, https://www.av8n.com/physics/symplectic-integrator.htm.