

Oponentský posudek diplomové práce
Vojtěcha Miloše
Modelování viskoelastických materiálů s teplotní závislostí

Obsah práce

Předložená diplomová práce se zabývá odvozením termodynamicky konzistentních modelů pro viskoelastické tekutiny s teplotní závislostí. Tyto modely jsou vhodné k popisu viskoelastických materiálů, jejichž materiálové parametry se relativně hodně mění s teplotou. Mezi takové materiály patří například různé geomateriály jako je asfalt, případně se zdá být vhodné tento model použít při výrobě skla, kdy materiál při tuhnutí projde viskoelastickou fází.

Pro konstantní teplotu se obvykle používá oblíbený Maxwellův a Oldroydův-B model – modely rychlostního typu, kde část Cauchyho tenzoru napětí splňuje evoluční diferenciální rovnici. Pro teplotně závislé materiálové parametry je třeba odvodit kromě konstitutivního vztahu pro tenzor napětí také evoluční rovnici pro teplotu tak, abychom získali uzavřený systém rovnic.

Dosažené výsledky. Diplomová práce se skládá ze tří částí. V první kapitole diplomant představuje klasické mechanické analogy – Maxwell, Kelvin-Voigt, Oldroyd a Burgers – a ukáže jejich odezvy v běžném oscilačním experimentu. Dále pro případ Kelvin-Voigta a Maxwella uvažuje teplotně závislé materiálové parametry a odvodí jednodimenzionální varianty těchto teplotně závislých modelů spolu s evoluční rovnicí pro teplotu. Tyto dva modely studuje v oscilačním experimentu a numerickým řešením ODR získává celkem překvapivý výsledek, že teplota materiálů klesá ve fázi prodlužování a nikdy nepřekročí počáteční teplotu.

Ve druhé kapitole diplomant zavede klasické i nové moderní pojmy mechaniky kontinua, pomocí přirozené konfigurace rozdělí celkovou deformaci na část čistě pružnou a část vazkou a pomocí principu maximalizace rychlosti produkce entropie odvozuje různé modely automaticky splňující druhý zákon termodynamiky (postup odvození dle Rajagopal, Srinivasa (2000)). Jako první odvodí klasický Navier-Stokes-Fourier model a dále dva nestlačitelné modely označené jako T-Oldroyd-B (T-Maxwell) a T-Quad1. T-Oldroyd-B vypadá jako klasický Oldroyd-B model s tím rozdílem, že materiálové parametry jsou funkcí teploty a systém rovnic je doplněn o evoluční rovnici pro teplotu. Model T-Quad1 je teplotní varianta viskoelastického modelu Quad1 odvozeného v mé dizertační práci za účelem získání modelu, který se lépe shoduje s experimentem než klasický Oldroyd-B.

Třetí kapitola obsahuje slabé formulace odvozených modelů, popis jejich konečněprvkové aproximace a tři numerické simulace, všechny tři jsou benchmarky. První benchmark je obtékání válce klasickým Oldroyd-B modelem a srovnání síly působící na válec se známými výsledky. Druhý benchmark ověřuje implementaci ALE metody a studuje natahování elastického materiálu popsaného neo-Hookeovým modelem, který lze získat jako speciální případ Oldroyd-B modelu (nulová viskozita a nekonečný relaxační čas). Numerické výsledky jsou

srovnané s analytickým řešením. Třetí benchmark studuje stacionární řešení Couetteova proudění T-Oldroyd-B modelu a porovnává numerické a analytické řešení. Je to jediná konečněprvková simulace teplotně závislého modelu. Všechny tři problémy jsou implementované pomocí softwaru FEniCS.

Přínos autora. Hlavní přínos autora je odvození termodynamicky kompatibilního teplotně závislého viskoelastického modelu a provedené simulace pro tři testovací situace. Oceňuji, že autor dodal všechny zdrojové kódy.

Hodnocení práce

Věcná kvalita práce. Nejprve obecně: Práce by byla naprosto vynikající, kdyby obsahovala několik dalších částí. Za prvé, odvozený model by bylo vhodné otestovat proti nějakým experimentálním datům a z toho pak vyvodit závěr, jestli teplotně závislý T-Oldroyd-B je postačující či nikoli. Dále, všechny provedené 2D simulace jsou jen benchmarky a práci by velmi prospělo, pokud by obsahovala buď nějaký problém simulující realitu a nebo problém, který by prověřil chování modelu (třeba vliv kaplování). To už by ale bylo nad rámec diplomové práce.

Dále konkrétně: V první kapitole se objevuje překvapivý výsledek říkající, že se disipující těleso ochlazuje během oscilačního experimentu. V obou případech Maxwella i Kelvin-Voigta je nejspíš chyba v prvním členu na pravé straně v rovnicích pro teplotu (1.2.8b) a (1.2.9b), viz srovnání s rovnicí (1.2.7), nechť se autor k tomu vyjádří. V případě Kelvin-Voigta je navíc chyba v implementaci (v rovnici pro teplotu je implementováno ε^2 namísto $\dot{\varepsilon}^2$), a když se provede výpočet správně, výsledkem je, že v systému dochází globálně k ohřívání s lokálním ochlazováním. Ve druhé kapitole je chyba ve vztahu (2.2.4) pro derivaci determinantu $\mathbf{B}_{\kappa_p(t)}$. Dále již probíhá výpočet dobře. Ve třetí kapitole jsou ve slabé formulaci ALE metody použity stejné prostory jako ve slabé formulaci v Eulerově popisu, některé integrály pak nemají smysl.

Formální kvalita práce. Práce obsahuje velké množství překlepů (i matematických) a různých dalších chyb. Například chybějící závorky, znaménka skalárního součinu, zapomenuté označení vektoru/tenzoru tučnými písmeny nebo násobení tenzoru vektorem zprava (\mathbf{vT}) velmi znesnadňuje čtení. Druhá a třetí kapitola silně navazuje a rozšiřuje mou dizertační práci a některé části jsou si velmi podobné (např. část o ALE metodě). Myslím, že bylo vhodné tyto části více přeformulovat. Nakonec, poslední část třetí kapitoly týkající se simulace kmitání s malou amplitudou pomocí teplotně závislých modelů obsahuje jen popis problému, ale už žádné výsledky. Práce tak působí dvěma dojmy: Autor si po sobě práci (nebo alespoň některé části) ani nepřčetl a dopsal ji těsně před odevzdáním.

Doporučení. Práce by byla daleko lepší, kdyby byla psána s větší pečlivostí a obsahovala by ještě čtvrtou plně teplotně závislou evoluční simulaci. Takto se jeví práce nedokončená. Přesto hlavní přínos vidím v odvození termodynamicky kompatibilního viskoelastického modelu s teplotní závislostí a oceňuji úsilí vy-

naložené v implementaci tří benchmarků. Předloženou práci doporučuji uznat jako diplomovou práci.

Dotazy

- Vzhledem k velmi překvapivému výsledku oscilačního experimentu teplotně závislého jednodimenzionálního Maxwellova modelu, který ukazuje, že během oscilačního experimentu teplota nikdy nevzroste nad počáteční teplotu, by se měl autor pokusit nalézt chybu (jako byla v případě Kelvina-Voigta), nebo se pokusit vysvětlit toto ochlazování. Autor v práci dává příklad ochlazení reálného materiálu v případě jednoho natáhnutí. Jak je to v případě, že aplikujeme mnohokrát za sebou cyklus natažení/zkrácení?
- Jaké časové schéma bylo použito ve druhé simulaci? V práci se píše o Crankově-Nicolsonové metodě, ve zdrojovém kódu je použitý zpětný Euler.
- V práci se píše, že teplota je aproximovaná kvadratickými prvky, v kódu třetí simulace jsou použité lineární prvky. Byly použité lineární prvky pro teplotu?
- Byly všechny problémy počítány s kvadratickou aproximací rychlosti, lineárním tlakem a kvadratickými složkami tenzoru \mathbf{B} ? Byl provedený test, ve kterém by pro úsporu velikosti problému byl tenzor \mathbf{B} aproximován stejně jako tlak?
- V případě ALE simulace bylo vzhledem k použití FEniCSu nutné implementovat okrajovou podmínku $\mathbf{v} = d\mathbf{u}/dt$ jen přibližně s použitím penalizačního koeficientu α . Jak počet Newtonových iterací závisí na velikosti α ? Lze použít libovolně velké α ?

Ve Varšavě 31. srpna 2016

Karel Tůma

Institute of Fundamental Technological
Research, Polish Academy of Sciences